

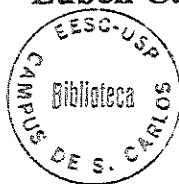
**UM ESTUDO DA MODELAGEM MATEMÁTICA E
SOLUÇÃO NUMÉRICA DE ESCOAMENTOS BIFÁSICOS
GÁS-SÓLIDOS**

DEDALUS - Acervo - EESC



31100006864

Eng. ° Luben Cabezas Gómez



Dissertação apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos, da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

ORIENTADOR: Prof. Dr. Fernando Eduardo Milioli

São Carlos

1999

Class.	TESE
Curr.	1007
Tombo	026199

3 LL 0000 6764

S/S 1032436

Ficha catalográfica preparada pela Seção de Tratamento
da Informação do Serviço de Biblioteca – EESC/USP

C114e Cabezas Gómez, Luben
Um estudo da modelagem matemática e solução
numérica de escoamentos bifásicos gás-sólidos / Luben
Cabezas Gómez. -- São Carlos, 1999.

Dissertação (Mestrado) -- Escola de Engenharia de
São Carlos-Universidade de São Paulo, 1999.

Área: Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Fernando Eduardo Milioli.

1. Modelo das duas fases. 2. Modelagem numérica.
3. Escoamentos bifásicos gás-sólidos. 4. Fluidização.
I. Título.

FOLHA DE APROVAÇÃO

Candidato: Engenheiro **LUBEN CABEZAS GÓMEZ**

Dissertação defendida e aprovada em 09.03.1999
pela Comissão Julgadora:



Prof. Doutor **FERNANDO EDUARDO MILIOLI (Orientador)**
(Escola de Engenharia de São Carlos - Universidade de São Paulo)



Prof. Doutor **PAULO SELEGHIM JÚNIOR**
(Escola de Engenharia de São Carlos - Universidade de São Paulo)



Prof. Associado **JOSÉ ALBERTO CUMINATO**
(Instituto de Ciências Matemáticas e Computação - Universidade de São Paulo)



Prof. Associado **ARTHUR JOSÉ VIEIRA PORTO**
Coordenador da Área de Engenharia Mecânica



JOSÉ CARLOS A. CINTRA
Presidente da Comissão de Pós-Graduação da EESC

Dedico este trabalho à minha família.
Especialmente aos meus pais e avós que
me deram muito amor e educação. À
minha esposa Isara pela sua amizade e
compreensão.

Agradecimentos

Ao professor Dr. Fernando Eduardo Milioli, pela sua orientação durante o trabalho, pelo seu apoio, revisão do trabalho e pela sua amizade.

Aos professores Dr. Paulo Seleguin Júnior, Dr. Antônio Moreira, Dr. Josmar Davilson Pagluiso e Dr. Geraldo Lombardi, pela colaboração e incentivo ao trabalho.

Um especial agradecimento ao professor Dr. José Maria Saiz Jabardo, pela ajuda e apoio oferecidos, pela transmissão de conhecimentos, e pela sua sincera amizade.

Ao professor Dr. Durval Duarte Júnior pela sua sincera amizade, confiança e transmissão de conhecimentos.

Agradeço particularmente à Juan Carlos Horta Gutierrez que possibilitou com seu esforço e amizade a realização deste trabalho.

Aos companheiros de trabalho, Kelen, Fabiana, Rosenda, Felipe, Luciano, Fernando Camargo, Fernando Schiavon, Márcio, João Paulo, Williams, Marcelo, Carlos, Enio, Gherhardt, Richard, Samuel e José Roberto, pela ajuda e amizade oferecidas.

Aos meus amigos Roberto e Rose Lourenço, Artur e Renata Jahrmann, Pedro e Yohandra, Elisa, Osvaldo e Teresinha Pontieri, Edgüin, Luis Manuel, Camilo, Juan Francisco, Vladimir e Yaumara, Jesus Eduardo, Ramón, Livan, Denis (in memoriam), Gilberto, Felix, Barcelo, Osiris, Lazaro, Andres, Alain Rodriguez e Alain Valdes pela convivência e amizade.

Aos técnicos Roberto Prata Vieira e Evandro Cesar Bueno pelo seu apoio ao trabalho.

À Elisabeth M Alves, Ana Paula Bueno e demais funcionários da secretaria pela sua ajuda e apoio durante a realização do trabalho.

Aos demais funcionários do Departamento de Engenharia Mecânica, pela colaboração.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq, pela bolsa de estudos concedida.

Sumário

LISTA DE FIGURAS.....	i
LISTA DE TABELAS.....	iii
LISTA DE SÍMBOLOS.....	iv
RESUMO.....	ix
ABSTRACT.....	x
1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1 Apresentação do trabalho.....	7
2. FORMULAÇÃO TEORICA.....	9
2.1 Introdução.....	9
2.2 Procedimento para a formulação do modelo das duas fases.....	11
2.3 Equações locais instantâneas.....	12
2.3.1 Equações generalizadas.....	13
2.3.2 Equações locais instantâneas e condições de salto primárias.....	15
2.4 Equações médias.....	16
2.4.1 Caracterização do processo de médias.....	16
2.4.2 Equações médias gerais.....	18
2.4.3 Equações de transporte de massa e de quantidade de movimento médias.....	19
2.4.4 Equações médias decompostas e ponderadas de transporte de massa e de quantidade de movimento.....	20
2.4.4.1 Decomposição de Reynolds.....	20
2.4.4.2 Variáveis médias ponderadas.....	21
2.4.4.3 Equações médias decompostas e ponderadas.....	22
2.5 Leis de Fechamento.....	23
2.5.1 Leis Constitutivas.....	24
2.5.1.1 Tensões Viscosas.....	24

2.5.1.2	Viscosidade dinâmica μ_k	26
2.5.1.3	Viscosidade volumétrica λ_k	28
2.5.1.4	Pressão do gás.....	28
2.5.1.5	Pressão do sólido.....	29
2.5.2	Leis de Transferência.....	34
2.5.2.1	Mecanismos de transferência de quantidade de movimento na interface, (ENWALD <i>et al.</i> , 1996).....	34
2.5.2.2	Discussão da força de arrasto estacionaria na interface F_{arrasto}	37
2.6	Sistema de equações geral para um escoamento gás-sólido.....	44
2.7	Modelo das duas fases.....	45
2.7.1	Modelos Hidrodinâmicos A e B, (IIT/ANL).....	45
3.	METODOLOGIA DE SOLUÇÃO NUMÉRICA.....	48
3.1	Introdução.....	48
3.1.1	Aspectos gerais das técnicas de solução numéricas, (KUIPERS & VAN SWAAIJ, 1997).....	49
3.1.1.1	Aspectos gerais das técnicas de solução numéricas para problemas hidrodinâmicos.....	49
3.1.1.2	Métodos de solução numérica para escoamentos multifasicos.....	51
3.1.2	Aplicações e linhas atuais de modelagem numérica na área de fluidização de escoamentos gás-sólido.....	53
3.2	Modelo hidrodinâmico em coordenadas cilíndricas.....	63
3.3	Discretização do Modelo Hidrodinâmico pelo Método das Diferenças Finitas.....	65
3.3.1	Introdução.....	65
3.3.2	Malha Computacional.....	66
3.3.3	Equações discretizadas em diferenças finitas em coordenadas cilíndricas.....	68
3.4	Técnica de solução.....	73

3.4.1 Detalhes do procedimento iterativo.....	73
3.4.2 Procedimento para o cálculo iterativo da pressão em uma célula computacional.....	75
3.5 Condições iniciais e de contorno.....	77
3.5.1 Condições iniciais.....	78
3.5.2 Análise das características do escoamento.....	79
3.5.3 Condições de contorno.....	80
3.5.3.1 Condições de contorno na parede.....	80
3.5.3.2 Condições de contorno de simetria.....	81
3.5.3.3 Condições de contorno na entrada do tubo ascendente, (TSUO, 1989).....	82
3.5.3.4 Condições de contorno na saída do tubo ascendente, (TSUO, 1989).....	83
3.5.4 Prescrição das condições de contorno no programa computacional.....	85
4. MODELAÇÃO NUMÉRICA DE UM LEITO CIRCULANTE.....	86
4.1 Introdução.....	86
4.2 Modelações numéricas efetuadas.....	86
5. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES.....	100
5.1 Considerações gerais.....	100
5.2 Conclusões.....	102
5.2 Recomendações para futuros trabalhos.....	102
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	104
APÊNDICE I.....	109
APÊNDICE II.....	116

Lista de Figuras

FIGURA 1.1	Diagrama esquemático de uma caldeira com um combustor de leito circulante. Instalação SCRUBGRASS (JONES <i>et al.</i> , 1995).....	3
FIGURA 2.1	Procedimentos adotados para modelar um escoamento bifásico (ISHII, 1975 e ISHII & MISHIMA, 1984).....	10
FIGURA 2.2	Procedimento geral para a formulação do modelo de duas fases (ENWALD <i>et al.</i> , 1996).....	12
FIGURA 2.3	Volume de controle fixo contendo duas fases com interface em movimento.....	13
FIGURA 2.4	Esquema dos resultados obtidos por CAMPBELL & WANG (1991).....	31
FIGURA 2.5	Módulo de elasticidade do sólido. Eqs. (2.47, 2.49, 2.50 e 2.53), (ENWALD <i>et al.</i> , 1996).....	33
FIGURA 2.6	Módulo de elasticidade do sólido. Eqs. (2.48, 2.51, 2.52 e 2.54), (ENWALD <i>et al.</i> , 1996).....	34
FIGURA 3.1	Malhas computacionais estruturadas e não estruturadas.	50
FIGURA 3.2	Malhas computacionais desfasadas e colocadas.....	50
FIGURA 3.3	Diferentes situações distinguidas na modelação de um escoamento bifásico disperso.....	52
FIGURA 3.4	Tendências atuais da modelagem numérica em fluidização.....	54
FIGURA 3.5	Malha e célula computacional típicas.....	66
FIGURA 3.6	Malha computacional desfasada para as equações de momentum.....	67
FIGURA 3.7	Método da secante para à correção da pressão.....	76
FIGURA 3.8	Método constringido das duas secantes para à correção da pressão.....	76
FIGURA 3.9	Esquema de um leito circulante, DING (1990).....	78

FIGURA 3.10	Diagrama esquemático do domínio computacional.....	84
FIGURA 4.1	Primeira simulação numérica, TSUO (1989).....	88
FIGURA 4.2	Segunda simulação numérica, TSUO (1989).....	89
FIGURA 4.3	Nova geometria adotada para a segunda simulação numérica.....	90
FIGURA 4.4	Velocidade mássica de saída do sólido em função do tempo.....	91
FIGURA 4.5	Perfis de velocidade do gás em função do tempo.....	92
FIGURA 4.6	Perfis de velocidade da fase sólida em função do tempo.....	94
FIGURA 4.7	Perfis de contorno da fração volumétrica de sólidos em função do tempo.....	96
FIGURA 4.8	Perfis da velocidade axial média local instantânea da fase gasosa em várias seções do leito.....	98
FIGURA 4.9	Perfis da velocidade axial média local instantânea da fase sólida em várias seções do leito.....	99
FIGURA B1.1	Exemplo de discretização a montante de um dos termos da Eq. (3.15).....	116
FIGURA B1.2	Exemplo da discretização à montante de um dos termos da Eq. (3.29).....	117
FIGURA B3.1	Direções caraterísticas para ambas as fases no tubo ascendente.....	120

Lista de Tabelas

TABELA 2.1	Valores de ψ_k , J_k , ϕ_k e ϕ_I para as equações generalizadas Eqs. (2.7) e (2.8).....	15
TABELA 2.2	Mecanismos que definem a viscosidade em ambas as fases. ENWALD <i>et al.</i> (1996).....	26
TABELA 2.3	Varias correlações da literatura para o modulo de elasticidade $G(\alpha_g)$	33
TABELA 2.4	Modelos de arrasto na interface.....	42
TABELA 2.5	Modelos hidrodinâmicos A e B, (IIT/ANL).....	46
TABELA 3.1	Resumo das simulações aplicadas à fluidização. ENWALD <i>et al.</i> (1996).....	58
TABELA 3.2	Modelo hidrodinâmico B em coordenadas cilíndricas....	63

Lista de Símbolos

A	Área da superfície do volume de controle, [m ²]
A_I	Área da interface, [m ²]
C	Velocidade do som no gás, [m/s]
C_D	Coefficiente de arrasto para uma partícula numa suspensão de particulado
C_{DK}	Coefficiente de arrasto para uma partícula num meio infinito definido pela Eq. (2.71) segundo WEN & YU (1966)
C_{Ds}	Coefficiente de arrasto para uma partícula num meio infinito
d	Derivada total
d_p	Diâmetro médio da partícula, [m]
D	Resíduo da fase gasosa definido pela Eq. (3.35)
\overline{D}_k	Tensor da taxa de deformações
f	Função geral na Eq. (2.24) e função dada na Eq. (3.53)
F_{arrasto}	Força de arrasto estacionária na interface, [N]
F_{Basset}	Força de Basset, [N]
F_{inmassa}	Força denominada como massa virtual, [N]
F_K	Força de arrasto na interface definida por WEN & YU (1966), [N]
F_{outras}	Forças adicionais que atuam sobre uma esfera num escoamento perfeito, [N]
F_s	Força de arrasto de uma partícula num meio infinito, [N]
F_{transv}	Força transversal que atua sobre o particulado, [N]
g	Aceleração da gravidade, [m/s ²]
G	Modulo de elasticidade da fase sólida, [Pa]
G_g, G_s	Velocidade mássica do gás e do sólido, respectivamente, [kg/(s.m ²)]

$\bar{\mathbf{I}}$	Tensor unitário
\mathbf{J}_k	Tensor de interação superficial
L	Comprimento na Eq. (2.79), [m]
L_p	Caminho livre médio das partículas, [m]
M_{kl}	Termo de transferência de quantidade de movimento na interface para a fase k , [N/m ³]
M_{kl}^d	Força de arrasto generalizada na interface da fase k , [N/m ³]
\dot{m}_k	Fluxo de massa da fase k por unidade de área e por unidade de tempo na interface, [kg/(m ² s)]
\hat{n}_k	Vetor unitário normal externo à superfície da fase k
n_p	Número de partículas por unidade de volume, [1/m ³]
P	Pressão termodinâmica, [Pa]
P_g	Pressão da fase gasosa, [Pa]
P_I	Pressão na interface, [Pa]
P_k	Pressão da fase k , [Pa]
P_s	Pressão do sólido, [Pa]
r	Radio, vetor posição do ponto, [m]
R_w	Radio interno do leito circulante, [m]
Re	Número adimensional de Reynolds
t	tempo, [s]
T	Intervalo de tempo na Eq. (2.14), [s] e temperatura, [°K]
$\bar{\mathbf{T}}_k$	Tensor das tensões da fase k , [Pa]
U_k	Velocidade média da fase k , [m/s]
U_g, U_s	Velocidade média do gás e do sólido, respectivamente, [m/s]
U_r	Velocidade relativa entre as fases, [m/s]
U_0	Velocidade de deslizamento, [m/s]
u_I	Velocidade de deslocamento da interface, [m/s]
u_k	Velocidade instantânea da fase k , [m/s]
u'_k	Flutuação da velocidade média da fase k , [m/s]

u_g, v_g	Velocidades radial e axial da fase gasosa, [m/s]
u_s, v_s	Velocidades radial e axial da fase sólida, [m/s]
V	Volume, [m ³]
v_k	Volume da fase k, [m ³]
V_1, V_2	Volumes das fases 1 e 2, respectivamente, [m ³]
W	Fator de ponderação, parede
x	Coordenada das abcissas, [m]
X_k	Parâmetro densidade de fase
y	Coordenada das ordenadas e direção normal nas Eqs. (3.45), (3.47), e (3.50), [m]
z	Direção axial, [m]

Símbolos gregos

α_g	Fração de vazio
α_k	Fração volumétrica da fase k
α_s	Fração volumétrica da fase sólida
β	Função de arrasto na interface
δt	Intervalo de tempo, [s]
ϕ_k	Termo fonte volumétrico
ϕ_I	Termo fonte volumétrico na interface
ϕ_s	Esfericidade da partícula
η	Coefficiente calculado pelas Eqs.(3.36) e (3.38)
λ	Direção característica do escoamento calculada pelas Eqs. (3.41) e (3.42), [m/s]
λ_g, λ_s	Viscosidade volumétrica do gás e do sólido, respectivamente, [Pa.s]
λ_k	Viscosidade volumétrica da fase k, [Pa.s]
λ_p	Distancia média entre as partículas, [m]
μ_g, μ_s	Viscosidade dinâmica do gás e do sólido, respectivamente, [Pa.s]

μ_k	Viscosidade dinâmica da fase k, [Pa.s]
ρ_g, ρ_s	Densidade do gás e do sólido, respectivamente, [kg/m ³]
ρ_k	Densidade da fase k, [kg/m ³]
ρ_p	Densidade do particulado, [kg/m ³]
τ	Tensões normais do sólido na Eq. (2.46), [Pa]
$\overset{=}{\tau}_g, \overset{=}{\tau}_s$	Tensor das tensões viscosas do gás e do sólido, respectivamente, [Pa]
$\overset{=}{\tau}_k$	Tensor das tensões viscosas para a fase k, [Pa]
ω	Parâmetro de relaxação na Eq. (3.37)
ψ_k	Propriedade intensiva conservada
∂	Derivada parcial

Subscritos

g	Fase gasosa
I	Interface
k	Índice da fase, 1 gasosa, 2 sólida
s	Fase sólida
p	Particulado
r	Relativa
1, 2	Fase gasosa e sólida, respectivamente

Sobrescritos

cin	Cinéticos
col	Colisões
gas	Gás
w	Ponderação de um parâmetro dado
\rightarrow	Vetor
$\overset{=}{}$	Tensor
$\overset{\cdot}{}$	Flutuação de um parâmetro dado

Operadores

$\bar{\nabla} \cdot$	Divergente
$\bar{\nabla}$	Gradiente
$\bar{\nabla}^T$	Gradiente transposto
$\langle \rangle$	Valor médio

Abreviaturas e Siglas

EDO	Equações diferenciais ordinárias
EDP	Equações diferenciais parciais
ICE	Implicit Continuous-fluid Eulerian
LES	Large Eddy Simulation
MAC	Marker And Cell
SMAC	Simplified Marker And Cell
TCEG	Teoria cinética dos escoamentos granulares
VOF	Volume of Fluid

Resumo

Cabezas, L.G. (1999). *Um estudo da modelagem matemática e solução numérica de escoamentos bifásicos gás-sólidos*. São Carlos, 1999. 121 p. Dissertação (Mestrado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

Foi desenvolvido um estudo inicial de modelagem hidrodinâmica de escoamentos bifásicos gás-sólidos, sendo consideradas a formulação matemática e a técnica numérica de solução. O sistema de equações conservativas diferenciais parciais foi obtido com base no modelo das duas fases, considerando ambas as fases como meios contínuos. Primeiramente, foram formuladas as equações locais instantâneas e as condições de salto. Posteriormente, aplicando o procedimento de médias de Euler, foram obtidas, para ambas as fases, as equações conservativas médias. Finalmente, foram formuladas as leis de fechamento, as condições iniciais e de contorno. As equações diferenciais parciais médias foram discretizadas num volume de controle Euleriano. As equações de continuidade foram discretizadas implicitamente, enquanto as equações de momentum o foram através de um procedimento explícito-implícito. Foram desenvolvidas simulações numéricas para uma geometria vertical típica de leitos fluidizados circulantes, e para um tubo ascendente aberto. Foram obtidos resultados em regime transiente, que mostram a instabilidade hidrodinâmica característica destes escoamentos, com recirculação e desenvolvimento de aglomerados.

Palavras-chave: modelo das duas fases, modelagem numérica, escoamentos bifásicos gas-sólido, fluidização

Abstract

Cabezas, L.G. (1999). *An study of mathematical modelling and numerical solution of gas-solid two-phase flows*. São Carlos, 1999. 121 p. Dissertação (Mestrado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

An initial study was carried out on hydrodynamics modelling of gas-solid two-phase flows. Both mathematical formulation and numerical solution technique were considered. A system of conservative partial differential equations was derived based on the two-fluid model conception, under the continuum hypothesis for both phases. Firstly the local instantaneous equations and jump conditions were derived. The Eulerian averaging procedure was then applied and average conservative equations were derived for each phase. Finally, closing laws, boundary and initial conditions were formulated. The average partial differential equations were discretized over an Eulerian control volume. The continuity equations were implicitly discretized, while the momentum equations were discretized following an explicit-implicit procedure. Numerical simulations were performed for a vertical geometry typical to circulating fluidized beds, and for an open vertical riser. Transient results were generated which showed the characteristic hydrodynamic instability of the flow field, with recirculations and development of clusters.

Key words: Two-fluid model, numerical modeling, two-phase gas-solid flow, fluidization

CAPÍTULO 1 - Introdução

A fluidização gás-sólido tem variadas aplicações industriais entre as quais incluem-se as indústrias do petróleo, química, metalúrgica e de geração de energia. Reatores de leito fluidizado são amplamente utilizados na combustão de carvão para geração termoelétrica de energia em larga escala, e no craqueamento catalítico do petróleo para a produção de gasolina e outros derivados.

Há vários tipos de reatores de leito fluidizado com aplicação industrial, sendo os mais utilizados os reatores de leito fluidizado borbulhante atmosférico e pressurizado, e os reatores de leito fluidizado circulante ou rápido. Os leitos borbulhantes e circulantes se distinguem quanto ao regime de fluidização. Os leitos borbulhantes são caracterizados por altas densidades de particulado, pelo desenvolvimento de bolhas de gás que promovem recirculação e mistura, e pelo arrasto e elutriação de particulados mais finos. A maior parte do leito é formada de partículas cujas velocidades terminais são maiores que a velocidade do gás. O regime de fluidização rápida é atingido quando o escoamento de gás passa a fluir à velocidades superiores à velocidade terminal do particulado. Nessas condições todo o particulado é removido do leito, e recirculação de sólidos é necessária. Os leitos circulantes caracterizam-se por baixas densidades de particulado e altas taxas de circulação.

Os combustores de leito circulante têm emergido como uma opção promissora para a geração de energia em caldeiras de queima de carvão. Existem muitas vantagens na utilização destes combustores de leitos circulantes tais como: a flexibilidade no combustível, a grande eficiência da combustão, a ampla faixa de carga, as baixas emissões de óxidos de nitrogênio e enxofre NO_x e SO_2 , e a boa taxa de recirculação do material no tubo ascendente. O uso da combustão por etapas nos

combustores de leito circulante permite um bom controle das emissões de óxidos de nitrogênio NO_x e uma taxa de recirculação boa no tubo ascendente. O grande contato entre o gás e o sólido assim como o relativamente grande tempo de residência do sólido no leito permitem uma melhor captura do enxofre para a razão de Ca/S dada. O leito circulante denomina-se a segunda geração de combustores de leito fluidizado, TSUO (1989).

No Brasil está em construção a primeira instalação de uma planta geradora de energia elétrica de ciclo combinado, turbina de vapor/turbina de gás, com queima parcial do combustível (gasificação) em Salvador, Estado da Bahia, CARPENTIERI *et al.* (1993). Esta planta utilizará um leito circulante para efetuar a combustão parcial da biomassa vegetal que será usada como combustível.

A Fig. 1.1 mostra o diagrama esquemático da instalação industrial de uma caldeira a vapor com um combustor de leito fluidizado circulante desenvolvida pela empresa Scrubgrass Generating Company. O objetivo desta instalação é a geração de energia elétrica (95 MW) a partir de duas unidades de combustores de leito fluidizado projetadas para a queima de resíduos de carvão betuminoso numa ampla faixa JONES *et al.* (1995).

As partes principais desta instalação são o sistema de alimentação de carvão (1), a fornalha no tubo ascendente do leito circulante (2), o recipiente separador do vapor de água (3), os ciclones separadores quentes que recirculam o leito (4), os trocadores de calor de superaquecimento do vapor de água (5), o economizador para preaquecimento da água de alimentação (6), os trocadores de calor de aquecimento do ar primário de alimentação do leito (7) e o sistema utilizado para recolher as cinzas de carvão do processo de combustão (8).

Apesar das vantagens dos sistemas de fluidização de leitos circulantes precisa-se de uma compreensão quantitativa e qualitativa da hidrodinâmica do escoamento bifásico gás-sólido para o projeto eficiente destas unidades industriais. Segundo TSUO, (1989) é necessário estudar vários fatores dos leitos circulantes como: a distribuição axial e radial não homogênea de ambas as fases, a formação de aglomerados de partículas que acontece no regime de fluidização rápida dispersa, e o padrão de escoamento anular que acontece para o regime de fluidização rápida densa.

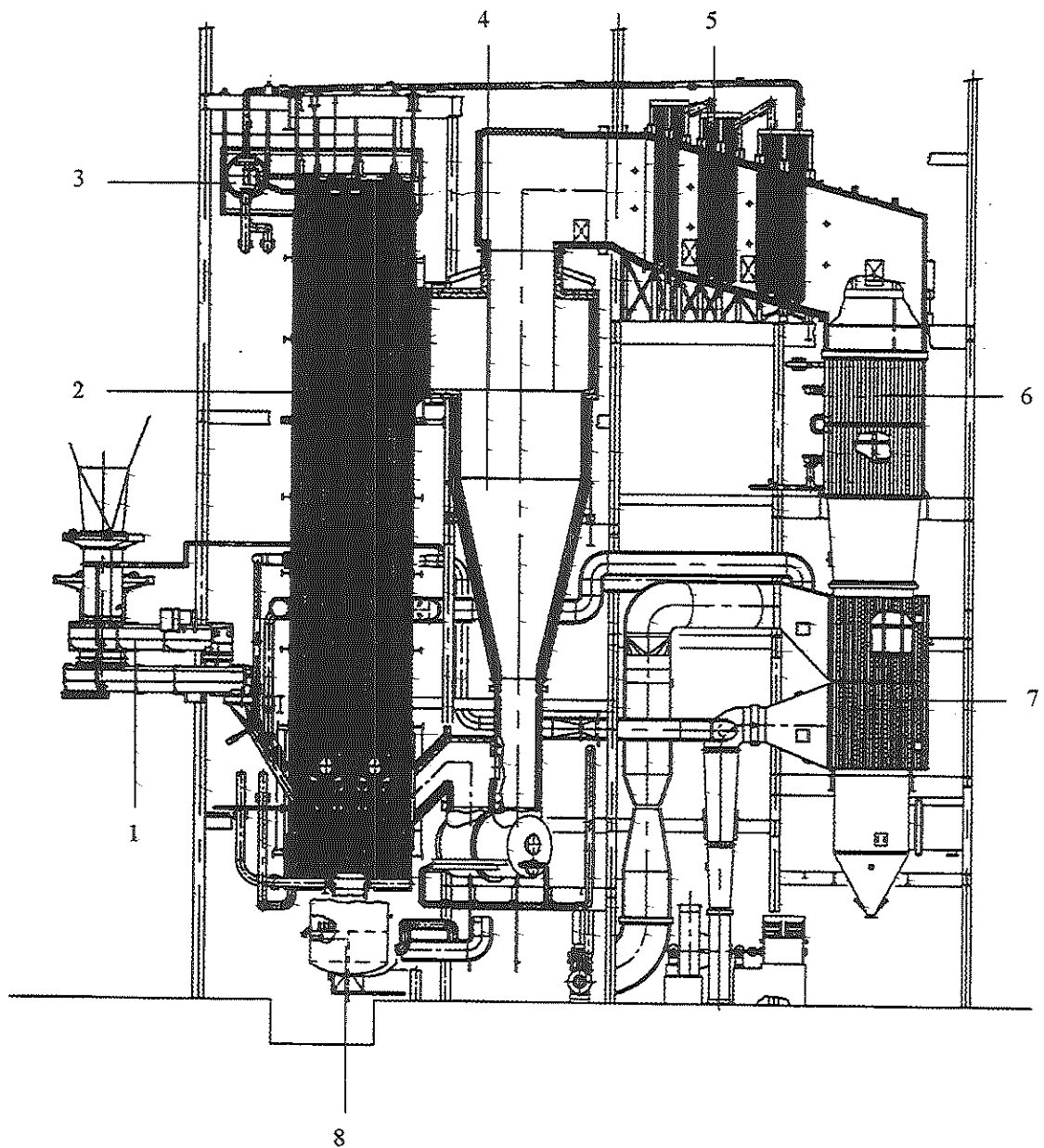


Figura 1.1. Diagrama esquemático de uma caldeira com um combustor de leito circulante. Instalação SCRUBGRASS (JONES *et al.*, 1995).

A tecnologia de fluidização gás-sólidos apresenta ainda problemas a serem resolvidos, tais como a forte erosão das superfícies internas ao leito, tubos de troca de calor, válvulas, etc., e a possível bloqueio das partículas finas no tubo ascendente. Além disso, devido à sensibilidade do escoamento fluidizado à escala e às condições

operacionais, o processo de escalonamento torna-se extremamente complexo (DING, 1990). Os estudos hidrodinâmicos podem contribuir de forma significativa para o melhor conhecimento e solução desses problemas.

A hidrodinâmica do escoamento em colunas de leito fluidizado circulante é caracterizada por grandes complexidades. Na base da coluna tem-se uma região de entrada de gases e sólidos com fração volumétrica de sólidos entre 0,2 e 0,4. Logo acima forma-se uma região densa semelhante à um leito fluidizado turbulento, caracterizada por concentrações de sólidos e vazios bastante irregulares, com fração volumétrica de sólidos média em torno de 0,2. Acima da região densa forma-se a região de arrasto que domina o escoamento em colunas circulantes, caracterizada por fração volumétrica de sólidos entre 0,02 e 0,05. Nessa região o escoamento é caracterizado pela agregação de partículas em aglomerados, que são formados e dissipados com grande frequência, há grande recirculação de sólidos, e a velocidade do gás é de ordem superior em relação à velocidade terminal de partículas individuais.

Os aglomerados fluem de forma ascendente ou descendente, dependendo da ordem de grandeza de sua velocidade terminal. Nas paredes do container do leito forma-se um escoamento descendente de particulado devido às baixas velocidades de gás locais. Com isso reduz-se a quantidade de partículas nessas regiões e estabelece-se um fluxo difusivo de particulado transversal na direção das paredes. O escoamento é tipicamente turbulento e instável, com condições de transporte axial altamente convectivas e transporte transversal difusivo menos intenso. As distribuições axial e radial de ambas as fases são altamente não homogêneas. Com isso estabelece-se um padrão anular de escoamento, com fluxo descendente mais denso nas paredes, e um escoamento no centro da coluna caracterizado por particulado disperso em ascensão e aglomerados em movimentos ascendentes e descendentes.

Essas complexas condições de escoamento provêm um intenso contato superficial entre gases e sólidos, garantindo as altas taxas de reação necessárias aos processos reativos. O conhecimento da hidrodinâmica do processo é então crucial para que os parâmetros reativos e de transporte de massa no reator possam ser estabelecidos. Uma determinação exata da hidrodinâmica do processo permite estabelecer o desempenho dos reatores relacionado à utilização de reagentes,

catalisadores, absorventes; permite a determinação de quantidades de calor trocadas entre o leito e superfícies imersas tais como tubos para geração de vapor; e permite a determinação de concentrações de gases gerados no processo, incluindo emissões de poluentes.

As pesquisas em processos de fluidização gás-sólidos tiveram início fundamentalmente na segunda metade deste século. Os primeiros trabalhos relacionavam-se principalmente à estudos experimentais. Mais recentemente, em função da evolução nos campos das técnicas numéricas e dos recursos computacionais, têm-se desenvolvido consideravelmente as áreas de modelagem matemática e simulação numérica.

HARRIS & DAVIDSON (1994) apud PUGSLEY & BERRUTI (1996) apresentam uma classificação de modelos utilizados na simulação de leitos fluidizados. Segundo esses autores existem três tipos de modelos matemáticos utilizados para modelar os processos de fluidização gás-sólidos:

1. Os modelos que predizem a variação axial da densidade da suspensão de sólidos, mas que não caracterizam a variação radial.
2. Os modelos que predizem a variação radial da densidade da suspensão de sólidos e as altas velocidades médias de deslizamento, assumindo duas ou mais regiões com diferentes características de escoamento (por exemplo, os modelos pistonado anular e de escoamento anular com aglomerados).
3. Os modelos que utilizam as equações fundamentais da dinâmica dos fluidos para prever o escoamento bifásico gás-sólidos. Tal é o caso do modelo das duas fases e dos outros tipos de modelagens tratadas neste trabalho.

Os dois primeiros tipos de modelos são preferencialmente utilizados como ferramentas de projeto, para investigar os efeitos das condições de operação e das dimensões do tubo ascendente do leito na estrutura do escoamento. Esses modelos podem ser facilmente acoplados à modelos cinético-químicos para simular o desempenho dos reatores de leito circulante.

Os modelos do terceiro tipo são mais adequados para pesquisar as estruturas locais do escoamento, e para verificar a influência local da geometria sobre o

escoamento. Nesse trabalho desenvolve-se o estudo deste tipo de modelos, especificamente do modelo das duas fases.

PRITCHETT *et al.* (1978) apud GIDASPOW (1986) foram os primeiros autores a reportar soluções numéricas das equações conservativas não lineares para suspensões fluidizadas. Através do seu código computacional (CHEMFLUG) reproduziram, pela primeira vez, a formação de bolhas provocadas por um jato de gás de fluxo contínuo através de um leito fluidizado. Esse modelo hidrodinâmico é apresentado em GIDASPOW (1994). SCHNEYER *et al.* (1981) apud KUIPERS & VAN SWAAIJ (1997) estenderam o modelo hidrodinâmico de PRITCHETT *et al.* (1978) para a modelagem de uma instalação completa de gasificação de carvão em leito fluidizado. Este modelo provavelmente representa o esforço de modelagem numérica em fluidização mais completo e ambicioso já desenvolvido (KUIPERS & VAN SWAAIJ, 1997).

Paralelamente o grupo de pesquisa JAYCOR (SHHARFF *et al.*, 1982) apud GIDASPOW (1986) desenvolveu um modelo hidrodinâmico para gasificação de carvão em leito fluidizado denominado código FLAG.

Posteriormente o grupo de pesquisa do IIT/ANL desenvolveu um código computacional para modelar numericamente o escoamento gás-sólido em leitos borbulhantes e circulantes. Esse código é uma modificação do código K-FIX desenvolvido por RIVARD & TORREY (1977) apud ETTEHADIEH (1982), para a modelagem numérica de escoamentos gás-líquido, e baseia-se no método numérico desenvolvido por HARLOW & AMSDEM (1975) para o cálculo de escoamentos multifásicos. Vários trabalhos têm sido desenvolvidos por este grupo do IIT/ANL: (GIDASPOW & ETTEHADIEH, 1983; SYAMLAL & GIDASPOW, 1985; GIDASPOW, 1986; BOUILLARD *et al.*, 1989; TSUO & GIDASPOW, 1990; DING & GIDASPOW, 1990; etc).

Como resultado da evolução do conhecimento nesta área há uma tendência à modelagem de situações experimentais cada vez mais reais, possibilitando uma melhor predição das características hidrodinâmicas do processo de fluidização. Com isso desenvolve-se uma poderosa ferramenta para o projeto e escalado de instalações futuras. Alguns trabalhos nessa direção foram executados por DING (1990), que

modelou a instalação experimental de combustão de leito circulante PIROFLOW. No trabalho de THEOLOGOS & MARKATOS (1992) modela-se os processos hidrodinâmicos e de transferência de calor em um reator de craqueamento catalítico fluidizado.

A modelagem numérica dos processos de fluidização gás-sólidos representa uma ferramenta auxiliar para a minimização dos esforços experimentais requeridos no desenvolvimento de instalações industriais. A experimentação e o desenvolvimento de protótipos são as ferramentas principais no projeto de qualquer processo industrial em engenharia. No entanto, os procedimentos de modelagem matemática e simulação numérica estão em constante desenvolvimento contribuindo de forma crescente para uma melhor compreensão de processos e fenômenos físicos. Além disso os modelos do processo de fluidização necessitam, para sua validação, de medições experimentais complexas de difícil execução. Assim, o desenvolvimento de modelagem também representa um estímulo ao desenvolvimento de novas técnicas e métodos experimentais.

Na atualidade existem diversos grupos de pesquisa dedicados à modelagem numérica de escoamentos gás-sólidos em fluidização. Alguns de estes grupos são apresentados no Capítulo 3, Seção 3.1.2, com uma breve descrição das suas linhas de pesquisa.

1.1 - Apresentação do trabalho

O objetivo deste trabalho é realizar um estudo inicial de formulação matemática e modelagem numérica em escoamentos bifásicos gás-sólidos aplicados à fluidização, especificamente à fluidização em leitos circulantes.

Para isso propõe-se efetuar um estudo teórico do modelo das duas fases aplicado à escoamentos gás-sólidos, estudar uma das técnicas computacionais utilizada para resolver esse modelo e simular o escoamento gás-sólidos num leito circulante.

O trabalho foi subdividido em cinco capítulos, dos quais se fará um breve resumo a seguir.

Capítulo 1. Breve apresentação do problema oferecendo uma breve resenha histórica da modelação numérica de escoamentos gás-sólidos em fluidização.

