Modelagem euleriana do escoamento gás-sólido em leito fluidizado circulante: análise da influência de parâmetros físicos e numéricos nos resultados de simulação

Serviço de Pós-Graduação EESC/USP

EXEMPLAR REVISADO

Data de entrada no Serviço... 13... / 04 / 06...

Ass.:..... *RB*

MSc. Renato César da Silva

DEDALUS - Acervo - EESC

31100053746

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

Orientador: Prof. Dr. Fernando Eduardo Milioli

São Carlos

2006

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato: Bacharel **RENATO CESAR DA SILVA**

Tese defendida e julgada em 03-02-2006 perante a Comissão Julgadora:

Prof. Dr. **FERNANDO EDUARDO MILIOLI (Orientador)**
(Escola de Engenharia de São Carlos/USP)

Aprovado

Dr. **LUBEN CABEZAS GOMÉZ**
(Autônomo)

Aprovado

Prof. Titular **JOSÉ ALBERTO CUMINATO**
(Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação/USP)

Aprovado

Prof. Dr. **VALDEMIR GARCIA FERREIRA**
(Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação/USP)

Aprovado

Dr. **VALDIR ESTEVAM**
(Petrobrás S/A)

Aprovado

Prof. Associado **JONAS DE CARVALHO**
Coordenador do Programa de Pós-Graduação
em Engenharia Mecânica

Profa. Titular **MARIA DO CARMO CALIJURI**
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

Dedico este trabalho a minha
amada esposa, **Adriana** a meus
filhos **Bruno** e **Pedro** e a meus
pais **Firmino** e **Doraci**.

Agradecimentos

Primeiramente, agradeço a Deus por responder as orações de muitos. ELE foi fiel até quando eu não era. Eu o reconheço e o exalto por dar a mim a força e sabedoria necessária para realizar esta tarefa.

Agradeço a Adriana, minha esposa, pelo seu sentimento, por sua paciência, e por ser forte quando eu estava fraco.

A meus filhos Bruno e Pedro, pelo amor incondicional.

Ao grande amigo Prof. Dr. Luben Cabezas-Gómez, por sua amizade, por seu exemplo, pelo trabalho desenvolvido em conjunto e primordialmente por “acreditar sempre”.

Ao Prof. Dr. Geraldo Lombardi pelo exemplo de conduta profissional, pela amizade e principalmente por utilizar o magistério como instrumento de auxílio ao próximo.

Ao amigo Prof. Dr. Hélio Navarro pelo companheirismo, amizade e troca de conhecimentos.

Ao Prof. Dr. Valdemir Garcia Ferreira e a Prof^a. Dra. Magda Kaibara pelas discussões científicas sobre métodos numéricos, transmissão de conhecimento e material e principalmente pela amizade.

Ao Prof. Dr. Antônio Moreira dos Santos, pela colaboração, incentivo e pela nobre humildade.

Ao Prof. Dr. Fernando Eduardo Milioli, pela sua orientação e apoio durante o desenvolvimento do trabalho.

Aos demais professores do Núcleo de Engenharia Térmica e Fluidos, pela colaboração e transmissão de conhecimento.

Aos técnicos Roberto Prata Vieira e Jorge Nicolau, pelo apoio ao desenvolvimento do trabalho, minimizando o tempo de manutenção dos computadores, troca de valiosas informações sobre o sistema operacional LINUX e amizade.

As secretárias do NETeF pelo atendimento e ajuda.

À Ana Paula Bueno e demais funcionários da secretaria de pós-graduação pela colaboração e apoio durante a realização do trabalho.

Aos funcionários da Biblioteca Central pelo cordial atendimento, ajuda e transmissão de informações.

Ao Núcleo de Engenharia Térmica e Fluidos (NETeF) do Departamento de Engenharia Mecânica da EESC/USP pelas facilidades oferecidas.

A Universidade Federal de Mato Grosso do Sul – UFMS, pelo afastamento das atividades docentes durante a execução deste trabalho.

Aos colegas do Departamento de Ciências Exatas do campus de Três Lagoas da UFMS pelo apoio, pelas atividades assumidas para propiciar o afastamento das atividades docentes durante o período de execução do trabalho e pela amizade.

A CAPES pelo projeto PICDT em que propiciou o auxílio financeiro para a execução de todo o trabalho.

Sumário

LISTA DE FIGURAS	i
LISTA DE TABELAS	viii
LISTA DE SÍMBOLOS	ix
RESUMO.....	xiii
ABSTRACT.....	xiv
1. INTRODUÇÃO	1
1.1 Aplicações dos escoamentos gás-sólido em leitos fluidizados	1
1.2 Breve resenha histórica da modelagem numérica aplicada a fluidização ..	5
1.3 A presença da difusão numérica na simulação do escoamento gás-sólido em leitos fluidizados.....	6
1.4 Objetivos e apresentação do trabalho	9
2. TEORIA HIDRODINÂMICA	12
2.1 Introdução	12
2.2 Classificação de escoamentos bifásicos gás-sólido	14
2.3 Formulação euleriana/euleriana clássica	19
2.3.1 Procedimento para a formulação do modelo das duas fases separadas.....	19
2.4 Modelos hidrodinâmicos A e B, (IIT/ANL)	20
2.5 Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares	23
2.6 Modelo matemático empregado por Agrawal <i>et al.</i> (2001)	27
2.7 Formulação sucinta da TCEG Algébrica	30
2.8 Apresentação e discussão física de leis constitutivas da TCEG	31
2.8.1 Análise das correlações para a viscosidade dinâmica do sólido μ_s ..	31
2.8.2 Análise das correlações para a função radial de distribuição g_0	38
Conclusões	44
3. METODOLOGIA DE SOLUÇÃO NUMÉRICA	45
3.1 Introdução	45
3.2 Equação de Transporte Escalar	46
3.3 Integração sobre um Volume de Controle	46
3.4 Discretização dos Termos de Convecção-Difusão	48
3.4.1 Esquemas de Primeira Ordem	48

3.4.2 Esquemas de Ordem Superior	51
3.4.3 Esquemas TVD	53
3.4.4 Diagrama de Variável Normalizada para o Limitador Universal – NVD	59
3.4.5 O Fator de Ponderação “Downwind”	62
3.4.6 Utilização do fator DWF no código MFIX	66
3.4.7 Algoritmo para a utilização do Fator de Downwind	69
3.4.8 Método de Correção Defasada – DC (Deferred Correction Method)	70
3.4.8.1 Motivação para a Aplicação do Método DC na Discretização das Equações que Governam o Escoamento Gás-Sólido	71
3.4.8.2 Descrição do Método	72
3.4.9 Comparação de Tempo de Processamento	73
3.4.10 Considerações	74
3.5 Equação de Transporte Discreta	80
3.5.1 Observações	82
3.6 Resumo do Algoritmo de Solução	84
3.7 Equação de Quantidade de Movimento	88
3.7.1 Equação de Quantidade de Movimento Discreta	90
3.7.2 Coordenadas Cilíndricas	92
3.7.3 Fórmulas Discretas	95
3.7.4 Coeficiente Central Nulo	97
3.7.5 Condições de Contorno	100
3.8 Eliminação Parcial do Acoplamento na Interface	102
3.9 Equação para a Correção da Pressão do Fluido	104
3.9.1 Formulação	104
3.9.2 Condições de Contorno	107
4. RESULTADOS DE SIMULAÇÃO	109
4.1 Introdução	109
4.2 Resultados de simulação	118
4.2.1 Considerações sobre a influência da malha computacional nos resultados de simulação.....	118
4.2.2 Análise comparativa entre as duas correlações empíricas para a viscosidade do sólido	123

4.2.3 Resultados de simulação considerando a formulação tradicional e a baseada na TCEG.....	131
4.2.3.1 Comparação dos resultados de simulação obtidos pelo procedimento tradicional e a TCEG algébrica	132
4.2.3.2 Comparação dos resultados de simulação obtidos pela TCEG algébrica e TCEG com a resolução de uma EDP para o computo da temperatura granular.....	136
4.2.4 Metodologia de identificação e caracterização de estruturas coerentes – “clusters”.....	139
4.2.4.1 Introdução.....	139
4.2.4.2 Identificação e caracterização dos “clusters”.....	142
4.2.4.3 Análise das características dos “clusters” a partir dos resultados de simulação numérica.....	146
4.2.4.3.1 Influência da malha computacional empregada considerando o modelo tradicional.....	146
4.2.4.3.2 Influência do esquema de discretização para o termo advectivo e do modelo físico empregado na quantificação das características dos “clusters”.....	148
5. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	156
5.1 Comentários finais.....	156
5.2 Principais contribuições obtidas com a realização deste trabalho.....	157
5.3 Principais conclusões do trabalho.....	158
5.4 Recomendações para futuros trabalhos.....	159
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	161
ANEXO A	176
ANEXO B	177
ANEXO C	180
ANEXO D	184

Lista de Figuras

Figura 1.1.	Bolha experimental. Gidaspow (1994).....	8
Figura 1.2.	Formação e crescimento de bolha utilizando: a) Foup, b) Van Leer, c) Muscl e d) Superbee. Malha: 124x108.....	9
Figura 2.1	Procedimentos adotados para modelar um escoamento bifásico [ISHII-1975] e [ISHII & MISHIMA-1984].....	13
Figura 2.2.	Classificação dos regimes de escoamento para escoamentos gás-sólido de acordo à Elgobashi (1991).....	17
Figura 2.3.	Classificação dos escoamentos gás-sólido em dependência das escalas de tempo características. Tomada de Peirano (1998).....	18
Figura 2.4.	Procedimento geral para a formulação do modelo de duas fases (ENWALD et al., 1996).....	20
Figura 2.5.	Procedimento geral simplificado para formulação da TCEG, baseado no trabalho de Therdthianwong (1994).....	25
Figura 2.6.	Comparação de várias correlações da literatura para a viscosidade dinâmica do sólido, μ_s . (g_0 calcula-se pelas correlações propostas pelos autores nos artigos acima referidos).....	33
Figura 2.7.	Comparação de várias correlações da literatura da viscosidade dinâmica do sólido, μ_s , quando $\alpha_s \rightarrow 0$. (A legenda é a mesma da Figura 2.6).....	35
Figura 2.8.	Comparação de várias correlações da literatura da viscosidade dinâmica do sólido μ_s , para $e = 1$ e g_0 calculada segundo Ogawa <i>et al.</i> (1980).....	36
Figura 2.9.	Ilustração da influencia do coeficiente de restituição e sobre a viscosidade dinâmica do sólido μ_s . a) Correlação de Lun <i>et al.</i> (1984), b) Correlação de Hrenya & Sinclair (1997). (g_0 calculada segundo Owaga <i>et al.</i> (1980)).....	37
Figura 2.10.	Comparação de várias correlações da literatura para a função radial de distribuição, g_0	40

Figura 2.11. Comparação de várias correlações da literatura para a função radial de distribuição, g_0 . Visualização para o valor limite da concentração de sólidos $\alpha_s \rightarrow 0$	41
Figura 2.12. Comparação de várias correlações da literatura para a função radial de distribuição, g_0 com os dados de simulação de Alder & Wainwright (1960).....	41
Figura 2.13. Ilustração da influencia da função radial de distribuição g_0 sobre a viscosidade dinâmica do sólido μ_s . a) Correlação de Gidaspow <i>et al.</i> (1992); b) Correlação de Hrenya & Sinclair (1997).....	43
Figura 3.1. Volume de Controle e localização dos nós na direção x.....	48
Figura 3.2. Estêncil de interpolação.....	55
Figura 3.3. Diagrama de Sweby.....	58
Figura 3.4. Variável da face convectiva, ϕ_f , dependendo do comportamento local de ϕ normal à face do VC: a) localmente monotônica, b) $\phi_C = \phi_U$, c) $\phi_C > \phi_D$, d) $\phi_C < \phi_U$	60
Figura 3.5. Definição das Variáveis Normalizadas de acordo com a equação 3.44: a) variáveis originais não normalizadas; b) Correspondente diagrama em termos das variáveis normalizadas.....	61
Figura 3.6. Restrições do Limitador Universal no Diagrama de Variável Normalizada (NVD). Ponto C está localizado em (0.5, 0.75).....	61
Figura 3.7. Restrições do Limitador Universal (correspondente à figura 3.6) em termos do fator DWF. Ponto C está em (0.5, 0.5). Note a Singularidade em $\tilde{\phi}_C = 1$	63
Figura 3.8. Notação para a localização do nó baseada na direção do fluxo..	66
Figura 3.9a. Fatores de Downwind como função de Φ normalizado.....	68
Figura 3.9b. Φ_f normalizado como função de Φ_C normalizado.....	68
Figura 3.10. Localização dos Nós.....	69
Figura 3.11. Domínio físico para a convecção de espécies: Distribuição inicial da espécie 1.....	76

Figura 3.12. Comparação dos resultados de simulação para o problema de convecção de espécie de um gás considerando os diversos esquemas numéricos de discretização para o termo advectivo.....	76
Figura 3.13. Distribuição da fração de massa da espécie 1 utilizando Foup.	77
Figura 3.14. Distribuição da fração de massa da espécie 1 utilizando Minmod.....	78
Figura 3.15. Distribuição da fração de massa da espécie 1 utilizando Van Leer.....	78
Figura 3.16. Distribuição da fração de massa da espécie 1 utilizando Muscl.....	79
Figura 3.17. Distribuição da fração de massa da espécie 1 utilizando Superbee.....	79
Figura 3.18. Arranjo co-localizado de variáveis.....	89
Figura 3.19. Campo de pressões inconsistente.....	90
Figura 3.20. Volume de Controle para a componente x da equação de quantidade de movimento.....	90
Figura 3.21. Rótulo para as coordenadas no MFIX.....	92
Figura 3.22. Exemplo de condições na interface.....	98
Figura 3.23. Condição de Deslizamento Livre e de Plena Aderência na parede leste.....	101
Figura 3.24. Condições de Contorno para o Fluxo.....	108
Figura 4.1. Geometria e condições iniciais e de contorno usadas nas simulações assumindo coordenadas cartesianas. (Dados para a instalação do IIT, Luo, 1987).....	112
Figura 4.2. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo para a fase sólida 3,4 metros acima da entrada para os três tamanhos de malha mostrados na Figura 4.1. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].....	119
Figura 4.3. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo para a fase gasosa 3,4 metros acima da entrada para os três tamanhos de malha mostrados na Figura 4.1. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].....	120

Figura 4.4. Perfis radiais da fração volumétrica da fase sólida média no tempo 3,4 metros acima da entrada para os três tamanhos de malha mostrados na Figura 4.1. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].....	120
Figura 4.5. Perfis radiais da velocidade mássica da fase sólida média no tempo 5,3 metros acima da entrada para os três tamanhos de malha mostrados na Figura 4.1. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].....	121
Figura 4.6. Variação temporal média na seção da velocidade mássica do sólido a 5,3 metros acima da entrada do leito para a viscosidade do sólido linear, considerando-se a malha 3 e esquemas Foup e Superbee.	122
Figura 4.7. Perfis radiais da velocidade mássica da fase sólida média no tempo 5,3 metros acima da entrada. Considera-se os esquemas Foup, com médias tomadas entre 20 e 100 s e Superbee com médias entre 20 e 100 s e entre 20 e 150 s. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].....	122
Figura 4.8. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo para a fase gasosa 3,4 metros acima da entrada para as duas correlações para a viscosidade do sólido considerada e esquemas Foup, Muscl e Superbee para os termos advectivos. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].....	125
Figura 4.9. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo para a fase sólida 3,4 metros acima da entrada para as duas correlações para a viscosidade do sólido considerada e esquemas Foup, Muscl e Superbee para os termos advectivos. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].....	126
Figura 4.10. Perfis radiais da fração volumétrica da fase sólida média no tempo 3,4 metros acima da entrada para as duas correlações para a viscosidade do sólido considerada e esquemas Foup, Muscl e Superbee para os termos advectivos. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].....	126
Figura 4.11. Perfis axiais da fração volumétrica da fase sólida média no tempo para: (a) correlação linear para a viscosidade do sólido e (b) correlação baseada na TCEG para a viscosidade do sólido. Considerando os esquemas Foup, Superbee e Muscl para os termos advectivos.....	127

Figura 4.12. Perfis médios no tempo para a componente radial da velocidade para a fase sólida, 3,4 metros acima da entrada, considerando as duas correlações para a viscosidade do sólido e esquemas Foup e Superbee para os termos advectivos.....	128
Figura 4.13. Perfis médios no tempo para a velocidade mássica para a fase sólida, 5,3 metros acima da entrada, considerando a correlação linear e a baseada na TCEG para a viscosidade do sólido e os esquemas Foup, Superbee e Muscl para os termos advectivos.....	129
Figura 4.14. Variação temporal média na seção da velocidade mássica do sólido a 5,3 metros acima da entrada do leito para a correlação da viscosidade do sólido baseada na TCEG, considerando-se a malha 3 e esquemas Foup e Superbee.....	129
Figura 4.15. Perfis radiais da fração volumétrica da fase sólida média no tempo 3,4 metros acima da entrada considerando os modelos tradicional, TCEG_def e TCEG_mod.....	132
Figura 4.16. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo da fase sólida 3,4 metros acima da entrada considerando os modelos tradicional, TCEG_def e TCEG_mod.....	133
Figura 4.17. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo da fase gasosa 3,4 metros acima da entrada considerando os modelos tradicional, TCEG_def e TCEG_mod.....	133
Figura 4.18. Perfis médios no tempo para a velocidade mássica para a fase sólida, 5,3 metros acima da entrada, considerando os modelos tradicional, TCEG_def e TCEG_mod.....	134
Figura 4.19. Perfis radiais da fração volumétrica da fase sólida média no tempo 3,4 metros acima da entrada considerando os modelos TCEG_mod e TCEG_edp.....	137
Figura 4.20. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo da fase sólida 3,4 metros acima da entrada considerando os modelos TCEG_mod e TCEG_edp.....	137

Figura 4.21. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo da fase gasosa 3,4 metros acima da entrada considerando os modelos TCEG_mod e TCEG_edp.....	138
Figura 4.22. Perfis médios no tempo para a velocidade mássica para a fase sólida, 5,3 metros acima da entrada, considerando os modelos TCEG_mod e TCEG_edp.....	138
Figura 4.23. Variação temporal da fração volumétrica de sólido local típica resultante de simulação e aplicação da proposição de SHARMA <i>et al</i> (2000) para quantificação do tempo de vida de um cluster.....	144
Figura 4.24. Perfis axiais da concentração média de sólido nos “clusters”, α_{sc} em função da altura do leito, considerando as três malhas computacionais empregadas e esquemas advectivos FOUP e Superbee.	146
Figura 4.25. Perfis axiais do tempo de duração dos “clusters”, τ_c , em função da altura do leito, considerando as três malhas computacionais empregadas e esquemas advectivos FOUP e Superbee.....	147
Figura 4.26. Número de “clusters” observados em função da altura do leito, considerando as três malhas computacionais empregadas e esquemas advectivos FOUP e Superbee.....	147
Figura 4.27. Fração volumétrica de sólido média na seção em função da altura do leito para os modelos considerados e esquemas Foup e Superbee.....	149
Figura 4.28. Variação temporal da fração volumétrica de sólido a 5,5 m da entrada do leito obtida a partir de resultado de simulação com o modelo Tceg_edp.....	150
Figura 4.29. Propriedades de “clusters” médias na seção 3,5 metros acima da entrada do leito obtidas com os modelos tradicional, Tceg_mod e Tceg_edp.....	151
Figura 4.30. Propriedades de “clusters” médias na seção 4,5 metros acima da entrada do leito obtidas com os modelos tradicional, Tceg_mod e Tceg_edp.....	152

Figura 4.31. Propriedades de “clusters” médias na seção 5,5 metros acima da entrada do leito obtidas com os modelos tradicional, Tceg_mod e Tceg_edp.....	153
Figura 4.32. Frequência de ocorrência média de “clusters” ao longo da coluna com os diferentes modelos e esquemas “Foup” e “Superbee”.....	155
Figura 4.33. Número de “clusters” observados ao longo da coluna com os diferentes modelos e esquemas “Foup” e “Superbee”.....	155
Figura C1. Região CBC no plano $\tilde{\phi}_f - \tilde{\phi}_U$	179
Figura C2. região ECBC no plano $\hat{\phi}_f - \hat{\phi}_U$	181
Figura C3. Região TVD em Variáveis Normalizadas.....	182