Capítulo 2. Exposição da formulação teórica do modelo das duas fases utilizando o procedimento tradicional. Procede-se à análise das leis de fechamento para escoamentos bifásicos gás-sólidos, enfatizando os modelos hidrodinâmicos A e B utilizados no IIT/ANL.

Capítulo 3. Apresentação sucinta das características gerais da modelagem numérica de escoamentos multifásicos e descrição das aplicações e linhas atuais da modelagem numérica na área de fluidização. Apresenta-se as equações de balanço do modelo hidrodinâmico B do IIT/ANL discretizadas em diferenças finitas, assim como a técnica de solução numérica deste sistema de equações. Apresenta-se também as condições iniciais e de contorno usadas na simulação numérica de um leito circulante.

Capítulo 4. Simulação numérica de um leito circulante. Desenvolve-se simulação numérica para casos descritos por TSUO (1989), e procede-se à análise qualitativa de resultados.

Capítulo 5. Conclusões do trabalho e principais recomendações para futuras pesquisas.

CAPÍTULO 2 - Formulação Teórica

2.1 - Introdução

Os modelos matemáticos utilizados na modelagem numérica em fluidos são baseados fundamentalmente em sistemas de equações diferenciais parciais (EDP), com condições iniciais e de contorno prescritas, que representam matematicamente os fenômenos físicos que ocorrem no processo. Na obtenção desse sistema fechado de EDP segue-se uma lógica baseada na aplicação de leis físicas de conservação, tais como, a conservação de massa, a segunda lei de Newton da conservação de momentum e a conservação de energia. Em escoamentos bifásicos a aplicação destas leis dificulta-se devido à que este tipo de escoamento caracteriza-se pela presença de duas fases diferentes, e de interfaces que separam essas fases entre si. Assim, dependendo da geometria das interfaces existem vários regimes de escoamento da mistura bifásica caracterizados por diferentes mecanismos de transporte (ver Tabela I-1, ISHII, 1975). Tais regimes de escoamento podem ocorrer simultaneamente num sistema simples, o que dificulta a modelagem dos escoamentos bifásicos.

Pode-se contornar teoricamente este problema aplicando localmente as equações de balanço a cada fase, e modelando apropriadamente as condições de contorno na interface. Porém, uma formulação geral baseada em variáveis locais instantâneas e interfaces em movimento, resulta num problema de multifronteiras, com posição de interfaces desconhecida. Isso torna impraticável para a maioria dos casos a obtenção de modelos matemáticos e portanto de soluções (ISHII & MISHIMA, 1984). Estes autores resumem os três procedimentos principais adotados para desenvolver modelos matemáticos de escoamentos bifásicos ou multifásicos, a partir de um ponto de vista macroscópico, eliminando parcialmente os detalhes da formulação local instantânea como mostra-se na Fig. 2.1.

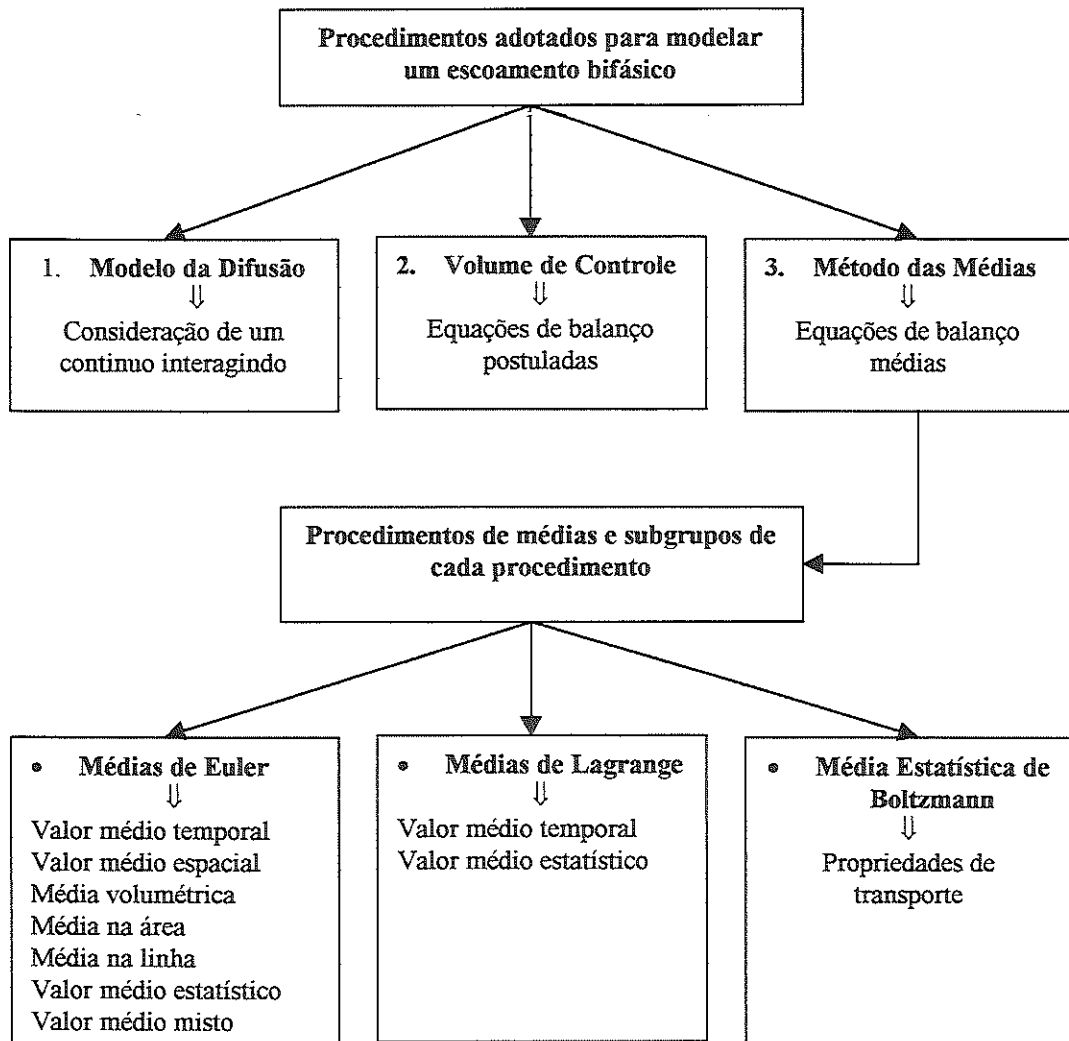


Figura 2.1. Procedimentos adotados para modelar um escoamento bifásico (ISHII, 1975 e ISHII & MISHIMA, 1984).

Os dois primeiros procedimentos baseiam-se principalmente em hipóteses, intuição física e similaridade assumida com escoamentos monofásicos. Por outro lado, o método das médias é matematicamente mais rigoroso, mas requer uma larga manipulação das equações. Para uma descrição de cada método pode-se consultar ISHII & MISHIMA (1984).

Na atualidade o procedimento mais usado é o das equações de balanço médias ou método de médias. Esse procedimento, por sua vez, é subdividido em três grupos, dependendo do conceito físico básico usado para formular o problema que se analisa. Segundo ISHII (1975), esses grupos são: as médias de Euler, as médias de Lagrange

e a média estatística de Boltzmann. Esses grupos também subdividem-se em vários subgrupos dependendo da variável utilizada para estabelecer as médias. Essa classificação é mostrada na Fig. 2.1.

Este capítulo tem como objetivo o estudo inicial da modelagem matemática de um escoamento bifásico, gás-sólidos em particular, utilizando o procedimento de médias de Euler. Através desse procedimento é obtido o **modelo das duas fases**, que constitui uma das formulações principais das equações de campo macroscópicas para um sistema bifásico. Este modelo é formulado considerando cada fase em separado, em termos de um sistema de equações de conservação de massa, quantidade de movimento para cada direção coordenada, e conservação da energia, para cada fase respectivamente. Devido a que ambas as fases interagem entre si, aparecem nas equações de campo termos devidos a essa interação, que especificam o transporte de massa, quantidade de movimento e energia através da interface.

O conteúdo exposto neste capítulo baseia-se fundamentalmente no artigo de ENWALD *et al.* (1996), que constitui uma extensa revisão bibliográfica da aplicação à fluidização da teoria de Euler de um escoamento bifásico.

2.2 - Procedimento para a formulação do modelo das duas fases

A formulação do modelo das duas fases é desenvolvida pelo procedimento mostrado na Fig. 2.2 (ENWALD *et al.*, 1996). A idéia geral é formular balanços integrais de massa, quantidade de movimento e energia para um volume de controle fixo que contenha as duas fases. Posteriormente aplicando os teoremas de Leibniz e de Gauss os balanços integrais dão origem à equações locais instantâneas para cada uma das fases e equações de salto locais instantâneas na interface que representam a interação entre as fases. Numa segunda etapa aplica-se o procedimento de médias de Euler às equações locais. Esse procedimento, como indicado na Fig. 2.1, pode ser desenvolvido de várias formas dependendo da variável escolhida para efetuar as médias. Devido à introdução de novas variáveis nas equações de campo, os termos de interação na interface, realiza-se um terceiro passo que consiste na aplicação de leis de fechamento com o objetivo de modelar os termos não conhecidos nas equações de

balanço. Por último são estabelecidas condições iniciais e de contorno completando a formulação do modelo das duas fases. Os tópicos a seguir detalham esta metodologia de obtenção do modelo das duas fases.

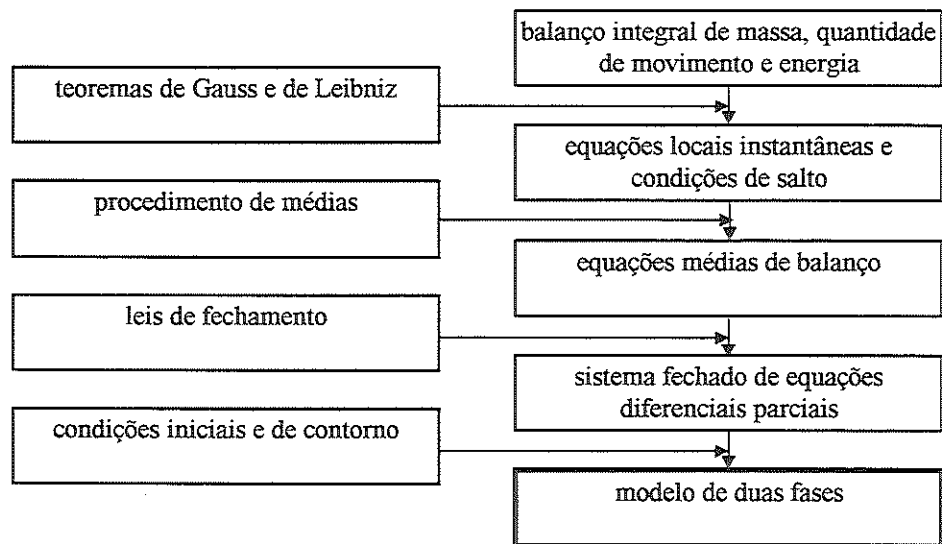


Figura 2.2. Procedimento geral para a formulação do modelo de duas fases (ENWALD *et al.*, 1996).

2.3 - Equações locais instantâneas

A importância das equações locais instantâneas reside no fato de que constituem a base fundamental para todos os modelos bifásicos obtidos a partir de procedimentos de médias. De fato, quando cada sub-região limitada pelas interfaces é definida como um contínuo, obtêm-se uma formulação local instantânea fundamentada em grande rigorismo matemático. Isso fortemente recomenda que todos os modelos de escoamentos bifásicos sejam derivados a partir desta formulação. Ademais, as equações locais instantâneas permitem a modelagem direta de escoamentos separados, tais como escoamentos estratificados, em películas ou anulares de ampla aplicação industrial, típicos de processos de ebulição e condensação (ISHII, 1975).

2.3.1 - Equações generalizadas

Para obter as equações generalizadas em abordagem Euleriana considera-se um volume fixo no espaço como aquele representado na Fig. 2.3, cortado por duas fases indexadas pela letra k . A interface de separação entre as fases de área $A_I(t)$ move-se com a velocidade \bar{u}_I que pode ser diferente de \bar{u}_k . Quando a variável ψ_k é transportada através do volume de controle, pode-se escrever o seguinte balanço integral

$$\sum_{k=1}^2 \left(\frac{d}{dt} \int_{V_k(t)} \rho_k \psi_k dV \right) = \int_{A_I(t)} \phi_I dA + \sum_{k=1}^2 \left(- \int_{A_k(t)} \rho_k \psi_k (\bar{u}_k \cdot \hat{n}_k) dA + \int_{V_k(t)} \rho_k \phi_k dV - \int_{A_k(t)} \mathbf{J}_k \cdot \hat{n}_k dA \right) \quad (2.1)$$

onde: \hat{n}_k é o vetor unitário normal externo com respeito à interface do volume ocupado pela fase k , \bar{u}_k é a velocidade, ρ_k é a densidade, ψ_k é a propriedade intensiva conservada, \mathbf{J}_k é o tensor de interação superficial, e ϕ_k é o termo fonte volumétrico, todos relativos à fase k . ϕ_I é o termo fonte volumétrico na interface.

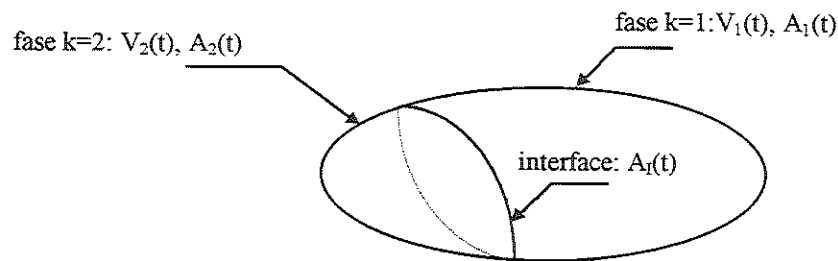


Figura 2.3. Volume de controle fixo contendo duas fases com interface em movimento.

Na obtenção das equações locais instantâneas a partir da Eq. (2.1) são utilizados o teorema de Leibniz e o teorema de Gauss-Ostragradskii ou teorema da

divergência apresentados no Apêndice I. Aplicando o teorema de Leibniz Eq. (A1.1) ao termo da esquerda na Eq. (2.1) resulta

$$\frac{d}{dt} \int_{V_k(t)} \rho_k \psi_k dV = \int_{V_k(t)} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_k \psi_k) dV + \int_{A_I(t)} \rho_k \psi_k \bar{u}_I \cdot \hat{n}_k dA \quad (2.2)$$

Na obtenção da Eq. (2.2) considera-se que a integral de superfície sobre A_k é nula devido à que a velocidade de deslocamento dessa superfície torna-se zero como consequência do volume de controle fixo, i.e. abordagem Euleriana. Transformando os termos convectivo e difusivo da Eq. (2.2) mediante à aplicação do teorema de Gauss- Ostragradskii Eqs. (A1.2-A1.4) acha-se as seguintes relações

$$\int_{V_k(t)} \bar{\nabla} \cdot (\rho_k \psi_k \bar{u}_k) dV = \int_{A_k(t)} \rho_k \psi_k \bar{u}_k \cdot \hat{n}_k dA + \int_{A_I(t)} \rho_k \psi_k \bar{u}_k \cdot \hat{n}_k dA \quad (2.3)$$

e

$$\int_{V_k(t)} \bar{\nabla} \cdot J_k dV = \int_{A_k(t)} J_k \cdot \hat{n}_k dA + \int_{A_I(t)} J_k \cdot \hat{n}_k dA \quad (2.4)$$

Substituindo as Eqs. (2.2-2.4) na Eq. (2.1) e arranjando os termos, a equação resultante é expressa como a soma de duas integrais como segue

$$\sum_{k=1}^2 \int_{V_k(t)} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho_k \psi_k) + \bar{\nabla} \cdot (\rho_k \psi_k \bar{u}_k) + \bar{\nabla} \cdot J_k - \rho_k \phi_k \right) dV - \int_{A_I(t)} \left(\sum_{k=1}^2 (\dot{m}_k \psi_k + J_k \cdot \bar{n}_k) + \phi_I \right) = 0 \quad (2.5)$$

onde \dot{m}_k representa o fluxo de massa por unidade de área e por unidade de tempo na interface e define-se como

$$\dot{m}_k = \rho_k (\bar{u}_k - \bar{u}_I) \cdot \hat{n}_k \quad (2.6)$$

Tendo em conta que a Eq. (2.5) deve ser satisfeita para valores quaisquer de $V_k(t)$ e $A_I(t)$ então a partir da integral de volume para as duas fases obtêm-se a equação local instantânea generalizada. Ainda, a partir da integral de superfície que expressa as condições de salto através da interface na Eq. (2.5) obtêm-se a condição de salto local instantânea generalizada. O procedimento resulta:

Equação de campo local instantânea generalizada

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \psi_k) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_k \psi_k \vec{u}_k) + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{J}_k - \rho_k \phi_k = 0 \quad (2.7)$$

Condição de salto local instantânea generalizada

$$\sum_{k=1}^2 (\hat{m}_k \psi_k + \mathbf{J}_k \cdot \hat{n}_k) = -\phi_I \quad (2.8)$$

onde os valores de ψ_k , \mathbf{J}_k , ϕ_k , e ϕ_I são definidos na Tabela 2.1.

Tabela 2.1. Valores de ψ_k , \mathbf{J}_k , ϕ_k , e ϕ_I para as equações generalizadas Eqs. (2.7) e (2.8).

Parâmetro conservado	Propriedade intensiva conservada ψ_k	Tensor de interação Superficial \mathbf{J}_k	Fonte volumétrica ϕ_k	Fonte volumétrica na interface ϕ_I
Massa	1	0	0	0
Momento	\vec{U}_k	$-\vec{T}_k$	\vec{g}	0

2.3.2 - Equações locais instantâneas e condições de salto primárias

As equações locais instantâneas e as condições de salto correspondentes, definidas segundo as Eqs. (2.7) e (2.8) e a Tabela 2.1, são denominadas de equações e condições de salto primárias respectivamente, embora não sejam discutidas as equações de conservação da energia e da entropia. A seguir apresenta-se as equações e as condições de salto primárias.

Conservação da massa

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k) + \bar{\nabla} \cdot (\rho_k \bar{u}_k) = 0 \quad (2.9)$$

Condição de salto de massa na interface

$$\sum_{k=1}^2 \dot{m}_k = 0 \quad (2.10)$$

Conservação da quantidade de movimento

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \bar{u}_k) + \bar{\nabla} \cdot (\rho_k \bar{u}_k \bar{u}_k) - \bar{\nabla} \cdot \bar{\bar{T}}_k - \rho_k \bar{g} = 0 \quad (2.11)$$

Condição de salto de quantidade de movimento na interface

$$\sum_{k=1}^2 (\dot{m}_k \bar{u}_k - \bar{\bar{T}}_k \cdot \hat{n}_k) = 0 \quad (2.12)$$

onde $\bar{\bar{T}}_k$ é o tensor das tensões, e \bar{g} a aceleração da gravidade.

2.4 - Equações médias

2.4.1 - Caracterização do processo de médias

A importância do processo de médias é que através dele eliminam-se as flutuações locais instantâneas de um escoamento multifásico, possibilitando a obtenção de valores médios dos movimentos e propriedades do escoamento. Com isso modela-se os aspectos macroscópicos do escoamento, que são de maior interesse em problemas de engenharia (ISHII, 1975).

No procedimento de Euler, para um parâmetro qualquer, seja escalar, vetor ou tensor, este é definido como uma $f(\vec{r}, t)$. Diz-se que o parâmetro é definido num ponto fixo do espaço, \vec{r} , num dado instante de tempo t . Neste ponto e instante de tempo uma das fases estará presente. O processo de médias consiste em aplicar às equações de balanço algum tipo de média.

A media volumétrica é estabelecida num intervalo $\Delta\vec{r}$ ao redor de um ponto fixo \vec{r} num instante de tempo t , enquanto a media temporal é determinada no ponto \vec{r} para um intervalo de tempo Δt em torno de um instante t contido nesse intervalo. A media de conjunto é vista como uma media estatística do parâmetro f , no ponto \vec{r} e no instante de tempo t , sobre um número grande de experimentos com as mesmas condições iniciais e de contorno. Estas médias são definidas pelos seguintes operadores

$$\langle \dots \rangle_v = \frac{1}{V} \int_V (\dots) dV \quad (2.13)$$

$$\langle \dots \rangle_t = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} (\dots) dt \quad (2.14)$$

$$\langle \dots \rangle_\epsilon = \int_\epsilon (\dots) dP(\mu) \quad (2.15)$$

Na Eq. (2.15), $dP(\mu)$ é a probabilidade de ocorrência do processo μ e ϵ é o conjunto de todas as suas possíveis realizações. Em resumo a média de conjunto é o valor médio estatístico de qualquer parâmetro f , no tempo e posição escolhidos, obtido de um número representativo de experimentos. As médias volumétrica e temporal são uma aproximação da média de conjunto, sendo todas equivalentes entre si, para um escoamento estacionário e homogêneo, (ENWALD *et al.*, 1996).

Uma descrição detalhada dos operadores e dos processos de médias pode ser encontrada em ISHII (1975), DELHAYE & ACHARD (1976, 1977) e DELHAYE (1981).

2.4.2 - Equações médias gerais

O objetivo do procedimento de médias é transformar as equações locais instantâneas e as condições de salto em equações de balanço médias e condições de salto médias, correspondentemente. Para obter essas equações médias gerais de balanço são utilizadas varias definições básicas relacionadas ao escoamento bifásico, assim como várias relações e propriedades do processo de médias. Tais relações e propriedades são apresentadas no Apêndice I.

Um dos parâmetros básicos a definir é o parâmetro densidade de fase, X_k , definido pela seguinte função

$$X_k(\vec{r}, t) = \begin{cases} 1, & \text{se } r \in k \\ 0, & \text{se } r \notin k \end{cases} \quad (2.16)$$

Este parâmetro densidade de fase indica quando a fase k está presente no tempo e coordenadas analisados. Outro parâmetro básico é a media da função densidade de fase, definida como o equivalente à ocorrência média da fase k , é expressa como

$$\alpha_k = \langle X_k \rangle \quad (2.17)$$

onde

$$\sum_{k=1}^2 \alpha_k = 1 \quad (2.18)$$

A ocorrência media da fase gasosa α_g é definida como a fração de vazio. O símbolo $\langle \dots \rangle$ denota qualquer dos operadores já definidos anteriormente nas Eqs. (2.13-2.15).

Multiplicando a equação de campo local instantânea generalizada, Eq. (2.7), pelo parâmetro densidade de fase X_k , obtendo a média da equação resultante e usando as Eqs. (A2.6-A2.9), obtém-se a equação de balanço média geral

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle X_k \rho_k \psi_k \rangle + \bar{\nabla} \cdot \langle X_k \rho_k \psi_k \bar{u}_k \rangle + \bar{\nabla} \cdot \langle X_k J_k \rangle - \langle X_k \rho_k \phi_k \rangle \\ = \left\langle \left(\dot{m}_k \psi_k + J_k \cdot \hat{n}_k \right) \frac{\partial X_k}{\partial n} \right\rangle \end{aligned} \quad (2.19)$$

Os detalhes da obtenção da Eq. (2.19) são apresentados no Apêndice I. O termo da direita nesta equação representa o transporte na interface, o qual é determinado usando a Eq. (A2.10), que representa o gradiente da função densidade de fase.

Utilizando essa expressão do gradiente da função densidade de fase e executando algumas operações oferecidas no Apêndice I, a condição de salto local instantânea generalizada, Eq. (2.8), transforma-se na condição de salto média geral

$$\left\langle \left(\dot{m}_k \psi_k + J_k \cdot \hat{n}_k \right) \frac{\partial X_k}{\partial n} \right\rangle = - \left\langle \phi_I \frac{\partial X_k}{\partial n} \right\rangle \quad (2.20)$$

2.4.3 - Equações de transporte de massa e de quantidade de movimento médias

As equações específicas de balanço de massa e de quantidade de movimento, e as correspondentes condições de salto, são formuladas a partir das Eqs. (2.19-2.20) e da Tabela 2.1.

Para o caso analisado, onde não existe transferência de massa entre as fases na interface, $\dot{m}_k = 0$, são obtidas as seguintes equações:

Equação de conservação da massa média

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle X_k \rho_k \rangle + \bar{\nabla} \cdot \langle X_k \rho_k \bar{u}_k \rangle = 0 \quad (2.21)$$

Devido à que $\dot{m}_k = 0$, a condição de salto na interface para a massa é nula.

Equação de conservação da quantidade de movimento média

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle X_k \rho_k \bar{u}_k \rangle + \bar{\nabla} \cdot \langle X_k \rho_k \bar{u}_k \bar{u}_k \rangle - \bar{\nabla} \cdot \langle X_k \bar{T}_k \rangle - \langle X_k \rho_k \bar{g} \rangle \\ = \langle -\bar{T}_k \cdot \bar{\nabla} X_k \rangle = M_{ki} \end{aligned} \quad (2.22)$$

onde M_{ki} é o termo de transferência de quantidade de movimento na interface.

A condição de salto de quantidade de movimento na interface média é

$$\sum_{k=1}^2 \langle -\bar{T}_k \cdot \bar{\nabla} X_k \rangle = \sum_{k=1}^2 M_{ki} = 0 \Rightarrow M_{1i} = -M_{2i} \quad (2.23)$$

Os termos de transferência na interface representam interações entre as fases, e são modelados usando expressões empíricas. As condições de salto impõem restrições precisas a serem satisfeitas por esses termos.

2.4.4 - Equações médias decompostas e ponderadas de transporte de massa e de quantidade de movimento

2.4.4.1 - Decomposição de Reynolds

As equações médias apresentadas na Seção 2.4.3 não podem ser resolvidas diretamente, já que contém termos envolvendo médias do produto de variáveis dependentes. Para que o sistema de equações possa ser resolvido é necessário expressar as médias de produtos em termos do produto das médias das variáveis em questão. A decomposição e o processo de médias temporais de Reynolds são utilizados na modelagem de escoamentos turbulentos monofásicos, para separar os componentes das flutuações das variáveis de suas médias temporais. No presente trabalho é utilizada essa metodologia independentemente do tipo de médias utilizadas (temporais, espaciais, estatística). O objetivo é separar as médias dos produtos em produtos das medias. Esse procedimento tem como resultado o surgimento de termos

adicionais nas equações contendo correlações dos componentes das flutuações, análogos às tensões de Reynolds no caso de um escoamento monofásico turbulento.

Aplicando a decomposição de Reynolds e o procedimento de médias ponderadas à uma variável geral f obtém-se a seguinte expressão

$$f = \langle f \rangle^w + f' \quad (2.24)$$

onde $\langle f \rangle^w$ representa o valor médio ponderado e f' representa a flutuação em torno deste valor médio.

2.4.4.2 - Variáveis médias ponderadas

Geralmente o valor médio ponderado de uma variável geral f é definido como

$$\langle f \rangle^w = \langle Wf \rangle / \langle W \rangle \quad (2.25)$$

onde W é um fator de ponderação qualquer. O valor médio ponderado deve satisfazer todas as propriedades dadas pelas Eqs. (A2.1–A2.5) respectivamente.

Existem dois procedimentos diferentes de ponderação para expressar as médias dos produtos em termos de produtos das médias. No primeiro, as variáveis são ponderadas através da função densidade da fase, denominada como média de fase

$$\langle f \rangle^{X_k} = \langle X_k f \rangle / \langle X_k \rangle \quad (2.26)$$

No segundo procedimento, as variáveis são ponderadas através da função densidade de fase vezes a densidade, denominada como média ponderada mássica ou média de Favre

$$\langle f \rangle^{X_k \rho_k} = \langle X_k \rho_k f \rangle / \langle X_k \rho_k \rangle \quad (2.27)$$

A seguir são definidas várias variáveis ponderadas de interesse conforme a conveniência:

- As velocidades são ponderadas como médias ponderadas mássicas

$$\langle \bar{u}_k \rangle^{X_k \rho_k} = \langle X_k \rho_k \bar{u}_k \rangle / \langle X_k \rho_k \rangle = \bar{U}_k \quad (2.28)$$

$$\langle \bar{u}'_k \rangle^{X_k \rho_k} = 0 \quad (2.29)$$

- A densidade da fase k é ponderada usando a média de fase

$$\langle \rho_k \rangle^{X_k} = \langle X_k \rho_k \rangle / \langle X_k \rangle = \langle X_k \rho_k \rangle / \alpha_k = \rho_k^{X_k} \quad (2.30)$$

- O tensor das tensões da fase k é ponderado usando a média de fase

$$\langle \bar{T}_k \rangle^{X_k} = \langle X_k \bar{T}_k \rangle / \langle X_k \rangle = \langle X_k \bar{T}_k \rangle / \alpha_k = \bar{T}_k^{X_k} \quad (2.31)$$

- A flutuação do tensor das tensões da fase k é ponderada usando a média de fase do produto dos componentes da flutuação da velocidade

$$\bar{T}_k^{\text{Re}} = -\langle X_k \rho_k \bar{u}'_k \bar{u}'_k \rangle / \langle X_k \rangle = -\langle X_k \rho_k \bar{u}'_k \bar{u}'_k \rangle / \alpha_k \quad (2.32)$$

2.4.4.3 - Equações médias decompostas e ponderadas

As equações médias decompostas e ponderadas são obtidas aplicando a decomposição de Reynolds, Eq. (2.24), às Eqs. (2.21-2.23) e re-escrevendo essas equações médias com ajuda das Eqs. (2.28-2.32). Os detalhes completos da derivação são apresentados no Apêndice I. Os resultados da derivação são apresentados a seguir.

Equação de conservação da massa média (continuidade)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k^{X_k}) + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k^{X_k} \bar{U}_k) = 0 \quad (2.33)$$

Equação de conservação da quantidade de movimento média

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k^{X_k} \bar{U}_k) + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k^{X_k} \bar{U}_k \bar{U}_k) = \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k (\bar{T}_k^{X_k} + \bar{T}_k^{Re})) + \alpha_k \rho_k \bar{g} + M_{kI} \quad (2.34)$$

onde a transferência da quantidade de movimento na interface para a fase k é determinada por

$$M_{kI} = -\langle \bar{T}_k \cdot \bar{\nabla} X_k \rangle \quad (2.35)$$

2.5 - Leis de Fechamento

Para obter o sistema fechado geral das equações de transporte para um escoamento gás-sólido é necessário especificar as leis de fechamento. Estas leis de fechamento podem ser aplicadas independentemente do método utilizado para obter as equações básicas médias de balanço.

Vários princípios básicos devem ser considerados para escolher as leis de fechamento dependendo do modelo matemático em questão. Discussões detalhadas relativas à princípios básicos considerados na formulação de leis de fechamento são apresentados em DREW & LAHEY (1993) apud ENWALD *et al.* (1996), ARNOLD *et al.* (1990), TRUESDELL & TOUPIN (1960) e ARIS (1962).

Nesta seção são discutidas apenas as leis de fechamento apropriadas para escoamentos bifásicos gás-sólidos.

As leis de fechamento são classificadas em três tipos: constitutivas, de transferência e topológicas.

- **Leis constitutivas:** são aquelas que descrevem as propriedades físicas das fases analisadas utilizando dados experimentais ou axiomas.
- **Leis de transferência:** são as equações empíricas que descrevem as diferentes interações entre as fases que ocorrem na interface.
- **Leis topológicas:** são aquelas que descrevem a distribuição espacial de uma variável específica do escoamento analisado (escoamento bifásico). Por exemplo a distribuição de velocidades de uma das fases de um escoamento unidimensional bifásico num duto.

2.5.1 - Leis Constitutivas

As leis constitutivas descrevem as propriedades físicas das fases analisadas. Elas especificam como as propriedades físicas das fases se relacionam, mas não descrevem parâmetros de transporte entre as fases na interface.

A seguir serão definidas as leis constitutivas necessárias para a modelagem hidrodinâmica de um escoamento bifásico gás-sólido. As propriedades a modelar são: o tensor das tensões viscosas, a viscosidade dinâmica, a viscosidade volumétrica e a pressão para ambas as fases respectivamente.

2.5.1.1 - Tensões Viscosas

Segundo KUIPERS *et al.* (1992b), apesar de que o tensor das tensões viscosas para ambas as fases deva depender da fração de vazão e das derivadas espaciais de \bar{U}_k , considerando também um efeito de memória, não há disponível uma formulação geral com os valores corretos das constantes do material. De fato, os estudos relacionados à reologia dos pó de fluidização ainda não conduziram à proposição de um modelo reológico unificado.

Pelo fato citado anteriormente o tensor das tensões viscosas $\bar{\tau}_k$, para ambas as fases, é modelado assumindo a relação tensão/deformação para um fluido Newtoniano, tendo em conta a hipótese de Stokes (ARIS, 1962 e WHITE, 1992)

$$\bar{\tau}_k = \lambda_k (\bar{\nabla} \cdot \bar{U}_k) \bar{I} + 2\mu_k \bar{D}_k \quad (2.36)$$

onde λ_k e μ_k representam a viscosidade volumétrica e a viscosidade dinâmica respectivamente, e D_k representa o tensor da taxa de deformação calculado como

$$\bar{D}_k = \frac{1}{2} (\bar{\nabla} \bar{U}_k + (\bar{\nabla} \bar{U}_k)^T) \quad (2.37)$$

Considerando a hipótese de Stokes têm-se

$$\lambda_k = -\frac{2}{3}\mu_k \quad (2.38)$$

Substituindo as Eqs. (2.37) e (2.38) na Eq. (2.36) resulta a seguinte expressão

$$\bar{\tau}_k = \mu_k \left[\bar{\nabla} \bar{U}_k + (\bar{\nabla} \bar{U}_k)^T - \frac{2}{3} (\bar{\nabla} \cdot \bar{U}_k) \bar{I} \right] \quad (2.39)$$

As tensões viscosas da fase k , $\bar{\tau}_k$, estão presentes no termo viscoso $\bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \bar{T}_k^{X_k})$ da Eq. (2.34). Considerando que o tensor das tensões é calculado utilizando a seguinte relação

$$\bar{T}_k^{X_k} = -P_k \bar{I} + \bar{\tau}_k \quad (2.40)$$

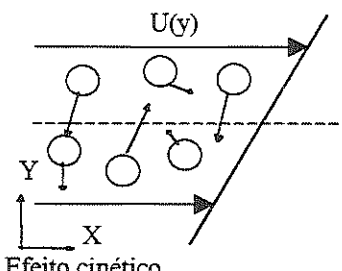
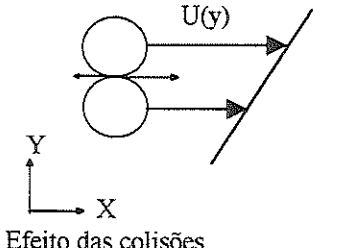
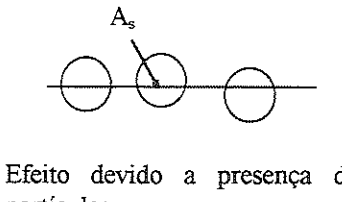
o termo viscoso da Eq. (2.34) $\bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \bar{T}_k^{X_k})$ transforma-se em

$$\begin{aligned} \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \bar{T}_k^{X_k}) &= \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k (-P_k \bar{I} + \bar{\tau}_k)) = -\bar{\nabla}(\alpha_k P_k) + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \bar{\tau}_k) \\ &= -\bar{\nabla}(\alpha_k P_k) + \bar{\nabla} \cdot \left\{ \alpha_k \mu_k \left[\bar{\nabla} \bar{U}_k + (\bar{\nabla} \bar{U}_k)^T - \frac{2}{3} (\bar{\nabla} \cdot \bar{U}_k) \bar{I} \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.41)$$

2.5.1.2 - Viscosidade dinâmica μ_k

O conhecimento do coeficiente de viscosidade dinâmica para ambas as fases é necessário para calcular a dissipação viscosa de energia do escoamento. ENWALD *et al.* (1996) apresenta uma tabela resumo dos diferentes mecanismos sugeridos na literatura que definem a viscosidade de ambas as fases, representada na Tabela 2.2.

Tabela 2.2 Mecanismos que definem a viscosidade em ambas as fases. ENWALD *et al.* (1996).

Efeito	Fase Gasosa	Fase Sólida
 <p>Efeito cinético</p>	Movimento molecular caótico através de um plano e gradiente médio de velocidade do gás provocam uma transferência de quantidade de movimento através do referido plano.	Movimento caótico das partículas através de um plano e gradiente médio de velocidade do gás provocam uma transferência de quantidade de movimento através do referido plano.
 <p>Efeito das colisões</p>	Forças intermoleculares. Quando a distância média entre as partículas é apenas várias vezes o seu diâmetro as forças de atração entre as moléculas são significativas. Efeito desprezável para os gases, mas importante para os líquidos.	Forças de atrito entre as partículas. Podem ser muito fortes quando a concentração de sólidos é grande.
 <p>Efeito devido a presença de partículas</p>	Não tem sido encontrado na literatura contribuição deste efeito sobre a viscosidade do gás. Existem divergências na literatura.	Tensões tangenciais na área A_s devido à força exercida pelo fluido sobre a superfície das partículas.

Como pode-se observar o coeficiente de viscosidade dinâmica é achado para ambas as fases mediante procedimentos quase similares no que se refere aos efeitos cinéticos e de colisão, variando apenas as escalas usadas para cada fase. Quando é analisado o efeito da presença das partículas existem divergências na literatura. Segundo DING (1990) o componente da viscosidade dinâmica do gás provocada por

este efeito, denominado como viscosidade aparente do gás, cresce com o aumento da concentração de sólidos. Porém devido a necessidade de mais estudos, esse efeito não é levado em consideração no cálculo da viscosidade dinâmica do gás. Portanto a viscosidade da fase gasosa é determinada das tabelas de propriedades de transporte para o gás, e denomina-se viscosidade molecular do gás ou fluido em questão.

Na determinação do coeficiente de viscosidade dinâmica da fase sólida, μ_s , utiliza-se dois procedimentos gerais (KUIPERS & VAN SWAAIJ, 1997). Tais procedimentos são:

1. A viscosidade do sólido é calculada considerando a fase sólida como um fluido Newtoniano, assumindo ainda $\mu_s = \text{constante}$.
2. A viscosidade do sólido é calculada explicitamente a partir da teoria cinética dos escoamentos granulares (TCEG).

No primeiro procedimento a viscosidade da fase sólida é calculada a partir de dados experimentais. Utilizando a equação de conservação da quantidade de movimento para a mistura na direção axial, integrada na seção transversal, TSUO (1989) e TSUO & GIDASPOW (1990) obtiveram a seguinte equação, utilizada para a determinação de μ_s

$$-\mu_s \frac{\partial V_s}{\partial r} = \frac{R_w}{2} \left(-\frac{\partial P}{\partial z} - \frac{2}{R_w^2} \int_0^{R_w} \alpha_s \rho_s r \, dr - \frac{2}{R_w^2} \int_0^{R_w} \frac{\partial(\alpha_s \rho_s V_s^2)}{\partial z} r \, dr \right) \quad (2.42)$$

onde R_w é o raio interno do leito circulante utilizado nos experimentos.

A metodologia de cálculo assim como a instalação experimental são mostrados detalhadamente no trabalho de MILLER & GIDASPOW (1992). Estes autores apresentam um exemplo de cálculo da viscosidade assim como uma tabela com os resultados obtidos dos vários cálculos desenvolvidos.

Neste primeiro procedimento os efeitos de turbulência da fase sólida são desprezados. A desvantagem deste método é que o modelo de cálculo requer um dado empírico μ_s achado experimentalmente ao contrario do segundo procedimento,

no qual o valor de μ_s é calculado diretamente da (TCEG). Porém, este segundo método é mais complexo e requer mais tempo de computação.

Existem na literatura várias formulações da viscosidade dinâmica da fase sólida μ_s utilizando a (TCEG). Todas as formulações baseiam-se na composição dos efeitos cinéticos e de colisão entre as partículas como anteriormente dito. BOEMER *et al.* (1995) apresentam um resumo das diferentes formulações utilizadas para calcular a viscosidade da fase sólida μ_s .

No presente trabalho é usado o primeiro procedimento.

2.5.1.3 - Viscosidade volumétrica λ_k

O coeficiente da viscosidade volumétrica λ_k é calculado pela Eq. (2.38), já que é adotado o modelo reológico para fluido Newtoniano e considera-se a hipótese de Stokes. Para a fase sólida, de forma similar à obtenção do coeficiente μ_s , o coeficiente de viscosidade volumétrica λ_s também pode ser calculado utilizando a (TCEG). BOEMER *et al.* (1995) apresentam uma correlação utilizada na literatura para o cálculo de λ_s .

No presente trabalho é utilizada a Eq. (2.38) para o cálculo da viscosidade volumétrica de ambas as fases λ_k . Uma discussão interessante do conceito da viscosidade volumétrica é apresentada no livro de LANDAU & LIFSHITZ (1987), p. 308-312. Esses autores denominam este coeficiente como segundo coeficiente de viscosidade.

2.5.1.4 - Pressão do gás

A pressão do gás é igual à pressão termodinâmica

$$P_g = P \quad (2.43)$$

2.5.1.5 - Pressão do sólido

O conceito físico da pressão do sólido ou pressão do particulado, P_s , é difícil de definir. BOEMER *et al.* (1995) definem a pressão do sólido como a força normal por unidade de área exercida sobre a fase sólida devido às interações entre as partículas. CAMPBELL & WANG (1991) definem a pressão do sólido como a força por unidade de área exercida sobre uma superfície pela fase sólida, refletindo o transporte total de quantidade de movimento que pode-se atribuir ao movimento das partículas sólidas e a suas interações.

Na literatura reportam-se dois procedimentos gerais para definir a pressão do sólido. Similar à viscosidade dinâmica do sólido, a pressão do particulado determina-se:

1. Utilizando a (TCEG) que é uma extensão da teoria cinética dos gases densos.
2. Usando o procedimento tradicional baseado nas propriedades das partículas e na fração de vazio local α_g .

No presente trabalho é assumido o procedimento tradicional. O primeiro procedimento pode ser consultado nos trabalhos de GIDASPOW (1994), BOEMER *et al.* (1995) e ENWALD *et al.* (1996) entre outros.

Na determinação da pressão do particulado são considerados três efeitos: um correspondente ao transporte de quantidade de movimento causado pelas flutuações da velocidade das partículas, P_s^{cin} , outro causado pela interação das partículas entre si (colisões entre partículas), P_s^{col} , e o último é uma contribuição da pressão da fase gasosa, P_s^{gas} , ENWALD *et al.* (1996). Considerando estes mecanismos físicos o gradiente de pressão para a fase sólida representado na Eq. (2.41) transforma-se em

$$\bar{\nabla}(\alpha_s P_s) = \bar{\nabla}(\alpha_s P_s^{cin}) + \bar{\nabla}(\alpha_s P_s^{col}) + \bar{\nabla}(\alpha_s P_s^{gas}) \quad (2.44)$$

Na teoria tradicional o primeiro termo da direita $\bar{\nabla}(\alpha_s P_s^{cin})$ é desprezado. O terceiro termo, o gradiente de pressão da fase gasosa $\bar{\nabla}(\alpha_s P_s^{gas})$, é levado em

consideração devido ao efeito de empuxo provocado por este gradiente de pressão na fase gasosa sobre o escoamento. De fato, se existe um gradiente de pressão gasoso através de um conjunto de partículas, este gradiente exerce uma força sobre as partículas e o gradiente de pressão do particulado será reduzido ou aumentado dependendo do sinal do gradiente de pressão da fase gasosa, em concordância com a Eq. (2.44).

O segundo termo da Eq. (2.44) refere-se ao gradiente de pressão do sólido devido às colisões que ocorrem entre as partículas, $\bar{\nabla}(\alpha_s P_s^{col})$. CAMPBELL & WANG (1991) apresentam uma discussão detalhada da pressão do sólido devido às colisões das partículas. Segundo esses autores este componente da pressão do sólido é o efeito dominante nas regiões densas de um leito fluidizado e surge por duas causas, uma devido às colisões de curta duração e outra provocada pelos contatos de longa duração entre as partículas. Os resultados experimentais apresentados por CAMPBELL & WANG (1991), mostram que para o leito não fluidizado, quando as partículas repousam umas sobre outras, a pressão do sólido devido às colisões é máxima pois os contatos de longa duração são intensos. Com o aumento da velocidade do gás até a velocidade de mínima de fluidização o componente da pressão devido às colisões diminui, pois as forças de arrasto se impõem às forças produzidas pelos contatos de longa duração. Para uma velocidade do gás acima da velocidade mínima de fluidização, a pressão devido às colisões aumenta novamente, como resultado do incremento da frequência das colisões de curta duração. Estes resultados são apresentados esquematicamente na Fig. 2.4.

Para modelar o gradiente de pressão do sólido devido às colisões das partículas, diferentes modelos apresentados na literatura são baseados na seguinte equação, ENWALD *et al.* (1996)

$$\bar{\nabla}(\alpha_s P_s^{col}) = -G(\alpha_g) \bar{\nabla} \alpha_g \quad (2.45)$$

onde $G(\alpha_g)$ é denominado módulo de elasticidade para a fase particulada ou coeficiente de interação de partícula com partícula que é modelado empiricamente.

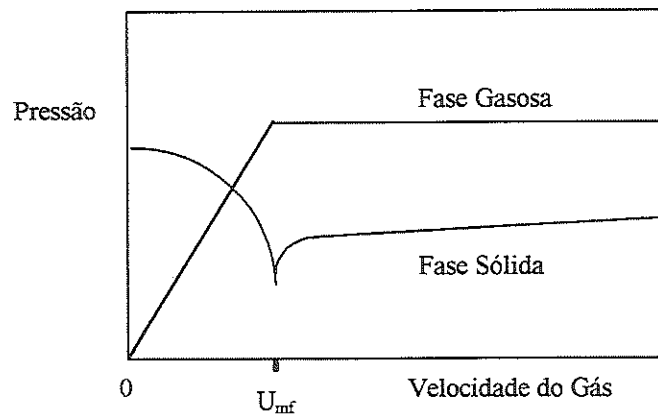


Figura 2.4. Esquema dos resultados obtidos por CAMPBELL & WANG (1991).

A Eq. (2.45) resume muitas das correlações utilizadas na literatura para modelar as chamadas tensões do sólido (tensões normais). Esse termo foi introduzido na modelagem da fluidização por RIETEMA & MUTSERS (1973) apud GIDASPOW (1986). A definição do módulo de elasticidade $G(\alpha_g)$ foi inicialmente proposta por GARG & PRITCHET (1975), segundo BOUILLARD *et al.* (1989). Como GIDASPOW (1986) especifica no seu trabalho, o termo das tensões do sólido deveria ser formulado em função da porosidade, pressão termodinâmica, e do tensor de deslocamento das velocidades do sólido, do gás e da velocidade relativa. Tal formulação geral com os valores próprios das constantes do material não existe na atualidade, fato pelo qual as tensões normais foram modeladas inicialmente apenas como função da fração de vazio, α_g , ou seja $\tau = \tau(\alpha_g)$. GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983) assumindo essa relação, aplicaram a regra da cadeia e chegaram a Eq. (2.45) como mostra-se

$$\frac{\partial \tau}{\partial y} = \frac{\partial \tau}{\partial \alpha_g} \frac{\partial \alpha_g}{\partial y} = -G(\alpha_g) \bar{V} \alpha_g \quad (2.46)$$

Posteriormente o gradiente do termo das tensões do sólido, τ , foi denominado gradiente da pressão do sólido devido às colisões das partículas. GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983), mediante uma interpolação dos dados experimentais de

RIETEMA & MUTSERS (1973) apud GIDASPOW (1986), obtiveram a seguinte correlação para o módulo de elasticidade

$$G(\alpha_g) = 10^{-8.76\alpha_g + 5.43} \text{ N/m}^2 \quad (2.47)$$

Segundo esses autores, a Eq. (2.47) tem significado numérico quando a fração de vazio atinge um valor abaixo do valor da fração de vazio para a condição de mínima fluidização. O termo contribui ainda para tornar o sistema de equações numericamente mais estável, já que converte as direções características imaginárias em valores reais. Segundo GIDASPOW (1986), em alguns cálculos é necessário ajustar $G(\alpha_g)$, como em SYAMLAL (1985), para impedir que a fração de vazio atinja valores muito baixos resultando em concentrações de particulado maiores que a concentração máxima possível.

Na atualidade existem muitas correlações para calcular o termo $G(\alpha_g)$ utilizando o procedimento aqui exposto, mas muitos autores preferem determinar o termo da pressão do sólido devido às colisões através da (TCEG).

A seguir são apresentadas na Tabela 2.3 varias correlações para calcular o módulo de elasticidade $G(\alpha_g)$ tomadas de MASSOUDI *et al.* (1992) e ENWALD *et al.* (1996). As diferentes formas de $G(\alpha_g)$ apresentadas na Tabela 2.3 diferem significativamente como pode ser visto nas Figs. 2.5 e 2.6.

Pelo descrito anteriormente a pressão do sólido pode ser formulada como

$$\bar{V}(\alpha_s P_s) = \bar{V}(\alpha_s P_s^{\text{col}}) + \bar{V}(\alpha_s P_g) \quad (2.55)$$

No presente trabalho será utilizada uma das correlações apresentadas na Tabela 2.3 para o cálculo do módulo de elasticidade $G(\alpha_g)$, e portanto do gradiente da pressão do sólido devido às colisões das partículas Eq. (2.45).

Tabela 2.3. Varias correlações da literatura para o módulo de elasticidade $G(\alpha_g)$

Autores	Forma de $G(\alpha_g)$
GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983)	$G(\alpha_g) = 10^{-8.76\alpha+5.43}$ (2.47)
GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983) apud BOUILLARD <i>et al.</i> (1989)	$G(\alpha_g) = G_o e^{-c(\alpha-\alpha^*)}$ (2.48) $c = 20$ $\alpha^* = 0.62$ $G_o = 1.0\text{Pa}$
ETTEHADIEH <i>et al.</i> (1984)	$G(\alpha_g) = 10^{-10.46\alpha+6.577}$ (2.49)
SHIH <i>et al.</i> (1987)	$G(\alpha_g) = 10^{-9.76\alpha+7.8}$ (2.50) $G(k) = \alpha_k G(\alpha_g)$ para $k = 2, \dots, n$ Sistema de Multipartículas
GIDASPOW & SYAMLAL (1985) apud BOUILLARD <i>et al.</i> (1989)	$G(\alpha_g) = G_o e^{-c(\alpha-\alpha^*)}$ (2.51) $c = 500$ $\alpha^* = 0.422$ $G_o = 1.0\text{Pa}$
SYAMLAL & O'BRIEN (1988)	$G(\alpha_g) = 1.5 \times 10^{-3} e^{500(0.4-\alpha_g)}$ (2.52) $\nabla(\alpha_s P_s) = \alpha_k G(\alpha_g) \nabla \alpha_g$ Sistema de Multipartículas
GIDASPOW <i>et al.</i> (1989)	$G(\alpha_g) = 10^{-10.5\alpha+9.0}$ (2.53)
BOUILLARD <i>et al.</i> (1989)	$G(\alpha_g) = G_o e^{-c(\alpha-\alpha^*)}$ (2.54) $c = 600$ $\alpha^* = 0.376$ $G_o = 1.0\text{Pa}$

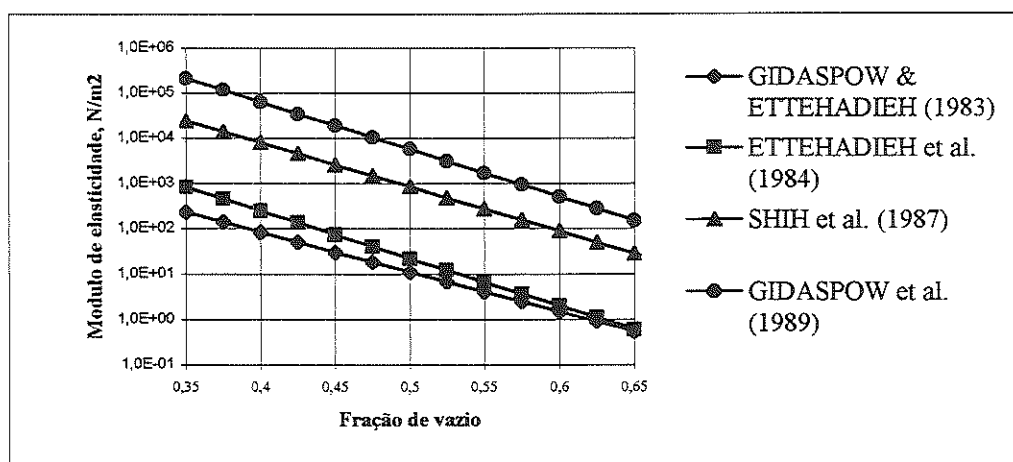


Figura 2.5. Módulo de elasticidade de sólido. Eqs. (2.47, 2.49, 2.50 e 2.53), (ENWALD *et al.*, 1996).

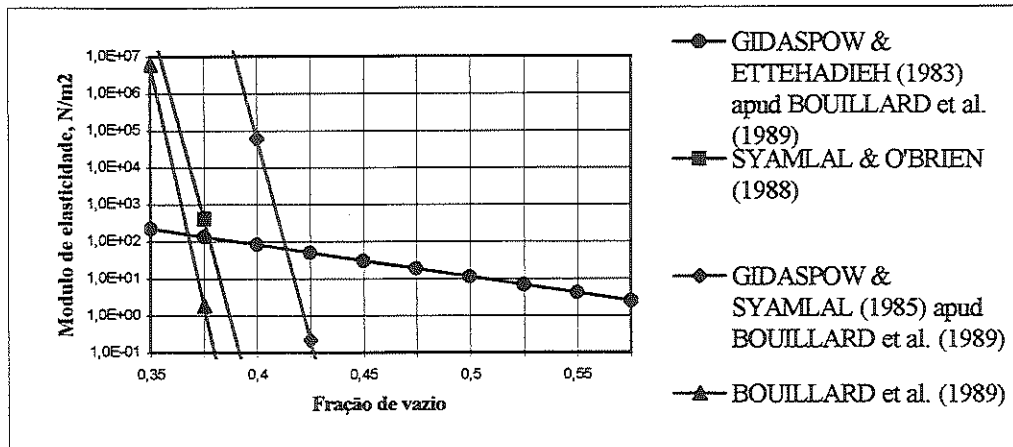


Figura 2.6. Módulo de elasticidade de sólido. Eqs. (2.48, 2.51, 2.52 e 2.54), (ENWALD *et al.*, 1996).

2.5.2 - Leis de Transferência

As leis de transferência são equações empíricas que descrevem o transporte de massa, quantidade de movimento ou energia através da interface entre as fases. Diz-se que descrevem as interações que ocorrem na interface entre as fases.

2.5.2.1 - Mecanismos de transferência de quantidade de movimento na interface (ENWALD *et al.*, 1996)

O termo a considerar na análise que segue é o termo de transferência de quantidade de movimento através da interface, Eq. (2.35), que participa da equação de balanço da quantidade de movimento, Eq. (2.34).

$$M_{kl} = -\langle \bar{T}_k \cdot \bar{\nabla} X_k \rangle \tag{2.56}$$

A modelação da transferência de quantidade de movimento através da interface é efetuada utilizando equações empíricas, onde as condições de salto impõem as necessárias restrições no termo em questão.

Desprezando o termo de flutuação das tensões, $\overline{\overline{T}}_k^{\text{Re}}$ (tensões de Reynolds), e tendo em conta as Eqs. (2.40) e (2.55), os termos do lado direito da Eq. (2.34) de conservação da quantidade de movimento média, transformam-se em

$$\begin{aligned} \overline{\nabla} \cdot (\alpha_k \overline{\overline{T}}_k) + \alpha_k \rho_k g + M_{ki} = -\alpha_k \overline{\nabla} P - P \overline{\nabla} \alpha_k - \\ \overline{\nabla}(\alpha_s P_s^{\text{col}}) + \overline{\nabla} \cdot (\alpha_k \overline{\overline{\tau}}_k) + \alpha_k \rho_k g + M_{ki} \end{aligned} \quad (2.57)$$

onde a pressão do gás é igual à pressão termodinâmica e o gradiente de pressão do particulado devido às colisões $\overline{\nabla}(\alpha_s P_s^{\text{col}})$ está presente apenas na equação para a fase sólida. De acordo a DREW & LAHEY (1993) apud ENWALD *et al.*(1996) é conveniente expressar o termo de transferência da quantidade de movimento na interface, M_{ki} , em função da pressão média na interface, P_I , e das tensões cisalhantes médias na interface τ_I^* . Fazendo isso obtém-se

$$M_{ki} = P_I \nabla \alpha_k - \tau_I \cdot \nabla \alpha_k + M_{ki}^d \quad (2.58)$$

onde M_{ki}^d é a força de arrasto generalizada que atua na interface sobre a fase k , e $\overline{\overline{T}}_{ki}^d$ é o tensor das tensões generalizado associado a este arrasto

$$M_{ki}^d = -\langle \overline{\overline{T}}_{ki}^d \cdot \nabla X_k \rangle \quad (2.59)$$

$$\overline{\overline{T}}_{ki}^d = -(P_k - P_I) \overline{\overline{I}} + (\overline{\overline{\tau}}_k - \overline{\overline{\tau}}_I) \quad (2.60)$$

A condição de salto para o termo de transferência de quantidade de movimento na interface é dada pela Eq. (2.23). Essa condição de salto também é aplicável à força de arrasto generalizada na interface, o que demonstra-se obtendo a somatória da Eq. (2.58) para as fases. Fazendo isso a condição de salto para a força

*ENWALD *et al.* (1996) apresenta a descrição completa da obtenção da Eq. (2.58).

de arrasto generalizada na interface resulta

$$\sum_{k=1}^2 M_{kl}^d = 0 \quad (2.61)$$

Uma vez que foi obtida a condição de salto para a força de arrasto generalizada na interface, substituindo a Eq. (2.58) na Eq. (2.57), a parte direita da equação de conservação da quantidade de movimento média, Eq. (2.34), transforma-se da seguinte maneira

$$-\alpha_k \bar{\nabla} P - \bar{\nabla}(\alpha_s P_s^{col}) + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \bar{\tau}_k) + \alpha_k \rho_k g + M_{kl}^d + (P_I - P) \bar{\nabla} \alpha_k - \bar{\tau}_I \cdot \bar{\nabla} \alpha_k \quad (2.62)$$

onde os dois últimos termos se referem ao efeito da diferença de pressão na interface, e ao efeito combinado das tensões cisalhantes na interface com o gradiente da fração de vazio. O primeiro destes dois termos é desprezado devido ao seu pequeno valor para um escoamento gás-sólido. O segundo termo é desprezado para escoamentos dispersos, ISHII & MISHIMA (1984). Devido a essa simplificação à Eq. (2.62) transforma-se em

$$-\alpha_k \bar{\nabla} P - \bar{\nabla}(\alpha_s P_s^{col}) + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \bar{\tau}_k) + \alpha_k \rho_k g + M_{kl}^d \quad (2.63)$$

Em problemas práticos o interesse é desenvolver uma expressão para M_{kl}^d , a força de arrasto generalizada por unidade de volume sobre uma suspensão de partículas de diâmetro médio d_p . M_{kl}^d divide-se normalmente em

$$M_{kl}^d = n_p (F_{arrasto} + F_{transv} + F_{inmassa} + F_{Basset} + F_{outras}) \quad (2.64)$$

onde as forças representadas são aquelas que atuam sobre uma única partícula na suspensão. Assumindo partículas esféricas, o número de partículas por unidade de volume resulta

$$n_p = 6(1 - \alpha_g) / \pi d_p^3 \quad (2.65)$$

onde d_p é o diâmetro médio de uma partícula.

Na Eq. (2.64) tem-se que:

- F_{arrasto} é a força de arrasto estacionária na interface.
- F_{transv} é a força transversal que atua sobre o particulado, devido a presença de gradiente de velocidade e de gradiente de pressão.
- F_{inmassa} é a força requerida para a aceleração da massa aparente da fase circundante quando a velocidade relativa muda, denominada como massa virtual.
- F_{Basset} é a denominada força de Basset. Esta força surge como resultado da difusão de quantidade de movimento através da camada limite da partícula.
- F_{outras} são outras forças que atuam sobre uma esfera num escoamento perfeito.

As correspondentes forças para a fase gasosa são obtidas mudando o sinal das expressões das forças para a fase do particulado, em concordância com a condição de salto para o arrasto generalizado na interface Eq. (2.61).

A seguir será discutida a força de arrasto estacionária na interface F_{arrasto} . A modelagem das outras forças apresentadas na Eq. (2.64) não será desenvolvida no presente trabalho visto a que normalmente esses termos não são levados em consideração pelo modelo tradicional. Por tanto o termo da força de arrasto generalizada na interface, M_{kl}^d , será modelado levando em consideração apenas a força de arrasto estacionária na interface F_{arrasto} .

2.5.2.2 - Discussão da força de arrasto estacionária na interface F_{arrasto}

A força de arrasto estacionária na interface é determinada através de dois procedimentos:

1. A partir de correlações para o coeficiente de arrasto sobre uma partícula numa suspensão de partículas, C_D .
2. A partir da queda de pressão por unidade de comprimento numa suspensão de partículas, $\Delta P/L$.

Na literatura existem vários modelos para determinar F_{arrasto} utilizando ambos os procedimentos. O objetivo do modelamento de F_{arrasto} é expressar esta força em função das variáveis dependentes do sistema de equações para modelagem do escoamento bifásico gás-sólido. Independentemente do procedimento adotado, a força de arrasto estacionária na interface é definida em função da velocidade relativa, \bar{U}_r , e do coeficiente de transferência de quantidade de movimento na interface, também denominado função de arrasto β . Obtém-se

$$n_p F_{\text{arrasto}} = \beta \bar{U}_r \quad (2.66)$$

onde

$$\bar{U}_r = \bar{U}_g - \bar{U}_s \quad (2.67)$$

O cálculo do valor da função de arrasto β depende do procedimento adotado. Utilizando o primeiro procedimento para determinar a relação entre a função de arrasto β e o coeficiente de arrasto C_D , a força de arrasto F_{arrasto} , por definição, resulta

$$F_{\text{arrasto}} = \frac{1}{2} C_D \rho_g |\bar{U}| \bar{U} (\pi d_p^2 / 4) \quad (2.68)$$

onde \bar{U} pode ser a velocidade relativa \bar{U}_r ou a velocidade de deslizamento \bar{U}_0 , dependendo da velocidade para a qual é determinado C_D . A velocidade de deslizamento é dada por

$$\bar{U}_0 = \alpha_g (\bar{U}_g - \bar{U}_s) \quad (2.69)$$

Combinando as Eqs. (2.65) e (2.68) à Eq. (2.66) a função de arrasto β resulta

$$\beta \bar{U}_r = \frac{3}{4d_p} (1 - \alpha_g) C_D \rho_g |\bar{U}| \bar{U} \quad (2.70)$$

O coeficiente de arrasto na Eq. (2.70), C_D , é o coeficiente de arrasto para uma partícula numa suspensão de particulado, mas na literatura as expressões disponíveis são para o cálculo do coeficiente de arrasto para uma partícula isolada C_{Ds} . Das diferentes correlações da literatura que relacionam C_D e C_{Ds} , todas coincidem em que tal relação é função da fração de vazio $f(\alpha_g)$ (WEN & YU, 1966; DI FELICE, 1994 e outras). Muitos pesquisadores fundamentam seus modelos no trabalho de RICHARDSON & ZAKI (1954), o qual estabelece que $f(\alpha_g) = \alpha_g^{-4.65}$.

WEN & YU (1966) definiram a força de arrasto na interface F_K utilizando a expressão de RICHARDSON & ZAKI (1954) da seguinte maneira

$$|F_K|/|F_s| = C_{DK}/C_{Ds} = f(\alpha_g) \quad (2.71)$$

onde F_s é a força de arrasto que atua sobre uma partícula num médio fluido infinito. A partir do resultado expresso em (2.71) é possível relacionar C_D com C_{Ds} . Utilizando a análise apresentada por ENWALD *et al.* (1996), da relação entre a força de arrasto estacionária, $F_{arrasto}$, e a força de arrasto F_K segundo WEN & YU (1966), obtém-se

$$F_K = \frac{1}{\alpha_g} F_{arrasto} \quad (2.72)$$

Combinando as Eqs. (2.72) e (2.71) obtém-se a seguinte expressão para o coeficiente C_D

$$C_D = \alpha_g C_{Ds} f(\alpha_g) \quad (2.73)$$

Substituindo a Eq. (2.73) na Eq. (2.70) obtém-se uma expressão geral para calcular a função de arrasto β na interface expressa por

$$\beta \bar{U}_r = \frac{3}{4d_p} (1 - \alpha_g) \alpha_g C_{Ds} \rho_g |\bar{U}| \bar{U} f(\alpha_g) \quad (2.74)$$

Finalmente das Eqs.(2.74) e (2.66) obtém-se

$$n_p F_{arrasto} = \beta \bar{U}_r = \frac{3}{4d_p} (1 - \alpha_g) \alpha_g C_{Ds} \rho_g |\bar{U}| \bar{U} f(\alpha_g) \quad (2.75)$$

Apesar das diferentes correlações utilizadas na literatura, as Eqs. (2.74) e (2.75) fornecem um resultado parcialmente geral que depende das correlações usadas para o cálculo do coeficiente de arrasto C_{Ds} , da velocidade \bar{U} e da função $f(\alpha_g)$.

Utilizando o segundo procedimento a força de arrasto é modelada relacionando $F_{arrasto}$ com o gradiente de pressão $\Delta P/L$. Segundo GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983), da equação de conservação da quantidade de movimento para a fase gasosa em escoamento estacionário, sem aceleração, e desprezando o atrito com as paredes e o efeito da gravidade, obtém-se

$$\beta(\bar{U}_g - \bar{U}_s) = \alpha_g \bar{\nabla}P \quad (2.76)$$

Da Eq. (2.76) acha-se uma expressão para a função de arrasto β que depende apenas da correlação utilizada para calcular o gradiente de pressão $\bar{\nabla}P$, de forma que a função de arrasto β resulta

$$\beta \bar{U}_r = \alpha_g \bar{\nabla}P \quad (2.77)$$

Substituindo a Eq. (2.77) na Eq. (2.66) obtém-se

$$n_p F_{\text{arrasto}} = \beta \bar{U}_r = \alpha_g \bar{\nabla} P \quad (2.78)$$

O gradiente de pressão $\bar{\nabla} P$ é considerado como a queda de pressão por unidade de comprimento numa suspensão de partículas, $\Delta P/L$. Existem várias correlações para calcular $\bar{\nabla} P$, entre elas a mais conhecida é a correlação de ERGUN (1952), apresentada em GIDASPOW (1994), a qual considera a esfericidade das partículas ϕ_s ,

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g |\bar{U}_0|}{\alpha_g^3 (\phi_s d_p)^2} + 1.75 \frac{\alpha_s \rho_g |\bar{U}_0|^2}{\alpha_g^3 \phi_s d_p} \quad (2.79)$$

Outra correlação do gradiente de pressão é proposta por GIBILARO *et al.* (1985), a qual não considera porém a esfericidade das partículas ϕ_s .

De acordo com os dois procedimentos acima descritos, a força de arrasto estacionária na interface, F_{arrasto} , é modelada segundo as Eqs. (2.74-75) ou Eqs. (2.77-78), dependendo do procedimento adotado. Na prática o arrasto na interface é obtido da Eq. (2.66), usando-se a expressão para a função de arrasto β de acordo com o procedimento adotado.

A seguir na Tabela 2.4, são apresentadas as correlações para β mais usadas na literatura segundo ENWALD *et al.* (1996) e BOEMER *et al.* (1995).

O número de Reynolds frequentemente utilizado na literatura é calculado usando o diâmetro da partícula d_p como dimensão característica

$$Re_p = \frac{\rho_g \alpha_g |\bar{U}_g - \bar{U}_p| d_p}{\mu_g} \quad (2.80)$$

Tabela 2.4. Modelos de arrasto na interface.

Autores	Expressão para a função de arrasto β	Considerações
GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983) GIDASPOW (1986) TSUO & GIDASPOW (1990) DING & GIDASPOW (1990) GIDASPOW (1994)	$\beta = \begin{cases} 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha (d_p \phi_s)^2} + 1.75 \frac{\alpha_s \rho_g \vec{U}_g - \vec{U}_s }{(d_p \phi_s)} & \alpha_g < 0.8 \\ \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{\alpha_g \alpha_s \rho_g \vec{U}_g - \vec{U}_s }{d_p} \alpha^{-2.65} & \alpha_g \geq 0.8 \end{cases} \quad (2.81)$	$\vec{U} = \vec{U}_0 = \alpha_g (\vec{U}_g - \vec{U}_s)$ $C_{Ds} = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} [1 + 0.15(Re_p)^{0.687}] & Re_p < 1000 \\ 0.44 & Re_p \geq 1000 \end{cases}$ $f(\alpha_g) = \alpha_g^{-4.65}$
ISHII & ZUBER (1979)	$\beta = \frac{3}{4d_p} C_{Ds} \alpha_s \rho_g \vec{U}_s - \vec{U}_g \quad (2.82)$	$\vec{U} = \vec{U}_r = (\vec{U}_s - \vec{U}_g)$ $C_{Ds} = \frac{24}{Re_{pm}} [1 + 0.1(Re_{pm})^{0.75}]$ $Re_{pm} = \frac{\rho_g \vec{U}_s - \vec{U}_g d_p}{\mu_{mis}}$ $\mu_{mis} = \mu_g (1 - \alpha_s / \alpha_{s,max})^{-2.5 \alpha_{s,max} (\mu_s + 0.4 \mu_g) / (\mu_s + \mu_g)}$
DI FELICE (1994)	$\beta = \frac{3}{4d_p} C_{Ds} \alpha_s \alpha_g^2 \rho_g \vec{U}_g - \vec{U}_s \alpha_g^{-\eta} \quad (2.83)$	$\vec{U} = \vec{U}_0 = \alpha_g (\vec{U}_g - \vec{U}_s)$ $C_{Ds} = \left(0.63 + 4.8 \sqrt{\frac{1}{Re_p}} \right)^2$ $\eta = 3.7 - 0.65 \exp \left(- \frac{[1.5 - \log(Re_p)]^2}{2} \right)$ $g(\alpha_g) = C_D / C_{Ds} = \alpha_g f(\alpha_g) = \alpha_g^{-\eta}$

Tabela 2.4 – continuação.

Autores	Expressão para a função de arrasto β	Considerações
GIBILARO <i>et al.</i> (1985)	$\beta = \left(\frac{17.3}{\text{Re}_p} + 0.336 \right) \frac{\alpha_s \rho_g \vec{U}_s - \vec{U}_g }{d_p} \alpha_g^{-1.8} \quad (2.84)$	$\vec{U} = \vec{U}_0 = \alpha_g (\vec{U}_g - \vec{U}_s)$
SYAMLAL & O'BRIEN (1988) SYAMLAL & O'BRIEN (1989) apud ENWALD <i>et al.</i> (1996)	$\beta = \frac{3}{4d_p} C_{Ds} \rho_g \frac{1}{R_t^2} \alpha_s \alpha_g \vec{U}_s - \vec{U}_g \quad (2.85)$	$C_1 = \alpha_g^{4.14} \text{ e } C_2 = \begin{cases} 0.8\alpha_g^{1.28} & \alpha_g < 0.85 \\ \alpha_g^{2.65} & \text{para } \alpha_g > 0.85 \end{cases}$ $C_{Ds} = \left(0.63 + 4.8 \sqrt{\frac{R_t}{\text{Re}_{ps}}} \right)^2$ $\text{Re}_{ps} = \frac{\rho_g \vec{U}_s - \vec{U}_g d_p}{\mu_g}$ $2R_t = C_1 - 0.06 \text{Re}_{ps} + ((0.06 \text{Re}_{ps})^2 + 0.12 \text{Re}_{ps} (2C_2 - C_1) + C_1^2)^{0.5}$
SYAMLAL & O'BRIEN (1993) apud ENWALD <i>et al.</i> (1996)	$\beta = \frac{3}{4d_p} C_{Ds} \rho_g \frac{1}{R_{clus}^2} \alpha_s \alpha_g \vec{U}_s - \vec{U}_g \quad (2.86)$	$C_3 = \begin{cases} 250 & G_s = 98 \text{ [kg/m}^2 \text{ s]} \\ 1500 & G_s = 147 \text{ [kg/m}^2 \text{ s]} \end{cases}$ $\frac{R_{clus}}{R_t} = [1 + C_3 \cdot \text{Re}_{ps} \cdot \alpha_s \cdot \exp\{-0.005 \cdot (\text{Re}_{ps} - 5)^2 - 90 \cdot (\text{Re}_{ps} - 0.92)^2\}]$

2.6 - Sistema fechado de EDP geral para um escoamento gás-sólidos

Nesta seção são fornecidas as equações gerais médias para um escoamento bifásico gás-sólidos. As equações de conservação da massa (2.33) e de conservação da quantidade de movimento (2.34) para ambas as fases, e as Eqs. (2.63), (2.64) e (2.66) obtidas das leis de fechamento, caracterizam o sistema fechado de EDP geral para um escoamento bifásico gás-sólidos. As equações conservativas são:

Equação de conservação da massa

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k) + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k \bar{\mathbf{U}}_k) = 0 \quad (2.87)$$

Equação de conservação da quantidade de movimento

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k \bar{\mathbf{U}}_k) + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k \bar{\mathbf{U}}_k \bar{\mathbf{U}}_k) = & -\alpha_k \bar{\nabla} P - \bar{\nabla}(\alpha_s P_s^{\text{col}}) + \\ & \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \bar{\boldsymbol{\tau}}_k) + \alpha_k \rho_k \bar{\mathbf{g}} + M_{ki}^d \end{aligned} \quad (2.88)$$

Nessa equação o termo do gradiente da pressão do sólido devido às colisões $\bar{\nabla}(\alpha_s P_s^{\text{col}})$ é considerado apenas para a fase sólida, e é modelado utilizando uma das Eqs. (2.47-2.54). O termo da força de arrasto generalizada na interface, M_{ki}^d , é modelado utilizando as Eqs. (2.64) e (2.66) e uma das Eqs. (2.81-2.86) para o cálculo da função de arrasto β , levando em consideração que o sinal de M_{ki}^d para a fase gasosa é negativo em virtude da condição de salto para o arrasto generalizado na interface, Eq. (2.61). O termo correspondente ao tensor das tensões viscosas é modelado pela Eq. (2.39) para ambas as fases.