Lista de Tabelas

TABELA 2.1. Modelos Hidrodinâmicos A e B, (GIDASPOW, 1994).....	21
TABELA 2.2. Modelo de Agrawal <i>et al.</i> (2001) para escoamentos gás-sólido.....	28
TABELA 2.3. Resumo de várias correlações para a viscosidade da fase sólida segundo a TCEG.....	32
TABELA 2.4. Resumo de várias correlações para a função radial de distribuição segundo a TCEG.....	39
TABELA 3.1. Fórmulas de Discretização em termos dos fatores de “Downwind”.....	67
TABELA 3.2. Análise Comparativa de tempo de processamento considerando o esquema de discretização Superbee com os métodos DWF e DC em três malhas computacionais.....	74
TABELA 4.1. Modelo hidrodinâmico B considerando o procedimento tradicional para o cálculo das relações constitutivas do tensor das tensões da fase sólida.....	113
TABELA 4.2. Modelo hidrodinâmico B considerando a TCEG algébrica “default” para o cálculo das relações constitutivas do tensor das tensões da fase sólida.....	114
TABELA 4.3. Modelo hidrodinâmico B considerando a TCEG algébrica “modificada” para o cálculo das relações constitutivas do tensor das tensões da fase sólida.....	115
TABELA 4.4. Modelo hidrodinâmico B considerando a TCEG com uma equação diferencial parcial para o compute da temperatura granular θ	116
TABELA 4.5. Análise de custo para o tempo de processamento em relação às correlações empíricas para a viscosidade do sólido.....	130
TABELA 4.6. Tipos de agrupamentos de partículas (particle clustering) observados em risers de LFCs (BI <i>et al.</i> apud HARRIS <i>et al.</i> , 2002).....	141

Simbologia Principal

A	Área da face do volume de controle, [m ²].
C_{Ds}	Coefficiente de arrasto para uma partícula num meio infinito.
d_p	Diâmetro de partícula, [m].
e	Coefficiente de restituição para a colisão entre as partículas sólidas.
e_w	Coefficiente de restituição para a colisão entre as partículas sólidas e a parede.
F_{gs}	Força de arrasto gás-sólido, [N].
$\vec{g}$	Aceleração da gravidade, [m/s ²].
g_0	Função radial de distribuição.
G	Modulo de elasticidade da fase sólida, [Pa].
G_s	Velocidade mássica da fase sólida, [kg/m ² s].
I_{gs}	Contabiliza as forças de iteração ou transferência de quantidade de movimento entre a fase gás e a fase sólida.
$\bar{\bar{I}}$	Tensor identidade.
J_{col}	Taxa de dissipação de energia granular através das colisões inelásticas.
J_{vis}	Taxa de dissipação de energia granular através do amortecimento viscoso.
$\vec{q}$	Fluxo difusivo de energia granular. [J/(m ² s)]
P_g	Pressão da fase gasosa, [Pa].
P_s	Pressão do sólido, [Pa].
Re	Número adimensional de Reynolds.
Re_p	Número de Reynolds baseado no diâmetro de partícula.
St	Número adimensional de Stokes.
$\bar{\bar{S}}_g$ e $\bar{\bar{S}}_s$	Tensor das tensões para a fase fluido e sólida.
t	Tempo [s].
$\vec{u}_g, \vec{v}_g$	Velocidades médias nas componentes radial e axial da fase gasosa no volume de controle, [m/s].

$\vec{u}_s, \vec{v}_s$	Velocidades médias nas componentes radial e axial da fase sólida no volume de controle, [m/s].
u_m, v_m, w_m	Velocidades nas direções x, y, z da fase gasosa / sólida no volume de controle, [m/s].
V_{rs}	Correlação para a velocidade terminal para a fase sólida.

Símbolos gregos

α_g	Fração de vazio
α_s	Fração volumétrica da fase sólida
α_m	Fração volumétrica da fase m (gás ou sólido)
β	Função de arrasto.
β_A, β_B	Função de arrasto na interface para os modelos A e B, [kg/m ³ -s].
ϕ	Propriedade transportada.
ϕ_s	Esfericidade da partícula.
ϕ'	Coefficiente de especularidade
η	Coefficiente da função de restituição.
λ_g, λ_s	Viscosidade volumétrica das fases gasosa e sólida, respectivamente, [kg/m-s].
λ_k	Viscosidade volumétrica da fase k, [kg/m-s].
$\lambda_{1,2,3,4}$	Direções características, [m/s].
μ_g, μ_s	Viscosidade dinâmica do gás e do sólido, respectivamente, [kg/m-s].
μ_k	Viscosidade dinâmica da fase k, [kg/m-s].
θ	Temperatura granular, [m ² /s ²].
Γ_{desl}	Taxa de produção de energia granular pelo deslizamento gás-partícula empregado na equação 2.41 e definido nas equações 2.52 e 2.53.
Γ_ϕ	Coefficiente de difusão da propriedade transportada ϕ .

ρ_g	Densidade do gás, [kg/m ³].
ρ_s	Densidade do sólido, [kg/m ³].
ρ'_g	Densidade efetiva (macroscópica) da fase gás.
ρ'_s	Densidade efetiva (macroscópica) da fase sólida.
$\bar{\tau}_g, \bar{\tau}_s$	Tensor das tensões viscosas do gás e do sólido, respectivamente, [Pa]
ψ	Fator de correção para a taxa de produção de energia granular pelo deslizamento gás-partícula definido e empregado na equação 2.32.
ω_{pk}	Fator de sob relaxação para a correção da pressão da fase k.

Subscritos

g	Fase gasosa
i	subíndice nas equações discretizadas em diferenças finitas indicando a direção radial ou horizontal.
j	subíndice nas equações discretizadas em diferenças finitas indicando a direção axial ou vertical.
k	Índice da fase, 1 gasosa, 2 sólida.
f	Fluido.
s	Fase sólida.
p	Particulado, partícula.
r	Relativa.
w	Face oeste do volume de controle.
e	Face leste do volume de controle.
n	Face norte do volume de controle.
s	Face sul do volume de controle.
b	Face da base do volume de controle.
t	Face do topo do volume de controle.
1, 2	Fase gasosa e sólida, respectivamente

Operadores e Identidades

$\vec{\nabla} \cdot$	Divergente
$\vec{\nabla}$	Gradiente
$\vec{\nabla}^T$	Gradiente transposto
$\langle \rangle$	Valor médio temporal, espacial ou estatístico; Operador médio

Abreviaturas e Siglas

ANL	Argonne National Laboratory.
CFL	Critério de Courant-Friedrichs e Lewy.
EDF	Electricité de France.
EDO	Equação diferencial ordinária.
EDP	Equação diferencial parcial.
IIT	Illinois Institute of Technology.
LFB	Leito fluidizado borbulhante.
LFC	Leito fluidizado circulante.
LFCC	Leito fluidizado circulante de combustão.
LFCCC	Leito fluidizado circulante de craqueamento catalítico.
MC	Modelos Contínuos.
MD	Modelos Discretos.
MFIX	Multiphase Flow with Interphase eXchanges.
METC	Morgantown Energy Technology Center.
NETL	National Energy Technology Laboratory.
SIMPLE	Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations.
TCEG	Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares.
Tel-Tek/	
Hit-TF	Telemark Technologycal R&D Centre/Telemark Institute of Technology.

Resumo

Silva, R. C. (2006). *Modelagem euleriana do escoamento gás-sólido em leito fluidizado circulante: análise da influência de parâmetros físicos e numéricos nos resultados de simulação*. São Carlos, 2006. 186 p. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

No presente trabalho desenvolve-se um estudo de modelagem matemática e simulação numérica do escoamento bifásico gás-sólido na coluna ascendente de um leito fluidizado circulante. Utiliza-se o modelo euleriano de duas fases separadas considerando dois procedimentos diferentes para a modelagem do tensor das tensões da fase sólida: modelo tradicional e a teoria cinética dos escoamentos granulares (TCEG).

As simulações numéricas são conduzidas com a utilização do código MFIX que é um software livre e disponível na rede (Internet). Os resultados de simulação numérica são avaliados por meio da análise da influência dos seguintes parâmetros: malha computacional, correlações para o computo do tensor das tensões da fase sólida e esquemas de discretização dos termos advectivos. Também se desenvolve estudo de caracterização de estruturas coerentes – “clusters”.

De forma complementar foram realizadas duas análises teóricas compreendendo: uma análise da influência das diversas correlações utilizadas na TCEG para o computo da viscosidade dinâmica do sólido; e uma análise enfocando o emprego de diversos esquemas de discretização para os termos advectivos presentes nas equações de conservação (Foup, Muscl, Van Leer, Minmod e Superbee). De todos os estudos e resultados apresentados no trabalho conclui-se que os escoamentos gás-sólido em leitos fluidizados circulantes são muito complexos, sendo necessário à realização de futuras pesquisas para uma melhor compreensão dos fenômenos físicos inerentes a esses escoamentos.

Palavras-chave: escoamentos bifásicos gás-sólido, modelo das duas fases separadas, leitos fluidizados circulantes, modelo tradicional, teoria cinética dos escoamentos granulares, MFIX, simulação numérica, esquemas de discretização dos termos advectivos, difusão numérica.

Abstract

Silva, R. C. (2006). *Eulerian modeling of the gas-solid flow in a circulating fluidized bed: analysis of the physical and numerical parameters influence in the simulation results*. São Carlos, 2006. 186 p. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

In the present work is described a mathematical model and numerical study simulation of the gas-solid flow in the riser of a circulating fluidized bed. It is used the two fluids eulerian model considering two different procedures for the solid phase stress tensor modeling: the traditional model and the kinetic theory of granular flows (KTGF). The numerical simulation results are evaluated through the influence analysis of the following parameters: computational mesh, correlations for computing the solid phase stress tensor and the discretization of the advective terms. It is also presented a study concerning the characterization coherent structures – “clusters”.

Complementing the above studies were accomplished two theoretical analyses comprehending: an influence analysis of several correlations used in the KTGF for computing the dynamic viscosity of the solid phase; and an analysis concerning several discretization schemes for the advective terms present in the conservative equations. Considering the developed studies and the obtained results it is concluded that the gas-solid flows in circulating fluidized beds are very complex, being necessary future research works for a better comprehension of the inherent physical phenomena to these flows.

Keywords: Two-phase gas-solid flow, two-fluid model, circulating fluidized bed, traditional model, kinetic theory granular flows, numerical simulation, discretization schemes for convective terms, numerical diffusion.

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1 Aplicações dos escoamentos gás-sólido em leitos fluidizados

A fluidização gás-sólido apresenta aplicações industriais variadas, entre as quais incluem-se aquelas nas indústrias do petróleo, química, metalúrgica e de geração de energia. Reatores de leito fluidizado são amplamente utilizados na combustão de carvão e combustíveis alternativos para geração termoeletrica 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 (LFB) atmosférico e pressurizado, e os reatores de leito fluidizado circulante (LFC). Os LFB e LFC 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. Os LFC operam no regime de fluidização rápida, em que o escoamento de gás ocorre a velocidades superiores a velocidade terminal do particulado. Nessas condições 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 parâmetros principais de operação num LFC são o fluxo de gás e a taxa de circulação de sólidos, sendo as condições de operação significativamente diferentes para distintas aplicações.

Os combustores de LFC têm emergido como uma opção promissora para a geração de energia em caldeiras de queima de carvão. Existem muitas vantagens na utilização destes combustores 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 grande contato entre o gás e o sólido assim como o tempo relativamente

grande de residência do sólido no leito permitem uma melhor captura do enxofre para uma dada razão Ca/S de alimentação TSUO (1989).

A compreensão quantitativa e qualitativa da hidrodinâmica do escoamento bifásico gás-sólido em LFCs é crucial para o projeto eficiente destas unidades industriais. Segundo TSUO (1989) é necessário estudar vários fatores relacionados a hidrodinâmica dos LFCs, tais como: a distribuição axial e radial não homogênea de ambas as fases, a formação de agregados 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.

A tecnologia de fluidização gás-sólido apresenta ainda problemas abertos, 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 LFC é caracterizada por grandes complexidades. Segundo PEIRANO & LECKNER (1998), num sistema típico de produção de energia elétrica o perfil axial da concentração média de sólidos divide-se em três zonas. Na base da coluna (zona inferior) tem-se uma região de entrada de gases e sólidos com fração volumétrica média de sólidos constante entre 0,2 e 0,4. Logo acima se forma uma região densa “splash zone” caracterizada por uma variação exponencial da concentração de sólidos com a altura ($\alpha_s < 0,2$). Acima da região densa forma-se a região de transporte (ou região de arrasto) que domina o escoamento em colunas circulantes, caracterizada por fração volumétrica média de sólidos entre 0,02 e 0,05. Essa região também apresenta uma variação exponencial da concentração média de sólidos, porém mais suave com relação à zona anterior. Nesta região o escoamento é caracterizado pela agregação de partículas nos denominados “clusters”, que são formados e dissipados com uma frequência característica. Há grande recirculação de sólidos, e a velocidade do gás é de ordem superior em relação à velocidade terminal de partículas individuais. Deve-se notar que os “clusters” são formados principalmente como resultado de efeitos hidrodinâmicos, sendo o seu mecanismo de formação diferente daquele dos aglomerados, nos quais as partículas se aderem entre si,

principalmente por atração superficial (forças de van der Waals e eletrostáticas) e por interações mecânicas ou químicas HORIO & CLIFT (1992).

Considerando estas observações, a hidrodinâmica de um LFC pode ser analisada dos pontos de vista macroscópico e mesoscópico. O comportamento macroscópico mostra não uniformidade da concentração de sólido média no tempo e no espaço, nas direções radial e axial. A existência de “clusters” caracteriza o comportamento mesoscópico, definido pelo caráter local transiente do escoamento FAN & ZHU (1998).

O comportamento hidrodinâmico macroscópico tem sido intensamente abordado na literatura. Estudam-se perfis axiais da fração de vazio média na seção transversal (RHODES & GELDART (1987); KUNII & LEVENSPIEL (1990) e YANG (1992), entre outros), perfis radiais da fração volumétrica e do fluxo de sólidos, e velocidade mássica da fase sólida (HARTGE *et al.* (1986); RHODES *et al.* (1992) e HERB *et al.* (1992); entre outros), e a fração volumétrica de sólidos em toda a coluna (“overall solids hold up”) KUNII & LEVENSPIEL (1990). Estes aspectos descrevem o comportamento médio no tempo do escoamento. Por outro lado, a nível mesoscópico deve-se analisar o comportamento transiente do sistema. A análise da estrutura instantânea do escoamento requer o reconhecimento dos seguintes fatores FAN & ZHU (1998):

1. As partículas migram para a região da parede devido às colisões partícula-partícula, (difusão), e devido aos efeitos das colisões partícula-parede. Esses efeitos provocam um alargamento da distribuição da velocidade das partículas na direção radial;
2. O não deslizamento da fase gasosa nas paredes resulta numa baixa velocidade e numa região turbulenta de baixa intensidade na vizinhança da parede.

Estes fatores conduzem a uma acumulação localizada de particulado na região da parede. Esta acumulação altera o movimento de larga escala (baixa frequência) do escoamento, o qual por sua vez afeta o tamanho dos “clusters” e seu movimento. Neste contexto, JIANG *et al.* (1993) apud FAN & ZHU (1998) e GIDASPOW *et al.* (1989) desenvolveram estudos, experimental e de simulação, respectivamente, observando um possível mecanismo de formação de “clusters” no escoamento disperso na região de saída do tubo ascendente. Foi constatada uma camada de sólido ondulatória na região da parede que se fragmenta em “clusters” relativamente pequenos durante o processo de ejeção de sólido para o centro da coluna, devido à ação dos grandes vórtices nessa

região. Outras pesquisas nessa direção são necessárias para esclarecer o mecanismo geral do escoamento ondulatório “wavy flow” e o fenômeno de formação de “clusters” nestas instalações FAN & ZHU (1998).

Devido ao comportamento mesoscópico, o escoamento em LFC é tipicamente turbulento e instável, com condições de transporte axial altamente convectivas e transporte transversal difusivo menos intenso. As distribuições axial e radial das frações de ambas as fases são altamente não homogêneas. Com isso estabelece-se, um padrão de escoamento pistonado-anular, com fluxo descendente mais denso nas paredes, e ascendente mais disperso no centro da coluna com “clusters” em movimentos ascendentes e descendentes. Essas condições complexas de escoamento provêm um intenso contato superficial entre os gases e sólido, garantindo as altas taxas de reação, necessárias aos processos reativos.

HORIO (1997) apontou que, no caso dos LFCCC – Leitos Fluidizados Circulantes de Craqueamento Catalítico, a existência de “clusters” e de um fluxo descendente de sólido ao longo das paredes provocam uma circulação interna de sólido não favorável devido ao incremento da mistura do gás “backmixing” e o conseqüente decréscimo da produção. Para os LFCC – Leitos Fluidizados Circulantes de Combustão esta circulação de sólido na região superior dispersa é favorável à transferência de calor para as paredes e para carregar o calor gerado pela combustão dos voláteis e do carvão desvolatilizado para a região densa do leito.

Evidencia-se, então, que o conhecimento da hidrodinâmica do processo de fluidização é crucial para que os parâmetros reativos e de transporte de massa no reator possam ser estabelecidos. Uma determinação exata desta hidrodinâmica 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; permite a determinação de concentrações de gases gerados no processo, incluindo emissões de poluentes.

Esta seção foi baseada em CABEZAS-GÓMEZ (2003).

1.2 Breve resenha histórica da modelagem numérica aplicada a fluidização

As pesquisas em processos de fluidização gás-sólido tiveram início fundamentalmente na segunda metade do século XX. Os primeiros trabalhos relacionavam-se principalmente a 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.

PRITCHETT *et al.* (1978), do grupo “System-Science-Software”, foram os primeiros autores a reportar soluções numéricas das equações conservativas não-lineares para suspensões fluidizadas. Por meio do seu código computacional (CHEMFLUG) reproduziram, pela primeira vez, a formação de bolhas provocadas por um jato de gás contínuo através de um leito fluidizado. Esse modelo hidrodinâmico é apresentado em GIDASPOW (1994). SCHNEYER *et al.* (1981) estenderam o modelo hidrodinâmico de PRITCHETT *et al.* (1978) para a modelagem de uma instalação completa de gaseificação de carvão em leito fluidizado. Segundo KUIPERS & VAN SWAAIJ (1997) este modelo provavelmente representa o esforço de modelagem numérica em fluidização mais completo e ambicioso desenvolvido até então.

Paralelamente o grupo de pesquisa JAYCOR (SCHARFF *et al.* (1982)) desenvolveu um modelo hidrodinâmico para gaseificação de carvão em leito fluidizado denominado FLAG. Posteriormente o grupo de pesquisa do IIT/ANL (*Illinois Institute of Technology/Argonne National Laboratory*) desenvolveu um código computacional para modelar o escoamento gás-sólido em LFB e LFC. O código é uma modificação do modelo 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 estudos têm sido propostos a partir dos desenvolvimentos do grupo do IIT/ANL GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983); SYAMLAL & GIDASPOW (1985); BOUILLARD *et al.* (1989); TSUO & GIDASPOW (1990); DING & GIDASPOW (1990), entre outros.

Como resultado da evolução do conhecimento nesta área há uma tendência à modelagem de situações experimentais cada vez mais reais. Alguns trabalhos nessa

direção foram executados por DING (1990), que desenvolveu modelagem aplicada à instalação experimental de LFCC PIROFLOW. Em THEOLOGOS & MARKATOS (1992) apresenta-se modelagem para os processos hidrodinâmico e de transferência de calor em um reator de LFCCC. GIDASPOW *et al.* (1992) modelaram a instalação PIROFLOW completa usando um modelo 2D para prever a produção de gás de síntese a partir do carvão. Nesse modelo foram incorporadas as equações de continuidade das espécies gasosas participantes das reações do processo.

A modelagem numérica dos processos de fluidização gás-sólido representa uma ferramenta auxiliar para a minimização dos esforços experimentais requeridos no desenvolvimento de instalações industriais. A experimentação e desenvolvimento de protótipos são ferramentas principais no projeto de qualquer equipamento industrial. 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 matemáticos empregados necessitam, para sua validação, de medições experimentais complexas e de difícil execução. Assim, o desenvolvimento de modelagem representa também um estímulo ao desenvolvimento de novas técnicas e métodos experimentais.

Esta seção foi baseada em CABEZAS-GÓMEZ (2003).

1.3 A presença da difusão numérica na simulação do escoamento gás-sólido em leitos fluidizados

A idéia de descrever leitos fluidizados com o modelo hidrodinâmico de dois fluidos existe desde os anos 60 (sessenta): Davidson (1961), Jackson (1963), Murray (1965), Collins (1965), Anderson e Jackson (1967) e Stewart (1968) apud GUENTHER & SYAMLAL (2001). O conjunto de equações a partir destes pesquisadores é muito difícil de se resolver, e soluções numéricas que predizem bolhas veio muito mais tarde: Gidaspow *et al.* (1983), Gidaspow (1994), Bouillard *et al.* (1991), Kuipers *et al.* (1993), Sanyal e Cesmebasi (1994), Boemer *et al.* (1997) e Syamlal & O'Brien (1989) apud GUENTHER & SYAMLAL (2001). Em cada um destes estudos, a forma da bolha predita, observada a partir de um contorno da fração de vazio, produziu bolhas apontadas e alongadas ao invés de bolhas arredondadas (com a forma de rins)

encontradas experimentalmente e utilizadas nas análises teóricas de COLLINS (1965) e STEWART (1968). Estes estudos fizeram crescer o questionamento se o modelo de dois fluidos é de alguma forma incompleto quando resulta na predição de bolhas com a forma não fisicamente correta ou se a técnica numérica utilizada foi inadequada para resolver as equações corretamente. Recentemente, estudos numéricos mostraram que o problema seja com a técnica numérica. ANDERSON *et al.* (1995) usaram o esquema de elementos finitos de Galerkin no processo de discretização e GLASSER *et al.* (1996) utilizaram um método de Fourier pseudoespectral. Ambas investigações mostraram como pequenas perturbações do estado uniforme cresce em estruturas que se assemelham a bolhas arredondadas. SYAMLAL (1998) conduziu uma variedade de simulações preliminares bidimensionais com os esquemas “first order upwinding” (FOUP) e com segunda ordem de precisão dada pelo esquema “Superbee”. A forma das bolhas calculadas pelo esquema FOUP eram apontadas enquanto que o “Superbee” obteve bolhas com a forma arredondada. Embora outros estudos conduzidos com métodos de segunda ordem têm reportado bolhas com a forma arredondada, eles não estabeleceram a difusão numérica como a causa da forma apontada das bolhas. Por exemplo, SANYAL (1995) comparou os resultados de uma simulação 3D com o esquema “Superbee” e uma simulação 2D que utilizou o esquema FOUP. A forma da bolha no experimento 3D era claramente arredondada. CHRISTIE *et al.* (1998) resolveram um conjunto reduzido de equações (com uma equação algébrica para a equação de quantidade de movimento da fase sólida) utilizando um método de operador separado (“operator splitting method”). Com o esquema FOUP eles não conseguiram a típica bolha apontada, mas sim uma bolha com a forma de rim invertida. Entretanto, foram capazes de calcular bolhas com uma forma arredondada utilizando o “Superbee”. Nenhum destes estudos estabeleceu a independência de malha para os cálculos com o “Superbee”, o que é essencial, para garantir que a forma arredondada é realmente a solução verdadeira das equações. Estes estudos indicam que a forma não física da bolha é um artefato numérico, ao invés de uma deficiência na teoria dos dois fluidos.

GUENTHER & SYAMLAL (2001) investigaram a sensibilidade da solução numérica das equações do escoamento gás-sólido para a ordem de precisão dos termos advectivos discretizados. Eles utilizaram as bolhas formadas em um leito fluidizado como uma métrica para comparar os esquemas de discretização. As bolhas preditas com um esquema de primeira ordem apresentaram uma forma, não física, apontada (figura

1.2 a). Métodos de alta ordem, especialmente “SMART” e “Superbee”, produziram bolhas mais realísticas, com a forma arredondada (figura 1.2 d). Com simulação em malha fina a independência da solução foi demonstrada. Baseados nestes fatos, eles concluíram que a forma da bolha apontada predita pelo esquema Foup é realmente um artefato numérico, causado pela difusão numérica introduzida pela discretização dos termos de advecção na equação de quantidade de movimento da fase sólida. Estes resultados não físicos foram efetivamente removidos com o uso de esquemas de discretização de alta ordem, tais como “SMART” e “Superbee” para discretizar os termos advectivos na equação de quantidade de movimento da fase sólida.

Na figura 1.1 tem-se a bolha experimental ilustrada em GIDASPOW (1994) e na figura 1.2 a, b, c, d têm-se as bolhas preditas usando os esquemas Foup, Van Leer, Muscl e Superbee a partir da reprodução do experimento numérico de GUENTHER & SYAMLAL (2001) utilizando o código MFIX.

Figura 1.1. Bolha experimental. Por Gidaspow (1994).

Figura 1.2. Formação e crescimento de bolha utilizando: a) Foup, b) Van Leer, c) Muscl e d) Superbee. Malha: 124x108.

1.4 Objetivos e apresentação do trabalho

No presente trabalho pretende-se avaliar a influência qualitativa no desempenho de um LFC, quando esquemas de ordens diferentes são utilizados para discretizar os termos não lineares presentes nas equações de quantidade de movimento. A avaliação dos resultados de simulação numérica será efetuada comparando-se parâmetros médios

experimentais (fração de sólido, velocidade do sólido e do gás e velocidade mássica do sólido) em diferentes seções do leito. Uma análise do comportamento instantâneo do leito também se faz necessária para uma melhor compreensão do efeito da difusão numérica quando se emprega o esquema FOUP na resolução do sistema de equações envolvido, esta análise se dará por meio de metodologia de identificação e caracterização de estruturas coerentes características do escoamento (análise dos “clusters”) segundo a metodologia empregada em CABEZAS-GÓMEZ (2003).

Os objetivos deste trabalho são:

1. Realizar experimentos computacionais com modelos eulerianos do contínuo. São consideradas formulações laminares, e relações de fechamento empíricas e baseadas na teoria cinética dos escoamentos granulares;
2. Realizar estudos fundamentais e de estado da arte, revisão de procedimentos numéricos, e simulação visando análises qualitativas. Concentram-se esforços na investigação da influência exercida pela ordem dos esquemas numéricos empregados no processo de discretização do termo de convecção, presente nas equações de transportes, sobre o desempenho médio e instantâneo do leito fluidizado circulante.

Os experimentos computacionais descritos acima serão realizados utilizando-se o código MFIX “Multiphase Flow with Interphase eXchanges” desenvolvido no “Morgantown Energy Technology Center” (METC). O MFIX é um código cujo modelo hidrodinâmico descreve reações químicas e transferência de calor em escoamentos densos ou diluídos, escoamentos estes que aparecem tipicamente em processos de conversão de energia e em reatores químicos. Os resultados obtidos pelo MFIX fornecem informações detalhadas de distribuições de pressão, temperatura, composição e velocidade nos reatores. Outras informações a respeito do código MFIX podem ser obtidas em SYAMLAL *et al.* (1993) ou na web www.mfix.org.

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

Capítulo 1. Apresenta-se uma descrição breve do escoamento gás-sólido, com ênfase às suas principais características e aplicações, uma breve resenha histórica da modelagem numérica de escoamentos gás-sólidos em fluidização e finalmente, apresenta-se uma motivação para o desenvolvimento do trabalho, com uma discussão sobre a difusão numérica na simulação do escoamento gás-sólido em leitos fluidizados.

Capítulo 2. Exposição sucinta da formulação teórica do modelo das duas fases separadas utilizando o procedimento tradicional e a TCEG, enfatizando a obtenção dos modelos hidrodinâmicos A e B utilizados no IIT/ANL e o modelo matemático empregado por AGRAWAL *et al.* (2001), respectivamente. Faz-se uma análise física comparativa das correlações usadas para modelar as leis constitutivas da TCEG.

Capítulo 3. Apresentação e discussão da metodologia de solução numérica utilizada no código MFIX, com ênfase na obtenção das fórmulas discretas dos termos de convecção presentes na equação de transporte de uma propriedade escalar.

Capítulo 4. Apresentam-se resultados de simulação numérica 2D obtidos a partir do modelo B para o tubo ascendente da instalação de transporte do IIT (LUO (1987)). Apresentam-se simulações com o modelo tradicional com duas correlações empíricas para o compute da viscosidade do sólido e simulações com o emprego da TCEG (Teoria Cinética para os Escoamentos Granulares) com a formulação algébrica e com a resolução de uma equação diferencial parcial para o compute da temperatura granular. Comparam-se os resultados para os modelos físicos empregados e para diversos esquemas numéricos de discretização dos termos de advecção presentes nas equações de conservação. Efetuam-se análises qualitativa e quantitativa dos resultados médios e avaliação de resultados de simulação numérica por meio de metodologia de identificação e caracterização de estruturas coerentes - “clusters”.

Capítulo 5. Conclusões do trabalho desenvolvido e propostas de continuidade a serem implementadas.

Capítulo 2

TEORIA HIDRODINÂMICA

2.1 Introdução

Os modelos matemáticos utilizados na simulação numérica de fluidos são baseados fundamentalmente em sistemas de equações diferenciais parciais (EDP), com condições iniciais e de contorno associadas, que modelam matematicamente os fenômenos físicos que ocorrem no processo. Na obtenção de um sistema fechado de EDPs segue-se uma lógica baseada na aplicação de leis físicas de conservação, tais como conservação de massa, de quantidade de movimento (2ª lei de Newton) e energia (1ª lei da Termodinâmica). Em escoamentos bifásicos a aplicação destas leis dificulta-se devido à presença de duas fases diferentes, e de interfaces que separam essas fases entre si. 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 sua modelagem.

Pode-se contornar 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, resultam 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)). ISHII & MISHIMA (1984) resumem os três procedimentos principais adotados para se desenvolver modelos matemáticos de escoamentos multifásicos, a partir do ponto de vista macroscópico, eliminando parcialmente os detalhes da formulação local instantânea como está mostrado na figura 2.1.

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

Os procedimentos Modelo da Difusão e Volume de Controle 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 ampla manipulação das equações. Para uma descrição de cada método pode-se consultar, por exemplo, ISHII & MISHIMA (1984).

O método mais usado na atualidade é o das equações de balanço médias, ou método de médias. O procedimento é subdividido em três grupos (ISHII (1975)): as médias de Euler; as médias de Lagrange; e as médias estatísticas de Boltzmann. Esses grupos também se subdividem em vários subgrupos dependendo da variável utilizada para estabelecer as médias. Essa classificação é mostrada na Figura 2.1.

A Figura 2.1 mostra que dependendo do procedimento de médias adotado, existem várias formulações diferentes para um sistema bifásico. Entre elas podem-se

nomear as seguintes: formulação de Euler/Euler, formulação de Euler/Lagrange e formulação de Euler/Boltzmann.

Neste capítulo apresentam-se, de forma sucinta, duas formulações que foram usadas nas simulações deste trabalho, a saber: Formulação euleriana/euleriana clássica e a formulação de Euler/Boltzmann (Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares - TCEG).

Antes de apresentar estes modelos matemáticos, será apresentada primeiramente uma seção tratando das diversas classificações dos escoamentos gás-sólido utilizadas na bibliografia. A importância dessas classificações reside no fato de que elas constituem um guia para a escolha do modelo matemático a ser utilizado em função do padrão de escoamento, tipo de instalação e parâmetros geométricos e de operação. Apesar disso, poucos trabalhos utilizam este procedimento por duas razões básicas: à não existência de um método de classificação geral e seguro, que considere todas as características e parâmetros determinantes nos escoamentos gás-sólido; e a não existência de um modelo físico correto ou definitivo que permita considerar todos os aspectos que intervêm nos fenômenos de transporte deste tipo de escoamento. Considera-se que o uso de algum tipo de classificação pode levar ao desenvolvimento de simulações com modelos mais realísticos. Por outro lado, o melhoramento das classificações existentes depende de simulações sofisticadas, assim como de medições experimentais exatas de difícil execução.

2.2 Classificação de escoamentos bifásicos gás-sólido

Para modelar escoamento bifásico gás-sólido, é importante saber considerar as interações entre as fases com o objetivo de determinar a influência que uma fase tem sobre a outra, e determinar corretamente as equações de balanço a serem utilizadas no cálculo dos valores médios e flutuantes das variáveis hidrodinâmicas em questão (pressão, velocidade, fração volumétrica de cada fase, etc.). Isto é válido para qualquer tipo de formulação empregada na simulação do escoamento, isto é Euler-Euler, Euler-Lagrange ou Euler-Boltzmann.

O método utilizado na literatura para avaliar a influência da fase gasosa sob a sólida ou as partículas sólidas e vice-versa incluindo turbulência é por meio da análise de escalas de tempo características, e números adimensionais. Ou seja, o escoamento gás-sólido é classificado de acordo com determinados critérios e posteriormente é

modelado em dependência dessa classificação. PEIRANO & LECKNER (1998) apresentam três tipos de classificações usadas na literatura. O primeiro tipo corresponde à proposta por ELGOBASHI (1991), a qual também é descrita em KUIPERS & VAN SWAAIJ (1997). O segundo tipo não inclui o aspecto de modelagem da turbulência e baseia-se apenas na análise das escalas de tempo características. O terceiro tipo é dado por Koch apud PEIRANO & LECKNER (1998), sendo válida apenas para escoamentos dispersos com um número de Reynolds para as partículas bem baixo, isto é $Re_p \ll 1$.

A seguir apresenta-se uma análise, tomada de PEIRANO & LECKNER (1998), da primeira classificação, originalmente proposta por ELGOBASHI (1991). Posteriormente apresenta-se a segunda classificação comentada por PEIRANO & LECKNER (1998) e mostrada e discutida por PEIRANO (1998).

ELGOBASHI (1991) propôs uma classificação das suspensões gás-sólido baseado em escalas de tempo características e também na distância relativa entre as partículas (S/d_p) , sendo S a distância entre os centros de duas partículas vizinhas. As escalas de tempo características analisadas foram: τ_p o tempo de resposta da partícula, τ_K a escala de tempo de Kolmogorov, τ_e a escala de tempo característica dos grandes vórtices. A Figura 2.2, tomada de ELGOBASHI (1991) ilustra esta classificação.

Figura 2.2. Classificação dos regimes de escoamento para escoamentos gás-sólido de acordo à Elgobashi (1991).

Quando a suspensão de partículas é muito dispersa, $\alpha_s < 10^{-6}$ (α_s : fração volumétrica de sólido), ou equivalentemente $(S/d_p \gg 100)$, as partículas não tem efeito no movimento turbulento da fase contínua, mas seu movimento pode ser governado pelo movimento turbulento do gás se sua inércia for suficientemente pequena. Esta interação entre as partículas e a turbulência da fase contínua é denominada de **acoplamento de uma via**. Isto significa que a dispersão das partículas depende do estado da turbulência do gás, porém não existe uma retroalimentação das partículas para o movimento turbulento da fase contínua (ELGOBASHI (1991)). Quando a fração volumétrica de sólidos é incrementada, $10^{-6} \leq \alpha_s \leq 10^{-3}$ ou $10 \leq S/d_p < 100$, os efeitos da presença das partículas no movimento turbulento da fase gasosa podem ser observados. Esta interação é denominada de **acoplamento de duas vias**. Nesta região a turbulência do gás pode-se modificar de duas formas: aumentada ou suprimida. Para um mesmo valor de α_s , a turbulência pode aumentar em função do incremento do tempo de resposta da partícula τ_p , devido ao aumento de d_p . Neste caso o número de Reynolds da partícula Re_p incrementa-se e tem lugar um desprendimento de vórtices “vortex shedding” provocando por sua vez um aumento ou produção de energia cinética turbulenta (PEIRANO & LECKNER (1998)). Ao contrário, quando o tempo de resposta da partícula τ_p diminui, não existe um desprendimento de vórtices e a energia é dissipada devido ao trabalho desenvolvido pelas estruturas turbilhonares para acelerar as partículas.

O acoplamento de duas vias tem sido observado experimentalmente segundo GORE & CROWE (1989). Acredita-se que estes dois mecanismos, o desprendimento de vórtices e o trabalho feito pelas estruturas turbilhonares, sejam os mecanismos predominantes na modulação da turbulência em escoamentos gás-sólido. Em geral, para escoamentos gás-sólido, cinco mecanismos podem ser responsáveis pela modulação da turbulência (YUAN & MICHAELIDES, (1992)). Estes mecanismos são: **a)** dissipação da energia cinética turbulenta pelas partículas; **b)** incremento da viscosidade turbulenta devido à presença das partículas; **c)** o desprendimento de vórtices por trás das partículas; **d)** movimentação do gás com as partículas, pelo denominado efeito de massa inercial; **e)** concentração preferencial das partículas pela turbulência, isto é, as partículas concentram-se seletivamente em estruturas particulares pela turbulência da fase gasosa, sendo que esta pode causar uma rápida atenuação dessa estrutura ou formar uma nova

instabilidade. Estes mecanismos podem não ser independente, e, além disso, **b)** e **e)** podem ser de menor importância em escoamentos bem dispersos. Os dois casos de escoamentos acima analisados podem ser classificados como escoamentos dispersos. Quando a fração volumétrica de sólidos excede certo valor, $\alpha_s > 10^{-3}$ ou $S/d_p < 10$, o escoamento pode ser referido como denso. Neste caso a distância relativa entre as partículas é muito pequena e as partículas colidem entre si. Aqui, além do acoplamento de duas vias entre as partículas e a turbulência, as colisões partícula-partícula têm lugar, conseqüentemente este tipo de interação denomina-se **acoplamento de quatro vias**. Na maioria das aplicações de fluidização, espera-se que aconteça o acoplamento de quatro vias, pelo menos nas regiões densas do leito. Segundo ELGOBASHI (1991), devido às complexidades dos escoamentos neste regime, a maioria dos estudos numéricos e experimentais são conduzidos para suspensões dispersas.

Mostra-se a segunda classificação na Figura 2.3 extraída de PEIRANO (1998). Esta é representada em função das escalas de tempo características e do número adimensional de Stokes, definido como $St = \tau_p / \tau_e$. Similarmente a ELGOBASHI (1991) este autor distingue entre as suspensões densas e dispersas. Nas suspensões dispersas, os mecanismos associados à fase contínua (propriedades do escoamento) dominam os mecanismos associados à fase discreta (colisões), ou seja, $\tau_p \ll \tau_e$, onde τ_e representa o tempo de colisão partícula-partícula. Nas suspensões densas observa-se o fenômeno contrário $\tau_p \gg \tau_e$. Entre estas duas regiões acontece o acoplamento de duas vias.

Cada região do escoamento gás-sólido é caracterizado pelo número de Stokes. No caso disperso, quando $St \gg 1$, as partículas não são influenciadas pela turbulência da fase gasosa. Quando $St \sim 1$ as partículas respondem à turbulência da fase gasosa. Se $St \ll 1$ as partículas atuam como partículas de fluido.

Na região densa, quando $St \gg 1$, as partículas colidem sem corresponder ao fluido. Isto é similar a um escoamento granular seco (escoamento granular sem gás intersticial). Este regime corresponde aos leitos fluidizados borbulhantes. Quando $St \sim 1$, as partículas respondem à turbulência, modulam ela e colidem. Este regime é o denominado de acoplamento de quatro vias. Esta região é observada provavelmente nos leitos fluidizados circulantes. Se $St \ll 1$, a suspensão pode ser classificada como coloidal. Este regime não se observa nas aplicações que envolvem leitos fluidizados

borbulhantes e circulantes. Na região intermediária correspondente ao acoplamento de duas vias, não é possível classificar a diminuição ou o aumento da turbulência da fase gasosa como apenas função do número de Stokes.

Figura 2.3. Classificação dos escoamentos gás-sólido em dependência das escalas de tempo características. Tomada de Peirano (1998).

Como se pode observar, existem vários tipos de classificação em função do método de análise empregado. Pela segunda classificação (Figura 2.3) os leitos fluidizados circulantes estão na região caracterizada por um acoplamento de quatro vias. Nesse caso a obtenção de um modelo matemático que considera todas as interações necessárias é uma tarefa bastante complicada. Os modelos que mais se aproximam a este tipo de formulação são os que consideram a influência do fluido intersticial, permitindo dessa forma calcular como as partículas ou a fase sólida influenciam na turbulência da fase gasosa. As colisões são consideradas por meio da formulação da TCEG.

2.3 Formulação euleriana/euleriana clássica

A formulação euleriana/euleriana clássica é bem descrita na literatura (SLATTERY, (1967 a,b), WHITAKER (1969), ISHII (1975), DELHAYE & ACHARD (1976 e 1977), DELHAYE (1981), DREW (1983), SOO (1990)). Esta formulação permite a obtenção do denominado **modelo das duas fases separadas**. Este modelo é geralmente obtido utilizando o procedimento de médias de Euler, e constitui-se numa das formulações principais das equações de campo macroscópicas para um sistema bifásico. O modelo é formulado considerando cada fase em separado, em termos de um sistema de equações de conservação de massa, quantidade de movimento, e energia, para cada fase. Visto que ambas as fases interagem entre si, aparecem nas equações de campo termos devidos a essa interação, que especificam os transportes de massa, quantidade de movimento e energia por meio da interface.