O sistema fechado de EDP geral representado pelas Eqs. (2.87) e (2.88) foi obtido considerando as seguintes hipóteses: escoamento bifásico não reativo, sem transferência de massa na interface, escoamento laminar e isotérmico para ambas as fases, consideração de ambas as fases como um contínuo e particulado homogêneo caracterizado por um diâmetro médio de sólidos, d_p .

2.7 - Modelo das duas fases para um escoamento bifásico gás-sólidos

O modelo das duas fases é obtido através da aplicação, ao sistema fechado de EDP geral apresentado na seção 2.6, das condições iniciais e de contorno apropriadas. Estas são formuladas de acordo com a geometria analisada, interações físicas das fases com os contornos do sistema, considerações sobre a simetria e o estado inicial do sistema.

A formulação e estabelecimento das condições iniciais e de contorno são apresentados no Capítulo 3, na Seção 3.5, em função do sistema específico que será modelado, isto é, um leito fluidizado circulante.

No presente trabalho são utilizados os modelos hidrodinâmicos e os procedimentos de modelagem numérica estabelecidos pelo grupo de pesquisa do (IIT/ANL). Uma apresentação exhaustiva dos trabalhos desenvolvidos por este grupo na área de fluidização gás-sólidos é apresentada no livro de GIDASPOW (1994). A seguir apresenta-se os modelos hidrodinâmicos baseados no procedimento clássico, acima descrito, usados pelo grupo do (IIT/ANL). Estes modelos são exemplos do modelo das duas fases aplicado especificamente à escoamentos gás-sólidos.

2.7.1 - Modelos hidrodinâmicos A e B, (IIT/ANL)

Como modelo hidrodinâmico A denomina-se o modelo tradicional, acima exposto, composto pelo sistema fechado de EDP descrito na seção 2.6, e as correspondentes equações para os vários termos nas Eqs. (2.87) e (2.88). O modelo hidrodinâmico B foi adotado devido à estabilidade numérica condicionada do modelo A. Para uma melhor compreensão dos critérios considerados na dedução do modelo B pode-se consultar os trabalhos de BOUILLARD *et al.* (1989) e GIDASPOW (1994).

Na Tabela 2.5 apresenta-se os modelos hidrodinâmicos A e B do (IIT/ANL). Estes modelos foram utilizados nos trabalhos de modelagem numérica apresentados na Tabela 3.1 da seção 3.1.2.

Tabela 2.5. Modelos hidrodinâmicos A e B, (IIT/ANL).

Equações de conservação da massa.	
Fase gasosa	$\frac{\partial(\rho_g \cdot \alpha_g)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho_g \alpha_g \bar{U}_g) = 0 \quad (2.89)$
Fase sólida	$\frac{\partial(\rho_s \cdot \alpha_s)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho_s \alpha_s \bar{U}_s) = 0 \quad (2.90)$
Equações de conservação da quantidade de movimento. Modelo A.	
Fase gasosa	$\frac{\partial(\rho_g \alpha_g \bar{U}_g)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho_g \alpha_g \bar{U}_g \bar{U}_g) = -\alpha_g \bar{\nabla} P - \beta_A (\bar{U}_g - \bar{U}_s) + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_g \bar{\tau}_g) + \rho_g \alpha_g \bar{g} \quad (2.91)$
Fase sólida	$\frac{\partial(\rho_s \alpha_s \bar{U}_s)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho_s \alpha_s \bar{U}_s \bar{U}_s) = -\alpha_s \bar{\nabla} P + \beta_A (\bar{U}_g - \bar{U}_s) - G(\alpha_g) \bar{\nabla} \alpha_s + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_s \bar{\tau}_s) + \rho_s \alpha_s \bar{g} \quad (2.92)$
Equações de conservação da quantidade de movimento. Modelo B.	
Fase gasosa	$\frac{\partial(\rho_g \alpha_g \bar{U}_g)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho_g \alpha_g \bar{U}_g \bar{U}_g) = \bar{\nabla} P - \beta_B (\bar{U}_g - \bar{U}_s) + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_g \bar{\tau}_g) + \rho_g \bar{g} \quad (2.93)$
Fase sólida	$\frac{\partial(\rho_s \alpha_s \bar{U}_s)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho_s \alpha_s \bar{U}_s \bar{U}_s) = \beta_B (\bar{U}_g - \bar{U}_s) - G(\alpha_g) \bar{\nabla} \alpha_s + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_s \bar{\tau}_s) + (\rho_s - \rho_g) \alpha_s \bar{g} \quad (2.94)$

Tabela 2.5 - continuação.

Equações Constitutivas	
Equações de estado e definição da fração volumétrica de sólidos	
$\rho_g = \frac{P}{RT}, \quad \rho_s = \text{constante} \quad \text{e} \quad \alpha_s = 1 - \alpha_g$	(2.95)
Função de arrasto na interface, β_A. (Modelo A)	
Baseada na Equação de Ergun (1952)	
$\beta_A = 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g (d_p \phi_s)^2} + 1.75 \frac{\rho_g \alpha_s \bar{U}_g - \bar{U}_s }{(d_p \phi_s)}$	$0.2 \leq \alpha_g < 0.8$ (2.96)
Baseada no arrasto de uma Esfera simples, Rowe (1961)	
$\beta_A = \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{\rho_g \alpha_s \alpha_g \bar{U}_g - \bar{U}_s }{(d_p \phi_s)} \alpha_g^{-2.65}$	$\alpha_g \geq 0.8$ (2.97)
onde	
$C_{Ds} = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 \cdot Re_p^{0.687}) & Re_p < 1000 \\ 0.44 & Re_p \geq 1000 \end{cases}$	e $Re_p = \frac{ \bar{U}_g - \bar{U}_s d_p \rho_g \alpha_g}{\mu_g}$ (2.98) e (2.99)
Função de arrasto na interface, β_B. (Modelo B)	
$\beta_B = \frac{\beta_A}{\alpha_g} \frac{\rho_s}{(\rho_s - \rho_g)}$	(2.100)
Tensor das tensões viscosas para ambas as fases	
$\bar{\tau}_k = \mu_k \left[\bar{\nabla} \bar{U}_k + (\bar{\nabla} \bar{U}_k)^T - \frac{2}{3} (\bar{\nabla} \cdot \bar{U}_k) \bar{I} \right]$	(2.101)
Módulo de elasticidade da fase sólida	
$G(\alpha_g) = \frac{\partial P_s}{\partial \alpha_s} = 10^{-8.76\alpha_g + 5.43} \frac{N}{m^2}$	(2.102)

CAPÍTULO 3 - Metodologia de Solução Numérica

3.1 - Introdução

Neste capítulo inicialmente apresenta-se uma introdução à modelagem numérica dos escoamentos multifásicos enfatizando à modelagem dos processos de fluidização. Posteriormente apresenta-se uma descrição detalhada da técnica numérica utilizada pelo grupo do IIT/ANL para modelar um escoamento fluidizado gás-sólidos.

No presente trabalho para efetuar os cálculos numéricos utiliza-se o código computacional MULTIFIX desenvolvido por SYAMLAL (1985). Este código computacional é uma extensão do código K-FIX, inicialmente desenvolvido por RIVARD & TORREY (1977) apud SYAMLAL (1985) para escoamentos gás-líquido, e posteriormente adaptado por ETTEHADIEH (1982) para modelar escoamentos gás-sólidos. O código K-FIX baseia-se no método numérico desenvolvido por HARLOW & AMSDEN (1975) o qual é uma extensão do método implícito de fluido contínuo de Euler (ICE), desenvolvido por HARLOW & AMSDEN (1971). O código K-FIX constitui o base dos trabalhos posteriores desenvolvidos no IIT/ANL para escoamentos gás-sólidos.

Optou-se pela aplicação do código computacional MULTIFIX modificado, seguindo o trabalho de TSUO (1989), e introduzindo o procedimento VSSCG proposto por DING (1990) para calcular o tensor das tensões viscosas da fase gasosa. Esse procedimento foi adotado para calcular as tensões viscosas de ambas as fases, com as tensões viscosas da fase sólida determinadas de forma similar através do procedimento VSSCS.

No processo de programação, assim como no estabelecimento das equações diferenciais discretizadas utilizou-se também os procedimentos descritos nos trabalhos de ETTEHADIEH (1982) e de BOUILLARD (1986).

3.1.1 - Aspectos gerais das técnicas de solução numérica (KUIPERS & VAN SWAAIJ, 1997)

A seguir considera-se aspectos gerais das técnicas numéricas usadas para a solução de problemas hidrodinâmicos, e posteriormente descreve-se os métodos gerais utilizados para escoamentos multifásicos, especificamente para escoamentos bifásicos.

3.1.1.1 - Aspectos gerais das técnicas de solução numérica para problemas hidrodinâmicos

De forma geral a solução numérica de um problema hidrodinâmico qualquer inclui os seguintes passos:

1. Geração de malha com ajuda de:
 - Métodos algébricos
 - Aplicação de transformação conforme
 - Sistemas de EDP elípticas

A geração da malha computacional é um ramo especializado da mecânica dos fluidos computacional. As malhas computacionais podem ser divididas em estruturadas e não estruturadas, de acordo com a Fig. 3.1. Na malha estruturada a conectividade é constante através do interior do domínio computacional, porém as malhas não estruturadas não tem necessariamente a conectividade constante. Este tipo de malhas oferece melhores possibilidades na representação de sistemas de características geométricas complexas. Ademais são distinguidas as malhas desfasadas e colocadas de acordo com a Fig. 3.2.

2. Discretização das equações de transporte utilizando:
 - Método das diferenças finitas
 - Método dos volumes finitos
 - Método dos elementos finitos

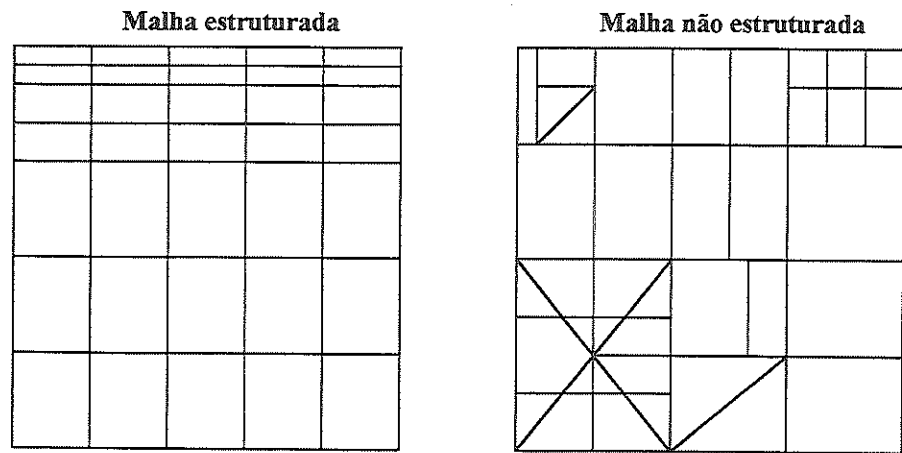


Figura 3.1. Malhas computacionais estruturadas e não estruturadas.

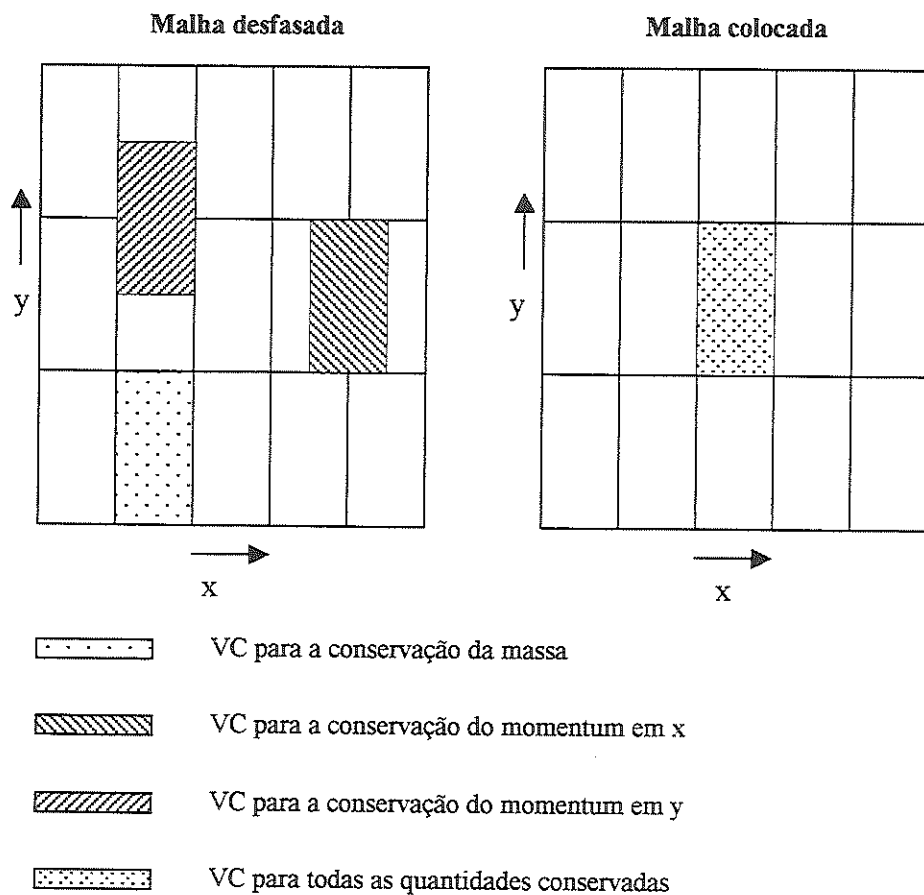


Figura 3.2. Malhas computacionais desfasadas e colocadas.



3. Solução das equações não lineares resultantes utilizando:
 - Métodos diretos de solução
 - Métodos iterativos de solução

4. Processamento posterior dos resultados com ajuda de:
 - Diagramas de vectores e de contornos
 - Redução dos dados
 - Animação

O processamento posterior dos dados constitui um passo muito importante na finalização da modelação numérica, já que permite efetuar uma melhor análise de resultados, assim como analisar outros aspectos relevantes ao processo estudado além dos aspectos hidrodinâmicos de interesse do problema.

3.1.1.2 - Métodos de solução numérica para escoamentos multifásicos

Da classificação de um escoamento bifásico (Tabela I-1, ISHII, 1975), pode-se observar os diferentes tipos de escoamento bifásico existentes e os diferentes regimes que um determinado tipo de escoamento bifásico pode apresentar. Portanto, a solução numérica de um problema deste tipo requer diferentes procedimentos computacionais. Existem três métodos computacionais gerais para resolver problemas de escoamentos multifásicos: métodos de Euler, métodos mistos de Euler-Lagrange, e os métodos das duas fases com superfícies livres

- **Métodos de Euler**

O desenvolvimento dos métodos computacionais de Euler para escoamentos multifásicos foi iniciado por HARLOW & AMSDEN (1975) no laboratório científico Los Alamos. O método implícito e contínuo de Euler desenvolvido por eles é a base de muitos desenvolvimentos posteriores tais como RIVARD & TORREY (1977, 1979) apud KUIPERS & VAN SWAAIJ (1997) e COOK *et al.* (1981).

Através dos métodos computacionais de Euler pode-se modelar escoamentos bifásicos dispersos e mistos. Estes métodos utilizam um sistema de EDP obtido através do processo de médias de Euler. Variados códigos computacionais têm sido desenvolvidos usando este método computacional para aplicação em fluidização. Como exemplo cita-se os códigos desenvolvidos no grupo de pesquisa do IIT/ANL apresentados em ETTEHADIEH (1982), SYAMLAL (1985), TSUO (1989), DING (1990).

- **Métodos de Euler-Lagrange**

Para os escoamentos multifásicos dispersos, em geral, pode-se distinguir três situações diferentes com suas correspondentes estratégias computacionais, de acordo com a Fig. 3.3:

- Escoamentos dispersos dilutos onde em média tem-se menos de uma partícula na célula computacional
- Escoamentos dispersos densos onde um número relativamente grande de partículas encontra-se na célula computacional
- Escoamentos dispersos densos ou dilutos onde apenas uma única partícula ocupa um grande número de células computacionais

A fase dispersa também pode estar constituída por gotas ou bolhas, as quais pode-se deformar. Os três casos acima mencionados são descritos detalhadamente nos trabalhos de PAN & BANERJEE (1996a, 1996b) apud KUIPERS & VAN SWAAIJ (1997).

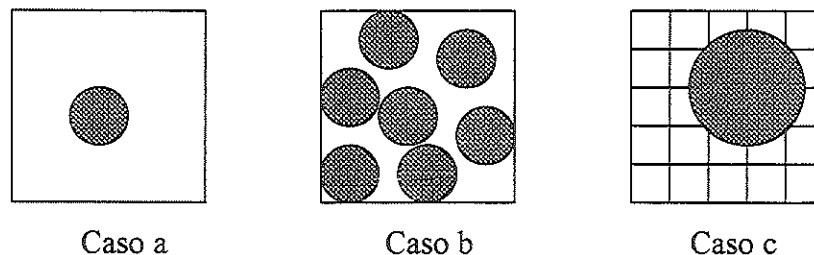


Figura 3.3. Diferentes situações distinguidas na modelação de um escoamento bifásico disperso.

Pode-se dizer que há uma utilização crescente dos métodos de Euler-Lagrange na atualidade devido ao aumento da capacidade de cálculo dos computadores ocorrido nos últimos anos. Estes métodos consistem em modelar a fase contínua aplicando o procedimento de médias de Euler, e a fase dispersa utilizando a formulação lagrangeana. Na área de fluidização, em especial, este método apresenta a desvantagem da impossibilidade de modelar por completo um leito fluidizado em escala industrial, já que a capacidade computacional requerida para incorporar na modelagem numérica a quantidade total de partículas atualmente não existe. Porém, os métodos de Euler-Lagrange constituem uma poderosa ferramenta no estudo das interações que ocorrem entre as fases, possibilitando melhorar a formulação das equações constitutivas, permitindo assim uma retroalimentação para os modelos contínuos amplamente utilizados. Exemplo de tais modelações são os trabalhos de HOOMANS *et al.* (1996) e TSUJI *et al.* (1993, 1998) entre outros.

- **Métodos das duas fases com superfícies livres**

As seguintes técnicas MAC, SMAC, e VOF são exemplos destes métodos computacionais utilizados na modelagem de escoamentos bifásicos separados, por exemplo escoamentos estratificados. Um breve resumo destas técnicas é apresentado em KUIPERS & VAN SWAAIJ (1997). Para uma melhor compreensão o leitor interessado pode-se referir às seguintes referencias: WELCH *et al.* (1965) e AMSDEN & HARLOW (1970) apud KUIPERS & VAN SWAAIJ (1997) para as técnicas MAC e SMAC respectivamente; NICHOLS *et al.* (1980) apud KUIPERS & VAN SWAAIJ (1997) e HIRT & NICHOLS (1981) para a técnica VOF.

3.1.2 - Aplicações e linhas atuais de modelagem numérica na área de fluidização de escoamentos gás-sólidos

Nesta seção pretendesse apresentar uma idéia geral do estado da arte da modelagem numérica com aplicação na fluidização.

Na Fig. 3.4 apresentam-se as linhas ou tendências atuais da modelagem numérica na área de fluidização baseando-se nos dois métodos utilizados na modelação de escoamentos multifásicos, o método de Euler e o método de Euler-Lagrange.

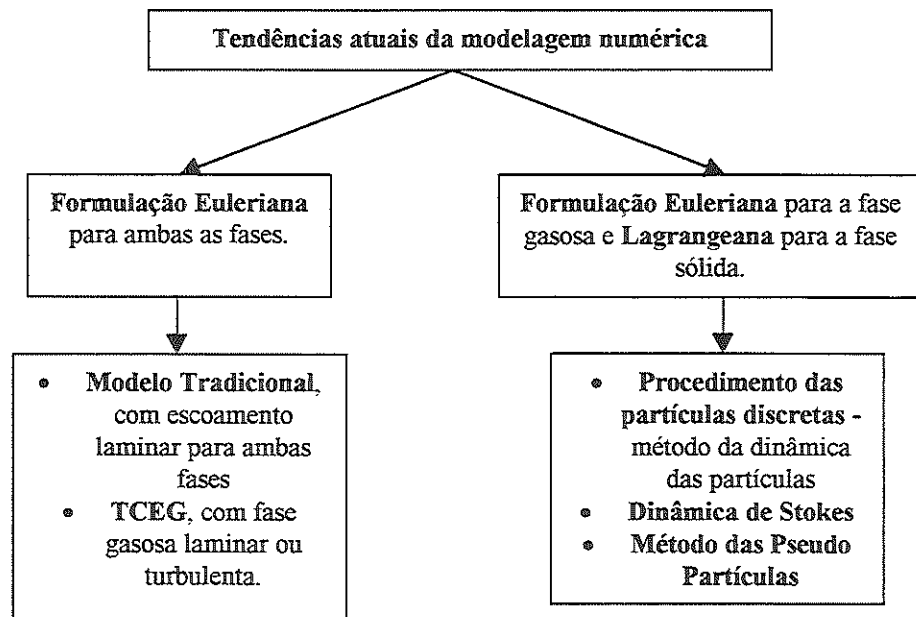


Figura 3.4. Tendências atuais da modelagem numérica em fluidização baseadas em equações fundamentais.

O método de Euler ou formulação Euleriana tem sido muito utilizado na modelação dos processos de fluidização. O método de Euler divide-se em dois procedimentos principais: o modelo tradicional e a teoria cinética dos escoamentos granulares (TCEG).

O modelo tradicional, que utiliza o método das médias de Euler e considera as duas fases como fases contínuas, denomina-se modelo das duas fases. Na literatura existe um grande número de publicações que utilizam este modelo das duas fases, tais como GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983), SYAMLAL & GIDASPOW (1985), GIDASPOW (1986), BOUILLARD *et al.* (1989) entre outras. A desvantagem do modelo tradicional consiste na necessidade de introduzir a viscosidade dinâmica do sólido, μ_s , como um dado obtido experimentalmente mediante um balanço de

quantidade de movimento, como mostrado em MILLER & GIDASPOW (1992). Devido a esse fato este modelo é também denominado de modelo das duas fases com viscosidade constante.

Os modelos baseados na TCEG para tratamento da fase sólida são atualmente adotados pela maioria dos pesquisadores, embora ainda não tenha sido demonstrado que este modelo possa produzir resultados mais realistas que os obtidos através do modelo das duas fases com viscosidade constante (KUIPERS & VAN SWAAIJ, 1997).

A TCEG foi desenvolvido por vários pesquisadores com base na teoria cinética dos gases densos (CHAPMAN & COGILNG, 1970). A grande vantagem dos modelos baseados nessa teoria é que permitem calcular diretamente o valor de μ_s . Suas desvantagens são a maior complexidade numérica e a necessidade de mais tempo de cálculo computacional. Alguns dos trabalhos que utilizam a TCEG são DING & GIDASPOW (1990), BOEMER *et al.* (1995), KIM & ARASTOPOUR (1995) e SAMUELSBERG & HJERTAGER (1996) entre outros.

A formulação de Euler-Lagrange constitui outra linha de modelagem numérica atualmente utilizada em fluidização. Nessa formulação, em geral, a fase gasosa é modelada como uma fase continua pelo método das médias de Euler, enquanto a fase sólida é modelada utilizando a formulação Lagrangeana.

De maneira geral essa linha de modelagem permite uma melhor compreensão das interações partícula-partícula. Também é útil como uma ferramenta para obter novos modelos reológicos das suspensões fluidizadas, e para melhorar a formulação das leis de fechamento necessárias nos modelos das duas fases.

Como mostra-se na Fig. 3.4 podem-se distinguir três procedimentos gerais deste tipo de formulação: o procedimento das partículas discretas, o modelo da dinâmica de Stokes, e o método das pseudo partículas.

No procedimento das partículas discretas o movimento das partículas individuais esféricas é calculado diretamente a partir das forças que atuam sobre essas partículas, levando em consideração as interações partícula-partícula e partícula-parede, assim como o arrasto entre as partículas e fase gasosa intersticial. Os trabalhos de TSUJI *et al.* (1993, 1998) e de HOOMANS *et al.* (1996) entre outros

são representativos deste procedimento. Os primeiros autores utilizam o modelo das esferas deformáveis, considerando que as partículas se deformam durante as iterações entre si. Os segundos autores utilizam o modelo das esferas não deformáveis, considerando as partículas como esferas quase rígidas que não sofrem deformações durante as interações.

O modelo da dinâmica de Stokes e o método das pseudo partículas constituem os outros dois procedimentos que utilizam a formulação de Euler-Lagrange. Uma breve explanação destes dois métodos é apresentada no trabalho de KUIPERS & VAN SWAAIJ (1997).

Na Tabela 3.1 apresenta-se um resumo das simulações de leitos fluidizados borbulhantes e circulantes desenvolvidas por diferentes grupos de pesquisa da área, segundo ENWALD *et al.* (1996). Estes trabalhos utilizam a formulação de Euler.

Os trabalhos de simulação de leitos borbulhantes e leitos circulantes têm sido desenvolvidos fundamentalmente por oito diferentes grupos de pesquisa, ao longo dos últimos quinze anos. A seguir apresenta-se as características fundamentais dos principais grupos de trabalho nesta área, extraído do trabalho de ENWALD *et al.* (1996).

Os membros do grupo do IIT/ANL são os pioneiros no campo da modelagem de leitos borbulhantes e possuem a maior quantidade de artigos publicados nesta área. Estes autores utilizam a formulação Euleriana. As primeiras publicações para leitos borbulhantes baseiam-se num modelo bidimensional laminar invíscido para ambas as fases. Os trabalhos posteriores consideram a turbulência na fase sólida através da TCEG, também foram realizados cálculos tridimensionais. No caso dos leitos circulantes o grupo começou utilizando o modelo bidimensional das duas fases com viscosidade constante para ambas as fases. Posteriormente o modelo foi melhorado levando em consideração a turbulência na fase sólida através da TCEG, e turbulência na fase gasosa usando a técnica LES.

Este grupo utiliza dois modelos hidrodinâmicos, modelos A e B (seção 2.7.1), diferenciados quanto ao tratamento do gradiente de pressão da fase gasosa nas equações de conservação da quantidade de movimento. O modelo B transforma o sistema de EDP num sistema matematicamente bem comportado, caracterizando um

problema matemático bem posto, LYCKOWSKI *et al.* (1982) apud GIDASPOW (1994). Segundo ENWALD *et al.* (1996) até o momento ninguém demonstrou os critérios matemáticos necessários e suficientes para que um problema multidimensional de valor inicial e de contorno seja bem comportado.

O grupo da universidade TU adota um procedimento de modelagem similar ao utilizado no IIT/ANL. Este grupo tem contribuído para desenvolvimento do conhecimento na modelagem de transferência de calor em leitos fluidizados borbulhantes. Mais recentemente o grupo passou a modelar leitos circulantes utilizando o modelo das duas fases, introduzindo a turbulência na fase sólida através da TCEG e na fase gasosa utilizando o modelo modificado do comprimento de mistura de Prandtl. Os pesquisadores deste grupo tem também desenvolvido modelagem usando a formulação de Euler-Lagrange, aplicando o procedimento das partículas discretas.

O grupo do RWTH desenvolveu, em cooperação com o FLUENT da Europa, um código computacional baseado no método de Euler para simular escoamentos bifásicos gás-sólidos aplicado a leitos borbulhantes e circulantes. O modelo baseia-se na TCEG. As principais contribuições deste grupo relacionam-se à comparações de diferentes modelos para o tensor das tensões, e entre os modelos algébricos e diferenciais para cálculo da temperatura granular.

O grupo do Tel-Tek/HiT-TF fez a primeira simulação da fluidização multifásica (três fases de particulado e uma de gás) num leito circulante. O modelo baseia-se na TCEG para as fases sólidas e utiliza a técnica LES para a fase gasosa.

Por fim, o grupo EDF tem desenvolvido a análise mais completa do modelo das duas fases, assim como das equações constitutivas, aplicado a fluidização gás-sólidos. A TCEG desenvolvida por este grupo leva em conta a influência da fase gasosa, o que possibilita aplicar o modelo para todas as concentrações de sólidos. Os modelos do EDF utilizam modelos de turbulência completos para ambas as fases, e resolvem quatro equações de transporte acopladas entre si. Os pesquisadores deste grupo têm efetuado simulações tridimensionais inclusive de instalações industriais de leitos circulantes.

Tabela 3.1. Resumo das simulações aplicadas à fluidização. ENWALD *et al.* (1996).

Leitos borbulhantes				
Referencias*	Modelo Computacional	Detalhes dos cálculos	Código computacional	Validação do cálculo
IIT/ANL GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983)	Modelo invíscido Modulo de Elasticidade Wen and Yu/Ergun 2D	$d_p=0.503$ mm $\rho_p=2660$ kg/m ³ $12 \times 31=372$ nos	K-FIX Modelo A. Simétrico	Distribuição da fração de vazio media no tempo
ETTEHADIEH <i>et al.</i> (1984)	Modelo invíscido Modulo de Elasticidade Wen and Yu/Ergun 2D	$d_p=0.280$ mm $\rho_p=901$ kg/m ³	K-FIX Modelo A. Simétrico	Perfis de velocidade e de fração de vazio médios no tempo
SYAMLAL & GIDASPOW (1985)	Modelo invíscido Modulo de Elasticidade Wen and Yu/Ergun 2D	$d_p=0.610$ mm $\rho_p=2470$ kg/m ³	MULTIFIX Modelo A. Simétrico	Dados experimentais do coeficiente de transferência de calor
LYCZKOWSKI <i>et al.</i> (1987) apud ENWALD <i>et al.</i> (1996)	Modelo invíscido Modulo de Elasticidade Wen and Yu/Ergun 2D	$d_p=0.503$ mm $\rho_p=2440$ kg/m ³ $12 \times 31=372$ nos $\Delta t=10^{-4}$ s	FLUFIX Modelo A. Simétrico	Gravação de vídeo
BOUILLARD <i>et al.</i> (1989)	Modelo invíscido Modulo de Elasticidade Wen and Yu/Ergun 2D	$d_p=0.503$ mm $\rho_p=2440$ kg/m ³ $31 \times 48=1488$ nos $\Delta t=10^{-5}-10^{-4}$ s	FLUFIX Modelos A e B. Simétricos	Gravação de vídeo e distribuição da fração de vazio media no tempo
LYCZKOWSKI <i>et al.</i> (1989) apud ENWALD <i>et al.</i> (1996)	Viscosidade da ambas as fases constante Modulo de Elasticidade Wen and Yu/Ergun 2D	$d_p=0.503$ mm $\rho_p=2440$ kg/m ³ $31 \times 48=1488$ nos $\Delta t=8 \times 10^{-5}-10^{-4}$ s $T_{sim}=4$ s	FLUFIX Modelos A e B. Simétricos	Fração de vazio media no tempo Erosão dos tubos

Tabela 3.1 – continuação.

Referencias	Modelo Computacional	Detalhes dos cálculos	Código computacional	Validação do cálculo
DING & GIDASPOW (1990)	Modelo viscoso Fase gasosa laminar e teoria cinética para a fase sólida Wen and Yu/Ergun 2D	$d_p=0.500$ mm $\rho_p=2500$ kg/m ³ $16 \times 42=672$ nos $\Delta t=5 \times 10^{-5}$ s $T_{sim}=5$ s	IFAP Modelo A. Não simétrico	Fração de vazio média no tempo
LYCZKOWSKI <i>et al.</i> (1991) apud ENWALD <i>et al.</i> (1996)	Viscosidade da ambas as fases constante Modulo de Elasticidade Wen and Yu/Ergun 2D	$d_p=0.500$ mm $\rho_p=2490$ kg/m ³ $32 \times 80=2560$ nos $\Delta t=5 \times 10^{-4}$ s $T_{sim}=4$ s	FLUFIX Modelo B. Não simétrico	Espectro das flutuações da pressão. Velocidade do sólido media no tempo
DING & LYCZKOWSKI (1992)	Modelo viscoso Fase gasosa laminar e teoria cinética para a fase sólida Wen and Yu/Ergun 3D	$d_p=1.0$ mm $\rho_p=2580$ kg/m ³ $4 \times 10 \times 33=1320$ nos $\Delta t=5 \times 10^{-4}$ s $T_{sim}=2$ s	IFAP Modelo A. Simétrico	Erosão dos tubos
GAMWO <i>et al.</i> (1995)	Viscosidade da ambas as fases constante Modulo de Elasticidade Wen and Yu/Ergun 3D	$d_p=0.503$ mm $\rho_p=2610$ kg/m ³ $8 \times 14 \times 38=4256$ nos $\Delta t=10^{-5} - 4 \times 10^{-4}$ s	IFAP3DB Modelo B. Simétrico	—
EG&G/DOE SYAMLAL & O'BRIEN (1989) apud ENWALD <i>et al.</i> (1996)	Modelo inviscido Resolvido para a pressão do particulado Syamlal and O'Brien 2D	$d_p=0.020-0.200$ mm $\rho_p=2500$ kg/m ³ $\Delta t=10^{-5} - 4 \times 10^{-4}$ s $T_{sim}=1.3$ s	— Modelo simétrico.	Frequência de Bolhas Perfis de pressão
NYU LI & ZAKKAY (1995) apud ENWALD <i>et al.</i> (1996)	Modelo inviscido Modulo de Elasticidade Wen and Yu/Ergun 2D	$d_p=1.5$ mm $\rho_p=2490$ kg/m ³ 2496-4992 nos $\Delta t=10^{-5}$ s $T_{sim}=2.0$ s	— Modelo simétrico	—

Tabela 3.1 – continuação.

Referencias	Modelo Computacional	Detalhes dos cálculos	Código computacional	Validação do cálculo
TU KUIPERS <i>et al.</i> (1992a)	Modelo invíscido Modulo de Elasticidade Wen and Yu/Ergun 2D	$d_p=0.500$ mm $\rho_p=2660$ kg/m ³ $38 \times 100=3800$ nos $\Delta t=2.5 \times 10^{-4}$ s $T_{sim}=1.05$ s	— Modelo simétrico Cálculos térmicos	—
KUIPERS <i>et al.</i> (1992b)	Viscosidade da ambas as fases constante Modulo de Elasticidade Wen and Yu/Ergun 2D	$d_p=0.500$ mm $\rho_p=2660$ kg/m ³ $76 \times 80=6080$ nos $\Delta t=3 \times 10^{-4}$ s $T_{sim}=0.72$ s	— Modelo simétrico.	—
KUIPERS <i>et al.</i> (1993)	Viscosidade da ambas as fases constante Modulo de Elasticidade Wen and Yu/Ergun 2D	$d_p=0.500$ mm $\rho_p=2660$ kg/m ³ $38 \times 100=3800$ nos Δt variável, $T_{sim}=0.798$ s	— Modelo simétrico.	Gravação de vídeo
NIEUWLAND <i>et al.</i> (1996)	Viscosidade da ambas as fases constante Modulo de Elasticidade Wen and Yu/Ergun 2D	d_p variando ρ_p variando $3040 - 12160$ nos $\Delta t=10^{-4} - 1.25 \times 10^{-4}$ s $T_{sim}=0.25$ s	— Modelo simétrico.	Gravação de vídeo Tamanho das bolhas Fator de forma das bolhas Fração de perdas
RWTH BOEMER <i>et al.</i> (1995)	Fase gasosa laminar e teoria cinética para a fase sólida SYAMLAL <i>et al.</i> (1988) 2D	$d_p=0.500$ mm $\rho_p=2660$ kg/m ³ $30 \times 79=2370$ nos $T_{sim}=2.0$ s	FLUENT 4.23 Modelo Simétrico	Fração de vazio media no tempo

Tabela 3.1 – continuação.

Referencias	Modelo Computacional	Detalhes dos cálculos	Código computacional	Validação do cálculo
EDF BALZER <i>et al.</i> (1995) apud ENWALD <i>et al.</i> (1996)	k-ε para a fase gasosa e teoria cinética para a fase sólida WEN & YU/ERGUN 2D	$d_p=0.500$ mm $\rho_p=2500$ kg/m ³ 50 × 100=5000 nos $T_{sim}=5.0$ s	MELODIF Modelo não simétrico	Imagem de raios X Distribuição de pressão Diâmetro das bolhas Altura do leito
CTH ENWALD <i>et al.</i> (1997) apud ENWALD <i>et al.</i> (1996)	Fase gasosa laminar e teoria cinética para a fase sólida Modulo de elasticidade GIBILARO 2D	$d_p=0.700$ mm $\rho_p=2600$ kg/m ³ 30 × 112=3360 nos $\Delta t=10^{-5}$ s $T_{sim}=32$ s	GEMINI2D Modelo não simétrico, Condições atmosféricas e pressurizadas	Prova capacitiva Medições de parâmetros estatísticos das bolhas
Leitos Circulantes				
HIT/ANL TSUO & GIDASPOW (1990)	Viscosidade da ambas as fases constante Modulo de Elasticidade Wen and Yu/Ergun 2D	$d_p=0.076$ mm $\rho_p=1714$ kg/m ³ 30 × 38=1140 nos $\Delta t=5 \times 10^{-4}$ s $T_{sim}=18$ s	Extensão do K-FIX Modelo B	Distribuição radial da fração volumétrica do sólido, Distribuição axial da velocidade do gás e do sólido
GIDASPOW & THEDTHIANWONG (1993) apud ENWALD <i>et al.</i> (1996)	LES para a fase gasosa e teoria cinética para a fase sólida WEN & YU/ERGUN 2D	$d_p=0.210$ mm $\rho_p=1530$ kg/m ³	Extensão do K-FIX Modelo B	—
WANG & BOUILLARD (1993) apud ENWALD <i>et al.</i> (1996)	Viscosidade da ambas as fases constante Modulo de Elasticidade WEN & YU/ERGUN 2D	$d_p=0.090$ mm $\rho_p=6700$ kg/m ³	FLUCOMP Modelo B	—

Tabela 3.1 – continuação.