2.3.1 Procedimento para a formulação do modelo das duas fases separadas

A formulação do modelo das duas fases separadas é desenvolvida pelo procedimento mostrado na Figura 2.4 (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-Ostrogradskii (ver Anexo A) os balanços integrais dão origem às 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. Aplicam-se então leis de fechamento com o objetivo de modelar os termos indeterminados nas equações de balanço. Por último são estabelecidas condições iniciais e de contorno, completando a formulação do modelo das duas fases separadas.

Figura 2.4. Procedimento geral para a formulação do modelo de duas fases (ENWALD *et al.*, 1996).

O desenvolvimento detalhado desta metodologia voltado para escoamentos gás-sólido é apresentado em ENWALD *et al.* (1996) com base em inúmeros trabalhos da literatura (ISHII, (1975); DELHAYE & ACHARD, (1976 e 1977); DELHAYE, (1981); DREW, (1983) e DREW & LAHEY, (1993) apud ENWALD *et al.*, (1996)). Um estudo deste desenvolvimento é apresentado também em CABEZAS-GÓMEZ, (1999); CABEZAS-GÓMEZ & MILIOLI, (2001) e CABEZAS-GÓMEZ, (2003).

O desenvolvimento do modelo das duas fases separadas não será considerado no presente trabalho, por não constituir parte do escopo e objetivos fixados. Os trabalhos acima citados devem ser consultados para uma melhor compreensão desse assunto.

2.4 Modelos hidrodinâmicos A e B, (IIT/ANL)

O modelo das duas fases separadas é obtido por meio de aplicação, ao sistema geral de EDPs, das condições iniciais e de contorno apropriadas. Estas condições são definidas em função da geometria, das interações físicas das fases com os contornos do

sistema, de considerações de simetria e do estado inicial no domínio físico considerado. Como exemplo do modelo das duas fases separadas aplicado especificamente a um escoamento bifásico gás-sólido, apresentam-se, na Tabela 2.1, os modelos hidrodinâmicos A e B do IIT/ANL.

No modelo A o gradiente de pressão do gás está incluído em cada equação de quantidade de movimento para cada fase. No modelo B o gradiente de pressão está incluído por completo apenas na equação de quantidade de movimento para a fase gasosa, e a expressão para a função de arrasto β é modificada para satisfazer o princípio de Archimedes e a relação usual de fluidização mínima dada em KUNII & LEVENSPIEL (1991) e BOUILLARD *et al.* (1989). Este modelo foi adotado no desenvolvimento do presente trabalho devido à estabilidade numérica condicionada do modelo A, causada pela existência de direções características complexas (BOUILLARD *et al.* (1989)). Considera-se que o modelo B transforma o sistema de equações condicionalmente estável do modelo A num sistema de EDPs bem posto (ou seja, incondicionalmente estável). No entanto, segundo ENWALD *et al.* (1996) não existe ainda um critério para determinar quando o modelo multidimensional das duas fases separadas é matematicamente bem comportado como problema multidimensional de valor inicial e de contorno.

Tabela 2.1. Modelos Hidrodinâmicos A e B, (GIDASPOW, 1994)

Equações de conservação da massa	
Fase gasosa	
$\frac{\partial(\alpha_g \cdot \rho_g)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g) = 0$	(2.1)
Fase sólida	
$\frac{\partial(\alpha_s \cdot \rho_s)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{v}_s) = 0$	(2.2)
Equações de conservação da quantidade de movimento. Modelo A	
Fase gasosa	
$\frac{\partial(\rho_g \alpha_g \vec{v}_g)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_g \alpha_g \vec{v}_g \vec{v}_g) = -\alpha_g \vec{\nabla} P$	(2.3)
$- \beta_A (\vec{v}_g - \vec{v}_s) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_g \vec{\tau}_g) + \rho_g \alpha_g \vec{g}$	

Fase sólida

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_s \alpha_s \bar{\mathbf{v}}_s)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho_s \alpha_s \bar{\mathbf{v}}_s \bar{\mathbf{v}}_s) = -\alpha_s \bar{\nabla} P + \beta_A (\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s) \\ + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_s \bar{\boldsymbol{\tau}}_s) - G(\alpha_s) \bar{\nabla} \alpha_s + \rho_s \alpha_s \bar{\mathbf{g}} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Equações de conservação da quantidade de movimento. Modelo B

Fase gasosa

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_g \alpha_g \bar{\mathbf{v}}_g)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho_g \alpha_g \bar{\mathbf{v}}_g \bar{\mathbf{v}}_g) = -\bar{\nabla} P \\ - \beta_B (\bar{\mathbf{v}}_g - \bar{\mathbf{v}}_s) + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_g \bar{\boldsymbol{\tau}}_g) + \rho_g \bar{\mathbf{g}} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Fase sólida

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_s \alpha_s \bar{\mathbf{v}}_s)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho_s \alpha_s \bar{\mathbf{v}}_s \bar{\mathbf{v}}_s) = \beta_B (\bar{\mathbf{v}}_g - \bar{\mathbf{v}}_s) \\ + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_s \bar{\boldsymbol{\tau}}_s) - G(\alpha_g) \bar{\nabla} \alpha_s + (\rho_s - \rho_g) \alpha_s \bar{\mathbf{g}} \end{aligned} \quad (2.6)$$

Equações de fechamento

Equações de estado (fase gasosa como gás ideal)

$$\rho_g = P/(R_g T) \text{ e } \rho_s = \rho_s \text{ (constante)} \quad (2.7)$$

Definição da fração volumétrica

$$\alpha_g + \alpha_s = 1 \quad (2.8)$$

Função de arrasto na interface, β_A , Modelo A

Baseada na equação de Ergun (1952) para $\alpha_s \geq 0,2$:

$$\beta_A = 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g (d_p \phi_s)^2} + 1,75 \frac{\rho_g \alpha_s |\bar{\mathbf{v}}_g - \bar{\mathbf{v}}_s|}{(d_p \phi_s)} \quad (2.9)$$

Wen and Yu (1966) para $\alpha_s < 0,2$:

$$\beta_A = \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{\rho_g \alpha_s \alpha_g |\bar{\mathbf{v}}_g - \bar{\mathbf{v}}_s|}{(d_p \phi_s)} \alpha_g^{-2,65} \quad (2.10)$$

Em que

$$C_{Ds} = \begin{cases} \frac{24}{\text{Re}_s} (1 + 0,15 \cdot \text{Re}_s^{0,687}) & \text{Re}_s < 1000 \\ 0,44 & \text{Re}_s \geq 1000 \end{cases} \quad (2.11)$$

e

$$\text{Re}_s = \frac{\alpha_g \rho_g |\bar{\mathbf{v}}_g - \bar{\mathbf{v}}_s| d_p \phi_s}{\mu_g} \quad (2.12)$$

Função de arrasto na interface, β_B , Modelo B

$$\beta_B = \frac{\beta_A}{\alpha_g} \quad (2.13)$$

Tensor das tensões viscosas, fase k (k = g, s)

$$\boldsymbol{\tau}_k = \mu_k \left[\bar{\nabla} \bar{\mathbf{v}}_k + (\bar{\nabla} \bar{\mathbf{v}}_k)^T - \frac{2}{3} (\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{v}}_k) \bar{\mathbf{I}} \right] \quad (2.14)$$

4. Modulo de elasticidade do sólido

$$G(\alpha_g) = 10^{-8,76\alpha_g+5,43} \text{ Pa/m}^2 \quad (2.15)$$

2.5 Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares

Como descrito anteriormente, o modelo das duas fases separadas para escoamentos gás-sólido necessita de leis constitutivas para a formulação do tensor de tensões em cada fase analisada. Para o caso da fase contínua (gás ou líquido) freqüentemente este termo é modelado considerando-se um modelo reológico newtoniano, o que é bastante razoável. No caso da fase dispersa (particulado) assume-se essa mesma hipótese de fluido newtoniano, o que constitui uma aproximação bastante grosseira, ainda mais quando a fase dispersa é composta de partículas sólidas. Para contornar esse problema muitos pesquisadores na atualidade utilizam a Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares (TCEG).

A TCEG baseia-se nas similaridades entre o escoamento de um material granular, o qual compreende uma população de partículas com ou sem gás intersticial, e as moléculas de um gás (PEIRANO (1996)). Este tratamento usa os resultados clássicos da teoria cinética dos gases densos apresentados em CHAPMAN & COWLING (1961).

SINCLAIR & JACKSON (1989) foram os primeiros a propor uma descrição fundamental das tensões na fase sólida no contexto do modelo das duas fases utilizando a TCEG. As interações das partículas e do gás estavam restritas à força de arrasto mútuo, sendo o valor desta dependente da concentração das partículas e da diferença entre os valores médios locais das velocidades das fases gasosa e sólida. Já que o gás não desliza livremente pelas paredes do duto, existe então um perfil de velocidade do gás, o que induz um perfil de velocidade para o sólido pela força de arrasto que atua sobre as partículas. Como resultado deste cisalhamento na fase sólida, as partículas colidem entre si, gerando uma componente aleatória do movimento do particulado. Este movimento aleatório ou flutuante é completamente independente das flutuações da velocidade do gás, e sua magnitude pode exceder aquela das flutuações da velocidade do gás, devido à massa das partículas. A energia cinética deste movimento flutuante é análoga a aquela do movimento térmico das moléculas num gás, e, correspondentemente, este movimento flutuante pode ser caracterizado pela

denominada “temperatura do particulado” ou “temperatura granular” (semelhante à temperatura de um gás) que é proporcional à raiz quadrada da componente flutuante média da velocidade do particulado. As flutuações da velocidade do particulado geram uma pressão efetiva na fase sólida, junto com uma viscosidade efetiva que resistem as tensões cisalhantes do conjunto de partículas. Ambas a pressão e a viscosidade efetivas dependem fortemente da “temperatura do particulado”, que deve ser calculada pela solução de uma EDP separada que representa o balanço da energia pseudotérmica do movimento flutuante das partículas. Essa energia pseudotérmica é gerada pelo trabalho efetuado pelas tensões de cisalhamento efetivo na fase particulada e dissipado pelas colisões inelásticas partícula – partícula e conduzido de acordo aos gradientes da temperatura do particulado. O balanço da energia pseudotérmica é obtido subtraindo-se a equação para a energia mecânica ou energia cinética da equação de balanço da energia total, e introduzindo-se um mecanismo de transferência de energia entre a energia térmica real e a energia pseudotérmica, isto é a inelasticidade das colisões partícula – partícula. Este material foi tomado de SINCLAIR (1997) o qual faz uma apresentação do estado da arte da modelagem hidrodinâmica aplicada a leitos circulantes até a data da publicação. Nesse material é descrito de maneira sucinta o significado físico da “temperatura do particulado”, que constitui uma definição de temperatura para o sólido semelhante à temperatura de um gás que normalmente apresenta-se na termodinâmica clássica e na estatística.

A formulação da TCEG pode ser desenvolvida seguindo o procedimento geral simplificado mostrado na Figura 2.5. Esse procedimento é um resumo do material apresentado em THERDTHIANWONG (1994) e relata as etapas básicas usadas na modelagem da TCEG. Primeiramente formula-se a equação integro diferencial de Boltzmann para a frequência de distribuição da velocidade f . Esta equação modela o escoamento desde o ponto de vista microscópico do sistema. Numa segunda etapa formula-se a equação de transporte de Maxwell. Esta equação permite formular o escoamento desde o ponto de vista macroscópico, proporcionando uma equação de transporte hidrodinâmica que possibilita o cálculo de uma propriedade ψ transportada (por exemplo, massa, quantidade de movimento ou energia). Num terceiro passo formula-se o teorema de transporte para escoamentos densos de Jenkins – Savage, apresentado em JENKINS & SAVAGE (1983) e em LUN *et al.* (1984). Este teorema baseia-se na equação de transporte para gases densos apresentada em CHAPMAN & COWLING (1961) e é denominado também como equação de transporte de Maxwell –

Chapman por SAVAGE (1983) e GIDASPOW (1994). Este teorema generaliza o teorema de transporte válido para gases e escoamentos de partículas diluídos. Por último formulam-se as equações constitutivas que permitem calcular os termos não modelados que foram introduzidos nas equações de transporte macroscópicas.

Figura 2.5. Procedimento geral simplificado para formulação da TCEG, baseado no trabalho de Therdthianwong (1994).

A formulação da TCEG para o modelo dos dois fluidos, segundo PEIRANO & LECKNER (1998), é desenvolvida por meio de dois procedimentos fundamentais: o primeiro considera um escoamento granular seco, (sem influência do gás intersticial, DING, (1990); DING & GIDASPOW, (1990)) e o segundo que considera o gás intersticial entre as partículas do escoamento (MA & AHMADI, (1988); KOCH, (1990); BALZER *et al.*, (1995)). Em GIDASPOW (1994) discute-se exaustivamente o primeiro procedimento. PEIRANO & LECKNER (1998) apresentam uma discussão detalhada do segundo procedimento aplicado a escoamentos turbulentos gás-sólido em leitos fluidizados circulantes.

Uma das análises mais completas desenvolvida com o modelo das duas fases separadas foi desenvolvida utilizando a TCEG e considerando a influência do fluido intersticial. Esses trabalhos foram realizados pelo grupo da EDF (“*Electricité de France*”) (PEIRANO (1998)). Este tipo de procedimento possibilita aplicar o modelo matemático para todas as concentrações de sólido, assim como modular a turbulência no escoamento. Esta modulação significa considerar a influência da presença das partículas sobre a turbulência da fase gasosa e vice-versa (CROWE (2000)). As simulações desenvolvidas por esse grupo utilizam modelos de turbulência completos para ambas as

fases (de segunda ordem), e resolvem quatro equações de transporte acopladas entre si. Porém, os autores assumem que a temperatura granular é igual a três meios da energia cinética turbulenta da fase sólida, em contraposição ao proposto pelo grupo de “Princeton” (SINCLAIR (1997)) e em concordância com muitos trabalhos da literatura (NÉRI & GIDASPOW, (2000); MATHIESEN *et al.*, (2000a,b) entre outros). Simulações tridimensionais, inclusive de instalações industriais de leitos circulantes, foram efetuadas no grupo da EDF como se mostra em BALZER *et al.* (1996) apud PEIRANO (1998). A validação dos perfis verticais da pressão, médios no tempo, num período de 30 segundos mostrou que o modelo prediz as principais características do escoamento médio relativamente bem. Recentemente BALZER (2000) publicou um resumo crítico sobre este procedimento da TCEG que considera o fluido intersticial entre as partículas. Futuros problemas de pesquisa foram abordados.

Em outro trabalho recente, ZHANG & REESE (2001) modularam a turbulência num escoamento plenamente desenvolvido considerando o fluido intersticial com base no trabalho de PEIRANO & LECKNER (1998). Os resultados do modelo foram comparados com os dados experimentais de TSUJI *et al.* (1984) e mostrando-se quantitativamente razoáveis. As comparações indicam a utilidade da TCEG que considera o fluido intersticial. O modelo k- ϵ foi utilizado para a fase gasosa considerando a influência das partículas na sua turbulência através dos termos de interface. Mostrou-se que a influência da turbulência da fase gasosa não deve ser ignorada para escoamentos relativamente dispersos, especialmente com partículas pequenas. O modelo capturou as características essenciais da modulação da turbulência da fase gasosa na presença de partículas ZHANG & REESE (2001).

A seguir apresenta-se o resumo do modelo que foi utilizado por AGRAWAL *et al.* (2001) em trabalho recente sobre meso-escalas características de escoamentos gás-sólido em leitos circulantes com a resolução da equação de conservação da temperatura granular. Outros desenvolvimentos e procedimentos de obtenção desta teoria existem na literatura (MA & AHMADI, (1988); KOCH, (1990); entre outros). Entretanto, deve-se destacar que a obtenção detalhada deste tipo de modelo matemático não será analisada no presente trabalho devido à complexidade do procedimento. Na sequência apresenta-se sucintamente a formulação da TCEG algébrica e para finalizar, uma discussão física de leis constitutivas da TCEG.

2.6 Modelo matemático empregado por Agrawal *et al.* (2001)

Na Tabela 2.2 apresenta-se o modelo empregado por AGRAWAL *et al.* (2001). Os autores consideraram o procedimento clássico de ANDERSON & JACKSON (1967), extensivamente utilizado na bibliografia pelo grupo de Princeton. Um resumo das diferentes formulações pode-se consultar em van WACHEM *et al.* (2001). Será dada prioridade à explicação dos termos envolvidos com o cálculo da temperatura granular.

As Eqs. (2.16)-(2.19) mostradas na página seguinte representam as equações da continuidade e da conservação da quantidade de movimento para as fases sólida e gasosa respectivamente. A Eq. (2.20) representa o balanço da energia pseudotérmica (i.e. da temperatura granular) das flutuações da velocidade das partículas. O primeiro termo do lado direito desta equação representa o transporte difusivo de energia granular, denotando $\bar{q}$ o fluxo difusivo desta energia. O segundo e terceiro termos representam as taxas de produção de energia granular pelo cisalhamento e pelo deslizamento gás-partícula, respectivamente. O quarto e quinto termos representam as taxas de dissipação de energia granular por meio das colisões inelásticas e amortecimento viscoso, respectivamente.

As tensões da fase sólida, o fluxo difusivo de temperatura granular e a taxa de dissipação devido às colisões inelásticas são expressos de forma similar a de LUN *et al.* (1984), ver Eqs. (2.24)–(2.30). As partículas são assumidas como esferas duras, lisas de diâmetro médio d_p . São consideradas apenas interações binárias. A influência do fluido intersticial é considerada por meio dos termos μ^* e λ^* , ver Eq. (2.28). A taxa de dissipação devido ao amortecimento viscoso modela-se de acordo com GIDASPOW (1994) pela Eq. (2.31).

A expressão para a taxa de produção da energia granular pelo deslizamento gás-partícula, ver Eq. (2.31), foi deduzida por KOCH (1990) sem o termo g_0 . Recentemente KOCH & SANGANI (1999) propuseram a Eq. (2.32). A maioria das simulações realizadas por AGRAWAL *et al.* (2001) foram desenvolvidas considerando a Eq. (2.31), a qual coincide com a Eq. (2.32) quando o fator de correção $\Psi = 1$. Considerando-se este fator os autores verificaram diferenças quantitativas, mas não qualitativas.

Tabela 2.2. Modelo de Agrawal *et al.* (2001) para escoamentos gás-sólido.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \vec{v}_s) = 0 \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \vec{v}_g) = 0 \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \vec{v}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{v}_s \vec{v}_s) = \alpha_s \rho_s \vec{g} - \nabla \cdot \tau_s - \alpha_s \nabla \cdot \tau_g + \vec{f} \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \vec{v}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g \vec{v}_g) = \alpha_g \rho_g \vec{g} - \alpha_g \nabla \cdot \tau_g - \vec{f} \quad (2.19)$$

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \theta) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{v}_s \theta) \right] = -\vec{\nabla} \cdot \vec{q} - \tau_s : \nabla \vec{v}_s + \Gamma_{\text{desl}} - J_{\text{col}} - J_{\text{vis}} \quad (2.20)$$

$$\tau_g = -P_g I - \mu_g \left[\nabla \vec{v}_g + (\nabla \vec{v}_g)^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v}_g I \right] \quad (2.21)$$

$$\vec{f} = \beta (\vec{v}_g - \vec{v}_s), \quad \beta = \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{\rho_g \alpha_g \alpha_s |\vec{v}_g - \vec{v}_s|}{d_p} \alpha_g^{-2,65} \quad (2.22)$$

$$C_{Ds} = \begin{cases} \frac{24}{Re_g} (1 + 0,15 \cdot Re_g^{0,687}), & Re_g < 1000 \\ 0,44 & Re_g \geq 1000 \end{cases}, \quad Re_g = \frac{\alpha_g \rho_g |\vec{v}_g - \vec{v}_s| d_p}{\mu_g} \quad (2.23)$$

$$\tau_s = [\alpha_s \rho_s (1 + 4\eta \alpha_s g_0) \theta - \eta \mu_b (\nabla \cdot \vec{v}_s)] I - \left(\frac{2 + \alpha}{3} \right) \left\{ \frac{2\mu^*}{g_0 \eta (2 - \eta)} (1 + \frac{\alpha}{8} \alpha_s g_0) (1 + \frac{\alpha}{8} \eta (3\eta - 2) \alpha_s g_0) + \frac{6}{5} \eta \mu_b \right\} S \quad (2.24)$$

$$\vec{q} = -\frac{\lambda^*}{g_0} \left\{ (1 + \frac{12}{5} \eta \alpha_s g_0) (1 + \frac{12}{5} \eta^2 (4\eta - 3) \alpha_s g_0) + \frac{64}{25\pi} (41 - 33\eta) \eta^2 \alpha_s^2 g_0^2 \right\} \nabla \theta \quad (2.25)$$

$$S = \frac{1}{2} (\nabla \vec{v}_s + (\nabla \vec{v}_s)^T) - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \vec{v}_s) I \quad (2.26)$$

$$J_{\text{col}} = \frac{48}{\sqrt{\pi}} \eta (1 - \eta) \frac{\rho_s \alpha_s^2}{d_p} g_0 \theta^{3/2} \quad (2.27)$$

$$\mu^* = \frac{\mu}{1 + \frac{2\beta\mu}{(\rho_s \alpha_s)^2 g_0 \theta}}, \quad \lambda^* = \frac{\lambda}{1 + \frac{6\beta\lambda}{5(\rho_s \alpha_s)^2 g_0 \theta}} \quad (2.28)$$

$$\mu = \frac{5\rho_s d_p \sqrt{\pi\theta}}{96}, \quad \mu_b = \frac{256\mu \alpha_s^2 g_0}{5\pi}, \quad \lambda = \frac{75\rho_s d_p \sqrt{\pi\theta}}{48\eta(41 - 33\eta)}, \quad \eta = \frac{(1 + e)}{2} \quad (2.29)$$

$$g_0 = \frac{1}{1 - (\alpha_s / \alpha_{s,\max})^{1/3}}, \quad \alpha_{s,\max} = 0,65, \quad \alpha = 1,6 \quad (2.30)$$

$$J_{\text{vis}} = 3\beta\theta, \quad \Gamma_{\text{desl}} = \frac{81\alpha_s\mu_g^2|\vec{v}_g - \vec{v}_s|}{g_0d_p^3\rho_s\sqrt{\pi\theta}} \quad (2.31)$$

$$\Gamma_{\text{desl}} = \frac{81\alpha_s\mu_g^2|\vec{v}_g - \vec{v}_s|}{g_0d_p^3\rho_s\sqrt{\pi\theta}} \Psi \quad (2.32)$$

onde

$$\Psi = \frac{R_d^2}{(1 + 3,5\alpha_s^{1/2} + 5,9\alpha_s)},$$

$$R_d = \begin{cases} \frac{1 + 3(\alpha_s/2)^{1/2} + (135/64)\alpha_s \ln \alpha_s + 17,14\alpha_s}{1 + 0,681\alpha_s - 8,48\alpha_s^2 + 8,16\alpha_s^3}, & \alpha_s < 0,4 \\ \frac{10\alpha_s}{(1 - \alpha_s)^3} + 0,7 & \alpha_s \geq 0,4 \end{cases} \quad (2.33)$$

O modelo apresentado na Tabela 2.2 foi extensivamente utilizado por AGRAWAL *et al.* (2001) usando o código MFIX. O objetivo principal destes autores foi à realização de análises qualitativas de estruturas mesoscópicas em escoamentos gás-sólido. Concluiu-se que estas estruturas aparecem no escoamento, independentemente da influência das macro-escalas, isto é, condições de contorno, iniciais e de operação, intervindo na hidrodinâmica do escoamento e nos fenômenos macroscópicos que acontecem. Devido ao caráter qualitativo da análise e as dificuldades apontadas pelos autores, uma avaliação quantitativa do escoamento ainda parece ser inviável. Nessa direção, os pesquisadores propuseram a construção de um modelo submalha com ajuda do modelo matemático apresentado na Tabela 2.2 para quantificar a influência das meso-escalas nas escalas macroscópicas. O modelo submalha consistiria na obtenção de correlações para as propriedades de transporte utilizadas na formulação das relações constitutivas (principalmente nas relações dos tensores de tensões de ambas as fases).

Deve-se destacar que o grupo de “Princeton” tem desenvolvido amplos e profundos estudos nesta área de pesquisa, incluindo a publicação recente de JACKSON (2000) em que se mostra um apanhado geral e profundo de todos esse desenvolvimentos.

2.7 Formulação sucinta da TCEG Algébrica

A seguir mostra-se sucintamente em que consiste a TCEG algébrica. Esta versão da TCEG foi desenvolvida inicialmente em SYAMLAL *et al.* (1993) devido à possibilidade de acelerar bastante a convergência da solução numérica. Um resumo da mesma foi publicado também em BOEMER *et al.* (1995) e em van WACHEM *et al.* (1998).

A maior diferença da TCEG algébrica em relação às outras versões da TCEG é o uso de uma equação de balanço simplificada para a temperatura granular. Este procedimento assume que a energia granular é dissipada localmente em estado estacionário, sendo os processos de convecção e difusão desprezíveis. Considerando-se então apenas os termos de dissipação e de geração da energia granular, a equação de balanço da temperatura granular (2.20) resulta em:

$$0 = -\tau_s : \nabla \vec{v}_s - J_{col} \quad (2.34)$$

De acordo com van WACHEM *et al.* (1998) este procedimento é válido apenas para valores elevados da fração volumétrica da fase sólida e valores relativamente baixos da sua velocidade. Neste regime a maior parte da energia granular é dissipada localmente, e pouco é deixado para escoar. Entretanto, este procedimento está sendo utilizado neste trabalho para simular escoamentos em LFC. Resultados serão apresentados no capítulo 4.

A Eq. (2.34) pode ser rescrita da seguinte maneira

$$\theta = \left(\frac{-(K_1 \alpha_s + \rho_s) tr(D_s) + \sqrt{(K_1 \alpha_s + \rho_s)^2 tr^2(D_s) + 4K_4 \alpha_s [2K_3 tr(D_s^2) + K_2 tr^2(D_s)]}}{2\alpha_s K_4} \right) \quad (2.35)$$

em que

$$D_s = \frac{1}{2} (\nabla \vec{v}_s + (\nabla \vec{v}_s)^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v}_s \quad (2.36)$$

$$K_1 = 2(1+e)\rho_s g_0 \quad (2.37)$$

$$K_2 = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} d_p \rho_s (1+e) \alpha_s g_0 - \frac{2}{3} K_3 \quad (2.38)$$

$$K_3 = \frac{d_p \rho_s \sqrt{\pi}}{6(3-e)} \left[1 + \frac{2}{5} (1+e)(3e-1) \alpha_s g_0 \right] + \frac{8d_p \rho_s \alpha_s}{10\sqrt{\pi}} g_0 (1+e) \quad (2.39)$$

$$K_4 = \frac{12(1-e^2)\rho_s g_0}{d_p \sqrt{\pi}} . \quad (2.40)$$

2.8 Apresentação e discussão física de leis constitutivas da TCEG

Nesta seção discute-se o comportamento de equações constitutivas formuladas com base na TCEG para um escoamento granular seco por diferentes autores, utilizando procedimentos similares ao apresentado anteriormente. Apenas são discutidas correlações para a viscosidade dinâmica do sólido, μ_s e a função de distribuição radial, g_0 . Nas Tabelas 2.3 e 2.4 mostra-se um resumo das correlações obtidas para essas duas variáveis segundo vários modelos apresentados na literatura que utilizam a TCEG. Das Tabelas 2.3 e 2.4 nota-se que existe uma ampla gama de correlações e, devido a este fato uma discussão física do comportamento destas correlações torna-se interessante. BOEMER *et al.* (1995), van WACHEM *et al.* (1999) e van WACHEM *et al.* (2001) fizeram estudos comparativos de várias correlações aqui apresentadas e mostraram diferenças significativas entre elas. Mostra-se uma extensão dessa análise a seguir.

2.8.1 Análise das correlações para a viscosidade dinâmica do sólido μ_s

Visto que a fase sólida, de fato, não é contínua como um gás ou um líquido, a sua viscosidade dinâmica não é uma propriedade física real. Porém com a TCEG a viscosidade do sólido pode ser deduzida (BOEMER *et al.* (1995)). Como descrito anteriormente o tensor de tensões compõe-se de duas parcelas: a que representa a contribuição devido às colisões; e a que considera a contribuição cinética. Estas duas parcelas estão presentes nas correlações para a viscosidade dinâmica do sólido, μ_s .

As Figuras 2.6, 2.7, 2.8 e 2.9 representam uma comparação quantitativa da viscosidade do sólido segundo as diferentes correlações usualmente usadas na literatura e mostradas na Tabela 2.3. Nestas figuras a viscosidade μ_s é calculada em função da fração volumétrica de sólido assumindo partículas esféricas, uma concentração máxima de particulado igual a 0,64356, um diâmetro médio de particulado de 0,52 mm e uma densidade de particulado igual a 2620 kg/m³.

Tabela 2.3. Resumo de várias correlações para a viscosidade da fase sólida segundo a TCEG.

Viscosidade dinâmica do sólido	Referências
$\mu_s = \frac{4}{5} \alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + \frac{10}{48} \sqrt{\pi \theta} \frac{\rho_p d_p}{(1+e)(3-e)g_0} + \frac{1}{12} \sqrt{\pi \theta} \frac{\rho_p d_p \alpha_s (3e+1)}{(3-e)} + \frac{1}{15} \sqrt{\pi \theta} \frac{\rho_p d_p g_0 (1+e)(3e-1) \alpha_s^2}{(3-e)} \quad (2.41)$	Lun <i>et al.</i> (1984); Sinclair & Jackson (1989)
$\mu_s = \frac{4}{5} \alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} \quad (2.42)$	Ding & Gidaspow (1990)
$\mu_s = \frac{4}{5} \alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + \frac{10}{96} \sqrt{\pi \theta} \frac{\rho_p d_p}{(1+e)g_0} + \frac{1}{6} \sqrt{\pi \theta} \rho_p d_p \alpha_s + \frac{1}{15} \sqrt{\pi \theta} \rho_p d_p g_0 (1+e) \alpha_s^2 \quad (2.43)$	Gidaspow <i>et al.</i> (1992) Gidaspow (1994)
$\mu_s = \frac{4}{5} \alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + \frac{\sqrt{\pi \theta} \rho_p d_p \alpha_s}{6(3-e)} + \frac{1}{15} \sqrt{\pi \theta} \frac{\rho_p d_p g_0 (1+e)(3e-1) \alpha_s^2}{(3-e)} \quad (2.44)$	Syamlal <i>et al.</i> (1993)
$\mu_s = \frac{4}{5} \alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + 1,016 \left[\frac{5}{96} \sqrt{\pi \theta} \frac{\rho_p d_p}{g_0} + \frac{1}{24} \sqrt{\pi \theta} \rho_p d_p (1+e) \alpha_s + \frac{1}{15} \sqrt{\pi \theta} \rho_p d_p g_0 (1+e) \alpha_s^2 \right] \quad (2.45)$	Nieuwland <i>et al.</i> (1996)
$\mu_s = \frac{4}{5} \alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + \frac{10}{48} \frac{\sqrt{\pi \theta} \rho_p d_p}{(1+e)(3-e)(1+\frac{\lambda}{R})g_0} + \frac{1}{12} \sqrt{\pi \theta} \frac{\rho_p d_p \alpha_s [2(1+\frac{\lambda}{R})+3e+1]}{(3-e)(1+\frac{\lambda}{R})} + \frac{1}{15} \sqrt{\pi \theta} \frac{\rho_p d_p g_0 (1+e)(3e-1) \alpha_s^2}{(3-e)} \quad (2.46)$	Hrenya & Sinclair (1997)

Na Figura 2.6 mostra-se uma comparação do comportamento das várias correlações para μ_s considerando-se as correlações de g_0 correspondentes aos modelos hidrodinâmicos dos autores que propuseram as relações para μ_s analisadas. Neste gráfico considera-se o coeficiente de restituição partícula-partícula, (e), igual a 0,90 e a temperatura granular, (θ), igual a 0,1 (m^2/s^2). Desta figura percebe-se que as correlações de LUN *et al.* (1984), SINCLAIR & JACKSON (1989), GIDASPOW *et al.* (1992), NIEUWLAND *et al.* (1996) e de HRENYA & SINCLAIR (1997) tem praticamente o mesmo comportamento em quase toda a faixa da fração volumétrica de sólidos exceto nas regiões muito dispersas (de valores muito baixos de α_s) onde existem divergências.

As correlações de SYAMLAL *et al.* (1993) e DING & GIDASPOW (1990) apresentam um comportamento bem diferente das acima analisadas para toda a faixa de valores de α_s . No caso da correlação de SYAMLAL *et al.* (1993) isto se deve que esta correlação foi derivada a partir da correlação de LUN *et al.* (1984) desprezando-se os termos da contribuição cinética. Já a correlação de DING & GIDASPOW (1990) também não considera os termos da contribuição cinética, mas apresenta um melhor comportamento com respeito às outras correlações nas regiões mais densas, caracterizadas por uma fração volumétrica de sólidos maior.

Figura 2.6. Comparação de várias correlações da literatura para a viscosidade dinâmica do sólido, μ_s . (μ_s calcula-se pelas correlações propostas pelos autores nos artigos acima referidos)

Na Figura 2.7 mostra-se o comportamento de todas as correlações acima analisadas na região dispersa. Como se pode notar todas elas apresentam um comportamento diferente uma das outras. Neste caso as correlações de DING & GIDASPOW (1990), SYAMLAL *et al.* (1993) e de HRENYA & SINCLAIR (1997) tendem ao valor correto de zero para a viscosidade do sólido quando $\alpha_s = 0$. Para as duas primeiras correlações isto se deve, novamente, ao fato de não se ter considerado os termos devidos à contribuição cinética. Já a correlação de HRENYA & SINCLAIR (1997) incorpora uma modificação da correlação de LUN *et al.* (1984) a qual é significativa apenas para valores muito pequenos de α_s e que corrige esta correlação.

Segundo van WACHEM *et al.* (1999) no tratamento original de LUN *et al.* (1984) considera-se que as partículas interagem num meio infinito. Conseqüentemente assim que a fração volumétrica de sólido decresce, o caminho livre médio incrementa-se sem limites e a viscosidade do sólido resultante toma para $\alpha_s = 0$ um valor finito. HRENYA & SINCLAIR (1997) limitaram o caminho livre médio das partículas por meio de uma dimensão característica do sistema físico que se analisa, obtendo, portanto o valor correto de $\mu_s = 0$ para $\alpha_s = 0$. Da mesma forma a correlação de LUN *et al.* (1984), as correlações de SINCLAIR & JACKSON (1989), GIDASPOW *et al.* (1992) e NIEUWLAND *et al.* (1996) apresentam um comportamento semelhante, devido à consideração dos termos referentes à contribuição cinética sem limitar o caminho livre das partículas. É interessante notar que a diferença observada entre as correlações de LUN *et al.* (1984) e SINCLAIR & JACKSON (1989), as duas calculadas com a Eq. (2.41), deve-se ao uso por estes autores de correlações diferentes para a função radial de distribuição g_0 segundo as Eqs. (2.69) e (2.68) respectivamente. No caso das correlações de GIDASPOW *et al.* (1992) e NIEUWLAND *et al.* (1996) além do uso de relações diferentes para g_0 , Eqs. (2.51) e (2.50) respectivamente, tem-se a influência do valor do coeficiente de restituição e .

Figura 2.7. Comparação de várias correlações da literatura da viscosidade dinâmica do sólido, μ_s , quando $\alpha_s \rightarrow 0$. (A legenda é a mesma da Figura 2.6).

De fato, fazendo uma análise das correlações para μ_s apresentadas na Tabela 2.3, pode-se inferir que, para uma mesma função radial de distribuição g_0 e um coeficiente de restituição unitário, as correlações de LUN *et al.* (1984), SINCLAIR & JACKSON (1989), GIDASPOW *et al.* (1992) e HRENYA & SINCLAIR (1997) apresentam os mesmos resultados, exceto para valores muito pequenos de α_s , onde a correlação de HRENYA & SINCLAIR (1997) tende ao valor correto de $\mu_s = 0$. A correlação de NIEUWLAND *et al.* (1996) mostra resultados praticamente iguais às anteriores, mas com uma pequena diferença para valores baixos e médios de α_s . A causa dessa discordância deve-se ao fator multiplicativo 1,016 utilizado na Eq. (2.45) que modifica ligeiramente a contribuição dos termos cinéticos da equação. Este fator calculado por CHAPMAN & COWLING (1961) é desprezado na análise desenvolvida por GIDASPOW (1994). Mostram-se as observações acima explanadas na Figura 2.8.

Figura 2.8. Comparação de várias correlações da literatura da viscosidade dinâmica do sólido μ_s , para $e = 1$ e g_0 calculada segundo Ogawa *et al.* (1980).

Na Figura 2.9 mostra-se a influência do coeficiente de restituição e no valor da viscosidade do sólido μ_s , considerando o valor da temperatura granular igual à $\theta = 0,1$ (m/s)² e utilizando a correlação de OGAWA *et al.* (1980) para a função radial de

distribuição g_0 e as correlações de LUN *et al.* (1984) e HRENYA & SINCLAIR (1997) para μ_s , respectivamente. Observa-se uma grande influência do coeficiente de restituição e para ambas as correlações de μ_s analisadas em toda a faixa de valores da fração volumétrica de sólidos. Isto demonstra a necessidade de se utilizar, nas simulações com a TCEG, um valor de e razoável, que corresponda às propriedades físicas do material particulado usado no sistema estudado. Com efeito, a estimação do valor do coeficiente de restituição partícula-partícula é uma das questões ainda não resolvidas na TCEG. Vários trabalhos experimentais tem sido desenvolvidos com esta finalidade, como GIDASPOW & HUILIN (1998), mas por enquanto os modelos eulerianos da TCEG para a fase sólida precisam deste dado empírico para obter resultados de simulação, o que é uma das desvantagens da TCEG. Nas predições de um escoamento gás-sólido no tubo ascendente de um leito circulante, NERI & GIDASPOW (2000) afirmaram que o desconhecimento do valor de e é uma das causas da divergência dos resultados de simulação com os dados experimentais na região mais densa do leito, i.e., na base da coluna. Segundo estes autores uma possível solução é formular uma relação entre o coeficiente de restituição e velocidade do sólido na coluna.

Outra das vias de solução desta questão é o uso das simulações euleriana-lagrangeana. Este tipo de simulação permite o estudo mais detalhado das interações das partículas entre si e possibilita a formulação deste tipo de relação. No entanto até o momento e tem sido arbitrado também neste tipo de simulação (HOOMANS *et al.* (1996)).

Figura 2.9. Ilustração da influencia do coeficiente de restituição e sobre a viscosidade dinâmica do sólido μ_s , a) Correlação de Lun *et al.* (1984) (g_0 calculada segundo Owaga *et al.* (1980)).

Figura 2.9. Ilustração da influencia do coeficiente de restituição e sobre a viscosidade dinâmica do sólido μ_s , b) Correlação de Hrenya & Sinclair (1997). (g_0 calculada segundo Owaga *et al.* (1980)).

2.8.2 Análise das correlações para a função radial de distribuição g_0

No escopo da teoria cinética a função radial de distribuição, g_0 , é introduzida para considerar o incremento da probabilidade das colisões quando o gás torna-se denso PEIRANO & LECKNER (1998). Isto significa que num gás rarefeito g_0 é igual à unidade, mas tende ao infinito quando as moléculas estão bem perto, de maneira que o movimento seja quase impossível CHAPMAN & COWLING (1961). Na literatura existe uma concordância com o fato de que g_0 deve aumentar com o aumento da fração volumétrica de sólidos, mas as correlações para g_0 diferem consideravelmente entre si BOEMER *et al.* (1995).

Uma ilustração desta diferença é mostrada nas Figuras 2.10 e 2.11. Nelas evidenciam-se o comportamento de várias correlações para g_0 apresentadas na Tabela 2.4. O valor assumido para a fração volumétrica máxima é de $\alpha_{s,\max} = 0,64356$. Observa-se uma grande diferença quantitativa das várias correlações apresentadas, o que dificulta a aplicação de uma ou outra correlação.