Referencias	Modelo Computacional	Detalhes dos cálculos	Código computacional	Validação do cálculo
Tel-Tek/HiT-TF MATHIESEN <i>et al.</i> (1996) apud ENWALD <i>et al.</i> (1996)	LES para a fase gasosa e teoria cinética com diferentes tamanhos de partícula WEN & YU/ERGUN 2D	$d_p=0.040-0.170$ mm $\rho_p=2500$ kg/m ³ $38 \times 102=3876$ nos $T_{sim}=60$ s	FLOTRACS-MP-3D	Diâmetro das partículas e diâmetro médio das partículas Flutuações axiais da velocidade Perfis da velocidade media
RWTH BOEMER <i>et al.</i> (1994) apud ENWALD <i>et al.</i> (1996)	Teoria cinética Correção dos aglomerados para o arrasto 2D	$d_p=0.074$ mm $\rho_p=1770$ kg/m ³ $36 \times 60=2160$ nos $T_{sim}=8.0$ s	FLUENT 4.23	Fração volumétrica do sólido radial
EDF BALZER <i>et al.</i> (1996) apud ENWALD <i>et al.</i> (1996)	k- ϵ para a fase gasosa e teoria cinética para a fase sólida WEN & YU/ERGUN 3D	$d_p=0.140$ mm $\rho_p=2500$ kg/m ³ $T_{sim}=30$ s	ASTRID	Perfil da pressão vertical

*

CTH	Chalmers Tekniska Högskola
EDF	Electricité de France
EG&G/DOE	EG&G Washington Services Center Inc./Department of Energy Morgantown
IIT/ANL	Illinois Institute of Technology/Argonne National Laboratory
NYU	New York University
RWTH	Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule
Tel-Tek/HiT-TF	Telemark Technological R&D Centre/Telemark Institute of Technology
TU	Twente University

3.2 - Modelo hidrodinâmico B em coordenadas cilíndricas

A seguir apresenta-se o modelo hidrodinâmico B, mostrado na Tabela 2.5, em coordenadas cilíndricas. A transformação para coordenadas cilíndricas é realizada segundo BIRD *et al.* (1973) e ISHII (1975). Este modelo hidrodinâmico B será utilizado nas simulações numéricas do presente trabalho. O sistema fechado de EDP do modelo B é apresentado na Tabela 3.2.

Tabela 3.2. Modelo hidrodinâmico B em coordenadas cilíndricas.

Equações de conservação da massa.	
Fase gasosa	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \alpha_g) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho_g \alpha_g u_g) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho_g \alpha_g v_g) = 0 \quad (3.1)$
Fase sólida	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s \alpha_s) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho_s \alpha_s u_s) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho_s \alpha_s v_s) = 0 \quad (3.2)$
Equações de conservação da quantidade de movimento.	
Fase gasosa na direção radial, r	$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \alpha_g u_g) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho_g \alpha_g u_g^2) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho_g \alpha_g v_g u_g) = -\frac{\partial P}{\partial r} - \beta_r(u_g - u_s) + \\ &\mu_g \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \alpha_g \left(2 \frac{\partial(u_g)}{\partial r} - \frac{2}{3} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial(r u_g)}{\partial r} + \frac{\partial v_g}{\partial z} \right) \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\alpha_g \left(\frac{\partial v_g}{\partial r} + \frac{\partial u_g}{\partial z} \right) \right] - \right. \\ &\left. \frac{\alpha_g}{r} \left(\frac{2 u_g}{r} - \frac{2}{3} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial(r u_g)}{\partial r} + \frac{\partial v_g}{\partial z} \right) \right) \right\} \quad (3.3) \end{aligned}$
Fase sólida na direção radial, r	$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s \alpha_s u_s) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho_s \alpha_s u_s^2) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho_s \alpha_s v_s u_s) = -G(\alpha_g) \frac{\delta \alpha_g}{\delta r} + \beta_r(u_g - u_s) \\ &\mu_s \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \alpha_s \left(2 \frac{\partial(u_s)}{\partial r} - \frac{2}{3} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial(r u_s)}{\partial r} + \frac{\partial v_s}{\partial z} \right) \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\alpha_s \left(\frac{\partial v_s}{\partial r} + \frac{\partial u_s}{\partial z} \right) \right] - \right. \\ &\left. \frac{\alpha_s}{r} \left(\frac{2 u_s}{r} - \frac{2}{3} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial(r u_s)}{\partial r} + \frac{\partial v_s}{\partial z} \right) \right) \right\} \quad (3.4) \end{aligned}$

Tabela 3.2 - continuação.

<p>Fase gasosa na direção axial, z</p> $\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \alpha_g v_g) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho_g \alpha_g u_g v_g) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho_g \alpha_g v_g^2) = -\frac{\partial P}{\partial z} - \beta_z(v_g - v_s) - \rho_g g +$ $\mu_g \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \alpha_g \left(\frac{\partial v_g}{\partial r} + \frac{\partial u_g}{\partial z} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\alpha_g \left(2 \frac{\partial v_g}{\partial z} - \frac{2}{3} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial(r u_g)}{\partial r} + \frac{\partial v_g}{\partial z} \right) \right) \right] \right\} \quad (3.5)$	
<p>Fase sólida na direção axial, z</p> $\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s \alpha_s v_s) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho_s \alpha_s u_s v_s) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho_s \alpha_s v_s^2) = -G(\alpha_g) \frac{\partial \alpha_g}{\partial z} + \beta_z(v_g - v_s) +$ $\mu_g \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \alpha_g \left(\frac{\partial v_g}{\partial r} + \frac{\partial u_g}{\partial z} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\alpha_g \left(2 \frac{\partial v_g}{\partial z} - \frac{2}{3} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial(r u_g)}{\partial r} + \frac{\partial v_g}{\partial z} \right) \right) \right] \right\} -$ $(\rho_s - \rho_g) \alpha_s g \quad (3.6)$	
<p>Equações Constitutivas.</p>	
<p>Equações de estado e definição da fração volumétrica de sólidos</p> $\rho_g = \frac{P}{R_g T}, \quad \rho_s = \text{const} \quad \text{e} \quad \alpha_s = 1 - \alpha_g \quad (3.7)$	
<p>Função de arrasto na interface, β</p> $\left\{ \begin{aligned} \beta_r &= 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g \rho_s}{(\alpha_g d_p \phi_s)^2 (\rho_s - \rho_g)} + 1.75 \frac{\rho_g \rho_s \bar{u}_g - \bar{u}_s \alpha_s}{(\alpha_g d_p \phi_s) (\rho_s - \rho_g)} \\ \beta_z &= 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g \rho_s}{(\alpha_g d_p \phi_s)^2 (\rho_s - \rho_g)} + 1.75 \frac{\rho_g \rho_s \bar{v}_g - \bar{v}_s \alpha_s}{(\alpha_g d_p \phi_s) (\rho_s - \rho_g)} \end{aligned} \right. \quad 0.2 \leq \alpha_g < 0.8 \quad (3.8)$	
$\left\{ \begin{aligned} \beta_r &= \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{ \bar{u}_g - \bar{u}_s \rho_g \rho_s \alpha_s}{d_p \phi_s (\rho_s - \rho_g)} \alpha_g^{-2.65} \\ \beta_z &= \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{ \bar{v}_g - \bar{v}_s \rho_g \rho_s \alpha_s}{d_p \phi_s (\rho_s - \rho_g)} \alpha_g^{-2.65} \end{aligned} \right. \quad \alpha_g \geq 0.8 \quad (3.9)$	
<p>Onde</p> $C_{Ds} = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 \cdot Re_p^{0.687}) & Re_p < 1000 \\ 0.44 & Re_p \geq 1000 \end{cases} \quad (3.10)$	

Tabela 3.2 - continuação.

<p>e</p> $\text{Re}_{p,r} = \frac{ \bar{u}_g - \bar{u}_s d_p \rho_g \alpha_g}{\mu_g} \text{ e } \text{Re}_{p,z} = \frac{ \bar{v}_g - \bar{v}_s d_p \rho_g \alpha_g}{\mu_g} \quad (3.11)$ <p>Módulo de elasticidade da fase sólida*</p> $G(\alpha_g) = \frac{\partial P_s}{\partial \alpha_s} = 10^{-8.76\alpha_g + 5.43} \frac{\text{N}}{\text{m}^2} \quad (3.12)$
--

3.3 - Discretização do modelo hidrodinâmico pelo método das diferenças finitas

3.3.1 - Introdução

As equações do modelo hidrodinâmico são discretizadas em diferenças finitas de acordo com o método numérico de solução implícita de problemas multifásicos desenvolvido por HARLOW & AMSDEN (1975). Neste método as equações de conservação da massa são discretizadas implicitamente, porém as equações de conservação da quantidade de movimento são discretizadas mediante uma técnica mista, explícita-implícita. Os termos associados à pressão do fluido, à pressão do sólido** e à transferência de quantidade de movimento na interface são discretizados implicitamente, e os restantes associados à dissipação viscosa, forças gravitacionais e termos convectivos são discretizados explicitamente.

*O módulo de elasticidade da fase sólida $G(\alpha_g)$ é definido segundo a Eq. (3.12), mas no programa computacional pode-se usar as outras equações disponíveis na literatura (Tab. 2.3).

**A pressão do sólido pode ser considerada tanto explícita como implicitamente no programa computacional.

3.3.2 - Malha computacional

Os cálculos são desenvolvidos usando uma malha computacional composta de células fixas num espaço bidimensional (malha Euleriana). A Fig. 3.5 mostra uma célula computacional típica. As variáveis escalares são localizadas no centro da célula e as variáveis vetoriais nas fronteiras.

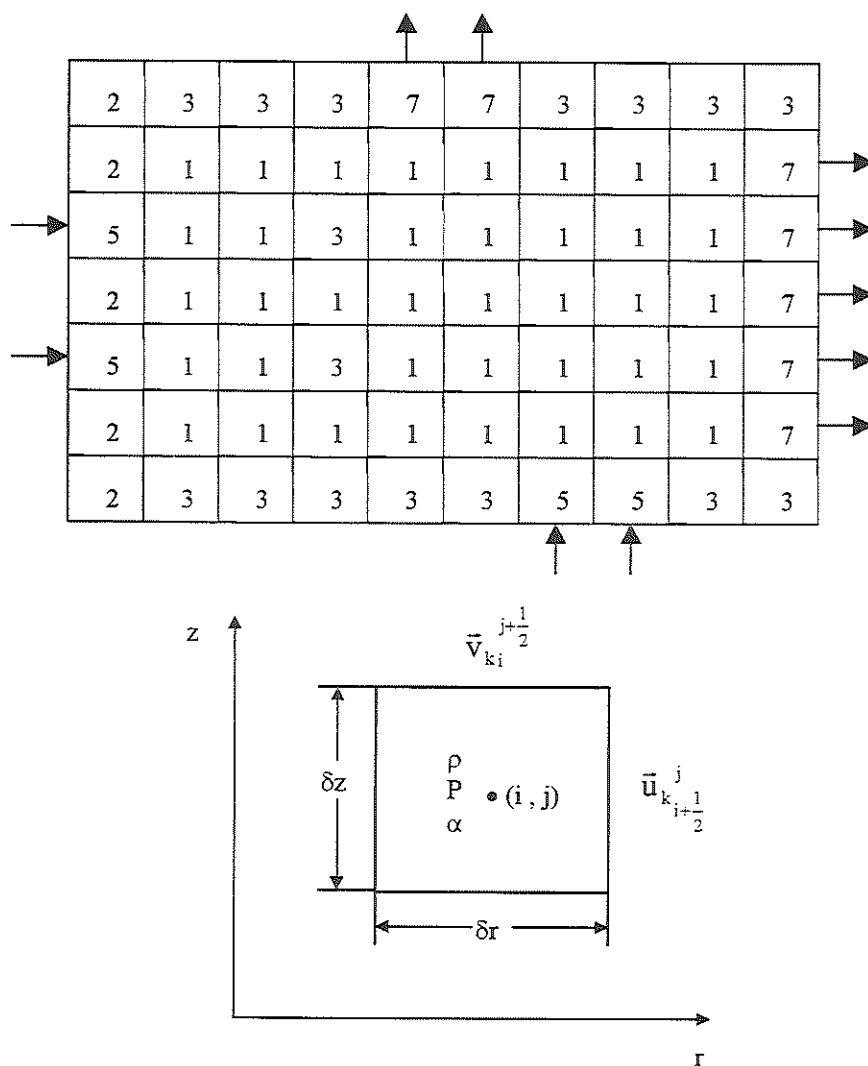


Figura 3.5. Malha e célula computacional típicas.

Na Fig. 3.5 os números das células representam o tipo de célula computacional. Este procedimento é utilizado para modelar as diferentes condições de contorno e consiste em adicionar células computacionais fictícias que podem representar as fronteiras do sistema assim como obstáculos no escoamento. O significado dos números de cada célula computacional é como segue:

1. Célula de Fluido.
2. Célula artificial com deslizamento livre nas fronteiras.
3. Célula artificial sem deslizamento nas fronteiras.
4. Célula de fluxo de saída contínuo.
5. Célula de fluxo de entrada constante.
6. Célula de pressão de entrada constante.
7. Célula de pressão de saída constante.

As equações de conservação da quantidade de movimento são discretizadas numa malha computacional deslocada como mostrado na Fig. 3.6.

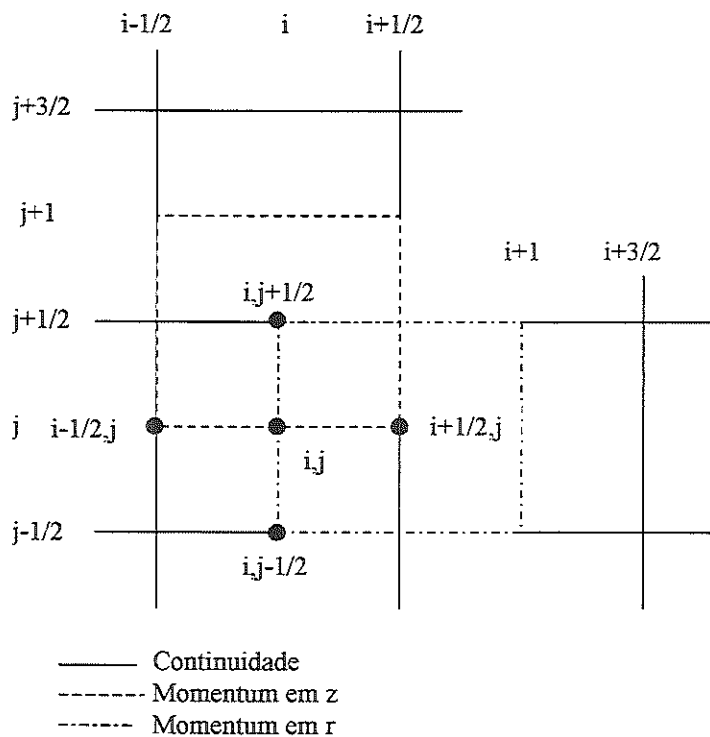


Figura 3.6. Malha computacional desfasada para as equações de momentum.

3.3.3 - Equações discretizadas em diferenças finitas em coordenadas cilíndricas

A equação da continuidade é discretizada implicitamente como segue:

Fase gasosa

$${}^{n+1}(\rho_g \alpha_g)_i^j = {}^n(\rho_g \alpha_g)_i^j - \frac{\delta t}{r_i \delta r} {}^{n+1} \langle (\rho_g \alpha_g r) u_g \rangle_i^j - \frac{\delta t}{\delta z} {}^{n+1} \langle (\rho_g \alpha_g) v_g \rangle_i^j \quad (3.13)$$

Fase sólida

$${}^{n+1}(\rho_s \alpha_s)_i^j = {}^n(\rho_s \alpha_s)_i^j - \frac{\delta t}{r_i \delta r} {}^{n+1} \langle (\rho_s \alpha_s r) u_s \rangle_i^j - \frac{\delta t}{\delta z} {}^{n+1} \langle (\rho_s \alpha_s) v_s \rangle_i^j \quad (3.14)$$

Os termos representados entre colchetes angulares representam discretização a montante. Um exemplo esquemático dessa discretização é mostrado na Fig. B1.1 do Apêndice II.

$${}^{n+1} \langle (\rho_k \alpha_k r) u_k \rangle_i^j = {}^{n+1} (u_k)_{i+\frac{1}{2}}^j \begin{cases} {}^n (\rho_k \alpha_k r)_i^j & \text{para } {}^{n+1} (u_k)_{i+\frac{1}{2}}^j > 0 \\ {}^n (\rho_k \alpha_k r)_{i+1}^j & \text{para } {}^{n+1} (u_k)_{i+\frac{1}{2}}^j < 0 \end{cases} - {}^{n+1} (u_k)_{i-\frac{1}{2}}^j \begin{cases} {}^n (\rho_k \alpha_k r)_{i-1}^j & \text{para } {}^{n+1} (u_k)_{i-\frac{1}{2}}^j > 0 \\ {}^n (\rho_k \alpha_k r)_i^j & \text{para } {}^{n+1} (u_k)_{i-\frac{1}{2}}^j < 0 \end{cases} \quad (3.15)$$

e

$${}^{n+1} \langle (\rho_k \alpha_k) v_k \rangle_i^j = {}^{n+1} (v_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} \begin{cases} {}^n (\rho_k \alpha_k)_i^j & \text{para } {}^{n+1} (v_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} > 0 \\ {}^n (\rho_k \alpha_k)_{i+1}^{j+1} & \text{para } {}^{n+1} (v_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} < 0 \end{cases} - {}^{n+1} (v_k)_{i-\frac{1}{2}}^{j-\frac{1}{2}} \begin{cases} {}^n (\rho_k \alpha_k)_{i-1}^{j-1} & \text{para } {}^{n+1} (v_k)_{i-\frac{1}{2}}^{j-\frac{1}{2}} > 0 \\ {}^n (\rho_k \alpha_k)_i^j & \text{para } {}^{n+1} (v_k)_{i-\frac{1}{2}}^{j-\frac{1}{2}} < 0 \end{cases} \quad (3.16)$$

As equações de conservação da quantidade de movimento discretizadas em diferenças finitas são:

Fase gasosa, eixo r

$$\begin{aligned} {}^{n+1}(\rho_g \alpha_g u_g)_{i+\frac{1}{2}}^j &= {}^n(\overline{\rho_g \alpha_g u_g})_{i+\frac{1}{2}}^j - \frac{\delta t^{n+1}}{\delta r} (P_{i+1}^j - P_i^j) - \\ &\delta t {}^n(\beta_r)_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}n+1} (u_g - u_s)_{i+\frac{1}{2}}^j \end{aligned} \quad (3.17)$$

Fase gasosa, direção z

$$\begin{aligned} {}^{n+1}(\rho_g \alpha_g v_g)_i^{j+\frac{1}{2}} &= {}^n(\overline{\rho_g \alpha_g v_g})_i^{j+\frac{1}{2}} - \frac{\delta t^{n+1}}{\delta z} (P_i^{j+1} - P_i^j) - \\ &\delta t {}^n(\beta_r)_i^{j+\frac{1}{2}n+1} (v_g - v_s)_i^{j+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.18)$$

Fase sólida, direção r

$$\begin{aligned} {}^{n+1}(\rho_s \alpha_s u_s)_{i+\frac{1}{2}}^j &= {}^n(\overline{\rho_s \alpha_s u_s})_{i+\frac{1}{2}}^j - \frac{\delta t^{n+1}}{\delta r} (G)_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}n+1} ((\alpha_g)_{i+1} - (\alpha_g)_i)^j + \\ &\delta t {}^n(\beta_r)_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}n+1} (u_g - u_s)_{i+\frac{1}{2}}^j \end{aligned} \quad (3.19)$$

Fase sólida, direção z

$$\begin{aligned} {}^{n+1}(\rho_s \alpha_s v_s)_i^{j+\frac{1}{2}} &= {}^n(\overline{\rho_s \alpha_s v_s})_i^{j+\frac{1}{2}} - \frac{\delta t^{n+1}}{\delta z} (G)_i^{j+\frac{1}{2}n+1} ((\alpha_g)^{j+1} - (\alpha_g)^j)_i + \\ &\delta t {}^n(\beta_r)_i^{j+\frac{1}{2}n+1} (v_g - v_s)_i^{j+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.20)$$

Os termos representados por linhas são discretizados explicitamente como segue

$$\begin{aligned} {}^n \overline{(\rho_g \alpha_g u_g)}_{i+\frac{1}{2}}^j &= {}^n (\rho_g \alpha_g u_g)_{i+\frac{1}{2}}^j - \frac{\delta t}{r_{i+\frac{1}{2}} \delta r} {}^n \langle (\rho_g \alpha_g u_g r) u_g \rangle_{i+\frac{1}{2}}^j - \frac{\delta t}{\delta z} {}^n \langle (\rho_g \alpha_g u_g) v_g \rangle_{i+\frac{1}{2}}^j + \\ &\quad \delta t {}^n (\bar{\nabla} \cdot \tau_{gr})_{i+\frac{1}{2}}^j - \frac{\delta t}{r_{i+\frac{1}{2}}} {}^n (\tau_{g\theta\theta})_{i+\frac{1}{2}}^j \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} {}^n \overline{(\rho_g \alpha_g v_g)}_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} &= {}^n (\rho_g \alpha_g v_g)_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} - \frac{\delta t}{r_i \delta r} {}^n \langle (\rho_g \alpha_g v_g r) u_g \rangle_i^{j+\frac{1}{2}} - \frac{\delta t}{\delta z} {}^n \langle (\rho_g \alpha_g v_g) v_g \rangle_i^{j+\frac{1}{2}} - \\ &\quad \delta t \rho_g g + \delta t {}^n (\bar{\nabla} \cdot \tau_{gz})_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} {}^n \overline{(\rho_s \alpha_s u_s)}_{i+\frac{1}{2}}^j &= {}^n (\rho_s \alpha_s u_s)_{i+\frac{1}{2}}^j - \frac{\delta t}{r_{i+\frac{1}{2}} \delta r} {}^n \langle (\rho_s \alpha_s u_s r) u_s \rangle_{i+\frac{1}{2}}^j - \frac{\delta t}{\delta z} {}^n \langle (\rho_s \alpha_s u_s) v_s \rangle_{i+\frac{1}{2}}^j + \\ &\quad \delta t {}^n (\bar{\nabla} \cdot \tau_{sr})_{i+\frac{1}{2}}^j - \frac{\delta t}{r_{i+\frac{1}{2}}} {}^n (\tau_{s\theta\theta})_{i+\frac{1}{2}}^j \end{aligned} \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} {}^n \overline{(\rho_s \alpha_s v_s)}_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} &= {}^n (\rho_s \alpha_s v_s)_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} - \frac{\delta t}{r_i \delta r} {}^n \langle (\rho_s \alpha_s v_s r) u_s \rangle_i^{j+\frac{1}{2}} - \frac{\delta t}{\delta z} {}^n \langle (\rho_s \alpha_s v_s) v_s \rangle_i^{j+\frac{1}{2}} - \\ &\quad \delta t (\rho_s - \rho_g) \alpha_s g + \delta t {}^n (\bar{\nabla} \cdot \tau_{sz})_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.24)$$

onde os termos do tensor das tensões viscosas para ambas as fases são dados por

$${}^n (\bar{\nabla} \cdot \tau_{kr})_{i+\frac{1}{2}}^j = \frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}} \delta r} \left[(r\tau_{krr})_{i+1}^j - (r\tau_{krr})_i^j \right] + \frac{1}{\delta z} \left[(\tau_{kzr})_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} - (\tau_{kzr})_{i+\frac{1}{2}}^{j-\frac{1}{2}} \right] \quad (3.25)$$

$${}^n (\bar{\nabla} \cdot \tau_{kz})_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{r_i \delta r} \left[(r\tau_{kzz})_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} - (r\tau_{kzz})_{i-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} \right] + \frac{1}{\delta z} \left[(\tau_{kzz})_i^{j+1} - (\tau_{kzz})_i^j \right] \quad (3.26)$$

Substituindo os componentes do tensor das tensões viscosas nas Eqs. (3.25) e (3.26) e discretizando explicitamente em diferenças finitas regressivas, os termos de transporte viscoso para ambas resultam

$$\begin{aligned}
 {}^n(\bar{\mathbf{V}} \cdot \boldsymbol{\tau}_{kr})_{i+\frac{1}{2}}^j &= \frac{\mu_k}{r_{i+\frac{1}{2}} \delta r} \left\{ (\alpha_s)_i^j r_{i+1} \left[\frac{2}{\delta r} \left((u_k)_{i+\frac{3}{2}}^j - (u_k)_{i+\frac{1}{2}}^j \right) - \frac{2}{3} \left[\frac{1}{r_{i+1} \delta r} \left((ru_k)_{i+\frac{3}{2}}^j - (ru_k)_{i+\frac{1}{2}}^j \right) + \right. \right. \right. \\
 &\left. \left. \frac{1}{\delta z} \left((v_k)_{i+1}^{j+\frac{1}{2}} - (v_k)_{i+1}^{j-\frac{1}{2}} \right) \right] \right\} - (\alpha_k)_i^j r_i \left\{ \frac{2}{\delta r} \left((u_k)_{i+\frac{1}{2}}^j - (u_k)_{i-\frac{1}{2}}^j \right) - \frac{2}{3} \left[\frac{1}{r_i \delta r} \left((ru_k)_{i+\frac{1}{2}}^j - (ru_k)_{i-\frac{1}{2}}^j \right) + \right. \right. \\
 &\left. \left. + \frac{1}{\delta z} \left((v_k)_i^{j+\frac{1}{2}} - (v_k)_i^{j-\frac{1}{2}} \right) \right] \right\} + \frac{\mu_k}{\delta z} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{(\alpha_k)_i^{j+1} + (\alpha_k)_i^j}{2} + \frac{(\alpha_k)_{i+1}^{j+1} + (\alpha_k)_{i+1}^j}{2} \right) \left[\frac{1}{\delta z} \left((u_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} - \right. \right. \right. \\
 &\left. \left. (u_k)_{i+\frac{1}{2}}^j \right) + \frac{1}{\delta r} \left((v_k)_{i+1}^{j+\frac{1}{2}} - (v_k)_i^{j+\frac{1}{2}} \right) \right] - \frac{1}{2} \left(\frac{(\alpha_k)_i^j + (\alpha_k)_i^{j-1}}{2} + \frac{(\alpha_k)_{i+1}^j + (\alpha_k)_{i+1}^{j-1}}{2} \right) \left[\frac{1}{\delta z} \left((u_k)_{i+\frac{1}{2}}^j - \right. \right. \\
 &\left. \left. (u_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j-1} \right) + \frac{1}{\delta r} \left((v_k)_{i+1}^{j-\frac{1}{2}} - (v_k)_i^{j-\frac{1}{2}} \right) \right] \right\} \quad (3.27)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 {}^n(\bar{\mathbf{V}} \cdot \boldsymbol{\tau}_{kz})_i^{j+\frac{1}{2}} &= \frac{\mu_s}{r_i \delta r} \left\{ \frac{r_{i+\frac{1}{2}}}{2} \left(\frac{(\alpha_k)_i^{j+1} + (\alpha_k)_i^j}{2} + \frac{(\alpha_k)_{i+1}^{j+1} + (\alpha_k)_{i+1}^j}{2} \right) \left[\frac{1}{\delta z} \left((u_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} - (u_k)_{i+\frac{1}{2}}^j \right) + \right. \right. \\
 &\left. \frac{1}{\delta r} \left((v_k)_{i+1}^{j+\frac{1}{2}} - (v_k)_i^{j+\frac{1}{2}} \right) \right] - \frac{r_{i-\frac{1}{2}}}{2} \left(\frac{(\alpha_k)_{i-1}^{j+1} + (\alpha_k)_{i-1}^j}{2} + \frac{(\alpha_k)_i^{j+1} + (\alpha_k)_i^j}{2} \right) \cdot \left[\frac{1}{\delta z} \left((u_k)_{i-\frac{1}{2}}^{j+1} - \right. \right. \\
 &\left. \left. - (u_k)_{i-\frac{1}{2}}^j \right) + \frac{1}{\delta r} \left((v_k)_i^{j+\frac{1}{2}} - (v_k)_{i-1}^{j+\frac{1}{2}} \right) \right] \right\} + \frac{\mu_k}{\delta z} \left\{ (\alpha_k)_i^{j+1} \left[\frac{2}{\delta z} \left((v_k)_i^{j+\frac{3}{2}} - (v_k)_i^{j+\frac{1}{2}} \right) - \frac{2}{3} \left[\frac{1}{r_i \delta r} \cdot \right. \right. \right. \\
 &\left. \left. \left((ru_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} - (ru_k)_{i-\frac{1}{2}}^{j+1} \right) + \frac{1}{\delta z} \left((v_k)_i^{j+\frac{3}{2}} - (v_k)_i^{j+\frac{1}{2}} \right) \right] \right\} - (\alpha_k)_i^j \left\{ \frac{2}{\delta z} \left((v_k)_i^{j+\frac{1}{2}} - (v_k)_i^{j-\frac{1}{2}} \right) - \frac{2}{3} \left[\frac{1}{r_i \delta r} \cdot \right. \right. \\
 &\left. \left. \left((ru_k)_{i+\frac{1}{2}}^j - (ru_k)_{i-\frac{1}{2}}^j \right) + \frac{1}{\delta z} \left((v_k)_i^{j+\frac{1}{2}} - (v_k)_i^{j-\frac{1}{2}} \right) \right] \right\} \left. \right\} \quad (3.28)
 \end{aligned}$$

Os termos representados entre colchetes angulares representam discretização a montante. Ver Fig. B1.2, Apêndice II.

$$\begin{aligned}
 {}^n \langle (\rho_k \alpha_k u_k) v_k \rangle_{i+\frac{1}{2}}^j &= (v_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} \begin{cases} (\rho_k \alpha_k u_k)_{i+\frac{1}{2}}^j \rightarrow \text{para}(v_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} > 0 \\ (\rho_k \alpha_k u_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} \rightarrow \text{para}(v_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} < 0 \end{cases} \\
 - (v_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j-\frac{1}{2}} &\begin{cases} (\rho_k \alpha_k u_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j-1} \rightarrow \text{para}(v_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j-\frac{1}{2}} > 0 \\ (\rho_k \alpha_k u_k)_{i+\frac{1}{2}}^j \rightarrow \text{para}(v_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j-\frac{1}{2}} < 0 \end{cases} \quad (3.29)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 {}^n \langle (\rho_k \alpha_k v_k) v_k \rangle_i^{j+\frac{1}{2}} &= (v_k)_i^{j+1} \begin{cases} (\rho_k \alpha_k v_k)_i^{j+\frac{1}{2}} \rightarrow \text{para}(v_k)_i^{j+1} > 0 \\ (\rho_k \alpha_k v_k)_i^{j+\frac{3}{2}} \rightarrow \text{para}(v_k)_i^{j+1} < 0 \end{cases} \\
 - (v_k)_i^j &\begin{cases} (\rho_k \alpha_k v_k)_i^{j-\frac{1}{2}} \rightarrow \text{para}(v_k)_i^j > 0 \\ (\rho_k \alpha_k v_k)_i^{j+\frac{1}{2}} \rightarrow \text{para}(v_k)_i^j < 0 \end{cases} \quad (3.30)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 {}^n \langle (\rho_k \alpha_k u_k r) u_k \rangle_{i+\frac{1}{2}}^j &= (u_k)_{i+1}^j \begin{cases} (\rho_k \alpha_k u_k r)_{i+\frac{1}{2}}^j \rightarrow \text{para}(u_k)_{i+1}^j > 0 \\ (\rho_k \alpha_k u_k r)_{i+\frac{3}{2}}^j \rightarrow \text{para}(u_k)_{i+1}^j < 0 \end{cases} \\
 - (u_k)_i^j &\begin{cases} (\rho_k \alpha_k u_k r)_{i-\frac{1}{2}}^j \rightarrow \text{para}(u_k)_i^j > 0 \\ (\rho_k \alpha_k u_k r)_{i+\frac{1}{2}}^j \rightarrow \text{para}(u_k)_i^j < 0 \end{cases} \quad (3.31)
 \end{aligned}$$

$${}^n \langle (\rho_k \alpha_k v_k r) u_k \rangle_i^{j+\frac{1}{2}} = (u_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} \begin{cases} (\rho_k \alpha_k v_k r)_i^{j+\frac{1}{2}} \rightarrow \text{para}(u_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} > 0 \\ (\rho_k \alpha_k v_k r)_{i+1}^{j+\frac{1}{2}} \rightarrow \text{para}(u_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} < 0 \end{cases}$$

$$-(u_k)_{i-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} \begin{cases} (\rho_k \alpha_k v_k r)_{i-1}^{j+\frac{1}{2}} \rightarrow \text{para}(u_k)_{i-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} > 0 \\ (\rho_k \alpha_k v_k r)_i^{j+\frac{1}{2}} \rightarrow \text{para}(u_k)_{i-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} < 0 \end{cases} \quad (3.32)$$

3.4 - Técnica de solução

3.4.1 - Detalhes do procedimento iterativo

Para resolver as equações discretizadas em diferenças finitas utiliza-se procedimento iterativo. As equações de conservação da quantidade de movimento, Eqs. (3.17-3.20), são expressas em forma matricial como segue

$${}^n \begin{pmatrix} \delta t \beta_r + \alpha_g \rho_g & -\delta t \beta_r \\ -\delta t \beta_r & \delta t \beta_r + \alpha_s \rho_s \end{pmatrix} {}^{n+1} \begin{pmatrix} \bar{u}_g \\ \bar{u}_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} {}^n \left(\overline{\alpha_g \rho_g u_g} \right) - \frac{\delta t}{\delta r} {}^{n+1} (P_{i+1}^j - P_i^j) \\ {}^n \left(\overline{\alpha_s \rho_s u_s} \right) - \frac{\delta t}{\delta r} {}^{n+1} G((\alpha_g)_{i+1}^j - (\alpha_g)_i^j) \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

$${}^n \begin{pmatrix} \delta t \beta_z + \alpha_g \rho_g & -\delta t \beta_z \\ -\delta t \beta_z & \delta t \beta_z + \alpha_s \rho_s \end{pmatrix} {}^{n+1} \begin{pmatrix} \bar{v}_g \\ \bar{v}_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} {}^n \left(\overline{\alpha_g \rho_g v_g} \right) - \frac{\delta t}{\delta z} {}^{n+1} (P_i^{j+1} - P_i^j) \\ {}^n \left(\overline{\alpha_s \rho_s v_s} \right) - \frac{\delta t}{\delta z} {}^{n+1} G((\alpha_g)_i^{j+1} - (\alpha_g)_i^j) \end{pmatrix} \quad (3.34)$$

A equação de continuidade para a fase gasosa, Eq. (3.13), pode ser escrita como

$$D_i^j = -{}^{n+1} (\rho_g \alpha_g)_i^j + {}^n (\rho_g \alpha_g)_i^j - \frac{\delta t}{r_i \delta r} {}^{n+1} \langle (\rho_g \alpha_g r) u_g \rangle_i^j - \frac{\delta t}{\delta z} {}^{n+1} \langle (\rho_g \alpha_g) v_g \rangle_i^j \quad (3.35)$$

onde D_i^j é o resíduo da equação de conservação da massa da fase gasosa, o qual deve ser igual a zero para que haja convergência absoluta. Para resolver as equações em diferenças finitas a pressão em cada célula computacional é corrigida iterativamente até que D_i^j atinja o critério de convergência. O processo iterativo prossegue até que o critério de convergência seja atingido em todas as células computacionais simultaneamente.

Os detalhes do procedimento iterativo são os seguintes:

1. São calculadas as quantidades representadas por linhas usando as Eqs. (3.21-3.24).
2. Calcula-se os coeficientes de arrasto usando as Eqs. (3.8-3.11).
3. Estima-se as velocidades num nível de tempo $n+1$ usando as Eqs. (3.33) e (3.34).
4. Calcula-se o coeficiente η_i^j , de maneira aproximada, pela equação

$$\frac{1}{\eta_i^j} = \frac{\partial D_i^j}{\partial P_i^j} = \frac{\alpha_g}{(C_i^j)^2} + \frac{(\delta t)^2}{r_i (\delta r)^2} \left(r_{i+\frac{1}{2}} (\alpha_g)_{i+\frac{1}{2}}^j + r_{i-\frac{1}{2}} (\alpha_g)_{i-\frac{1}{2}}^j \right) + \frac{(\delta t)^2}{(\delta z)^2} \left((\alpha_g)_i^{j+\frac{1}{2}} + (\alpha_g)_i^{j-\frac{1}{2}} \right) \quad (3.36)$$

onde C_i^j é a velocidade do som no ar.

O coeficiente η_i^j representa as derivadas do resíduo D_i^j com respeito a pressão e é obtido analiticamente a partir das equações de conservação da quantidade de movimento como mostrado no Apêndice II.

5. O valor da pressão é corrigido iterativamente de acordo com o procedimento descrito na Seção 3.4.2. A correção da pressão é efetuada em cada célula computacional até que seja atingido o critério de convergência ou o número de iterações seja maior que um número de iterações interinas permissível. Se não foi atingido o critério de convergência em alguma das células computacionais, o ciclo é repetido. O número de tais ciclos de cálculo é restringido pelo número externo de iterações.

3.4.2 - Procedimento para o cálculo iterativo da pressão em uma célula computacional

A seguir apresenta-se os passos do processo de cálculo iterativo da pressão para uma célula computacional.

- a) Calcula-se D_i^j utilizando a Eq. (3.35). Se $|D_i^j| < \delta_g$, avança-se para o passo e).
- b) Se $|D_i^j| > \delta_g$, a pressão na célula precisa ser ajustada.

O ajuste inicial da pressão* é efetuado usando o método de Newton-Raphson

$${}^{m+1}(P_g)_i^j = {}^m(P_g)_i^j - \omega \cdot \eta_i^j \cdot D_i^j \quad (3.37)$$

onde ω é um parâmetro de relaxação. O método de Newton-Raphson é utilizado até que o resíduo D_i^j mude de sinal. Em seguida efetua-se a correção da pressão usando o método da secante, Fig. 3.7, onde

$$\eta_i^j = \frac{(P_g)_1 - (P_g)_2}{D_1 - D_2} \quad (3.38)$$

As demais correções da pressão são realizadas usando o método constringido das duas secantes ilustrado na Fig. 3.8. Segundo este método, dados os três pontos 1, 2, e 3 dos quais 1 e 2 englobam a pressão desejada e 3 fica entre eles, as pressões P_A e P_B são determinadas por extrapolação e interpolação linear, respectivamente. O novo valor estimado da pressão no nível de tempo avançado é calculado como

$${}^{m+1}(P_g)_i^j = \frac{1}{2}(P_A + P_B) \quad (3.39)$$

* Os índices m e $m+1$ na Eq. (3.37) representam os valores calculados nos níveis de tempo t e $t+\Delta t$ respectivamente. Durante a primeira iteração o valor da pressão em m é o valor inicial da pressão segundo as condições iniciais dadas.

Se a pressão P_A fica fora do intervalo entre P_1 e P_3 , assume-se

$$P_A = \frac{1}{2}(P_1 + P_3) \quad (3.40)$$

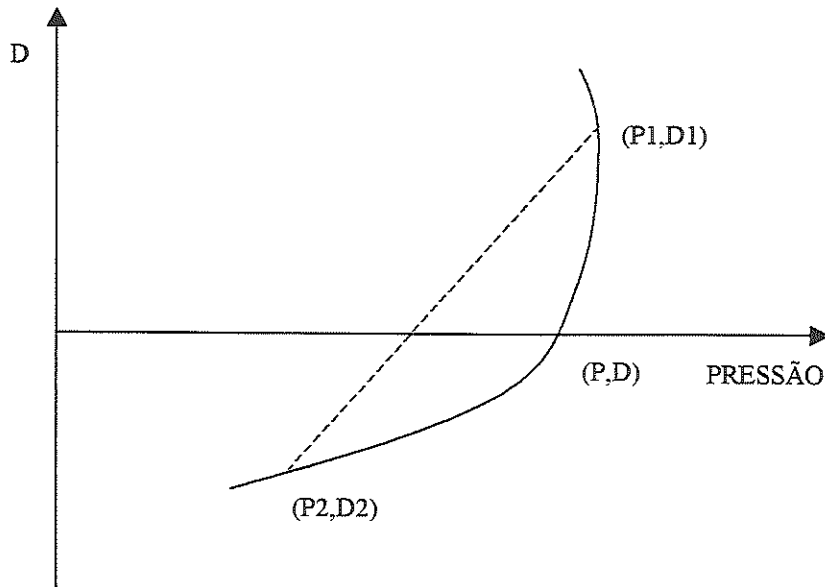


Figura 3.7. Método da Secante para à correção da pressão.

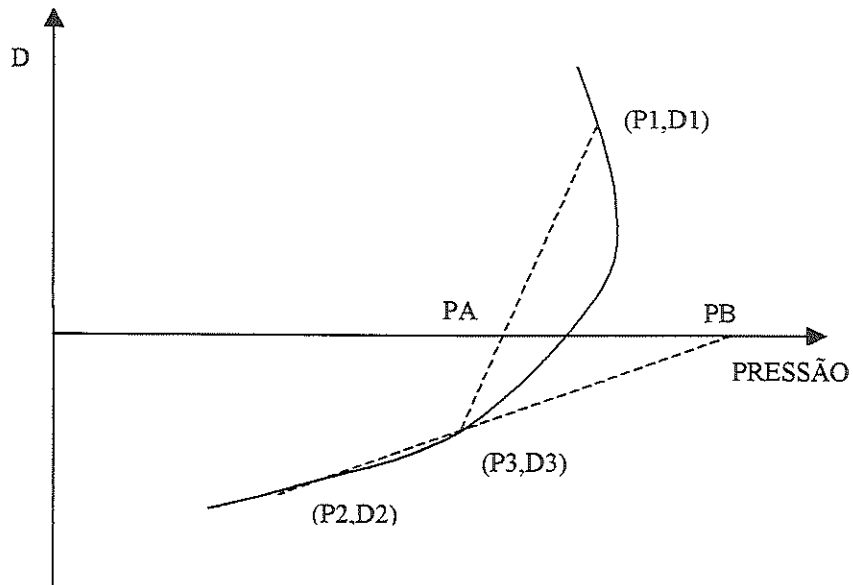


Figura 3.8. Método constringido das duas secantes para à correção da pressão.

Depois de estimar o valor da pressão ${}^{m+1}(P_g)_i^j$, o ponto 2 é descartado e os pontos 1 e 3 são retidos como os limites melhorados para a nova estimativa da pressão.

- c) Calcula-se as velocidades utilizando as equações (3.33) e (3.34).
- d) Calcula-se os fluxos de massa de ambas as fases.
- e) A equação da continuidade do sólido é resolvida para calcular α_s .
- f) Calcula-se o valor de α_g da equação $\alpha_g + \alpha_s = 1$.
- g) Se $|D_i^j| > \delta_g$ retorna-se ao passo a).

3.5 - Condições iniciais e de contorno

Para obter um problema matematicamente bem posto é necessário formular corretamente as condições iniciais e de contorno. A seguir serão abordados alguns dos aspectos referentes ao tratamento e estabelecimento destas condições

O sistema a ser modelado neste estudo é um leito fluidizado circulante. Um leito circulante é um sistema transporte-reator composto por quatro partes principais. Estas são o tubo ascendente (riser), o ciclone separador, o tubo descendente (standpipe) e a seção de alimentação. O tubo ascendente é o núcleo do leito circulante pois nele acontece a maioria das reações químicas do processo industrial executado. No caso de uma instalação de geração de energia elétrica, no tubo ascendente ocorre a maioria das reações de combustão do carvão e de remoção do enxofre. Um diagrama esquemático de um leito circulante é mostrado na Fig. 3.9, DING (1990).

Neste trabalho estuda-se a modelagem numérica de um escoamento gás-sólido no tubo ascendente de um leito circulante. Portanto no domínio espacial computacional tem-se três fronteiras definidas pelas paredes do tubo ascendente e pelas seções de entrada e saída do escoamento respectivamente.

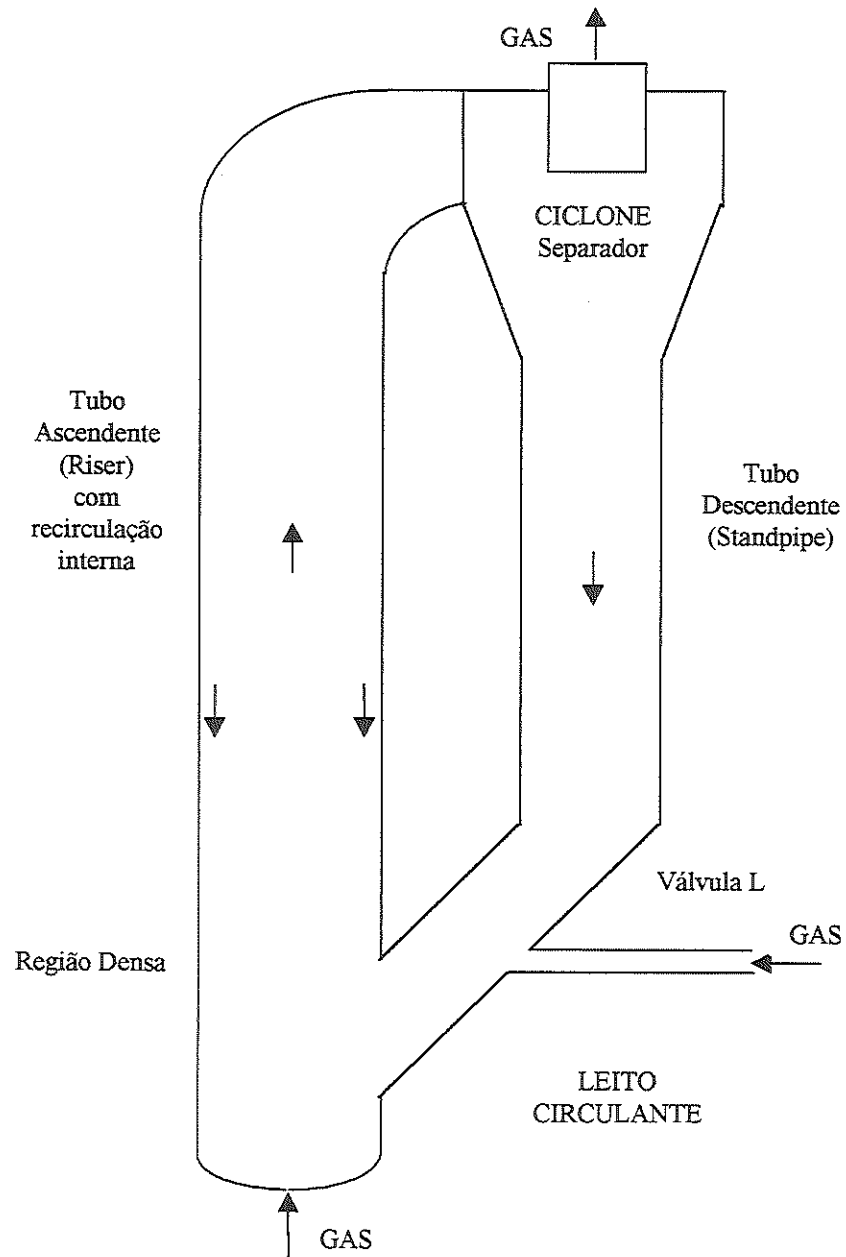


Figura 3.9. Esquema de um leito circulante, DING (1990).

3.5.1 - Condições iniciais

Como estado inicial é considerado o tubo ascendente sem sólidos, à pressão atmosférica e à temperatura ambiente ($P = 101.325 \text{ kPa}$ e $T = 25 \text{ }^\circ\text{C}$). Em caso de variação destas condições iniciais serão especificadas as novas condições de acordo com o processo modelado.

3.5.2 - Análise das características do escoamento

O método das características é um método numérico clássico utilizado para resolver sistemas de EDP hiperbólicos com duas variáveis independentes que descrevem escoamentos monofásicos compressíveis. Ao longo das linhas características o sistema de EDP reduz-se à um sistema de EDO que pode ser integrado facilmente para obter a solução desejada, HOFFMAN & CHIANG (1993). Uma exposição do método das características é apresentada em VON MISES (1958).

GIDASPOW (1994) apresenta uma explanação detalhada da aplicação da análise das características à escoamentos bifásicos gás-sólidos. Essencialmente aplica-se a análise das características por duas razões. A primeira, para determinar se o sistema de EDP é estável e portanto verificar se o problema é bem posto. A segunda, para prever onde devem ser prescritas as condições de contorno para um problema bem posto.

Através da análise das características calcula-se as direções características de propagação do gás e do sólido respectivamente. TSUO & GIDASPOW (1990) realizaram esse cálculo examinando o caso de um escoamento gás-sólidos invíscido unidimensional. Foram obtidas as seguintes direções características

$$\lambda_{1,2} = v_g \pm \sqrt{\frac{C^2}{\alpha_g}} \quad (3.41)$$

$$\lambda_{3,4} = v_s \pm \sqrt{\frac{G}{\rho_s}} \quad (3.42)$$

onde C é a velocidade do som no gás calculada à temperatura constante como

$$C = \sqrt{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho_g}\right)_T} \quad (3.43)$$

Esta análise não é aplicável aos escoamentos viscosos, embora se saiba que os termos viscosos são uma correção já que a dissipação viscosa em ambas as fases é muito menor que a dissipação devido ao arrasto entre as partículas e a fase gasosa. Portanto a análise invíscida provê uma guia útil para determinar onde devem ser prescritas as condições de contorno, TSUO & GIDASPOW (1990).

No presente trabalho utiliza-se esta metodologia para prescrever as condições de contorno na entrada e saída do leito para ambas as fases.

3.5.3 - Condições de contorno

Primeiramente são estabelecidas as condições de contorno considerando os aspectos físicos do escoamento e levando em consideração a análise das direções características. Posteriormente define-se a utilização destas condições de contorno no programa computacional. Analisa-se um escoamento bifásico gás-sólido bidimensional.

3.5.3.1 - Condições de contorno na parede

Para o gás as velocidades na parede são nulas. Esta condição denomina-se condição de não deslizamento na parede.

$$u_g = v_g = 0 \quad (3.44)$$

Para as partículas sólidas a velocidade na direção tangencial na parede oscila entre a condição de não deslizamento e a condição de deslizamento livre. Pode-se especular que as partículas finas deslizam pela parede e as partículas mais grosseiras rolam ao longo da parede. Segundo SOO (1983) apud TSUO & GIDASPOW (1990), essa condição de contorno modela-se como

$$v_s|_w = L_p \left(\frac{\partial v_s}{\partial y} \right) \Big|_w \quad (3.45)$$

onde L_p é o caminho livre médio das partículas calculado como

$$L_p = \left(\frac{\pi}{6\alpha_s} \right)^{\frac{1}{3}} d_p \quad (3.46)$$

Já DING & GIDASPOW (1990), baseados no modelo de ELDIGHITY *et al.* (1977) apud DING (1990), consideram que o diâmetro da partícula é usualmente maior que o comprimento representativo da rugosidade da superfície da parede, e portanto as partículas deslizam parcialmente na parede. O modelo utilizado por estes autores expressa-se como

$$v_s|_w = -\lambda_p \left(\frac{\partial v_s}{\partial y} \right) \Big|_w \quad (3.47)$$

onde λ_p é o parâmetro de deslizamento que representa a distância média entre as partículas, e calcula-se como

$$\lambda_p = \frac{1}{(\alpha_s)^{1/3}} d_p \quad (3.48)$$

Nas Eqs. (3.45) e (3.47) y é a direção normal à parede.

3.5.3.2 - Condições de contorno de simetria

A condição de contorno de simetria denomina-se condição de deslizamento livre na parede e modela-se de igual maneira para ambas as fases. Neste caso as componentes normais da velocidade para ambas as fases são nulas e as componentes tangenciais da velocidade para ambas as fases possuem gradientes nulos na direção normal à superfície, ou seja

$$u_g|_w = u_s|_w = 0 \tag{3.49}$$

$$\left(\frac{\partial v_g}{\partial y}\right)|_w = \left(\frac{\partial v_s}{\partial y}\right)|_w = 0 \tag{3.50}$$

No programa computacional a condição de simetria simula-se como uma parede fictícia no centro do tubo ascendente representando a simetria axial do escoamento.

3.5.3.3 - Condições de contorno na entrada do tubo ascendente (TSUO, 1989)

O número de condições de contorno necessárias em qualquer fronteira é igual ao número de direções características apontando para o domínio de interesse.

A Eq. (3.41) mostra que apenas uma direção característica aponta para dentro do domínio computacional. Portanto a especificação da velocidade mássica constante do gás é suficiente

$$\rho_g \alpha_g v_g = \text{constante} \tag{3.51}$$

Embora a Eq. (3.42) mostre que a direção característica para o sólido é similar à do gás, o valor G/ρ_s é pequeno. A raiz quadrada deste termo é da ordem de 1 m/s para escoamentos densos com uma fração volumétrica α_s aproximadamente igual a 0,6. Para escoamentos dispersos o termo torna-se muito pequeno. Assim para o sólido as duas direções características são positivas e apontam para dentro do domínio computacional. Para valores pequenos de G ambas as direções características são positivas. As partículas movem-se com sua própria velocidade. Então como condições de contorno na entrada para a fase sólida especifica-se a velocidade axial do sólido v_s e a sua fração volumétrica α_s constantes, ou seja

$$v_s = \text{constante} \quad \text{e} \quad \alpha_s = \text{constante} \quad (3.52)$$

As especificações acima baseiam-se na análise unidimensional. Para o caso bidimensional assume-se na entrada um escoamento pistonado unidimensional.

3.5.3.4 - Condições de contorno na saída do tubo ascendente (TSUO, 1989)

Na seção de saída do tubo ascendente todas as direções características do sólido apontam para fora do domínio computacional. Portanto, não é necessário especificar qualquer condição de contorno para a fase sólida. Porém, a hidrodinâmica de um leito circulante é muito mais complexa, e na saída do leito pode existir um escoamento inverso das partículas sólidas formando aglomerados descendentes. Neste caso as direções características apontam para o domínio computacional. Então, há necessidade de especificação de condições de contorno para o sólido na saída do leito.

Neste estudo opta-se por modelar a geometria da saída do leito como corresponde às condições experimentais e à prática industrial. A forma geométrica adotada é mostrada esquematicamente na Fig. 3.10. Esta modificação do domínio computacional introduz a condição de contorno válida para o sólido na região dos aglomerados descendentes, quando estes existem. Assim a componente normal da velocidade do sólido é nula. A desvantagem de este procedimento é que não permite utilizar a condição de simetria axial no tubo ascendente, provocando que a modelação numérica seja desenvolvida em coordenadas cartesianas o que introduz mais aproximações na modelação efetuada.

Como condição de contorno na saída do tubo ascendente aplica-se a condição de continuidade para todas as variáveis dependentes do escoamento. A condição de continuidade expressa-se como

$$\frac{\partial f}{\partial z} = 0 \quad (3.53)$$

onde f pode ser a pressão, P , a fração de vazio, α_g , ou as componentes normais das velocidades de ambas as fases, u_g e u_s , respectivamente. As componentes tangenciais das velocidades de ambas as fases v_g e v_s são nulas.

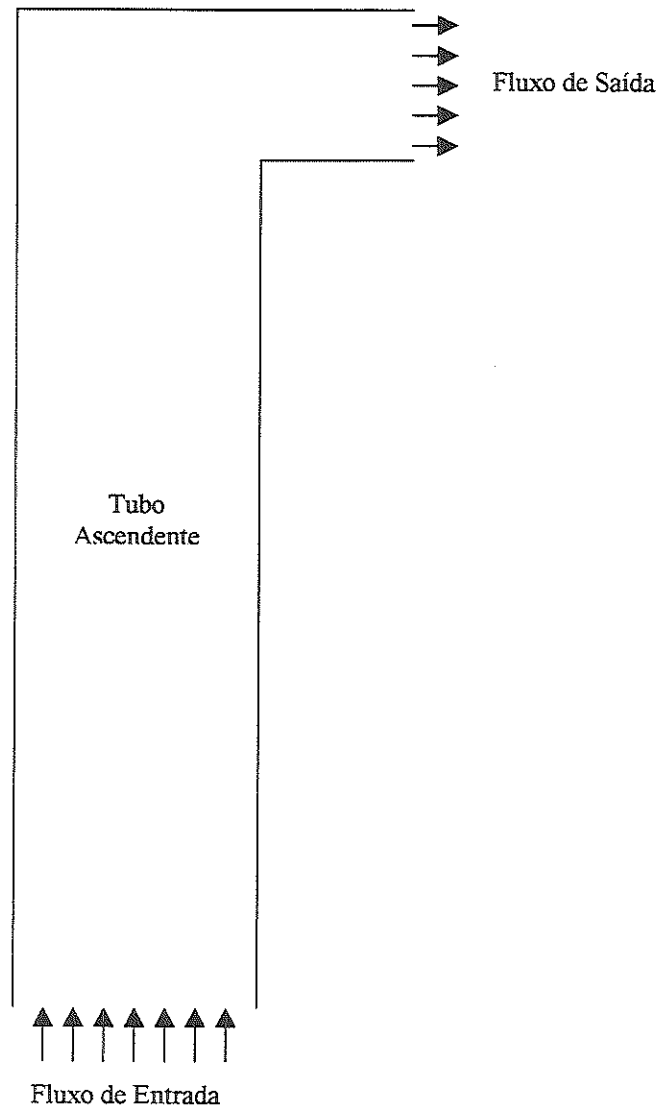


Figura 3.10. Diagrama esquemático do domínio computacional.

No Apêndice II, Fig. B3.1, mostra-se as direções características para ambas as fases tanto na entrada como na saída do tubo ascendente. Mostra-se como as direções características mudam de direção quando existem aglomerados descendentes de partículas sólidas na saída do tubo ascendente.

3.5.4 - Prescrição das condições de contorno no programa computacional

No programa computacional as condições de contorno antes expostas são prescritas utilizando as células computacionais fictícias mostradas na Fig. 3.5 e apresentadas na seção 3.3.2.

Para representar a condição de contorno de simetria utiliza-se as células computacionais fictícias de número 2. Estas células representam a condição de contorno de deslizamento livre na parede modelada pelas Eqs. (3.49) e (3.50).

Na modelação da condição de contorno de não deslizamento utiliza-se as células computacionais fictícias representadas pelo número 3. Esta condição de contorno é modelada pelas Eqs. (3.44-3.48).

As condições de contorno na entrada do tubo ascendente são modeladas utilizando as células computacionais fictícias com os números 4 e 5, respectivamente. Neste caso as condições de contorno são prescritas segundo descrito na seção 3.5.3.3.

Para modelar a condição de contorno de continuidade, Eq. (3.53), na saída do tubo ascendente utiliza-se as células computacionais representadas pelos números 4 e 7, respectivamente.

CAPÍTULO 4 - Simulação Numérica de um Leito Circulante

4.1 - Introdução

Nesse trabalho desenvolve-se modelagem numérica do escoamento hidrodinâmico gás-sólido no tubo ascendente de um leito circulante. Tal estudo consiste em pesquisa inicial a ser aprofundada com vistas a investigação de aspectos problemáticos do escoamento. Entre estes aspectos pode-se mencionar a modelagem da pressão e viscosidade da fase sólida, o estabelecimento de condições de contorno exatas, e aspectos relacionados à estabilidade do escoamento e de procedimentos numéricos.

TSUO (1989) pesquisou três aspectos fundamentais de um leito circulante: o regime de formação de aglomerados no tubo ascendente, o regime de escoamento anular no tubo ascendente e a transferência de calor superficial no leito circulante. Estes estudos foram modelações numéricas de diferentes instalações experimentais.

Nesse trabalho pretende-se efetuar duas das modelações desenvolvidas por TSUO (1989) utilizando como base o código computacional MULTIFIX modificado, desenvolvido por SYAMLAL (1985), e usado por TSUO (1989). À diferença de TSUO (1989), utilizou-se os procedimentos VSSCG e VSSCS propostos por DING (1990) para calcular as tensões viscosas para ambas as fases, e foram utilizadas as Eqs. (3.47 e 3.48) para o cálculo da condição de contorno do sólido na parede.

4.2 – Simulações numéricas efetuadas

Simulações numéricas foram desenvolvidas para o tubo ascendente de seção circular de um leito circulante no regime de formação de aglomerados para as duas situações mostradas nas Fig. 4.1 e 4.2.

Os seguintes resultados são apresentados:

- Perfil de velocidade mássica de sólidos na saída da coluna em função do tempo de fluidização (Fig. 4.4).
- Diagramas vetoriais e perfis de velocidade axial do gás e dos sólidos na altura da coluna em função do tempo de fluidização (Figs. 4.5, 4.6, 4.8 e 4.9).
- Perfis de contorno de fração volumétrica de sólidos na coluna em função do tempo de fluidização (Fig. 4.7).

Os resultados são apresentados para tempos de fluidização a partir de 0,5 segundos, com incrementos de 0,5 segundos.

O conjunto desses resultados permite a observação de aspectos qualitativos e quantitativos do escoamento. Em vista da complexidade do processo e do modelo, e em vista do carácter inicial deste trabalho, a análise dos resultados que segue é voltada apenas para aspectos qualitativos.

Os resultados da simulação numérica do esquema representado na Fig. 4.1 em coordenadas cilíndricas apresentam as mesmas tendências daqueles apresentados por TSUO (1989). De fato, quando foi utilizada a condição de continuidade, Eq. (3.53), na saída do leito, depois de 3,0 segundos de tempo real de fluidização o campo de pressões atinge valores incorretos em todo o tubo ascendente provocando um escoamento inverso no leito. Posteriormente essa condição de contorno na saída do leito foi mudada, fixando-se o valor da pressão e utilizando-se a Eq. (3.53) para as demais variáveis. Nesse caso obteve-se resultados diferentes, com o escoamento inverso surgindo aos 16 segundos de fluidização.

Ambos os casos indicam que o modelo para o escoamento gás-sólidos num leito circulante considerando a formulação de Euler para ambas as fases e as hipóteses assumidas torna-se inadequado para a geometria representada na Fig. 4.1. TSUO (1989) chegou a essa mesma conclusão. Já no trabalho de TSUJI (1998), utilizando a formulação Euleriana-Lagrangiana para as fases gasosa e sólida respectivamente, foi possível simular o escoamento gás-sólidos num leito circulante usando a geometria representada na Fig. 4.1.

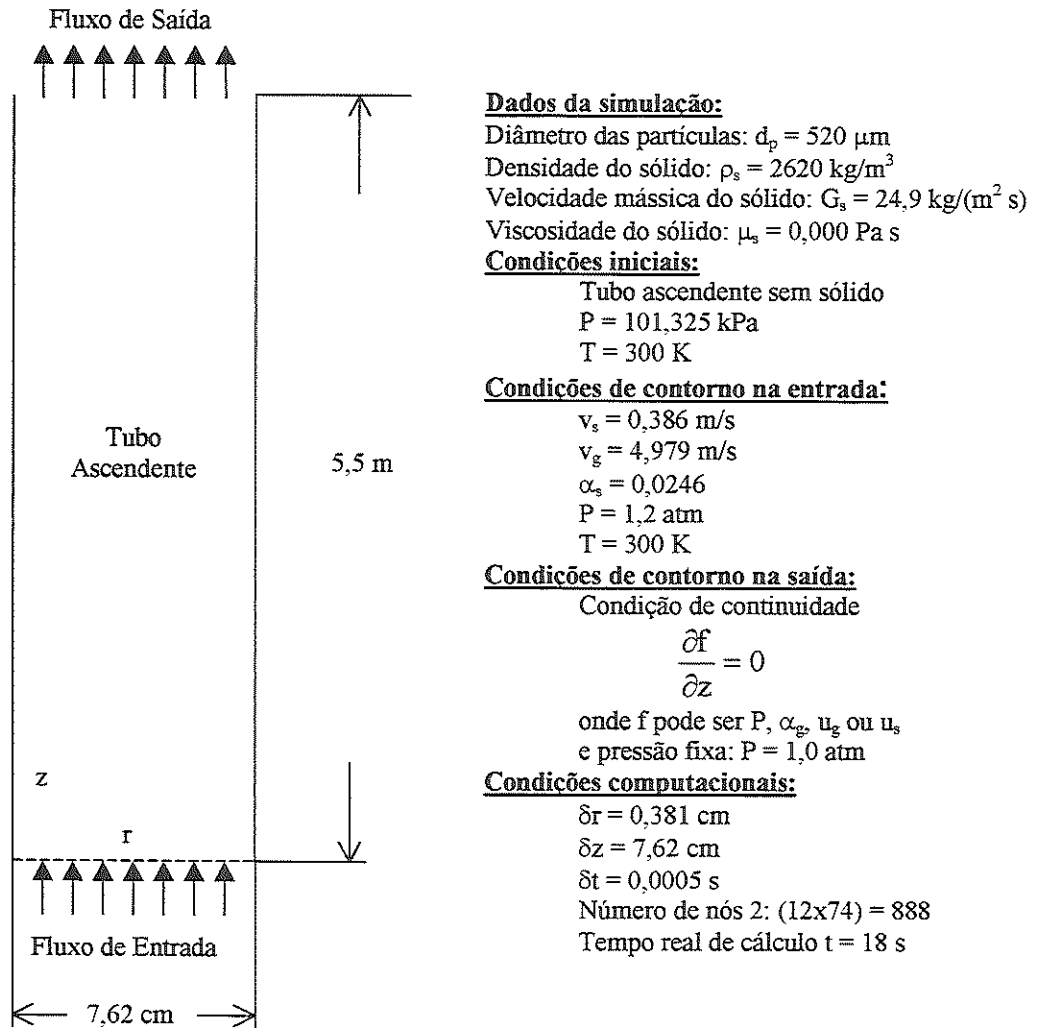


Figura 4.1. Primeira simulação numérica. TSUO (1989).

A simulação numérica do esquema representado na Fig. 4.2 apresentou várias dificuldades. Primeiramente, a exemplo do caso da Fig. 4.1, foi efetuada uma simulação em coordenadas cartesianas, com as condições de contorno descritas na Fig. 4.2. Neste caso, depois de 0,5 segundos de tempo real de fluidização o programa computacional divergiu. Mudou-se então, o sistema de coordenadas para coordenadas cilíndricas e considerou-se na saída do leito a pressão fixa igual à atmosférica, e a condição de continuidade para as demais variáveis do problema. Esta nova geometria é apresentada na Fig. 4.3. Todas as demais condições são as mesmas expostas na Fig. 4.2.

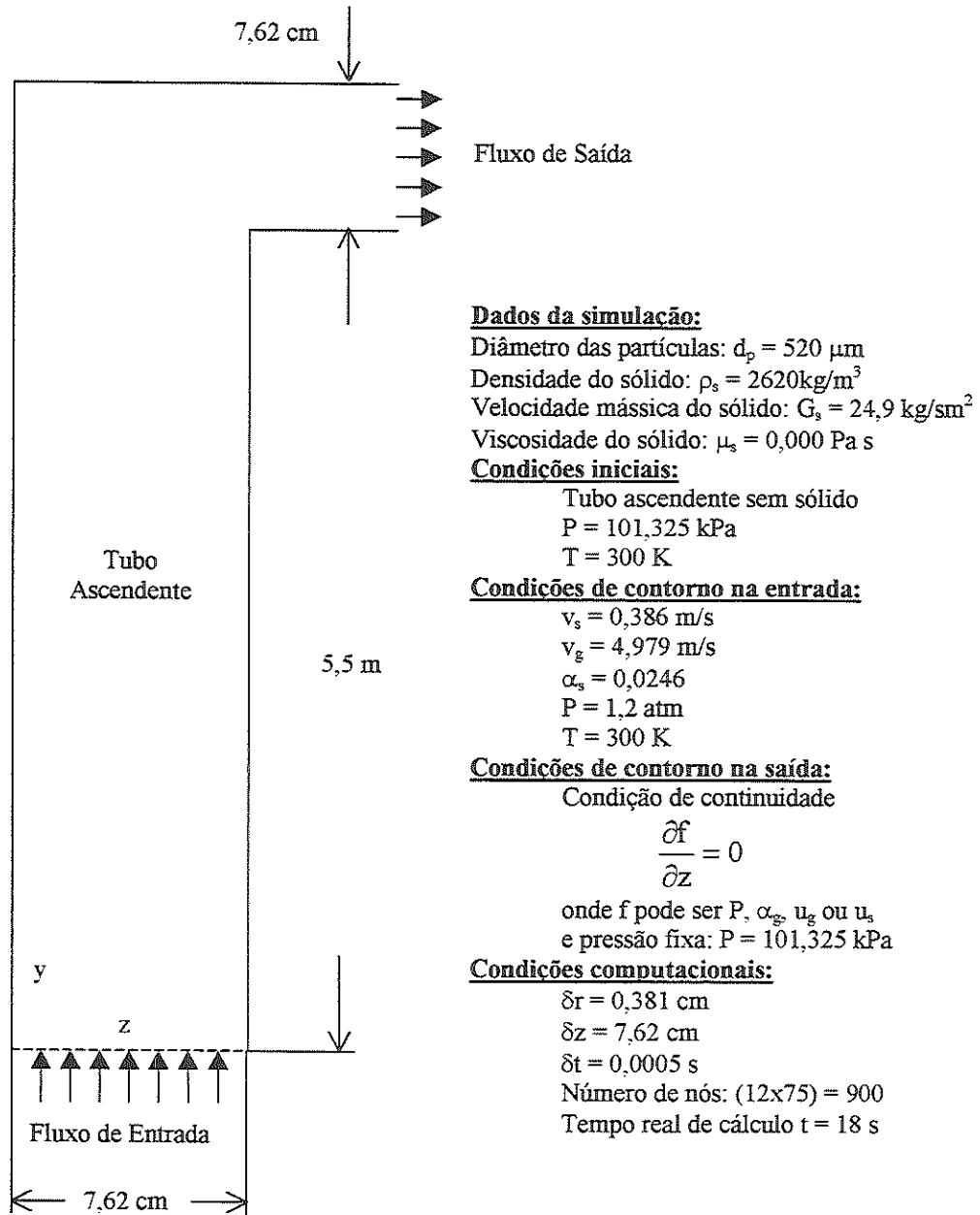


Figura 4.2. Segunda simulação numérica. TSUO (1989).

Simulando o tubo ascendente como mostra-se na Fig. 4.3 obteve-se convergência para até 6,5 segundos de tempo real de fluidização, posteriormente o procedimento de cálculo numérico divergiu. Esse melhor comportamento obtido com o sistema cilíndrico de coordenadas é, possivelmente, consequência da sua melhor adequação à geometria do problema.

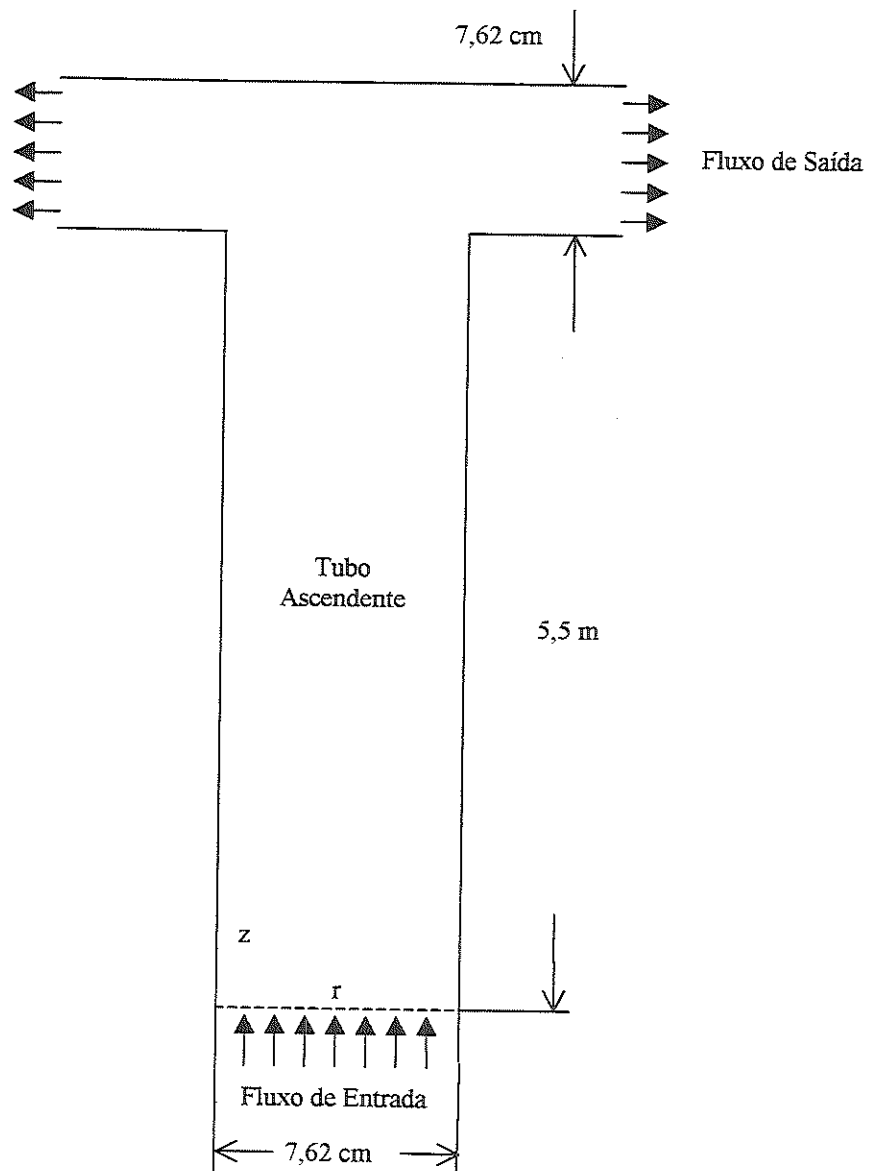


Figura 4.3. Nova geometria adotada para a segunda simulação numérica.