Na Figura 2.10 observa-se que as correlações de OGAWA *et al.* (1980), DING & GIDASPOW (1990), LUN & SAVAGE (1986), BALZER & SIMONIN (1993) e MA & AHMADI (1986) tendem ao infinito para $\alpha_s \rightarrow \alpha_{s,\max}$. Já as de CARNAHAN & STARLING (1969) e SYAMLAL *et al.* (1993) não tendem ao limite correto quando $\alpha_s \rightarrow \alpha_{s,\max}$. A correlação de CARNAHAN & STARLING (1969) prediz variações suaves não reais até a concentração maior possível, i.e. para $\alpha_s = \alpha_{s,\max}$ (MA & AHMADI (1986)). SYAMLAL *et al.* (1993) usaram esta mesma correlação desprezando apenas o terceiro termo da mesma. Para o caso de $\alpha_s \rightarrow 0$, todas as correlações tendem à unidade exceto a correlação de DING & GIDASPOW (1990), a qual não tende para o limite correto, sendo $g_0 = 0,6$ para $\alpha_s = 0$. Observa-se isto claramente na Figura 2.11 e deve-se a que estes autores multiplicaram a correlação de OGAWA *et al.* (1980) pelo fator de $\frac{3}{5}$. A razão deste ajuste foi à tentativa de correlacionar de uma forma melhor os dados de ALDER & WAINWRIGHT (1960). Estes autores obtiveram resultados de simulação da equação de estado por meio do cálculo do fator de compressibilidade Z para partículas elásticas esféricas utilizando um

valor de $\alpha_{s,max}$ igual à 0,64356. Usando a relação entre o fator de compressibilidade Z e a função radial de distribuição g_0 , Eq. (5) de GIDASPOW & HUILIN (1998), estes dados servem de referência para o ajuste e comparação das correlações usadas na literatura para g_0 . Esta comparação é mostrada na Figura 2.12.

Tabela 2.4. Resumo de várias correlações para a função radial de distribuição segundo a TCEG.

Função radial de distribuição		Referências
$g_0 = \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^{-1}$	(2.47)	Bagnold (1954); Ogawa <i>et al.</i> (1980); Sincalir & Jackson (1989)
$g_0 = \frac{1}{1-\alpha_s} + \frac{3\alpha_s}{2(1-\alpha_s)^2} + \frac{\alpha_s^2}{2(1-\alpha_s)^3} = \frac{(2-\alpha_s)}{2(1-\alpha_s)^3}$	(2.48)	Carnahan & Starling (1969)
$g_0 = \left[1 - \frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}} \right]^{-2,5\alpha_{s,max}}$	(2.49)	Lun & Savage (1986)
$g_0 = \frac{[1 + 2,5\alpha_s + 4,5904\alpha_s^2 + 4,515439\alpha_s^3]}{[1 - (\alpha_s/\alpha_{s,max})^3]^{0,678021}}$	(2.50)	Ma & Ahmadi (1986)
$g_0 = \frac{3}{5} \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^{-1}$	(2.51)	Ding & Gidaspow (1990); Gidaspow (1994)
$g_0 = \frac{1}{1-\alpha_s} + \frac{3\alpha_s}{2(1-\alpha_s)^2}$	(2.52)	Syamlal <i>et al.</i> (1993)
$g_0 = \frac{1}{1-\alpha_s/\alpha_{s,max}} + \frac{3}{2} \frac{\alpha_s/\alpha_{s,max}}{(1-\alpha_s/\alpha_{s,max})^2} + \frac{1}{2} \frac{(\alpha_s/\alpha_{s,max})^2}{(1-\alpha_s/\alpha_{s,max})^3}$	(2.53)	Balzer & Simonin (1993)

Figura 2.10. Comparação de várias correlações da literatura para a função de distribuição radial, g_0 .

Figura 2.11. Comparação de várias correlações da literatura para a função de distribuição radial, g_0 .
Visualização para o valor limite da concentração de sólidos $\alpha_s \rightarrow 0$.

Figura 2.12. Comparação de várias correlações da literatura para a função de distribuição radial, g_0 com os dados de simulação de Alder & Wainwright (1960).

Na Figura 2.12 são apresentadas as correlações de OGAWA *et al.* (1980), DING & GIDASPOW (1990), LUN & SAVAGE (1986), CARNAHAN & STARLING (1969) e MA & AHMADI (1986). Segundo BOEMER *et al.* (1995) as três primeiras correlações dependem fortemente do valor $\alpha_{s,max}$, sendo possível minimizar a diferença entre elas e os dados de ALDER & WAINWRIGHT (1960) com o ajuste desse valor. Destas três correlações, a de DING & GIDASPOW (1990) é a que melhor coincide com os dados de comparação em todo o conjunto de valores de α_s , exceto para pequenos valores de α_s , i.e., quando α_s tende à zero. As outras duas correlações mostram a mesma tendência de variação com α_s que os dados de comparação, sendo que a correlação de LUN & SAVAGE (1986) tem um bom comportamento para valores pequenos e médios da fração volumétrica de sólidos e a correlação de OGAWA *et al.* (1980) para valores de α_s perto do limite máximo de empacotamento. A correlação de CARNAHAN & STARLING (1969) concorda muito bem com os dados de comparação para valores pequenos e médios da fração volumétrica de sólidos, não tendendo aos

valores de g_0 corretos quando $\alpha_s \rightarrow \alpha_{s,\max}$. Por último, na Figura 2.12 percebe-se que a correlação que apresenta melhor comportamento em comparação aos dados de ALDER & WAINWRIGHT (1960) para toda a faixa de valores de α_s é a correlação desenvolvida por MA & AHMADI (1986). Este fato deve ser considerado na aplicação destas correlações em simulações com a TCEG.

Finalmente, de forma análoga à análise desenvolvida por van WACHEM (1999), é mostrado na Figura 2.13 o efeito quantitativo que a função radial de distribuição g_0 exerce no valor da viscosidade dinâmica do sólido, μ_s . Analisa-se o comportamento de μ_s em função de g_0 e α_s para duas correlações, a de GIDASPOW *et al.* (1992), GIDASPOW (1994) e a de HRENYA & SINCLAIR (1997), respectivamente. Assumem-se os seguintes valores do coeficiente de restituição e da temperatura granular, $e = 0,9$ e $\theta = 1,0$ (m^2/s^2).

Como se pode observar, exceto para a correlação de CARNAHAN & STARLING (1960), no máximo existe uma diferença de duas ordens de magnitude nos valores de μ_s das correlações analisadas em função das correlações de g_0 consideradas. Isto pode representar uma grande diferença, com ênfase nas regiões densas do leito, do valor da viscosidade dinâmica do sólido, μ_s , e influenciar de maneira significativa os resultados de simulação. Portanto a escolha da correlação para a função radial de distribuição g_0 e da correlação para μ_s é um dos fatores que contribuem à obtenção de resultados de simulação diferentes para os diferentes modelos físicos utilizados na literatura.

Com as análises apresentadas pode-se evidenciar que em função da escolha das correlações para o cálculo da viscosidade dinâmica do sólido μ_s , da função de distribuição radial g_0 e do coeficiente de restituição partícula-partícula e podem ser obtidos valores bastante diferentes com a TCEG. Além disso, comprovou-se, no caso de μ_s , que os termos devidos às colisões exercem maior influência nas regiões mais densas do escoamento e os termos devidos à contribuição cinética tem maior influência nas regiões mais dispersas do escoamento.

Figura 2.13. Ilustração da influencia da função de distribuição radial g_0 sobre a viscosidade dinâmica do sólido μ_s . a) Correlação de Gidaspow *et al.* (1992)

Figura 2.13. Ilustração da influencia da função de distribuição radial g_0 sobre a viscosidade dinâmica do sólido μ_s . b) Correlação de Hrenya & Sinclair (1997).

Conclusões

No presente estudo evidencia-se a complexidade matemática das diversas derivações presentes no procedimento da TCEG, mesmo considerando apenas um escoamento granular seco. Considerando às diferenças de comportamento entre as correlações analisadas, é possível derivar, quantitativamente, resultados bem diferentes. Tal fato comprova que resultados de simulação numérica podem diferir consideravelmente em função da correlação utilizada e que cuidados devem ser tomados durante o desenvolvimento de trabalhos de simulação numérica.

Capítulo 3

METODOLOGIA DE SOLUÇÃO NUMÉRICA

3.1 Introdução

Escoamentos de fluidos e fenômenos relacionados podem ser descritos por equações diferenciais parciais ou integro-diferenciais; quando tais equações envolvem não-linearidades em suas formulações, raras são às vezes em que soluções analíticas podem ser encontradas. Os métodos numéricos oferecem, portanto, uma ferramenta indispensável na determinação de soluções aproximadas. Para se obter uma solução aproximada, faz-se o uso de um método de discretização que aproxima as equações diferenciais por um sistema de equações algébricas, que pode ser resolvido no computador. As aproximações são aplicadas a pequenos domínios no espaço e/ou tempo tal que a solução numérica fornece resultados em locais discretos no espaço e tempo. Muito embora, a precisão dos dados experimentais depende da qualidade das ferramentas utilizadas, a precisão da solução numérica é dependente da qualidade da discretização utilizada (FERZIGER & PERIC (1999)).

Via de regra, obter soluções numéricas das equações de conservação em circunstâncias adversas é uma tarefa muito difícil em virtude da natureza não linear dos termos de inércia, principalmente quando esses termos representam os mecanismos predominantes no transporte de propriedades físicas. Recentemente, a maneira mais adequada de se tratar essas não-linearidades é um dos principais assuntos no campo da dinâmica dos fluidos computacional - CFD "Computational Fluid Dynamics". Os métodos numéricos convencionais podem resolver "facilmente" os problemas difusivos, mas não os convectivos. Complicações adicionais aparecem nos casos em que o escoamento envolve número de Reynolds elevado, especialmente em regime turbulento. Assim, é de fundamental importância que os termos convectivos presentes nas equações de transporte sejam tratados de maneira apropriada, levando-se em conta as não-linearidades associadas. Este parágrafo é baseado em FERREIRA (2001).

Em se tratando de simulações numéricas de escoamentos viscosos, nas últimas décadas muitos esforços têm sido dirigidos na obtenção de soluções não-transientes,

sobretudo devido aos limitados recursos computacionais. No entanto, muitos problemas em aplicações práticas são essencialmente transientes e tridimensionais, ocasionando dificuldades em se obter precisão e estabilidade das soluções numéricas. No regime incompressível há mais um agravante: nenhuma equação descrevendo as variações da pressão com o tempo é acessível, e somente as condições de contorno para a velocidade são suficientes na determinação dos campos de velocidade e pressão. Como consequência desses inconvenientes, é difícil conseguir resultados numéricos confiáveis sem a utilização de um algoritmo adequado e uma estrutura de dados efetiva. É importante, portanto dispor de um código computacional eficiente e robusto, e computadores com boa capacidade de armazenamento e velocidade de processamento. Este parágrafo é baseado em FERREIRA (2001).

Nesta seção, procede-se à dedução das fórmulas para a discretização dos termos transientes, advectivos, difusivos e do termo fonte, em seguida obtém-se uma equação algébrica (discretizada) a partir de uma equação diferencial parcial.

3.2 Equação de Transporte Escalar

Para obterem-se as equações discretas, utiliza-se a equação (3.1), dada por:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_m \rho_m \phi)}_A + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i}(\alpha_m \rho_m v_{mi} \phi)}_B = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right)}_C + \underbrace{R_\phi}_D \quad (3.1)$$

A equação (3.1) é a equação de transporte para uma propriedade escalar ϕ da fase gás $m = g$ ou fase sólida $m = s$. Os termos na eq. (3.1) representam: A a taxa de intercâmbio; B e C efeitos de convecção-difusão respectivamente e D um termo fonte R_ϕ para a quantidade ϕ . Em escoamento multifásico o termo fonte contabiliza a transferência de massa e de quantidade de movimento na interface.

3.3 Integração sobre um Volume de Controle

Integrando a equação (3.1) sobre um volume de controle (figura 3.1) e escrevendo termo a termo, da esquerda para a direita, resulta:

• **Termo Transiente**

$$\int_{VC} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_m \rho_m \phi) dV \approx \left[(\alpha_m \rho_m \phi)_P - (\alpha_m \rho_m \phi)_P^{old} \right] \frac{\Delta V}{\Delta t}. \quad (3.2)$$

• **Termo Convectivo**

$$\begin{aligned} \int_{VC} \frac{\partial}{\partial x_i} (\alpha_m \rho_m v_{mi} \phi) dV \approx & (\alpha_m \rho_m \phi)_e (u_m)_e A_e - (\alpha_m \rho_m \phi)_w (u_m)_w A_w \\ & + (\alpha_m \rho_m \phi)_n (v_m)_n A_n - (\alpha_m \rho_m \phi)_s (v_m)_s A_s, \\ & + (\alpha_m \rho_m \phi)_t (w_m)_t A_t - (\alpha_m \rho_m \phi)_b (w_m)_b A_b \end{aligned} \quad (3.3)$$

Em que A é a área da seção transversal do volume de controle e t , b são topo e base de uma face da célula.

• **Termo Difusivo**

$$\begin{aligned} \int_{VC} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) dV \approx & \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e A_e - \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w A_w \\ & + \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n A_n - \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s A_s \\ & + \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_t A_t - \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_b A_b \end{aligned} \quad (3.4)$$

Na próxima seção discutir-se-á com mais detalhes a discretização dos termos convectivos-difusivos.

• **Termo Fonte**

O termo fonte é geralmente não linear e é primeiramente linearizado como segue:

$$R_\phi \approx \bar{R}_\phi - R'_\phi \phi_P \quad (3.5)$$

Para a estabilidade do esquema numérico, é essencial que $R'_\phi \geq 0$ [PATANKAR-1980]. Então a integral do termo fonte sobre um volume de controle origina:

$$\int_{VC} R_\phi dV \approx \bar{R}_\phi \Delta V - R'_\phi \phi_P \Delta V \quad (3.6)$$

Figura 3.1 Volume de Controle e localização dos nós na direção x

3.4 Discretização dos Termos de Convecção-Difusão

3.4.1 Esquemas de Primeira Ordem

A equação de transporte (3.1) contém termos de convecção-difusão da forma:

$$\rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right). \quad (3.7)$$

A estabilidade e a precisão (ver anexo D) do esquema numérico dependem fortemente do método utilizado para discretizar tais termos. É natural discretizar os termos utilizando uma expansão em série de Taylor. Em dinâmica de fluidos computacional, entretanto, o método de volume de controle (VC) é usualmente preferido. O método de VC invoca as bases físicas da dedução das equações de conservação e garante a conservação global de massa, quantidade de movimento e energia, mesmo em malhas grosseiras (PATANKAR (1980)). Na resolução numérica em uma malha suficientemente fina os métodos expansão em série de Taylor e o método de volume de controle resultariam na mesma precisão de solução. O método VC é mais atraente computacionalmente, desde que uma malha fina raramente é desejável.

Quando o termo de convecção-difusão é integrado sobre um VC, (figura 3.1) obtém-se:

$$\int \left[\rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right] DV = \left[\rho u \phi_e - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \right] A_e - \left[\rho u \phi_w - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] A_w \quad (3.8)$$

O fluxo difusivo é aproximado por um esquema simples de interpolação de segunda ordem de precisão. Por exemplo, o fluxo difusivo na face leste é dado por:

$$\left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = (\Gamma_{\phi})_e \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x_e} + O(\Delta x^2) \quad (3.9)$$

Os valores da face das células dos coeficientes de difusão Γ_{ϕ} são calculados utilizando uma média harmônica dos valores definidos no centro das células (PATANKAR (1980)). Por exemplo,

$$\begin{aligned} (\Gamma_{\phi})_e &= \left[\frac{1-f_e}{(\Gamma_{\phi})_P} + \frac{f_e}{(\Gamma_{\phi})_E} \right]^{-1} \\ &= \frac{(\Gamma_{\phi})_P (\Gamma_{\phi})_E}{f_e (\Gamma_{\phi})_P + (1-f_e) (\Gamma_{\phi})_E} \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\text{em que } f_e = \frac{\Delta x_E}{\Delta x_P + \Delta x_E} \quad (3.11)$$

Quando a fração de volume de uma certa fase muda para zero em uma face da célula, a equação (3.10), corretamente, ajusta o coeficiente de difusão da face para zero. Isto está em acordo com a realidade física, isto é, nenhuma difusão pode ocorrer em tal interface.

A discretização dos termos de convecção é uma tarefa fundamental.

Da equação (3.8), a discretização do termo de convecção é equivalente a determinação do valor ou expressão para Φ em cada face do VC (Φ_e e Φ_w). Uma interpolação simples tal como

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2}, \quad (3.12)$$

denominada de média simples, origina resultados de segunda ordem de precisão. Entretanto, em escoamentos dominados por convecção, típico de gás-sólido, este método introduz oscilações na solução e conduz a um esquema numérico instável (SYAMLAL (1998)). Uma solução conhecida para estabilizar os cálculos é o esquema de discretização “upwind”, conhecido na literatura como FOUP – “*First Order Up Winding*”:

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_P & \text{se } u \geq 0 \\ \phi_E & \text{se } u \leq 0 \end{cases} \quad (3.13)$$

Este método é de primeira ordem de precisão e é difusivo (SYAMLAL (1998)).

A motivação para o esquema FOUP é encontrada na solução analítica para um escoamento estável, unidimensional:

$$\frac{\phi - \phi_P}{\phi_E - \phi_P} = \frac{\exp\left(\frac{P_e x}{\delta x_e}\right) - 1}{\exp(P_e) - 1} \quad (3.14)$$

sendo que o número de Péclet (P_e), a razão entre o fluxo convectivo e o difusivo, na face leste é dado por:

$$P_e = \frac{\rho u \Delta x_e}{\Gamma} \quad (\text{SYAMLAL (1998)}). \quad (3.15)$$

Baixos valores de (P_e) mostram que a difusão é o mecanismo dominante de transporte na escala da amplitude da malha e valores elevados de (P_e) mostram que a convecção é dominante.

Uma discretização mais precisa do fluxo de convecção-difusão, motivada pela solução analítica, é o esquema exponencial:

$$\rho u \phi_e - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \rho u \left(\phi_P + \frac{\phi_P - \phi_E}{\exp(P_e) - 1} \right) \quad (\text{SYAMLAL (1998)}). \quad (3.16)$$

O esquema exponencial é caro computacionalmente, e, portanto, aproximações mais baratas tais como esquemas híbridos e esquema da lei de potências são utilizados na prática (SYAMLAL (1998)). Nestes esquemas a discretização “upwind” é utilizada para o termo de convecção. A discretização da lei de potências para o fluxo difusivo na face leste, por exemplo, é dado por:

$$\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = A(|P_e|) \Gamma_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_e} \right) \quad (3.17)$$

em que

$$A(|P_e|) = \llbracket (1 - 0,1|P_e|)^5 \rrbracket \quad (3.18)$$

que utiliza a definição de uma função de duplo colchete:

$$\llbracket R \rrbracket = \begin{cases} 0 & \text{se } R \leq 0 \\ R & \text{se } R > 0 \end{cases} \quad (\text{SYAMLAL (1998)}). \quad (3.19)$$

3.4.2 Esquemas de Ordem Superior

No desenvolvimento de um código computacional para problemas de escoamento de fluidos e transferência de calor, é desejável a adoção de um esquema que modela os termos convectivos com alta precisão e estabilidade, ausência de oscilações espúrias e com bom desempenho. Por nosso conhecimento, não há na literatura um esquema que contemple plenamente estes objetivos. Apesar de que os termos convectivos são representados por uma derivada simples de primeira ordem, sua representação numérica tem sido um dos principais objetos de pesquisa na dinâmica dos fluidos computacional - CFD “Computational Fluids Dynamic”. (KAIBARA *et al.* (2004))

Em CFD a maneira pela qual as derivadas convectivas nas equações de conservação são aproximadas requer atenção especial, porque esses termos são os responsáveis por muitos fenômenos complexos nos escoamentos e os principais causadores de dificuldades numéricas nas simulações. Por essas razões nas últimas décadas o estado da arte na modelagem numérica dessas não-linearidades, utilizando-se a metodologia de diferenças finitas ou volumes finitos, tem sido dominado principalmente pelas aproximações “upwind” de primeira ordem, tais como FOUP - “First Order Upwind” (Courant *et al.* (1952)), HYBRID (Spalding (1972)) e PLDS - “Power-Law Differencing Scheme” (Patankar (1980)). Muito embora os esquemas “upwind” de primeira ordem imitem o método das características (Ferziger (2000)) e assegurem a estabilidade do esquema numérico, vários pesquisadores tais como Raithby (Raithby (1976)), deVahl e Mallison (deVahl & Mallison (1976)), entre muitos outros, alertam para o fato da introdução de viscosidade numérica (“artificial damping”) que suaviza a solução do mesmo modo que a viscosidade física, intrínseca a esses esquemas. (FERREIRA (2001))

Via de regra, a viscosidade artificial adicional introduzida pelo processo de discretização é muito maior do que o coeficiente de viscosidade molecular do fluido, e, como consequência, o resultado numérico obtido pode estar associado à solução de um problema com características completamente diferentes do problema físico. Os esquemas FOUP, HYBRID e PLDS têm suas origens no comportamento do fluido em que a convecção é o mecanismo predominante no transporte de propriedades físicas. Atualmente eles continuam, ainda, sendo utilizados para superar os problemas das

oscilações não-físicas e/ou instabilidades numéricas associados aos métodos clássicos CD - “Central Difference” e SOU - “Second Order Upwind” (Price *et al.* 1966), (Fromm – 1968). (FERREIRA (2001))

Com o objetivo de minimizar a introdução excessiva de viscosidade numérica e, ao mesmo tempo derivar técnicas de alta ordem de consistência (ver anexo D), diversos esquemas “upwind” com ordem igual ou superior a dois surgiram na década de setenta. Dentre os mais populares, podem-se destacar os algoritmos SUDS - “Skew-Upwind Differencing Schemes” (Raithby – 1976) e QUICK – “Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics” (Leonard – 1979). Entretanto, o mesmo que acontece com os esquemas CD e SOU, nas vizinhanças de regiões onde gradientes elevados aparecem, a natureza dispersiva desses esquemas pode induzir oscilações espúrias - “wiggles” - na solução, as quais são suficientes para causar instabilidade numérica e, em decorrência, deteriorar completamente a precisão do método numérico. As dificuldades em superar oscilações/instabilidades na solução numérica levaram ao desenvolvimento de esquemas localmente limitados, e muitas tentativas foram feitas para encontrar um compromisso aceitável entre precisão, estabilidade e simplicidade de implementação. Hoje em dia, os esquemas localmente limitados consistem de uma das metodologias mais bem aceitas em escoamentos incompressíveis, pois proporcionam alta ordem do esquema QUICK e as boas propriedades de estabilidade do esquema FOU, resultando em esquemas incondicionalmente estáveis e de ordem de consistência razoável. (FERREIRA (2001))

Desde os anos noventa, esforços têm sido feitos para construir esquemas com alto grau de ausência de oscilações espúrias. Para problemas em estado estacionário, o SHARP - “Simple High-Accuracy Resolution Program”, proposto por Leonard em 1988 (LEONARD (1988)), é um exemplo de um esquema que tem um bom desempenho. Neste trabalho, ele desenvolveu a formulação de um esquema no contexto de normalização de variáveis e deduziu um método que é limitado e tem alta resolução. Outro exemplo é o esquema construído por Gaskell e Lau (GASKELL & LAU (1988)). Eles propuseram o esquema denominado SMART – “Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport”, que utiliza a formulação de variáveis normalizadas e é linear por partes. Ambos SHARP e SMART podem alcançar terceira ordem de precisão, mas para alguns problemas, tais como o escoamento em um tubo de choque, eles não são limitados (LIN & CHIENG (1991)) apud KAIBARA *et al.* (2004).

Atualmente, dois conceitos têm demonstrado ser de grande utilidade na construção de esquemas de ordem elevada: as restrições TVD – “Total Variation Diminishing” e as aproximações em NVD – “Normalized Variavel Diagram”. O mecanismo comum e fundamental destes dois modelos é o uso da natureza dissipativa da diferenciação de primeira ordem. Esquemas TVD, isto é, esquemas que satisfazem as restrições TVD possuem características atrativas. As soluções obtidas por eles são bem resolvidas, livres de oscilações e convergentes. Usualmente, os esquemas TVD são aplicados para escoamentos compressíveis nos quais as variáveis convectivas sofrem grandes alterações no seu gradiente ou no caso da presença de descontinuidades. Esquemas que satisfazem as condições TVD são sempre limitados, e um bom exemplo é o MUSCL – “Monotonic Upstream Scheme for Conservation Laws”. A aproximação NVD, como mencionado anteriormente, foi introduzida por Gaskell e Lau (GASKELL & LAU (1988)) e Leonard (LEONARD (1988)) para problemas que envolvam escoamento em regime permanente, e estendido para problemas transientes por Leonard (LEONARD (1991)). (KAIBARA *et al.* (2004))

Em resumo, quando precisão de ordem elevada, estabilidade numérica e simplicidade do algoritmo são objetivos simultâneos a serem alcançadas, as simulações de problemas de escoamentos incompressíveis em condições severas de convecção permanece ainda um problema difícil de se resolver, particularmente em problemas de escoamentos gás-sólido transientes.

3.4.3 Esquemas TVD

Dada uma seqüência de aproximações discretas $\phi(t) = \{\phi_i(t)\}_{i \in \mathbb{Z}}$ para um escalar, a Variação Total (TV - “Total Variation”) em um nível t desta seqüência é definida por:

$$TV(\phi(t)) = \sum_{i \in \mathbb{Z}} |\phi_{i+1}(t) - \phi_i(t)|. \quad (3.20)$$

Após Harten (HARTEN (1984)), esquemas de diferenças que originam uma TV limitada são denominados esquemas TVD. Uma propriedade desejável para uma solução aproximada compartilhar com uma exata é que sua TV diminua no tempo (TADMOR (1998)). TVD é uma propriedade puramente escalar, ela garante que oscilações indesejáveis são removidas da solução numérica de uma lei de conservação não linear.

Formalmente, considere o esquema de diferenças explícito envolvendo $(2k+1)$ pontos da forma:

$$\phi_i^{n+1} = H(\phi_{i-k}^n, \dots, \phi_{i+k}^n), \forall n \geq 0, i \in \mathbb{Z}, \quad (3.21)$$

em que $H: \mathbb{R}^{2k+1} \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função contínua e ϕ_i^n denota uma aproximação da solução exata ϕ em uma malha uniforme (x_i, t_n) , sendo $x_i = i\Delta x$, $t_n = n\Delta t$, com Δx e Δt os passos espacial e temporal, respectivamente. Por definição, temos que o esquema acima é TVD se:

$$TV(\phi^{n+1}) \leq TV(\phi^n) \quad (3.22)$$

Se as seguintes propriedades de monotonicidade são mantidas como uma função de t :

- Nenhum extremo local em x pode ser criado;
- O valor de um mínimo local é não decrescente, o valor de um máximo local é não crescente.

Então o esquema é dito estar preservando monotonicidade. Esta condição estabelece que um esquema está preservando a monotonicidade se ϕ^{n+1} permanece monótono quando ϕ^n é monótono. Em outras palavras, perfis monótonos são preservados durante a evolução temporal das soluções discretas e superestimativas não serão criadas.

Considere a equação de advecção linear transiente de um escalar ϕ com velocidade constante α , descrita por:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \alpha \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0, \quad (3.23)$$

cuja solução é aproximada pelo seguinte esquema numérico na forma conservativa:

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \nu \left(\phi_{i+\frac{1}{2}} - \phi_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (3.24)$$

em que $\nu = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x}$ é o número de Courant e $\phi_{i+\frac{1}{2}}$ é uma aproximação para o valor de ϕ na face da célula $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$, cujo centro é x_i . Denotamos o valor da face $\phi_{i-\frac{1}{2}}$ por ϕ_l e $\phi_{i+\frac{1}{2}}$ por ϕ_f . Estes pontos e valores são mostrados na figura 3.2. Utilizando estas notações, pode-se escrever para a face f :

Figura 3.2: Molécula de interpolação

- Esquema Upwind

$$\phi_f = \frac{\phi_{i+1} + \phi_i}{2} - \frac{1}{2} \text{sgn}(\alpha)(\phi_{i+1} - \phi_i). \quad (3.25)$$

- Esquema Lax-Wendroff

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \frac{\nu}{2}(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) + \frac{\nu^2}{2}(\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}) \quad (3.26)$$

ou

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \nu(\phi_i - \phi_{i-1}) - \frac{1}{2}\nu(1-\nu)(\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}) \quad (3.27)$$

Portanto,

$$\phi_f = \phi_i + \frac{1}{2}(1-\nu)(\phi_{i+1} - \phi_i). \quad (3.28)$$

Note que o termo $\frac{1}{2}\nu(1-\nu)(\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1})$ na equação (3.27) pode ser visto como um termo antidifusivo adicionado ao esquema “upwind”. É conhecido que o esquema Lax-Wendroff é não TVD (SYAMLAL (1998)). O termo antidifusivo pode ser modificado com a finalidade de limitar o esquema:

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \nu(\phi_i - \phi_{i-1}) - \frac{1}{2}\nu(1-\nu) \left[\varphi_{i+1/2}(\phi_{i+1} - \phi_i) - \varphi_{i-1/2}(\phi_i - \phi_{i-1}) \right] \quad (3.29)$$

então

$$\phi_f = \phi_i + \frac{1}{2}(1-\nu)\varphi_{i+1/2}(\phi_{i+1} - \phi_i). \quad (3.30)$$

É comum na literatura escolher o limitador $\varphi_{i+1/2}$ como função da razão de dois gradientes consecutivos,

$$\phi_{i+1/2} = \phi\left(\tau_{i+1/2}\right) \text{ com } \tau_{i+1/2} = \begin{cases} \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\phi_{i+1} - \phi_i}, & \text{se } a > 0 \\ \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\phi_{i+1} - \phi_i}, & \text{se } a < 0 \end{cases}. \quad (3.31)$$

Observação 3.1: Note que para $\phi \equiv 1$, obtém-se o esquema de Lax-Wendroff.

A seguir apresenta-se um critério bastante útil devido a Harten (HARTEN (1983)), o qual garante que um esquema específico seja TVD. Utilizando este critério, Sweby (SWEBY (1984)) deduziu condições suficientes para que o esquema (3.29) seja TVD.

Critério de Harten:

Considere um esquema na forma:

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n + C_{i+1/2}(\phi_{i+1}^n - \phi_i^n) - D_{i-1/2}(\phi_i^n - \phi_{i-1}^n) \quad (3.32)$$

onde os coeficientes $C_{i+1/2}$ e $D_{i-1/2}$ dependem das variáveis $\phi_{i-k+1}, \dots, \phi_{i+k}$.

Se os coeficientes em (3.32) satisfazem as seguintes desigualdades para todo i ,

$$\begin{aligned} C_{i+1/2} &\geq 0, \\ D_{i+1/2} &\geq 0, \\ C_{i+1/2} + D_{i+1/2} &\leq 1, \end{aligned} \quad (3.33)$$

então o esquema é TVD.

Prova:

Temos que:

$$\begin{aligned} \phi_{i+1}^{n+1} - \phi_i^{n+1} &= \phi_{i+1}^n + C_{i+3/2}(\phi_{i+2}^n - \phi_{i+1}^n) - D_{i+1/2}(\phi_{i+1}^n - \phi_i^n) \\ &\quad - \phi_i^n - C_{i+1/2}(\phi_{i+1}^n - \phi_i^n) + D_{i-1/2}(\phi_i^n - \phi_{i-1}^n) \\ &= C_{i+3/2}(\phi_{i+2}^n - \phi_{i+1}^n) + \left(1 - C_{i+1/2} - D_{i+1/2}\right)(\phi_{i+1}^n - \phi_i^n) + D_{i-1/2}(\phi_i^n - \phi_{i-1}^n) \end{aligned} \quad (3.34)$$

Por hipótese todos os coeficientes no lado direito de (3.34) são positivos, portanto;

$$\left| \phi_{i+1}^{n+1} - \phi_i^{n+1} \right| \leq C_{i+3/2} \left| \phi_{i+2}^n - \phi_{i+1}^n \right| + \left(1 - C_{i+1/2} - D_{i+1/2}\right) \left| \phi_{i+1}^n - \phi_i^n \right| + D_{i-1/2} \left| \phi_i^n - \phi_{i-1}^n \right|.$$

Adicionando estas desigualdades para todo $i \in Z$, e rearranjando a soma em termos de $|\phi_{i+1}^n - \phi_i^n|$, obtém-se:

$$TV(\phi^{n+1}) = \sum_i |\phi_{i+1}^{n+1} - \phi_i^{n+1}| \leq \sum_i |\phi_{i+1}^n - \phi_i^n| = TV(\phi^n) \quad \blacksquare \quad (3.35)$$

Utilizando o critério de Harten, Sweby (SWEBY (1984)), no próximo resultado, fornece uma condição suficiente para que o esquema (3.29) seja TVD.

Teorema 3.1 Suponha que a função ϕ satisfaça:

$$\begin{cases} \phi(r) = 0, & \text{se } r \leq 0 \\ 0 \leq \phi(r) \leq \min\{2, 2r\}, & \text{se } r > 0 \end{cases} \quad (3.36)$$

então o esquema (3.29) é TVD sob a condição $0 \leq \nu \leq 1$, para $\alpha > 0$. (Chamada de condição de CFL (*Courant-Friedrichs-Lewy*))

Prova:

Uma possível escolha para os coeficientes $C_{i+1/2}$ e $D_{i-1/2}$ no critério de Harten é:

$$C_{i+1/2} = 0 \quad (3.37a)$$

$$D_{i-1/2} = \nu + \frac{1}{2}\nu(1-\nu) \left(\frac{\phi_{i+1/2}}{r_{i+1/2}} - \phi_{i-1/2} \right). \quad (3.37b)$$

Sob as condições expressas em (3.33), deve-se checar a restrição: $0 \leq D_{i-1/2} \leq 1$.

Note que neste caso, ϕ_i^{n+1} permanece entre ϕ_{i-1}^n e ϕ_i^n , o que ilustra a propriedade “upwind” do esquema. Suponha primeiro que:

$$\left| \frac{\phi(r)}{r} - \phi(s) \right| \leq \phi, \quad (3.38)$$

para todo r, s e algum $\phi = \phi(\nu)$. Desde que, $0 < \nu < 1$, tem-se de (3.37a,b) e (3.38):

$$\begin{aligned} 1 - (1-\nu)\frac{\phi}{2} &\geq 0 \\ 1 + (1-\nu)\frac{\phi}{2} &\leq \frac{1}{\nu} \end{aligned} \quad (3.39)$$

e portanto $0 \leq D_{i-1/2}$ e $D_{i-1/2} \leq 1$ ou equivalentemente:

$$\phi \leq \min \left\{ \frac{2}{\nu}, \frac{2}{1-\nu} \right\} \Rightarrow 0 \leq D_{i-1/2} \leq 1. \quad (3.40)$$

Desde que $\nu \in (0,1)$, deve-se ter $\phi \leq 2$. É claro, de (3.37a,b), que para $\nu = 0$ ou $\nu = 1$ o critério de Harten é satisfeito.

Em seguida, assumindo $\phi(r) = 0$ para $r \leq 0$, a equação (3.38) será satisfeita com $\phi = 2$, se $r > 0$ então $0 \leq \phi(r) \leq 2r$ e $\phi(r) \leq 2$, o que origina (3.36)■

A condição (3.36) significa que o gráfico de ϕ deve permanecer na região hachurada da figura 3.3.

Observação 3.2: O teorema 3.1 é valido no caso geral $|\nu| \leq 1$.

Figura 3.3 Diagrama de Sweby

Exemplos de Limitadores

1. Limitador de Sweby

$$\phi_s(r) = \max \{0, \min(Sr, 1), \min(r, S)\} \quad (3.41)$$

em que S é um parâmetro no intervalo $[1, 2]$. A função ϕ_s é monótona crescente, e possuidora da propriedade de simetria, isto é,

$$\frac{\phi_s(r)}{r} = \phi_s\left(\frac{1}{r}\right). \quad (3.42)$$

2. Limitadores de Roe

Para $S = 1$ em (3.41), obtém-se o limitador Minmod e para $S = 2$, obtém-se o limitador altamente compressivo Superbee.

3. Limitador de Van Leer

A técnica descrita em VAN LEER (1974) conduz ao limitador

$$\phi(r) = \frac{r + |r|}{1 + |r|} = \begin{cases} 0, & r \leq 0 \\ \frac{2r}{1+r}, & r \geq 0 \end{cases} \quad (3.43)$$

Esta seção foi baseada em KAIBARA *et al.* (2004).

3.4.4 Diagrama de Variável Normalizada para o Limitador Universal - NVD

O conceito de variáveis normalizadas que se descreve agora foi introduzido por Gaskell e Lau (GASKELL & LAU (1988)) e por Leonard (LEONARD (1988)), (LEONARD (1991)) e (LEONARD & MOKHTARI (1990)).

A figura 3.4 ilustra o comportamento local da variável convectiva, $\Phi(x, y, z)$, na vizinhança da face de um volume de controle (VC), na direção normal àquela face. Dependendo da direção da velocidade de convecção (aqui, à direita), rotula-se os três valores nodais: Φ_D (à jusante), Φ_U (à montante) e Φ_C (centralizado entre os outros dois). Na figura 3.4(a), o comportamento local é monotônico. Uma condição necessária do limitador universal está esquematizada na figura, com as linhas hachuradas: o valor da face convectiva, Φ_f , deveria permanecer entre os valores nodais adjacentes numa região monotônica (ver Anexo C – Critério de Convecção Limitada). Note que isto inclui o caso limite, $\Phi_C = \Phi_D (= \Phi_f)$. Mas se $\Phi_C = \Phi_U$, uma condição adicional é necessária: $\Phi_f = \Phi_C (= \Phi_U)$, neste caso, como mostrado na parte (b) da figura 3.4. O tratamento do comportamento localmente não monotônico é esquematizado nas partes (c) e (d) da figura 3.4.

É mais conveniente resumir as restrições para o limitador universal em termos das variáveis normalizadas. A figura 3.5(a) mostra o comportamento local próximo a uma face do VC na direção normal à face. Note que os rótulos para os valores nodais novamente seguem a convenção da direção da velocidade de convecção, neste caso, para a esquerda. Define-se a variável normalizada, $\tilde{\Phi}$, em qualquer vizinhança desta face do VC como

$$\tilde{\Phi}(x, y, z) = \frac{\Phi(x, y, z) - \Phi_U}{\Phi_D - \Phi_U} \quad (3.44)$$

Figura 3.4: Variável da face convectiva, ϕ_f , dependendo do comportamento local de ϕ normal à face do VC: a) localmente monotônica, b) $\phi_C = \phi_U$, c) $\phi_C > \phi_D$, d) $\phi_C < \phi_U$

Note, em particular, que $\tilde{\Phi}_U = 0$ e $\tilde{\Phi}_D = 1$. A figura 3.5(b) fornece a mesma informação que 3.5(a), mas em termos das variáveis normalizadas. Agora as restrições para o limitador universal podem ser descritas no Diagrama Variável Normalizado (NVD), isto é, o plano $(\tilde{\Phi}_C, \tilde{\Phi}_f)$. Conforme a figura 3.6, simbolicamente, as restrições para o limitador universal em $\tilde{\Phi}_f$ podem ser escritos como:

$$\tilde{\Phi}_C \leq \tilde{\Phi}_f \leq 1 \quad \text{para} \quad 0 < \tilde{\Phi}_C \leq 1 \quad (3.45)$$

com

$$\tilde{\Phi}_f = 0 \quad \text{em} \quad \tilde{\Phi}_C = 0 \quad (3.46)$$

e com extensões contínuas além de $\tilde{\Phi}_C < 0$, mantendo uma condição crescente de monotonicidade: $\partial \tilde{\Phi}_f / \partial \tilde{\Phi}_C > 0$. Na figura 3.6, estas extensões são dadas por uma diferenciação central de segunda ordem para $\tilde{\Phi}_C > 1$:

$$\tilde{\Phi}_f = 1 + 0,5(\tilde{\Phi}_C - 1) \quad \text{para} \quad \tilde{\Phi}_C > 1 \quad (3.47)$$

e “upwind” de segunda ordem para $\tilde{\Phi}_C$ negativo:

$$\tilde{\Phi}_f = 1,5\tilde{\Phi}_c \quad \text{para} \quad \tilde{\Phi}_c < 0 \quad (3.48)$$

mas outras relações funcionais são possíveis. As linhas tracejadas mostram a extensão das equações (3.47) e (3.48) no interior da faixa de monotonicidade, $0 < \tilde{\Phi}_c < 1$. Note que ambas passam pelo ponto **C**, com coordenadas (0,5; 0,75). Para evitar a não unicidade quando $\tilde{\Phi}_c \rightarrow 0_+$, a fronteira **OB** tem uma pequena inclinação positiva e finita. Isto introduz uma restrição adicional:

$$\tilde{\Phi}_f \leq \text{const} \tilde{\Phi}_c \quad \text{quando} \quad \tilde{\Phi}_c \rightarrow 0_+ \quad (3.49)$$

em que $\text{const} = o(10^2)$, por exemplo.