A seguir apresenta-se alguns dos resultados de simulação obtidos para a situação proposta na Fig. 4.3.

A Fig. 4.4 mostra a variação da velocidade mássica do sólido na saída do leito em função do tempo. Observa-se que após cerca de 2,0 segundos de fluidização os sólidos atingem o topo da coluna. A partir daí a velocidade mássica do sólido cresce e passa a flutuar no tempo, permanecendo, até os 6,0 segundos de fluidização, aquém do seu valor na entrada da coluna ($24,9 \text{ kg/m}^2\text{s}$). Até os 6,0 segundos de fluidização

o leito não havia atingido o estado estacionário de trabalho. Para o cálculo da velocidade mássica do sólido na saída do leito ($z = 5.309$ m) foi utilizada a Eq. (4.1):

$$G_s = \frac{2}{R^2} \int_0^R \rho_s \alpha_s v_s r dr \quad (4.1)$$

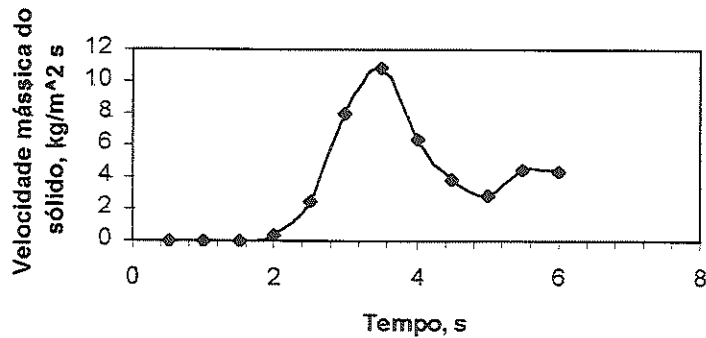


Figura 4.4. Velocidade mássica de saída do sólido em função do tempo.

As Figs. 4.5 e 4.6 mostram, respectivamente, os perfis de velocidade do gás e dos sólidos para vários intervalos de tempo em várias seções transversais do tubo ascendente. Apresenta-se a variação da velocidade somente no radio do leito e não em toda a seção transversal.

A Fig. 4.7 mostra os contornos de fração volumétrica de sólidos no tubo ascendente. Nessa figura, quanto menos intenso o tom de cinza maior a fração volumétrica de sólidos.

Como mostrado nas Figs. 4.5 e 4.6, após 0,5 segundos da fluidização o particulado alcança uma altura de cerca de 1,5 metros na coluna. A velocidade do gás abaixo dessa seção sofre uma redução devido à troca de momentum com o particulado sólido. Com o avanço do tempo de fluidização há uma maior penetração e espalhamento de sólidos na coluna. Esse comportamento é claramente visualizado nos contornos de fração volumétrica de sólidos mostrados na Fig. 4.7.

Aos 2,5 segundos de fluidização observa-se, nas Figs. 4.5 e 4.6, a formação de uma região na coluna caracterizada por velocidades de sólidos negativas, e velocidades de gás muito baixas ou negativas. Essa região aparece na Fig. 4.7 como um campo branco, indicando uma grande concentração de sólidos.

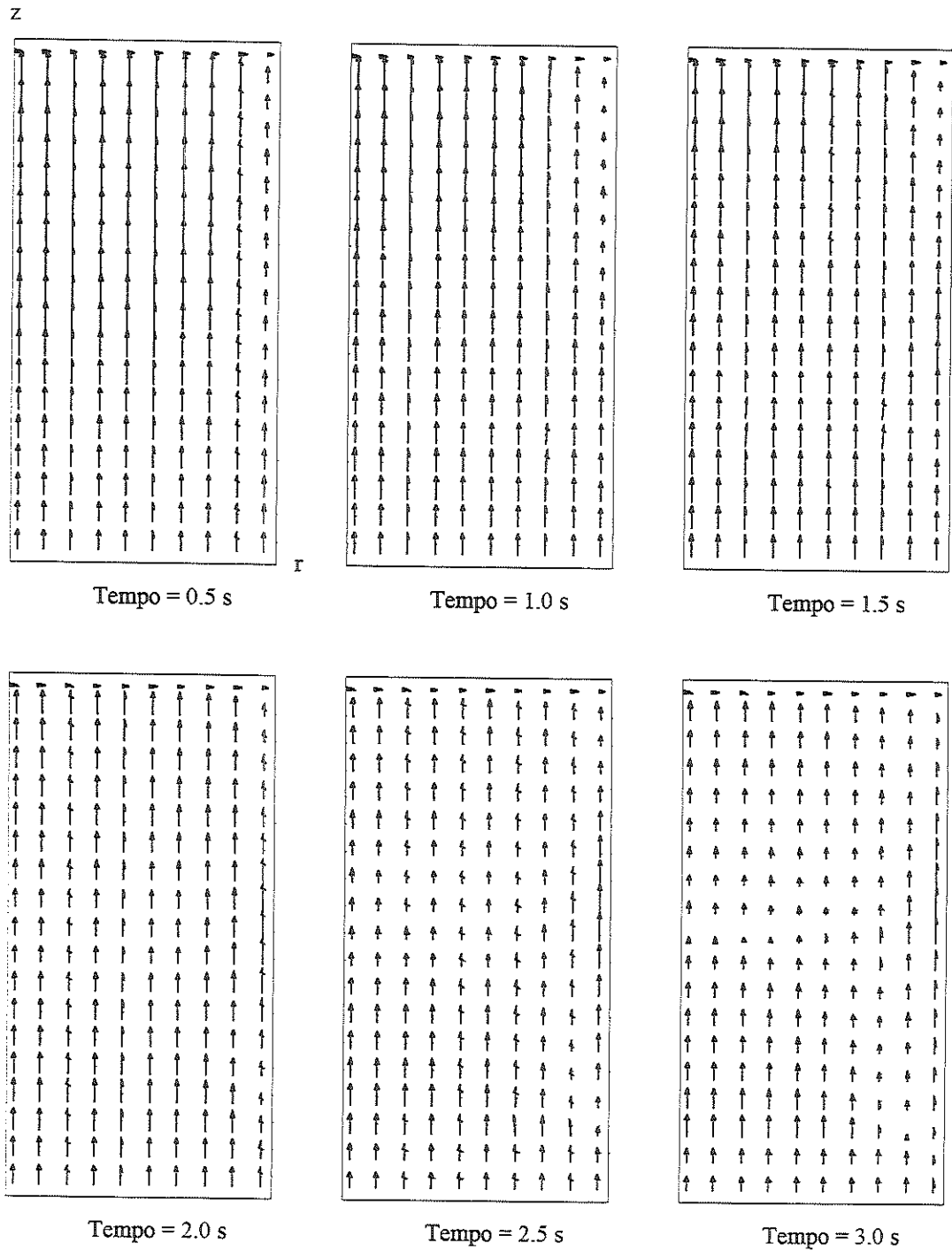
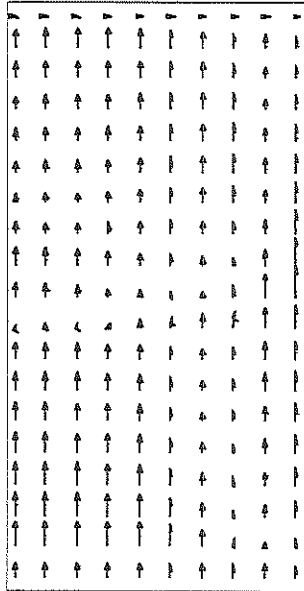
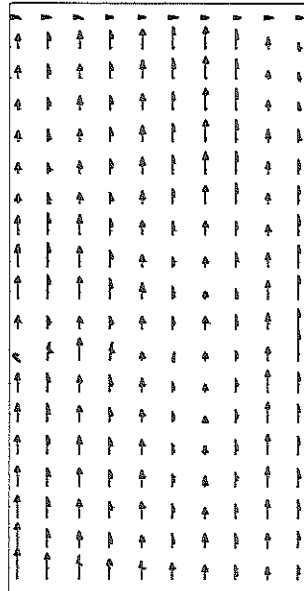


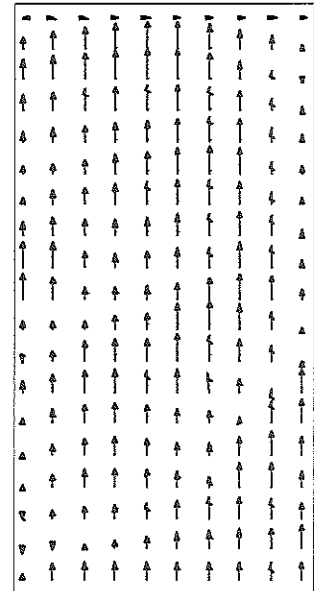
Figura 4.5. Perfis de velocidade do gás em função do tempo.



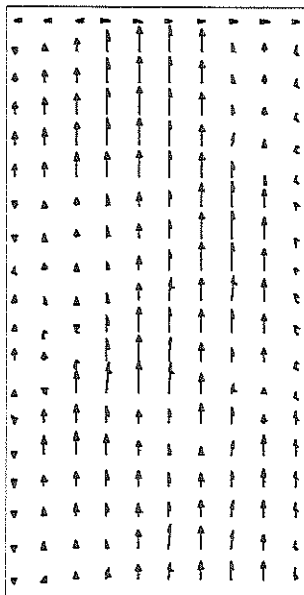
Tempo = 3.5 s



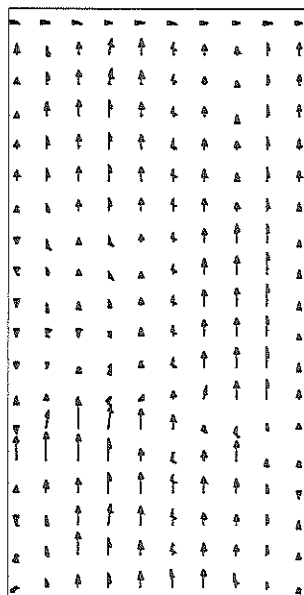
Tempo = 4.0 s



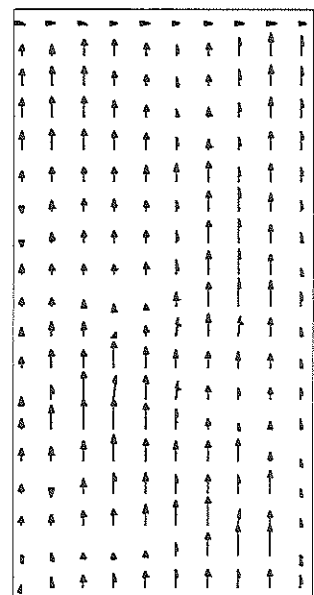
Tempo = 4.5 s



Tempo = 5.0 s



Tempo = 5.5 s



Tempo = 6.0 s

Figura 4.5 - continuação.

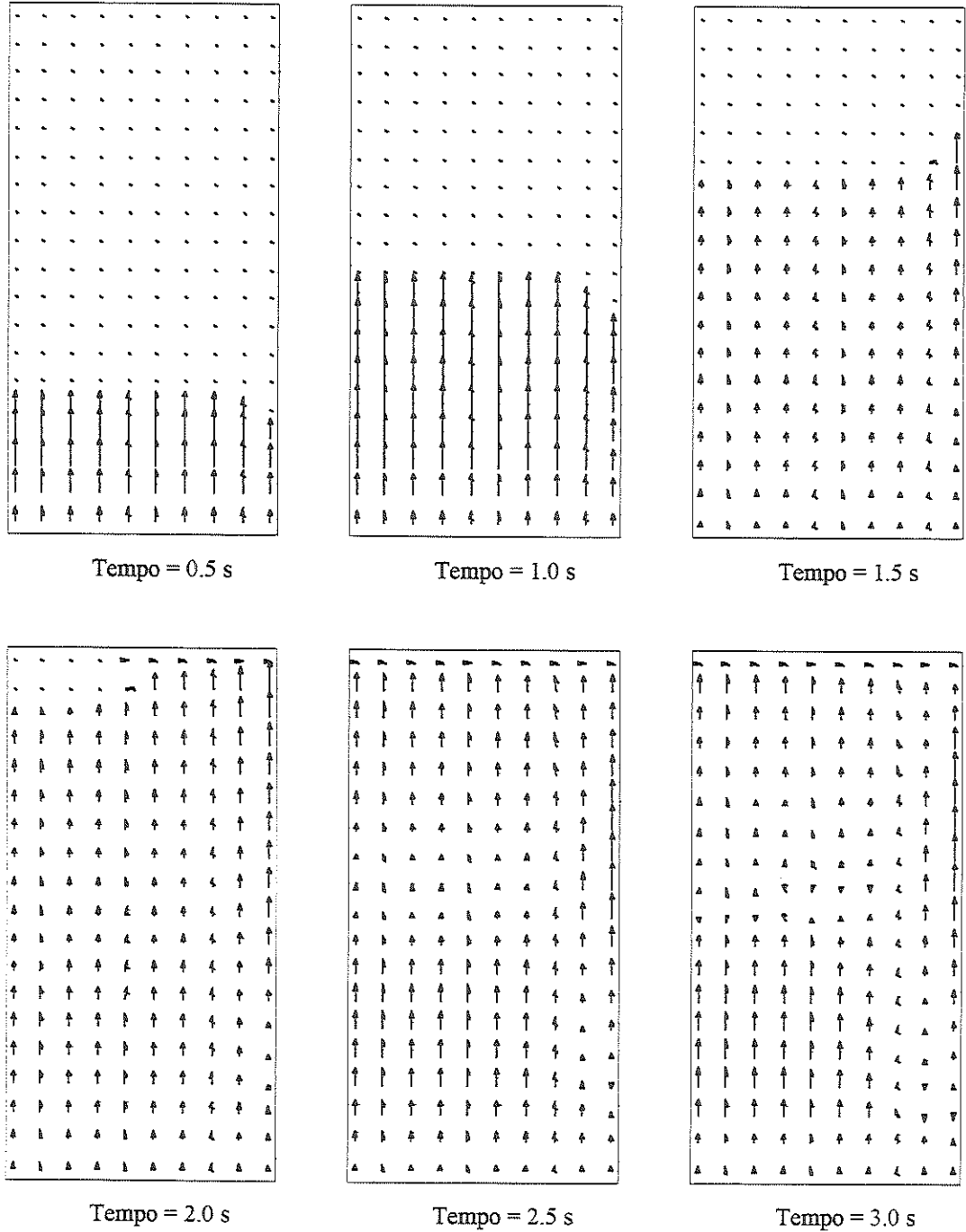
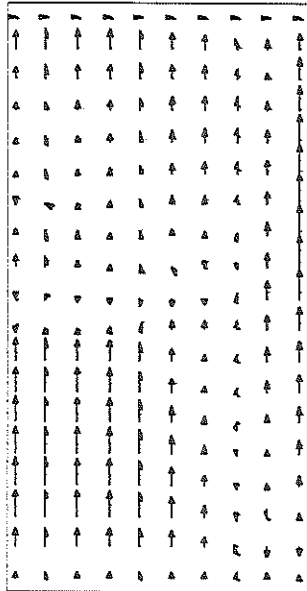
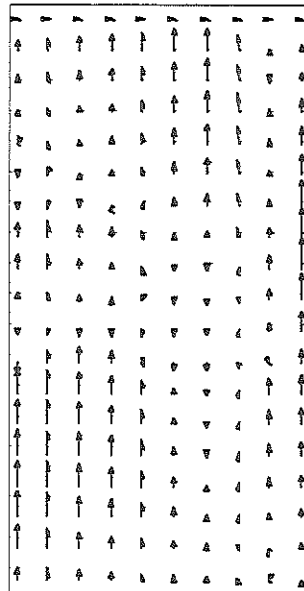


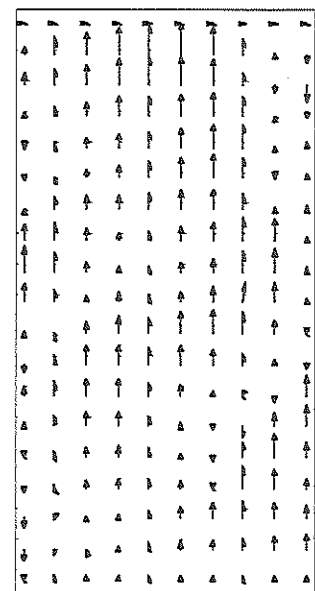
Figura 4.6. Perfis de velocidade da fase sólida em função do tempo.



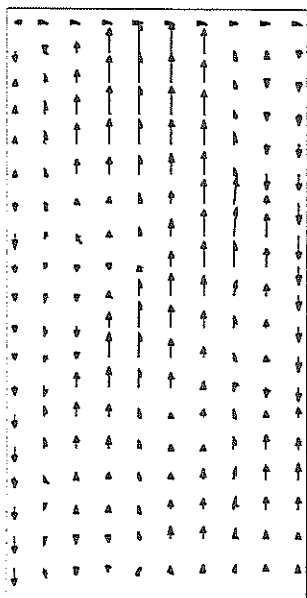
Tempo = 3.5 s



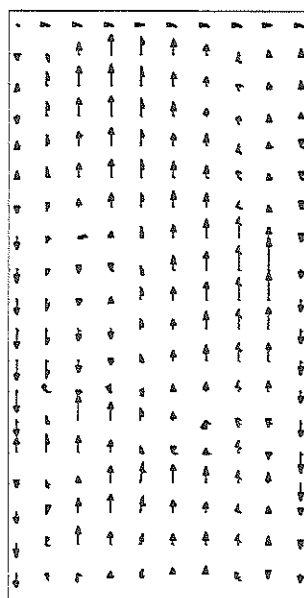
Tempo = 4.0 s



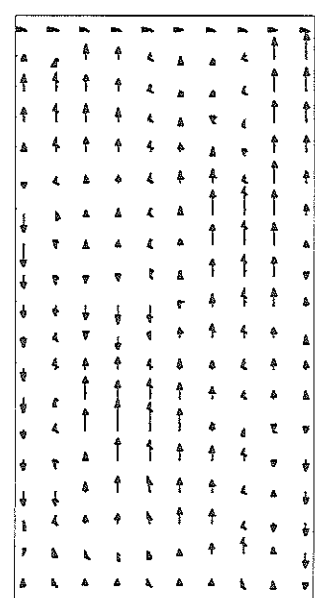
Tempo = 4.5 s



Tempo = 5.0 s



Tempo = 5.5 s



Tempo = 6.0 s

Figura 4.6 - continuação.

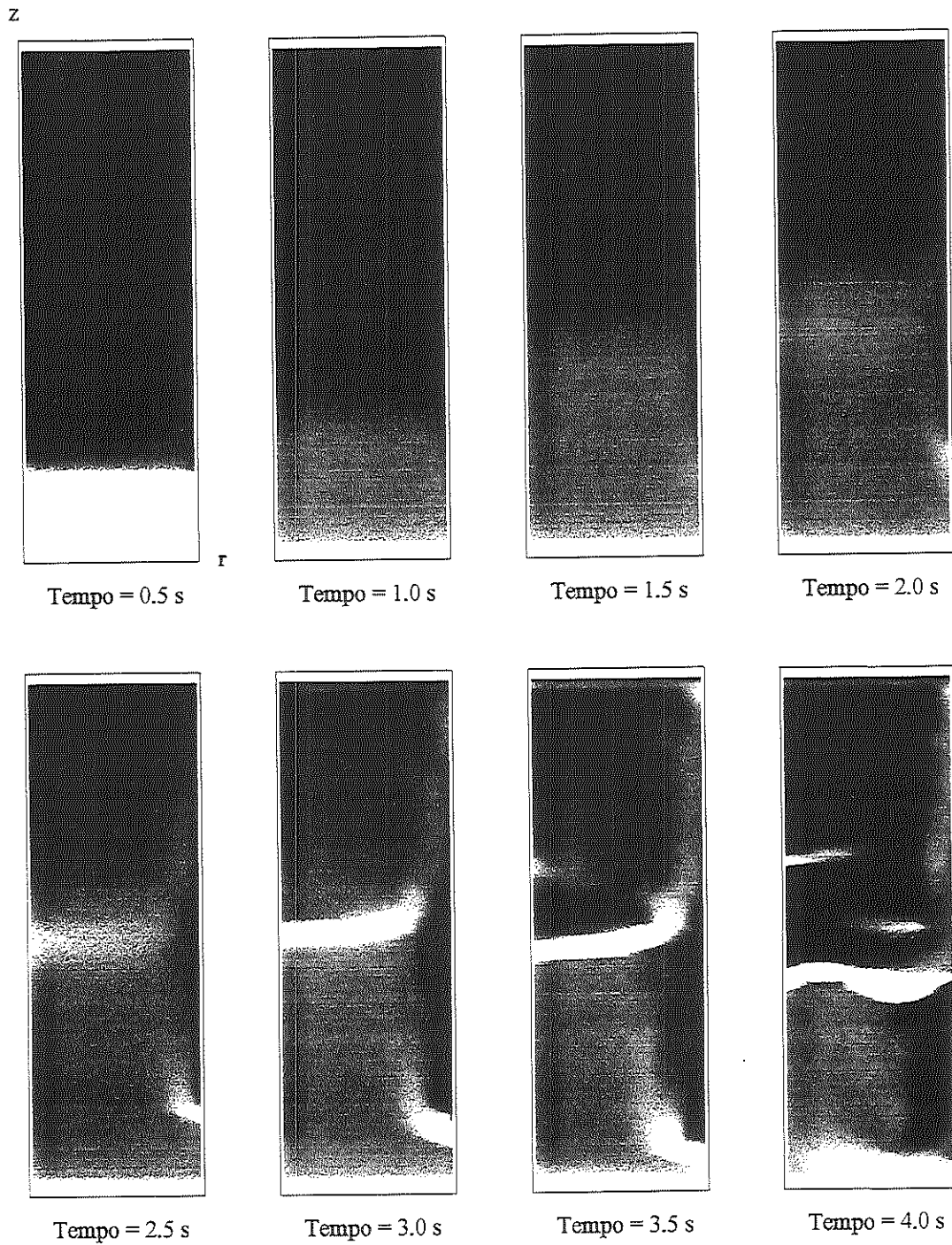


Figura 4.7. Perfis de contorno da fração volumétrica de sólidos em função do tempo.

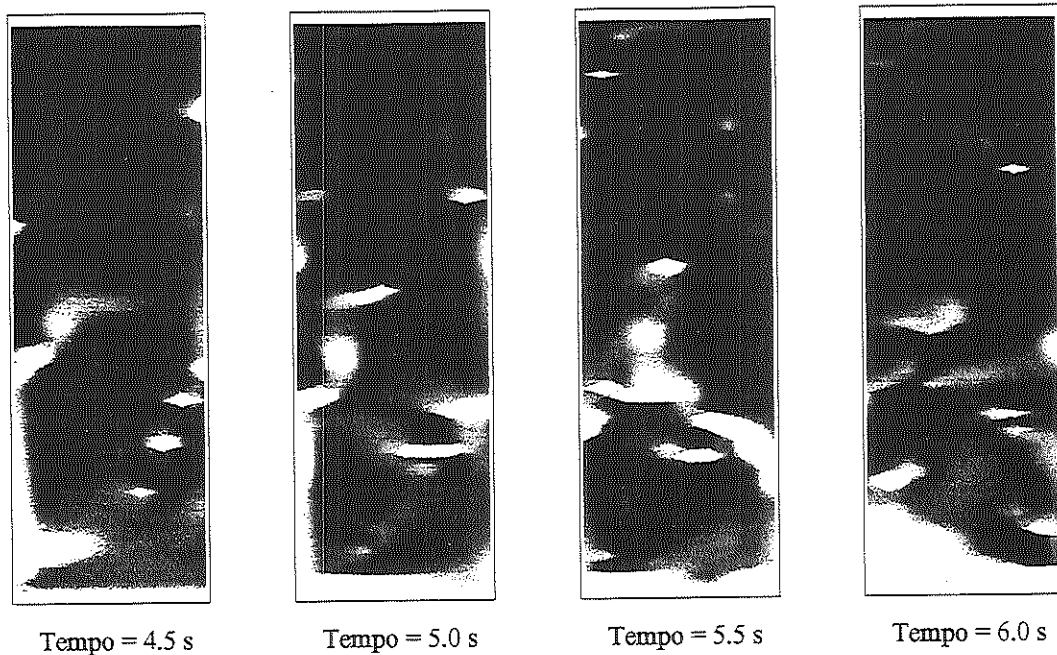


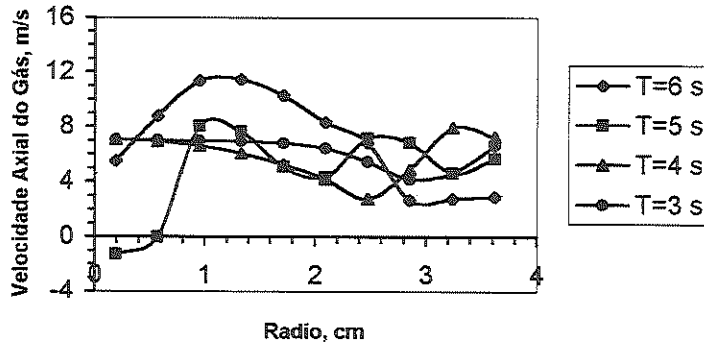
Figura 4.7 - continuação.

Essa formação caracteriza um aglomerado de particulado ou *cluster*. Com o avanço do tempo nota-se, na Fig. 4.7, que este aglomerado cresce em volume e move-se em escoamento descendente.

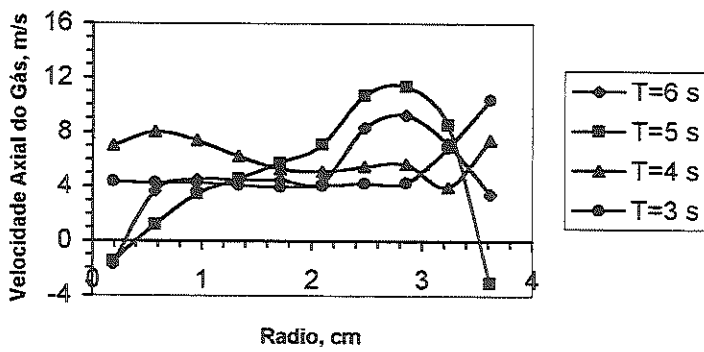
O escoamento na coluna torna-se progressivamente mais instável, caracterizando perfis de velocidade de gás e de sólidos bastante irregulares e flutuantes. Aglomerados são formados e dissipados, e movem-se na coluna em escoamentos ascendentes e descendentes.

As Figs. 4.8 e 4.9 representam os perfis de velocidades locais e instantâneas para as fases gasosa e sólida respectivamente, em determinadas seções transversais do leito. Observa-se que as curvas apresentam qualitativamente as mesmas tendências para uma mesma seção transversal, independentemente da fase analisada. Observa-se que não existe uma tendência de estabilização do escoamento em nenhuma das seções analisadas, incluindo a seção correspondente à zona de escoamento plenamente desenvolvido ($z = 5.3$ m). Esse escoamento instável também verifica-se nos resultados oferecidos por TSUO (1989), onde são apresentados perfis da concentração de sólidos como função do tempo mostrando a formação de aglomerados, e o carácter instável do escoamento.

Perfis da velocidade axial média local e instantânea da fase gasosa. Altura: 1.5 m



Perfis da velocidade axial média local e instantânea da fase gasosa. Altura: 3.4 m



Perfis da velocidade axial média local e instantânea da fase gasosa. Altura: 5.3 m

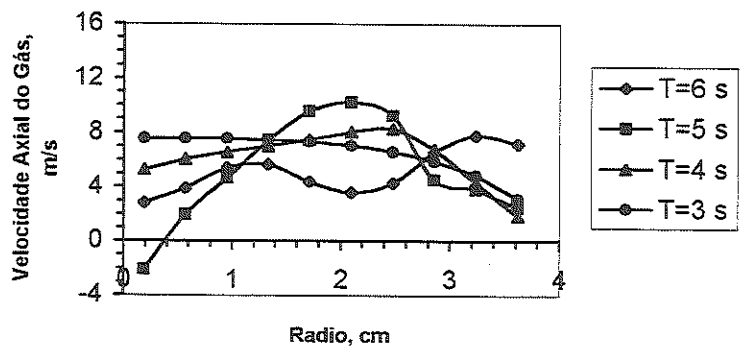
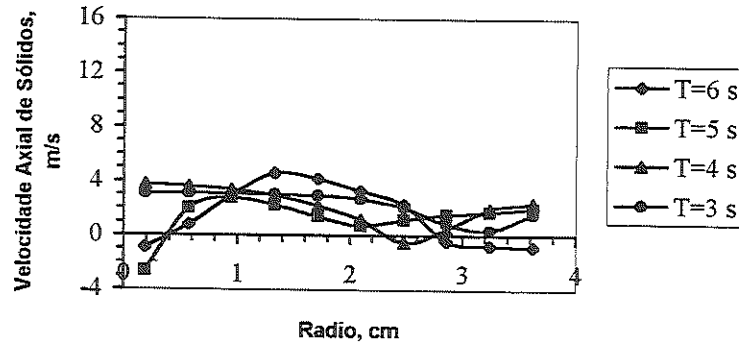
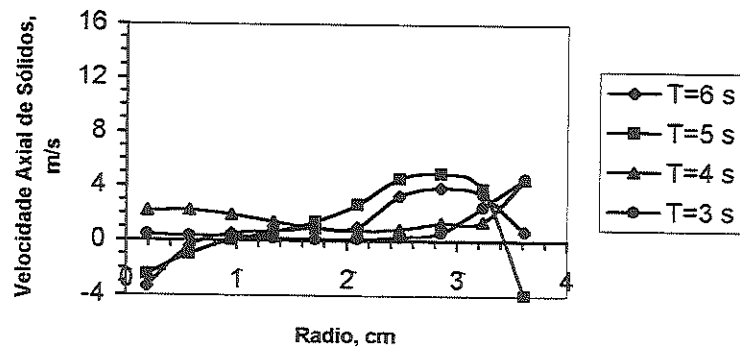


Figura 4.8. Perfis da velocidade axial média local instantânea da fase gasosa em várias secções do leito.

Perfis da velocidade axial média local instantânea da fase sólida. Altura: 1.5 m



Perfis da velocidade axial média local instantânea da fase sólida. Altura: 3.4 m



Perfis da velocidade axial média local instantânea da fase sólida. Altura: 5.3 m

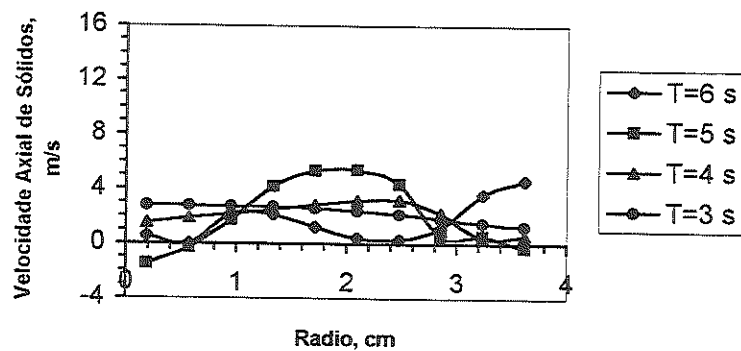


Figura 4.9. Perfis da velocidade axial média local instantânea da fase sólida em várias seções do leito.

CAPÍTULO 5 - Conclusões e Recomendações

5.1 - Considerações gerais

O objetivo principal do presente trabalho foi realizar um estudo inicial dos métodos de modelagem matemática apresentados na literatura para simular a hidrodinâmica dos escoamentos bifásicos gás-sólidos. Apresentou-se um estudo teórico do modelo das duas fases tradicionalmente utilizado na análise e modelagem de escoamentos bifásicos. Também efetivou-se o estudo de uma das metodologias numéricas usadas para resolver o modelo das duas fases.

Vários aspectos desses estudos merecem comentários. O modelo das duas fases para escoamentos bifásicos gás-sólidos não reativos analisado, assume que não existe transferência de massa na interface, e considera escoamento isotérmico para ambas as fases. Na formulação das leis constitutivas a fase sólida é considerada um fluido Newtoniano, o que não corresponde ao processo físico real. O termo da pressão do sólido é modelado através de correlações empíricas, as quais diferem muito entre si. Isto reflete o fato de que esse termo é introduzido nas equações conservativas por razões de estabilidade numérica, como mostrado em GIDASPOW (1986). A transferência de quantidade de movimento na interface é modelado levando em consideração apenas o arrasto estacionário na interface. As correlações propostas para o cálculo da função de arrasto devem ser usadas com cuidado, visto que a maioria destas foi obtida a partir de experimentos em leitos fluidizados líquido-sólidos sob fluidização homogênea, embora o processo de fluidização gás-sólido seja heterogêneo.

Outro aspecto a salientar é a não inclusão de nenhum modelo de turbulência no modelo das duas fases apresentado. A influência da turbulência é considerada nas equações através do termo das tensões de Reynolds. Segundo ENWALD *et al.*



(1996), em leitos fluidizados borbulhantes onde a diferença de densidade entre as fases e a concentração de sólidos são altas, a inércia do particulado amortece a turbulência da fase gasosa. Isto significa que é razoável ignorar a turbulência do gás nas regiões densas do leito. No entanto, nas regiões mais dispersas a turbulência deve ser levada em consideração. Para leitos circulantes, onde existem grandes regiões de baixa concentração de sólidos, o fenômeno da turbulência torna-se bastante significativo.

Para resolver o modelo das duas fases, em especial o modelo B do IIT/ANL, é usado o código computacional MULTIFIX modificado. Um aspecto muito importante relacionado aos problemas de convergência do modelo usado são as condições de contorno para a fase sólida nas paredes, assim como para ambas as fases na entrada do tubo ascendente do leito. Na entrada do leito foi considerado um escoamento pistonado unidimensional, mas na realidade essas condições dependem da geometria física da placa distribuidora de gás. Os efeitos de simetria e dimensões usadas também introduzem desvios nos resultados. Os escoamentos gás-sólidos em leitos circulantes são caracterizados por efeitos tridimensionais provocados por alimentação assimétrica dos sólidos, características geométricas assimétricas na saída do tubo ascendente, e pela presença do ciclone separador de sólidos quando modelada uma instalação completa. Finalmente, é necessário formular um critério de convergência para sistemas de EDP que descrevem escoamentos multifásicos gás-sólidos. LYCZKOWSKI *et al.* (1982) apud ENWALD *et al.* (1996) estudaram e estabeleceram um critério de convergência para os modelos unidimensionais invíscidos de escoamentos gás-sólidos baseados no teorema de Lax (1958). Porém, não existe ainda um critério para determinar quando o modelo multidimensional das duas fases é matematicamente bem comportado como problema multidimensional de valor inicial e de contorno.

O código computacional usado foi construído a partir de listagens obtidas das referências citadas. Além da possível ocorrência de erros de programação, há ainda a possibilidade de incorreção no material fonte. Porém, os resultados obtidos são similares aos apresentados por TSUO (1989), e o programa final não apresenta erros de compilação.

A seguir são apresentadas as conclusões do trabalho levando em consideração os resultados qualitativos das simulações numéricas. Finalmente são apresentadas algumas recomendações para futuros trabalhos considerando que este trabalho, de fato, representa o início de uma série de estudos de modelagem dos fenômenos de transporte de massa, quantidade de movimento e energia em escoamentos gás-sólidos.

5.2 – Conclusões

Qualitativamente comprova-se que a hidrodinâmica do escoamento bifásico gás-sólidos numa coluna de leito circulante é bastante complexa, caracterizando-se por grandes variações radiais e axiais da concentração de sólidos, e pela freqüente formação e dissociação de aglomerados sólidos que escoam de forma ascendente e descendente.

O escoamento gás-sólidos num leito circulante tem um caracter instável. Isto é verificado através das variações significativas dos perfis de velocidades e de concentração de sólidos para ambas as fases em função do tempo. Embora o escoamento tenha sido simulado com sucesso apenas em parte do regime transiente, nota-se que essas variações persistem na região de escoamento desenvolvido.

Estudos e dados experimentais detalhados são necessários para o aperfeiçoamento e validação de metodologias para simulação de escoamentos gás-sólidos.

5.3 – Recomendações para futuros trabalhos

1. Realizar trabalhos experimentais que permitam medir localmente as variáveis de interesse do escoamento, tais como: a velocidade da fase sólida, a fração de vazio e a fração volumétrica de sólidos.
2. Projetar experimentos visando esclarecer os mecanismos da turbulência em escoamentos gás-sólidos. Comparar esses resultados experimentais com resultados de simulações numéricas usando modelos de turbulência.

3. Estudos teóricos e experimentais são necessários para melhorar a formulação das leis constitutivas e de transferência.
4. Otimizar as simulações numéricas. Para isto propõe-se utilizar um programa profissional, como o FLUENT, que permita comparar diferentes modelos e formulações. Assim pode-se estudar o sentido físico dos parâmetros e termos envolvidos nas diferentes modelagens. Por exemplo, pode-se comparar os resultados obtidos através do modelo das duas fases com viscosidade constante, e aplicando a TCEG. Também com esse objetivo podem ser usados programas já elaborados, ou podem ser desenvolvidos novos algoritmos.
5. Utilizar programas de geração de malhas para simular as partes geométricas assimétricas das instalações. Também utilizar códigos tridimensionais que considerem os efeitos espaciais do escoamento.
6. Incorporar nos modelos matemáticos a equação de conservação da energia para as fases simuladas, com o propósito de modelar os processos de transferência de calor.
7. Finalmente, propõe-se simular uma instalação completa de fluidização incluindo os efeitos da combustão. Isto permitirá atingir o objetivo fundamental da modelagem numérica em engenharia: a simulação de processos em escala industrial, proporcionando uma ferramenta muito útil no processo de projeto e escalonamento destas instalações.

Referências Bibliográficas

- ARIS, R. (1962). *Vector, tensors, and the basic equations of fluid mechanics*. Dover Publications Inc., New York.
- ARNOLD, G.S. (1990). An assessment of multiphase flow models using the second law of thermodynamics. *Int. J. Multiphase Flow*, v.16, n.3, p.481-494.
- BIRD, R.B.; STEWARD, W.E.; LIGHTFOOT, E.N. (1973). *Fenómenos de Transporte*. Editorial Reverté.
- BOEMER, A.; QI, H.; RENZ, U.; VASQUEZ, S.; BOYSAN, F. (1995). Eulerian computation of fluidized hydrodynamics-a comparison of physical models. *Proc. 13th Int. Conf. on Fluidized Bed Combustion*, v.2, p.775-787.
- BOUILLARD, J.X. (1986). *Hydrodynamics of sedimentation, fluidization, and erosion*. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology, Chicago.
- BOUILLARD, J.X. (1989). Porosity distributions in a fluidized bed with an immersed obstacle. *AIChE Journal*, v.35, n.6, p.908-922.
- CAMPBELL, C.S.; WANG, D.G. (1991). Particle pressures in gas-fluidized beds. *J. Fluid Mech.*, v.227, p.495-508.
- CARPENTIERI, A.E.; LARSON, E.D. & WOODS, J. (1993). Future biomass-based electricity supply in northeast Brazil. *Biomass and Bioenergy*, v.4, n.3, p.149-173.
- CHAPMAN, S.; COWLING, T.G. (1970). *The mathematical theory of non-uniform gases*. 3rd Ed. Cambridge Univ. Press, Cambridge, U.K.
- COOK, T.L.; DEMUTH, R.T.; HARLOW, F.H. (1981). PIC Calculations of multiphase flow. *J. Comp. Phys.*, v.41, p.51-67.
- DELHAYE, J.M.; ACHARD, J.L. (1976). On the averaging operators introduced in two-phase flow modeling. *Specialists' Meeting on Transient Two-Phase Flow*, Agosto 3-4, Toronto.

- DELHAYE, J.M.; ACHARD, J.L. (1977). On the use of averaging operators in two-phase flow modeling. *Thermal and hydraulic aspects of nuclear reactor safety, 1: Light water reactors*. ASME winter meeting.
- DELHAYE, J.M. ed. (1981). *Thermohydraulics of two-phase systems for industrial design and nuclear engineering*. ed. J. M. Delhaye.
- DI FELICE, R. (1994). The voidage function for fluid-particle interaction systems. *Int. J. Multiphase Flow*, v.20, n.1, p.153-159.
- DING, J. (1990). *A fluidization model using kinetic theory of granular flow*. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology, Chicago.
- DING, J.; GIDASPOW, D. (1990). A bubbling model using kinetic theory of granular flow. *AIChE Journal*, v.36, n.4, p.523-538.
- DING, J., LYCZKOWSKI, R.W. (1992). Three-dimensional kinetic theory modeling of hydrodynamics and erosion in fluidized beds. *Powder Technology*, v.73, p.127-138.
- DREW, D.A. (1983). Mathematical modeling of two-phase flow. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, v.15, p.261-291.
- ENWALD, H.; PEIRANO, E.; ALMSTEDT, A.-E. (1996). Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. *Int. J. Multiphase Flow*, v.22, p.21-66, Supplement.
- ERGUN, S. (1952). Fluid flow through packed columns. *Chem. Engng Prog.*, v.48, n.2, p.89-94.
- ETTEHADIEH, B. (1982). *Hydrodynamic analysis of gas-solids fluidized beds*. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology, Chicago.
- ETTEHADIEH, B.; GIDASPOW, D.; LYCZKOWSKI, R.W. (1984). Hydrodynamics of fluidization in a semicircular bed with a jet. *AIChE Journal*, v.30, n.4, p.529-536.
- GAMWO, I.K.; SOONG, Y.; GIDASPOW, D.; LYCZKOWSKI, R.W. (1995). Three dimensional hydrodynamics modeling of a bubbling fluidized bed. *Proc. 13th Int. Conf. on Fluidized Bed Combustion*, v.1, p.297-303.
- GARG, S.K.; PRITCHET, J.W. (1975). Dynamics of gas fluidized beds. *J. App. Phys.*, v.46, n.10, p.4493-4500.
- GIDASPOW, D.; ETTEHADIEH, B. (1983). Fluidization in two-dimensional beds with a jet 2. Hydrodynamics modeling. *I & EC Fundam.*, v.22, p.193-201.

- GIDASPOW, D. (1986). Hydrodynamics of fluidization and heat transfer: supercomputing modeling. *App. Mech. Rev.*, v.39, n.1, p.1-23.
- GIDASPOW, D. (1989). Hydrodynamics of a lamella electrosettler. *AIChE Journal*, v.35, n.5, p.715-724.
- GIDASPOW, D. (1994). *Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions*. Academic Press Inc., Bostom.
- GIBILARO, L.G.; DI FELICE, R.I., WALDRAM, S.P. (1985). Generalized friction factor and drag coefficient correlations for fluid-particle interactions. *Chem. Eng. Sci.*, v.40, n.10, p.1817-1823.
- HARLOW, F.H.; AMSDEN, A.A. (1971). A numerical fluid dynamics calculation method for all flow speeds. *J. Comp. Phys.*, v.8, p.197-213.
- HARLOW, F.H.; AMSDEN, A.A. (1975). Numerical calculations of multiphase fluid flow. *J. Comp. Phys.*, v.17, p.19-52.
- HIRT, C.W., NICHOLS, B.D. (1981). Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J. Comp. Phys.*, v.39, p.201-225.
- HOFFMANN, K.A.; CHIANG, S.T. (1993). *Computational fluid dynamics for engineers - volume I*. Engineering Education System, Wichita, USA.
- HOOMANS, B.P.B.; KUIPERS, J.A.M.; BRIELS, W.J.; VAN SWAAIJ, W.P.M. (1996). Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidised bed: a hard-sphere approach. *Chem. Eng. Sci.*, v.51, n.1, p.99-118.
- ISHII, M. (1975). *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow*. Eyrolles. Paris.
- ISHII, M.; ZUBER, N. (1979). Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particle flows. *AIChE Journal*, v.25, n.5, p.843-855.
- ISHII, M.; MISHIMA, K. (1984). Two-fluid model and hydrodynamic constitutive relations. *Nuclear Engineering and Desing*, v.82, p.107-126.
- JONES, P.A.; SYNGLE, D.V.; SINN, B.T.; WU, S. (1995). Case history of the scrubgrass circulating fluidized bed projet. *Proc. 13th Int. Conf. on Fluidized Bed Combustion*, v.2, p.713-719.
- KIM, H.S.; ARASTOPOUR, H. (1995). Simulation of FCC particles flow behavior in a CFB using modified kinetic theory. *Can. J. Chem. Eng.*, v.73, p.603-611.

- KUIPERS, J.A.M.; PRINS, W.; VAN SWAAIJ, W.P.M. (1992a). Numerical calculation of wall-to-bed heat-transfer coefficients in gas-fluidized beds. *AIChE Journal*, v.38, n.7, p.1079-1091.
- KUIPERS, J.A.M.; VAN DUIN, K.J.; VAN BECKUM, F.P.H.; VAN SWAAIJ, W.P.M. (1992b). A numerical model of gas fluidized beds. *Chem. Eng. Sci.*, v.47, n.8, p.1913-1924.
- KUIPERS, J.A.M.; VAN DUIN, K.J.; VAN BECKUM, F.P.H.; VAN SWAAIJ, W.P.M. (1993). Computer simulation of the hydrodynamics of a two-dimensional gas-fluidized bed. *Computers Chem. Engng*, v.17, n.8, p.839-858.
- KUIPERS, J.A.M.; VAN SWAAIJ, W.P.M. (1997). Application of computational fluid dynamics to chemical reaction engineering. *Reviews in Chemical Engineering*, v.13, n.3.
- LANDAU, L.D., LIFSHITZ, E.M. (1987). *Fluid mechanics*. 2nd Ed. Pergamon Press.
- LAX, P.D., (1958). Differential equations, difference equations and matrix theory. *Comm. Pure Appl. Math.*, v.11, p.175-194.
- MASSOUDI, M.; RAJAGOPAL, K.R.; EKMANN, J.M.; MATHUR, M.P. (1992). Remarks on the modeling of fluidized systems. *AIChE Journal*, v.38, n.3, p.471-472.
- MILLER, A.; GIDASPOW, D. (1992). Dense, vertical gas-solid flow in a pipe. *AIChE Journal*, v.38, n.11, p.1801-1815.
- NIEUWLAND, J.J.; VAN SINT ANNALAND, M.; KUIPERS, J.A.M.; VAN SWAAIJ, J.P.M. (1996). Hydrodynamics modeling of gas/particle flows in riser reactors. *AIChE Journal*, v.42, n.6, p.1569-1582.
- PUGSLEY, T.S.; BERRUTI, F. (1996). A predictive model for circulating fluidized bed risers. *Powder Technology*, v.89, p.57-69.
- RICHARDSON, J.F.; ZAKI, W.N. (1954). Sedimentation and fluidisation: Part I. *Trans. Inst. Chem. Engrs.*, v.32, p.35-53.
- ROWE, P.N. (1961) Drag forces in a hydraulic model of a fluidised bed – part II, *Trans. Inst. Chem. Engrs.*, v.39, p.175-180.
- SAMUELSBERG, A.; HJERTAGER, B.H. (1996). An experimental and numerical study of flow patterns in a circulating fluidized bed reactor. *Int. J. Multiphase Flow*, v.22, n.3, p.575-591.

- SHIH, Y.T.; GIDASPOW, D.; WASAN, D.T. (1987). Hydrodynamics of electrofluidization: separation of pyrites from coal. *AIChE Journal*, v.33, p.1322-1333.
- SYAMLAL, M. (1985). *Multiphase hydrodynamics of gas-solids flow*. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology, Chicago.
- SYAMLAL, M.; GIDASPOW, D. (1985). Hydrodynamics of fluidization: prediction of wall to bed heat transfer coefficients. *AIChE Journal*, v.31, n.1, p.127-135.
- SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T.J. (1988). Simulation of granular layer inversion in liquid fluidized beds. *Int. J. Multiphase Flow*, v.14, n.4, p.473-481.
- THEOLOGOS, K.N.; MARKATOS, N.C. (1992). Modelling of flow and heat transfer in fluidized catalytic cracking riser-type reactors. *Trans. Inst. Chem. Engrs.*, v.70 (Part A), p.239-245.
- TRUESDEL, C.; TOUPIN, R. (1960). Classical field theories. In: *Handbuch der Physik*. Springer, Berlin.
- TSUJI, Y. et al. (1993). Discrete particle simulation of two dimensional fluidized bed. *Powder Technology*, v.77, p.79-87.
- TSUJI, Y. et al. (1998). Cluster patterns in circulating fluidized beds by numerical simulation (discrete particle model versus two-fluid model). *Powder Technology*, v.95, p.254-264.
- TSUO, Y.P. (1989). *Computation of flow regimes in circulating fluidized beds*. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology, Chicago.
- TSUO, Y.P.; GIDASPOW, D. (1990). Computation of flow patterns in circulating fluidized beds. *AIChE Journal*, v.36, n.6, p.885-896.
- VON MISES, R. (1953). *Mathematical theory of compressible fluid flow*. Academic Press, New York.
- WEN, C.Y.; YU, Y.H. (1966). Mechanics of fluidization. *Chem. Eng. Prog. Symp. Series*, v.62, n.62, p.100-111.
- WHITE, F.M. (1991). *Viscous fluid flow*. 2nd ed. McGraw-Hill Inc.

Apêndice I

A1. Teoremas utilizados para obter as equações de balanço locais instantâneos generalizadas

Teorema de Leibniz

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} f(\vec{r}, t) dV = \int_{V(t)} \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{A(t)} f(\vec{u}_a \cdot \hat{n}) dA \quad (\text{A1.1})$$

onde $\vec{u}_a \cdot \hat{n}$ é a velocidade de deslocamento da superfície geométrica.

Teorema de Gauss-Ostragradskii

Função escalar (tensor de ordem zero)

$$\int_V \vec{\nabla} \circ f dV = \int_A f \circ \hat{n} dA \quad (\text{A1.2})$$

Função vetorial (tensor de primeira ordem)

$$\int_V \vec{\nabla} \circ \vec{f} dV = \int_A \vec{f} \circ \hat{n} dA \quad (\text{A1.3})$$

Função tensorial (tensor de segunda ordem)

$$\int_V \vec{\nabla} \circ \vec{\vec{f}} dV = \int_A \vec{\vec{f}} \circ \hat{n} dA \quad (\text{A1.4})$$

A2. Propriedades e Relações do procedimento de médias

Propriedades do procedimento de médias

$$\langle f + g \rangle = \langle f \rangle + \langle g \rangle \quad (\text{A2.1})$$

$$\langle \langle f \rangle g \rangle = \langle f \rangle \langle g \rangle \quad (\text{A2.2})$$

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle f \rangle}{\partial t} \quad (\text{A2.3})$$

$$\langle \bar{\nabla} f \rangle = \bar{\nabla} \langle f \rangle \quad (\text{A2.4})$$

$$\langle \bar{\nabla} \cdot f \rangle = \bar{\nabla} \cdot \langle f \rangle \quad (\text{A2.5})$$

Relações fundamentais usadas no processo de médias

$$\frac{\partial \langle X_k f_k \rangle}{\partial t} = \left\langle X_k \frac{\partial f_k}{\partial t} \right\rangle + \left\langle f_k \frac{\partial X_k}{\partial t} \right\rangle \quad (\text{A2.6})$$

$$\bar{\nabla} \langle X_k f_k \rangle = \langle X_k \bar{\nabla} f_k \rangle + \langle f_k \bar{\nabla} X_k \rangle \quad (\text{A2.7})$$

$$\bar{\nabla} \cdot \langle X_k f_k \rangle = \langle X_k \bar{\nabla} \cdot f_k \rangle + \langle f_k \cdot \bar{\nabla} X_k \rangle \quad (\text{A2.8})$$

$$\frac{\partial X_k}{\partial t} + \bar{u}_i \cdot \bar{\nabla} X_k = 0 \quad (\text{A2.9})$$

$$\bar{\nabla} X_k = \left(\frac{\partial X_k}{\partial n} \right) \hat{n}_k \quad (\text{A2.10})$$

As relações (A2.6-A2.8) foram obtidas utilizando as relações (A2.1-A2.5) e a definição (2.16) da função densidade de fase X_k .

A relação (A2.9) foi obtida por DREW (1983). De acordo com DREW & LAHEY apud ENWALD *et al.* (1996) pode ser interpretada como a derivada material da função densidade de fase ao longo da interface.

A relação (A2.10) representa o gradiente da função densidade de fase. O significado físico desta função é que representa o fluxo molecular na interface.

A3. Obtenção da equação de balanço média geral e da condição de salto média geral

Obtenção da equação de balanço média geral

Multiplicando a equação de campo local instantânea (2.7) pela função densidade de fase, e formando a média da equação resultante obtém-se

$$\underbrace{\left\langle X_k \frac{\partial}{\partial t} (\rho_k \psi_k) \right\rangle}_1 + \underbrace{\left\langle X_k \bar{\nabla} \cdot (\rho_k \psi_k \bar{u}_k) \right\rangle}_2 + \underbrace{\left\langle X_k \bar{\nabla} \cdot \bar{J}_k \right\rangle}_3 - \underbrace{\left\langle X_k \rho_k \phi_k \right\rangle}_4 = 0 \quad (A3.1)$$

Os termos 1,2 e 3 são transformados aplicando as relações A2.6 e A2.8 resultando

$$\text{Termo 1} = \left\langle X_k \frac{\partial}{\partial t} (\rho_k \psi_k) \right\rangle = \frac{\partial \langle X_k \rho_k \psi_k \rangle}{\partial t} - \left\langle \rho_k \psi_k \frac{\partial X_k}{\partial t} \right\rangle \quad (A3.2)$$

$$\text{Termo 2} = \left\langle X_k \bar{\nabla} \cdot (\rho_k \psi_k \bar{u}_k) \right\rangle = \bar{\nabla} \cdot \langle X_k \rho_k \psi_k \bar{u}_k \rangle - \left\langle \rho_k \psi_k \bar{u}_k \cdot \bar{\nabla} X_k \right\rangle \quad (A3.3)$$

$$\text{Termo 3} = \left\langle X_k \bar{\nabla} \cdot \bar{J}_k \right\rangle = \bar{\nabla} \cdot \langle X_k \bar{J}_k \rangle - \left\langle \bar{J}_k \cdot \bar{\nabla} X_k \right\rangle \quad (A3.4)$$

Substituindo as expressões (A3.2-A3.4) em (A3.1) e arranjando os termos obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle X_k \rho_k \psi_k \rangle + \bar{\nabla} \cdot \langle X_k \rho_k \psi_k \bar{u}_k \rangle + \bar{\nabla} \cdot \langle X_k J_k \rangle - \langle X_k \rho_k \phi_k \rangle \\ = \left\langle \rho_k \psi_k \frac{\partial X_k}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \rho_k \psi_k \bar{u}_k \cdot \bar{\nabla} X_k \right\rangle + \left\langle J_k \cdot \bar{\nabla} X_k \right\rangle \end{aligned} \quad (A3.5)$$

Aplicando as relações (A2.9) e (A2.10) aos termos da direita na equação (A3.5) obtém-se a equação de balanço média geral (2.19)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle X_k \rho_k \psi_k \rangle + \bar{\nabla} \cdot \langle X_k \rho_k \psi_k \bar{u}_k \rangle + \bar{\nabla} \cdot \langle X_k J_k \rangle - \langle X_k \rho_k \phi_k \rangle \\ = \left\langle (\dot{m}_k \psi_k + J_k \cdot \hat{n}_k) \frac{\partial X_k}{\partial n} \right\rangle \end{aligned} \quad (A3.6)$$

Obtenção da condição de salto média geral

Multiplicando a equação de salto local instantânea (2.8) pela expressão $\frac{\partial X_k}{\partial n}$, a equação (2.8) transforma-se em

$$\sum_{k=1}^2 (\dot{m}_k \psi_k + J_k \cdot n_k) \frac{\partial X_k}{\partial n} = -\phi_I \frac{\partial X_k}{\partial n} \quad (A3.7)$$

Obtendo a média da equação (A3.7) determina-se a condição de salto média geral (2.20)

$$\sum_{k=1}^2 \left\langle (\dot{m}_k \psi_k + J_k \cdot n_k) \frac{\partial X_k}{\partial n} \right\rangle = -\left\langle \phi_I \frac{\partial X_k}{\partial n} \right\rangle \quad (A3.8)$$

A4. Obtenção das equações médias decompostas e ponderadas

Obtenção da equação de conservação da massa média decomposta e ponderada

Aplicando a decomposição de Reynolds, Eq. (2.24), ao vetor velocidade da fase k e introduzindo-o na Eq. (2.21), resulta a seguinte equação

$$\frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\langle X_k \rho_k \rangle}_1 + \bar{\nabla} \cdot \underbrace{\langle X_k \rho_k (\bar{U}_k + \bar{u}'_k) \rangle}_2 = 0 \quad (A4.1)$$

O termo 1 é simplificado aplicando a Eq. (2.30) da média da densidade de fase

$$\text{Termo 1} = \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_k \rho_k^{X_k}) \quad (A4.2)$$

Na transformação do termo 2 considera-se que a média ponderada mássica de \bar{U}_k é constante, por definição, na escala do processo de médias. Utilizando essa propriedade e as Eqs. (2.29) e (2.30), o termo 2 resulta

$$\begin{aligned} \text{Termo 2} &= \bar{\nabla} \cdot \langle X_k \rho_k \bar{U}_k + X_k \rho_k \bar{u}'_k \rangle = \bar{\nabla} \cdot \left(\alpha_k \rho_k^{X_k} \left(\bar{U}_k + \underbrace{\langle \bar{u}'_k \rangle^{X_k \rho_k}}_{=0} \right) \right) \\ &= \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k^{X_k} \bar{U}_k) \end{aligned} \quad (A4.3)$$

A partir da Eq. (A4.1) e das Eqs. (A4.2) e (A4.3) obtém-se a equação de conservação da massa média decomposta e ponderada (2.33)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_k \rho_k^{X_k}) + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k^{X_k} \bar{U}_k) = 0 \quad (A4.4)$$

Obtenção da equação de conservação da quantidade de movimento média decomposta e ponderada

Introduzindo na Eq. (2.22) a velocidade da fase k decomposta através da decomposição de Reynolds, Eq. (2.24), obtém-se

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \langle X_k \rho_k (\bar{U}_k + \bar{u}'_k) \rangle}_1 + \underbrace{\bar{\nabla} \cdot \langle X_k \rho_k (\bar{U}_k + \bar{u}'_k) (\bar{U}_k + \bar{u}'_k) \rangle}_2 - \underbrace{\bar{\nabla} \cdot \langle X_k \bar{T}_k \rangle}_3 - \underbrace{\langle X_k \rho_k \bar{g} \rangle}_4 = - \langle \bar{T}_k \cdot \bar{\nabla} X_k \rangle \quad (A4.5)$$

O termo 1 é similar ao termo 2 da Eq. (A4.1). Aplicando a mesma transformação executada na Eq. (A4.3), o termo 1 é rescrito como

$$\text{Termo 1} = \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_k \rho_k^{X_k} \bar{U}_k) \quad (A4.6)$$

O termo 2 é rearranjado como

$$\begin{aligned} \text{Termo 2} &= \bar{\nabla} \cdot \left(\langle X_k \rho_k \bar{U}_k \bar{U}_k \rangle + \langle 2 X_k \rho_k \bar{U}_k \bar{u}'_k \rangle + \langle X_k \rho_k \bar{u}'_k \bar{u}'_k \rangle \right) \\ &= \bar{\nabla} \cdot \left(\langle X_k \rho_k \rangle \bar{U}_k \bar{U}_k + 2 \langle X_k \rho_k \rangle \bar{U}_k \underbrace{\langle \bar{u}'_k \rangle^{X_k \rho_k}}_{=0} - \alpha_k \bar{T}_k^{\text{Re}} \right) \\ &= \bar{\nabla} \cdot \left(\alpha_k \rho_k \bar{U}_k \bar{U}_k - \alpha_k \bar{T}_k^{\text{Re}} \right) \end{aligned} \quad (A4.7)$$

Na obtenção da Eq. (A4.7) foram utilizadas as definições dadas pelas Eqs. (2.28-2.30) e (2.32). Aplicando as médias de fase, Eqs. (2.31) e (2.30), aos termos 3 e 4 respectivamente, obtém-se

$$\text{Termo 3} = -\bar{\nabla} \cdot \left(\alpha_k \bar{\bar{T}}_k^{X_k} \right) \quad (\text{A.4.8})$$

e

$$\text{Termo 4} = -\alpha_k \rho_k^{X_k} \bar{g} \quad (\text{A.4.9})$$

Substituindo as Eqs. (A4.6-A4.9) na Eq. (A4.5), e arranjando a equação resultante obtém-se a equação de conservação da quantidade de movimento média decomposta e ponderada (2.34)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_k \rho_k^{X_k} \bar{U}_k) + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k^{X_k} \bar{U}_k \bar{U}_k) = \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k (\bar{\bar{T}}_k^{X_k} + \bar{\bar{T}}_k^{Re})) + \alpha_k \rho_k \bar{g} + M_{ki} \quad (\text{A4.10})$$

onde $M_{ki} = -\left\langle \bar{\bar{T}}_k \cdot \bar{\nabla} X_k \right\rangle$ é o termo de transferência de quantidade de movimento entre as fases na interface.

Apêndice II

B1. Alguns esquemas demonstrativos da discretização à montante

Esquema da discretização à montante dos termos representado na Eq. (3.15)

Na Fig. B1.1 representa-se esquematicamente o procedimento de discretização à montante do primeiro termo da Eq. (3.15) da equação da conservação de massa para ambas as fases.

Se a velocidade na fronteira da célula computacional é positiva, $(u_k)_{i+\frac{1}{2}}^j > 0$, as variáveis escalares para o cálculo são tomadas no ponto a montante no centro da célula (i, j) , $(\rho_k \alpha_k \Gamma)_i^j$. No caso contrário, quando $(u_k)_{i+\frac{1}{2}}^j < 0$, as variáveis escalares são tomadas no ponto a montante correspondente $(i+1, j)$, $(\rho_k \alpha_k \Gamma)_{i+1}^j$.

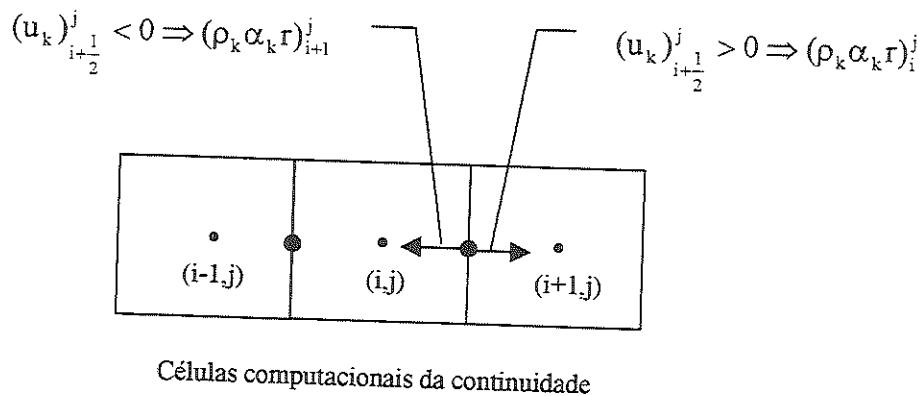
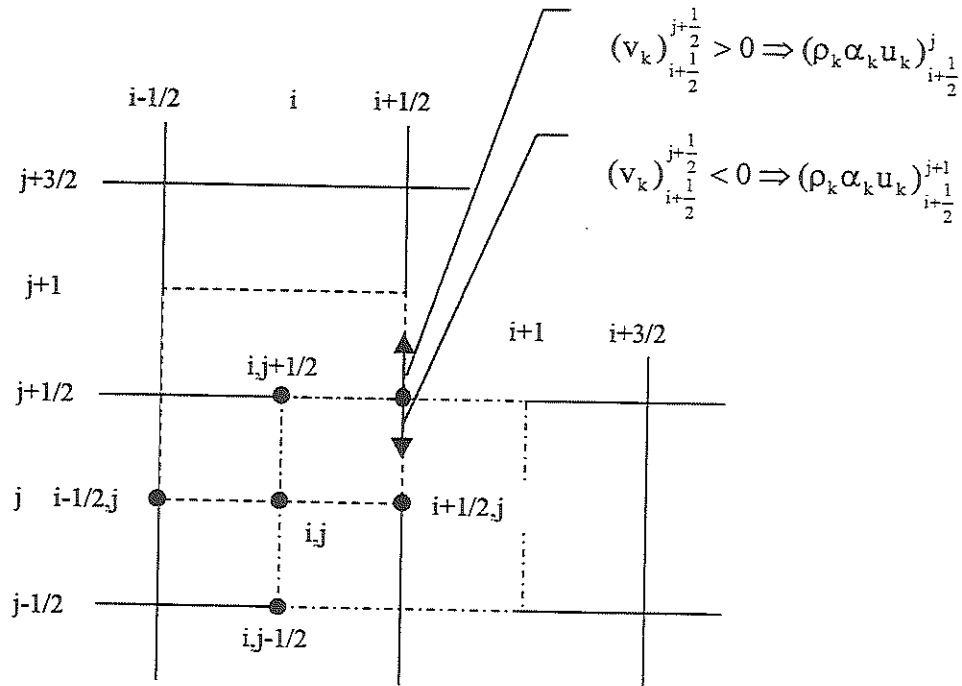


Figura B1.1. Exemplo de discretização a montante de um dos termos da Eq. (3.15).

Esquema da discretização à montante dos termos representados na Eq. (3.29)

Na Fig. B1.2 representa-se esquematicamente o procedimento de discretização à montante do primeiro termo da Eq. (3.29) da equação da conservação da quantidade de movimento para ambas as fases na direção radial.



Malha deslocada Fig. 3.6

Figura B1.2. Exemplo da discretização à montante de um dos termos da Eq. (3.29).

De forma similar à diferenciação da Eq. (3.15), aplica-se o critério de discretização à montante na Eq. (3.29) da conservação da quantidade de movimento na direção radial. Dependendo do sinal da velocidade na fronteira da célula computacional, $(v_k)_{i+1/2}^{j+1/2}$, escolhe-se o componente das variáveis $(\rho_k \alpha_k u_k)$ no centro da célula defasada $(i+1/2, j)$ ou $(i+1/2, j+1)$.

O valor da velocidade na fronteira calcula-se como

$$(v_k)_{i+1/2}^{j+1/2} = \frac{1}{2} \left((v_k)_i^{j+1/2} + (v_k)_{i+1}^{j+1/2} \right) \tag{B1.1}$$

B2. Cálculo aproximado do coeficiente η_i^j

O coeficiente η_i^j , calculado aproximadamente pela fórmula (3.36), representa as derivadas do resíduo D_i^j com respeito à pressão e é obtido analiticamente a partir das equações de conservação da quantidade de movimento (3.17-3.20).

Substituindo na Eq. (3.36) a Eq. (3.35), usada para calcular o resíduo de gás em cada célula computacional, obtém-se

$$\frac{1}{\eta_i^j} = \left(\frac{\partial D_i^j}{\partial P_i^j} \right) = \frac{\partial \left[\rho_g \alpha_g \right]_i^{j-n} \left[\rho_g \alpha_g \right]_i^j}{\partial P_i^j} + \frac{\delta t}{r_i \delta r} \left[\frac{\partial^{n+1} \langle (\rho_g \alpha_g r) u_g \rangle_i^j}{\partial P_i^j} \right] + \frac{\delta t}{\delta z} \left[\frac{\partial^{n+1} \langle (\rho_g \alpha_g) v_g \rangle_i^j}{\partial P_i^j} \right] \quad (B2.1)$$

Considerando a derivada do primeiro termo da direita nula para o tempo n, e aplicando uma discretização central nos dois termos restantes da direita obtém-se

$$\frac{1}{\eta_i^j} = \frac{\alpha_g}{(C_i^j)^2} + \frac{\delta t}{r_i \delta r} \left[r_{i+\frac{1}{2}} \frac{\partial^{n+1} (\rho_g \alpha_g u_g)_{i+\frac{1}{2}}^j}{\partial P_i^j} - r_{i-\frac{1}{2}} \frac{\partial^{n+1} (\rho_g \alpha_g u_g)_{i-\frac{1}{2}}^j}{\partial P_i^j} \right] + \frac{\delta t}{\delta z} \left[\frac{\partial^{n+1} (\rho_g \alpha_g v_g)_{i+\frac{1}{2}}^j}{\partial P_i^j} - \frac{\partial^{n+1} (\rho_g \alpha_g v_g)_{i-\frac{1}{2}}^j}{\partial P_i^j} \right] \quad (B2.2)$$

onde C_i^j é a velocidade do som calculada como

$$(C_i^j)^2 = \frac{\partial P_i^j}{\partial \rho_g} \quad (B2.3)$$

A seguir substitui-se as Eq. (3.17-3.20) de conservação da quantidade de movimento na Eq. (B2.2). Como exemplo apresenta-se essa substituição para o segundo termo da direita da Eq. (B2.2)

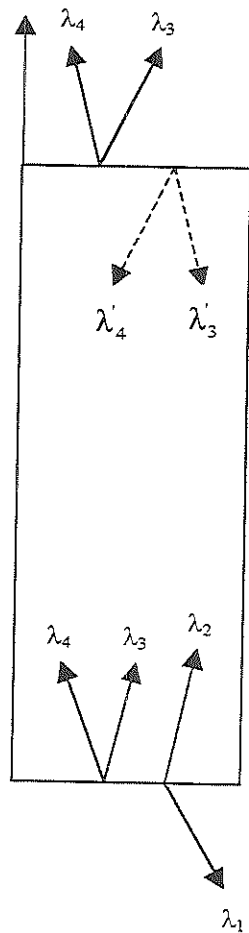
$$\begin{aligned} r_{i+\frac{1}{2}} \frac{\partial^{n+1}(\rho_g \alpha_g u_g)^j_{i+\frac{1}{2}}}{\partial P_i^j} = r_{i+\frac{1}{2}} \left\{ \frac{\partial^n(\rho_g \alpha_g u_g)^j_{i+\frac{1}{2}}}{\partial P_i^j} + \frac{\delta t}{\delta r} (\alpha_g)^j_{i+\frac{1}{2}} \frac{\partial^{n+1}(P_i^j - P_{i+1}^j)}{\partial P_i^j} - \right. \\ \left. \delta t^n \beta^j_{i+\frac{1}{2}} \frac{\partial^{n+1}(u_g - u_s)^j_{i+\frac{1}{2}}}{\partial P_i^j} \right\} \approx r_{i+\frac{1}{2}} \frac{\delta t}{\delta r} (\alpha_g)^j_{i+\frac{1}{2}} \quad (B2.4) \end{aligned}$$

Na obtenção da Eq. (B2.4) foram desprezados o termo que contem a derivada parcial da velocidade relativa com respeito à pressão, e o termo da derivada parcial das variáveis no tempo n com respeito à pressão. Considerando as simplificações adotadas e realizando o mesmo procedimento para os demais termos da Eq. (B2.2), obtém-se a Eq. (3.36) utilizada para o cálculo do coeficiente η_i^j

$$\begin{aligned} \frac{1}{\eta_i^j} = \frac{\partial D_i^j}{\partial P_i^j} = \frac{\alpha_g}{(C_i^j)^2} + \frac{(\delta t)^2}{r_i (\delta r)^2} \left(r_{i+\frac{1}{2}} (\alpha_g)^j_{i+\frac{1}{2}} + r_{i-\frac{1}{2}} (\alpha_g)^j_{i-\frac{1}{2}} \right) + \\ \frac{(\delta t)^2}{(\delta z)^2} \left((\alpha_g)_i^{j+\frac{1}{2}} + (\alpha_g)_i^{j-\frac{1}{2}} \right) \quad (B2.5) \end{aligned}$$

B3 - Direções caraterísticas para ambas as fases no tubo ascendente

Na Fig. B3.1 apresenta-se as direções caraterísticas para ambas as fases no tubo ascendente obtidas pela análise de um escoamento gás-sólido unidimensional e inviscído segundo TSUO & GIDASPOW (1990).



Na saída do tubo ascendente, quando existem aglomerados de partículas sólidas descendentes, as direções caraterísticas apontam para o domínio computacional. Portanto, a informação é transmitida para o interior do leito na velocidade $\lambda'_{3,4}$, dada por:

$$\lambda'_{3,4} = -V_s \pm \sqrt{\frac{G}{\rho_s}}$$

Na entrada do tubo ascendente a informação é transmitida para o interior do domínio computacional com a velocidade λ_2 para a fase gasosa e com as velocidades $\lambda_{3,4}$ para a fase sólida. Portanto precisa-se de três condições de contorno na entrada do tubo ascendente dadas pelas Eqs. (3.51) e (3.52) para a fase gasosa e a fase sólida respetivamente.

Figura B3.1. Direções caraterísticas para ambas as fases no tubo ascendente.

Na saída do tubo ascendente mostra-se apenas as direções caraterísticas da fase sólida. Quando existem aglomerados de partículas descendentes as direções do sólido apontam para o domínio computacional, razão pela qual opta-se por mudar a geometria na saída do tubo ascendente como mostrado na Fig. 3.10. Neste caso aplica-se a condição de contorno de continuidade formulada pela Eq. (3.53).

B4 – Algumas definições do análise das características (HOFFMANN & CHIANG, 1993)

1. As direções características ou características são os caminhos de propagação de perturbações físicas.
2. Ao longo das características, as equações diferenciais parciais governantes são reduzidas em uma dimensão espacial, e são denominadas como equações de compatibilidade. Por exemplo, as equações parciais governantes em duas dimensões espaciais são reduzidas a uma dimensão espacial, e portanto a uma equação diferencial ordinária.
3. As propriedades físicas são contínuas através das direções características, no entanto as suas derivadas podem ser descontínuas.
4. Em consideração à física do movimento de fluidos, as seguintes observações são feitas:
 - Para um escoamento irrotacional, isoentrópico, estacionário bidimensional existem apenas características reais para escoamentos supersônicos.
 - As linhas de Mach são características do escoamento.