Figura 3.5: Definição das Variáveis Normalizadas de acordo com a equação 3.44: a) variáveis originais não normalizadas; b) Correspondente diagrama em termos das variáveis normalizadas.

Figura 3.6: Restrições do Limitador Universal no Diagrama de Variável Normalizada (NVD). Ponto C está localizado em (0,5, 0,75)

Em cada estágio de uma marcha pseudo-temporal ou solução iterativa, as restrições para o limitador universal são aplicadas como segue:

- i) Para cada face do VC, identifique a direção da componente da velocidade normal atual, portanto, identificando Φ_U, Φ_C e Φ_D .
- ii) Calcule explicitamente uma tentativa para o valor de face com alta ordem, multidimensional, “upwind-predisposto”, Φ_f .
- iii) Calcule o correspondente valor de face normalizado, $\tilde{\Phi}_f$, e o valor nodal adjacente “upwind”, $\tilde{\Phi}_C$.
- iv) Se o ponto $(\tilde{\Phi}_C, \tilde{\Phi}_f)$ não pertence à região triangular da figura 3.6, proceda para a próxima face do VC.
- v) Se não, $\tilde{\Phi}_f$ está limitado a uma vizinhança apropriada da restrição da fronteira para um dado valor de $\tilde{\Phi}_C$.
- vi) O valor de face não normalizado é então reconstruído por:
$$\Phi_f = \tilde{\Phi}_f (\Phi_D - \Phi_U) + \Phi_U \quad (3.50)$$
- vii) O mesmo procedimento é utilizado para cada face do VC.

Então, em um algoritmo de marcha temporal, os fluxos convectivos (limitados) e correspondentes difusivos (calculados utilizando uma diferenciação central de segunda ordem) estão agora disponíveis para o passo de atualização explícita. Alternativamente, soluções iterativas implícitas podem ser implementadas pela introdução do fator ponderado de “downwind”, descrito a seguir.

3.4.5 O Fator de Ponderação “Downwind”

Ao invés de limitar diretamente os valores na face, o “*Downwind Weighting Factor*” (*DWF*) é introduzido como uma variável auxiliar, gerando assim um esquema compacto implícito conveniente para métodos de solução de sistemas tridiagonais. Após calcular explicitamente uma estimativa para Φ_f , define-se

$$DWF = \frac{\Phi_f - \Phi_c}{\Phi_D - \Phi_c} . \quad (3.51)$$

Desde que isto é equivalente a:

$$DWF = \frac{\tilde{\Phi}_f - \tilde{\Phi}_c}{1 - \tilde{\Phi}_c} . \quad (3.52)$$

Em termos do DWF , as restrições para o limitador universal, referente à figura 3.6, tornam-se:

$$0 \leq DWF \leq 1 \quad \text{para} \quad 0 < \tilde{\Phi}_c \leq 1 \quad (3.53)$$

ou

$$DWF \leq \frac{(const - 1)\tilde{\Phi}_c}{(1 - \tilde{\Phi}_c)} \quad \text{quando} \quad \tilde{\Phi}_c \rightarrow 0_+ \quad (3.54)$$

na região monotônica, e nas regiões externas, por exemplo:

$$DWF = \frac{\tilde{\Phi}_c}{2(1 - \tilde{\Phi}_c)} \quad \text{para} \quad \tilde{\Phi}_c \leq 0 \quad (3.55)$$

e

$$DWF = 0,5 \quad \text{para} \quad \tilde{\Phi}_c > 1. \quad (3.56)$$

Isto é ilustrado na figura 3.7. Note que o ponto A dado por (1; 1) na figura 3.6 foi estendido numa linha vertical na figura 3.7. O ponto C é dado agora pelas coordenadas (0,5; 0,5).

Figura 3.7: Restrições do Limitador Universal (correspondente à figura 3.6) em termos do fator DWF . Ponto C está em (0,5; 0,5).

Note a Singularidade em $\tilde{\Phi}_c = 1$.

Agora se reescreve o valor de face (em termos do DWF conhecido) como

$$\Phi_f = DWF\Phi_U^{TBC} + (1 - DWF)\Phi_C^{TBC} \quad (3.57)$$

em que “ TBC ” significa a ser calculado na próxima iteração de uma atualização implícita com varredura por linha. – “implicit line-sweep update”. Note que o fluxo convectivo em cada face do VC envolve agora somente valores nodais adjacentes “ TBC ” “upwind” e “downwind”; mas o DWF na equação (3.53) contém implicitamente informações no estêncil de ordem superior (em adição às restrições do limitador universal).

Utilizando a notação popular de “compass-point”, os valores de face convectivos individuais são calculados como segue. Considerando a face oeste, por exemplo, o valor de face obtido da equação (3.57) dependerá do sinal da velocidade de convecção na face oeste. Se Φ_W^* é uma estimativa inicial de ordem superior na face oeste, o DWF é calculado primeiramente de acordo com:

$$DWF_W^+ = \frac{\Phi_W^* - \Phi_W}{\Phi_C - \Phi_W} \quad \text{se} \quad u_W \geq 0, \quad (3.58)$$

ou

$$DWF_W^- = \frac{\Phi_W^* - \Phi_C}{\Phi_W - \Phi_C} \quad \text{se} \quad u_W < 0. \quad (3.59)$$

Então DWF é limitado de acordo com a figura 3.7. O valor de face utilizado na atualização implícita é então:

$$\Phi_W = DWF_W^+\Phi_P + (1 - DWF_W^+)\Phi_W \quad \text{para} \quad u_W \geq 0, \quad (3.60)$$

ou

$$\Phi_W = DWF_W^-\Phi_W + (1 - DWF_W^-)\Phi_P \quad \text{para} \quad u_W < 0. \quad (3.61)$$

Em qualquer caso, Φ_W é uma combinação linear de seus dois valores nodais adjacentes (“upwind” e “downwind”) com $\text{sgn}(u_W)$ como um parâmetro, isto é,

$$\Phi_W = \Gamma_W^{DWF} [\Phi_W, \Phi_P; \text{sgn}(u_W)]. \quad (3.62)$$

Procede-se de maneira semelhante para as outras faces desta célula de VC. Isto resulta em uma atualização (em três dimensões) da forma:

$$a_P\Phi_P = a_W\Phi_W + a_S\Phi_S + a_B\Phi_B + a_E\Phi_E + a_N\Phi_N + a_T\Phi_T + b \quad (3.63)$$

que é, claro, idêntico a forma gerada pelos métodos de primeira ordem “upwind” ou central de segunda ordem ou combinações tais como híbridos, PLDS ou EDS. Deve-se

ressaltar que as informações multidimensionais de ordem superior e as restrições no limitador universal não-oscilatório estão implicitamente contidas no DWF de cada face ao invés de envolver valores nodais “distantes” (remotos) que estão em conjunto no termo fonte explícito. As restrições inerentes no DWF garantem resultados não oscilatórios, com propriedades de estabilidade e convergência semelhantes aos métodos de primeira ordem ($DWF \equiv 0$), mas sem introdução da difusão numérica artificial. (LEONARD & MOKHTARI (1990))

Conclusões

Em termos das variáveis normalizadas, o esquema “upwind” de primeira ordem é representado por:

$$\tilde{\Phi}_f = \tilde{\Phi}_c, \quad (3.64)$$

que em NVD, é representado por uma linha reta passando pelos pontos (0,0) e (1,1). Deste modo conforma, marginalmente, com as restrições para o limitador universal (figura 3.6) e, portanto, produz resultados não oscilatórios. Como mostrado por Godunov apud LEONARD & MOKHTARI (1990), ele é somente um esquema linear (isto é, na terminologia presente, $\tilde{\Phi}_f$ é uma função linear de $\tilde{\Phi}_c$) que possui esta propriedade, como pode ser facilmente constatado na figura 3.6. Os esquemas TVD são baseados em relações únicas não lineares estimadas entre $\tilde{\Phi}_f$ e $\tilde{\Phi}_c$, mas também requerem que as correspondentes curvas no NVD passem pelos pontos (0,0) e (1,1). Se a curva no NVD passa pelo ponto (0.5, 0.75), o esquema é de segunda ordem de precisão (ou terceira ordem se ele passa através deste ponto com uma inclinação de $3/4$); caso contrário o esquema é somente de primeira ordem (SYAMLAL (1998)).

Esquemas com valores geralmente maiores de $\tilde{\Phi}_f$ (em um dado valor de $\tilde{\Phi}_c$) tendem a ser mais compressivos do que esquemas com valores menores. Portanto o esquema Superbee é mais compressivo do que o Muscl, por exemplo, por outro lado o esquema Minmod é mais difusivo. O esquema “upwind” de primeira ordem é o mais difusivo de todos os esquemas não-oscilatórios, pois ele coincide com a restrição TVD inferior (reta passando pelos pontos (0,0) e (1,1)) conforme figura 3.9 b.

Esquemas de ordem superior não podem ser representados por uma simples curva no plano $(\tilde{\Phi}_c, \tilde{\Phi}_f)$; entretanto, eles ainda podem ser forçados a passar pelos

pontos (0,0) e (1,1), o que parece ser uma condição básica para resultados não oscilatórios. No limite de monotonicidade ($0 \leq \tilde{\Phi}_c \leq 1$), a restrição à jusante (downwind), $\tilde{\Phi}_f \leq 1$, garante a unicidade, considerando a restrição à montante (upwind), $\tilde{\Phi}_f \geq \tilde{\Phi}_c$, elimina o efeito de cobertura de escada - “stair-casing”.

A restrição adicional, $\tilde{\Phi}_f \leq \text{const} \tilde{\Phi}_c$, evita a não unicidade quando $\tilde{\Phi}_c \rightarrow 0_+$. A região triangular resultante no NVD, figura 3.6, constitui o limitador universal para o escoamento não transiente no limite monotônico. No regime não monotônico, há uma considerável flexibilidade, provendo as restrições de serem consistentes em passarem pelos pontos (0,0) e (1,1), e que $\frac{\partial \tilde{\Phi}_f}{\partial \tilde{\Phi}_c}$ mantenha-se positivo e finito (para garantir unicidade).

3.4.6 Utilização do fator *DWF* no código MFLX

Como vimos na seção anterior, o limitador universal pode ser expresso em termos de fatores de ponderação à jusante – “downwind weighting factors” para gerar um estêncil compacto adequado a métodos de solução de sistemas tridiagonais (“septadiagonais” em 3D) (Equações 3.51 e 3.52). Ou seja,

$$DWF = \frac{\Phi_f - \Phi_c}{\Phi_D - \Phi_c} = \frac{\tilde{\Phi}_f - \tilde{\Phi}_c}{1 - \tilde{\Phi}_c} \quad (3.65)$$

onde C é um nó localizado entre U e D (figura 3.8). Leonard e Mokhtari (LEONARD & MOKHTARI (1990)) descrevem um procedimento para aplicar o limitador a qualquer esquema de ordem arbitrária (seção 3.4.4).

Figura 3.8 Notação para a localização do nó baseada na direção do fluxo

Na prática, fórmulas explícitas para o DWF podem ser obtidas pela avaliação de $\frac{\Phi_f - \Phi_c}{\Phi_D - \Phi_c}$, onde Φ_f , é substituído por seu valor interpolado. Uma vez que DWF tem sido determinado, é claro que o valor da face da célula, Φ_f , é dado por:

$$\Phi_f = DWF\Phi_D + (1 - DWF)\Phi_c \quad (3.66)$$

Para vários esquemas de discretização fórmulas explícitas para o fator de “Downwind” podem ser deduzidas. As fórmulas utilizadas no MFIX são mostradas na tabela 3.1 e plotam-se algumas delas na figura 3.9 (a) e (b).

Tabela 3.1 Fórmulas de Discretização em termos dos fatores de “Downwind”

Esquema de Discretização	Fator de Down Wind $\left(\Theta \equiv \frac{\tilde{\Phi}_c}{1 - \tilde{\Phi}_c} \right)$
FOUP	0
Diferença Central	0,5
Upwind de segunda ordem	$\frac{\Theta}{2}$
Esquemas TVD	0 SE $(\tilde{\Phi}_c < 0 \text{ ou } \tilde{\Phi}_c > 1)$ SENÃO
Van Leer	$\tilde{\Phi}_c$
Minmod	$\left(\frac{1}{2} \right) \max[0, \min(1, \Theta)]$
MUSCL	$\left(\frac{1}{2} \right) \max[0, \min(2\Theta, 0.5 + 0.5\Theta, 2)]$
UMIST	$\left(\frac{1}{2} \right) \max[0, \min(2\Theta, 0.75 + 0.25\Theta, 2)]$
SMART	$\left(\frac{1}{2} \right) \max[0, \min(4\Theta, 0.75 + 0.25\Theta, 2)]$
Superbee	$\left(\frac{1}{2} \right) \max[0, \min(1, 2\Theta), \min(2, \Theta)]$

ULTRA-QUICK	$\frac{\Theta}{2}$	$\tilde{\phi}_c < 0$
	$\left(\frac{1}{c}-1\right)\Theta$	$0 \leq \tilde{\phi}_c < \frac{3c}{8-6c}$
	$0.375 + 0.125\Theta$	$\frac{3c}{8-6c} \leq \tilde{\phi}_c < \frac{5}{6}$
	1	$\frac{5}{6} \leq \tilde{\phi}_c \leq 1$
	0.5	$\tilde{\phi}_c > 1$

Figura 3.9 a) Fatores de Downwind como função de Φ normalizado

Figura 3.9 b) Φ_f normalizado como função de Φ_c normalizado

3.4.7 Algoritmo para a utilização do Fator de “Downwind”

Por conveniência de programação, calcula-se um fator de convecção ponderado (ξ) a partir do fator de “Downwind”, o qual pode ser calculado uma vez e utilizado sem checagem adicional na direção do fluxo. Define-se o fator de convecção ponderado, ξ como:

$$\xi = \begin{cases} DWF & \text{se } u \geq 0 \\ 1 - DWF & \text{se } u < 0 \end{cases} \quad (3.67).$$

O método é ilustrado com o cálculo de ξ na face leste. As localizações dos nós são mostradas na figura 3.10. Refere-se também à figura 3.8 para as definições dos nós C, D e U.

Figura 3.10: Localização dos Nós

Algoritmo 3.1.

1. Cálculo de $\tilde{\Phi}_C$.

SE $u_e \geq 0$ ($P \equiv C$; $E \equiv D$; $W \equiv U$)

$$\tilde{\Phi}_C = \frac{\Phi_P - \Phi_W}{\Phi_E - \Phi_W} \quad (3.68)$$

SENÃO ($E \equiv C$; $P \equiv D$; $EE \equiv U$)

$$\tilde{\Phi}_C = \frac{\Phi_E - \Phi_{EE}}{\Phi_P - \Phi_{EE}} \quad (3.69)$$

2. Utilize $\tilde{\Phi}_C$ na fórmula da tabela 3.1 para calcular o fator de “Downwind”.

3. Aplicando a eq.(3.66), obtém-se:

$$\Phi_e = DWF_e \Phi_D + (1 - DWF_e) \Phi_C \quad (3.70)$$

calcula-se ξ como segue:

$$\text{SE } u_e \geq 0 \quad (P \equiv C; E \equiv D)$$

$$\Phi_f = DWF_e \Phi_E + (1 - DWF_e) \Phi_P \quad (3.71)$$

$$\xi_e = DWF_e \quad (3.72)$$

$$\text{SENÃO } (E \equiv C; P \equiv D)$$

$$\Phi_f = DWF_e \Phi_P + (1 - DWF_e) \Phi_E \quad (3.73)$$

$$\xi_e = 1 - DWF_e \quad (3.74)$$

O valor de Φ na face leste, por exemplo, é então escrito como:

$$\Phi_e = \xi_e \Phi_E + \bar{\xi}_e \Phi_P, \quad (3.75)$$

em que $\bar{\xi}_e = 1 - \xi_e$.

3.4.8 Método de Correção Defasada – DC “Deferred Correction Method”

Considere o sistema algébrico dado pela seguinte equação:

$$a_P \Phi_P = \sum_{nb} a_{nb} \Phi_{nb} + S_P \quad (3.76)$$

Que é equivalente à:

$$a_P \Phi_P - \sum_{nb} a_{nb} \Phi_{nb} = S_P \quad (3.77)$$

Se todos os termos contendo os valores nodais da variável desconhecida são mantidos no lado esquerdo da equação (3.77), a molécula computacional pode tornar-se muito grande. Desde que o tamanho da molécula computacional afeta tanto o armazenamento como o esforço necessário para resolver o sistema de equações lineares, então se deve mantê-la tão pequena quanto possível, usualmente, somente os vizinhos mais próximos do nó P são mantidos no lado esquerdo da equação. Entretanto, aproximações que produzem tais moléculas computacionais simples não são, em geral, suficientemente precisas, então se obriga a utilização de aproximações que se referem a mais nós do que simplesmente os mais próximos.

O único caminho para este problema seria deixar somente os termos contendo os vizinhos mais próximos no lado esquerdo da equação (3.77) e levar todos os demais para o lado direito. Isto requer que estes termos sejam avaliados utilizando valores das iterações prévias. Entretanto, isto não é uma boa estratégia e pode conduzir a instabilidades e, conseqüentemente, divergência do método (devido ao fato que os termos tratados explicitamente podem ser substanciais). Para prevenir a divergência, alto grau de relaxação entre uma iteração e a subsequente poderia ser requerida, resultando em baixa taxa de convergência.

Uma aproximação mais adequada é calcular os termos que são aproximados com uma aproximação explícita de ordem elevada e colocá-los no lado direito da equação. Então se toma uma aproximação mais simples para estes termos (uma que forneça uma molécula computacional menor) e a coloca em ambos os lados, isto é, no lado esquerdo (com as variáveis desconhecidas) e no lado direito (calculando a explicitamente, utilizando valores conhecidos). O lado direito é agora a diferença entre duas aproximações do mesmo termo (com ordens distintas e é comumente menor). Portanto, ela deveria causar nenhum problema no procedimento de solução iterativo. Uma vez que a solução convergiu, os termos aproximados com baixa ordem cancelam-se, e a solução obtida corresponde à aproximação de alta ordem.

Desde que métodos iterativos são necessários, devido a não linearidade do sistema de equações a ser resolvido, a adição de um pequeno termo na parte tratada explicitamente acarreta em um pequeno aumento do esforço computacional. Por outro lado, ambos a memória e o tempo de processamento requerido são grandemente reduzidos quando o tamanho da molécula computacional na parte da equação tratada implicitamente é pequena.

3.4.8.1 Motivação para a Aplicação do Método DC na Discretização das Equações que Modelam o Escoamento Gás-Sólido

Esquemas de discretização de alta ordem utilizam informação de um estêncil mais amplo do que um de sete pontos (em 3D). Os métodos *DWF* e *DC* são técnicas utilizadas para gerar um sistema linear baseado em um “estêncil” de sete pontos originado a partir de fórmulas de discretização com ordem superior. No método *DWF*

quantidades definidas nas faces do volume de controle são calculadas em função dos seus termos DWF 's e valores nodais à jusante e à montante. Isto mantém uma estrutura compacta para o sistema resultante de equações discretas com a contribuição de um “estêncil” mais amplo e as restrições do limitador universal não oscilatório implicitamente contidas no DWF . A expectativa era que esta técnica garantisse resultados não oscilatórios com as propriedades de estabilidade e de convergência do $FOUP$. Infelizmente sob certas condições o método DWF gera instabilidades devido à ênfase dada aos valores nodais à jusante ao invés dos valores à montante. O método DWF pode destruir a estrutura de dominância diagonal da matriz dos coeficientes e desacelerar a taxa de convergência ou em alguns casos levar à divergência.

O método DC mantém a estrutura algébrica, característica de métodos de baixa ordem, pela adição de um termo fonte que contém a diferença entre os métodos de baixa e alta ordem. Esta técnica, um tanto antiga, não é muito preferida em cálculos envolvendo escoamentos de fase simples, devido ao fato que o termo fonte atribui uma carga indevida na convergência. O desempenho desta técnica em cálculos de escoamento gás-sólido não tem sido muito explorado (GUENTHER & SYAMLAL (2001)). Como se vê adiante (tabela 3.2), DC é um método efetivo para simulação de escoamento gás-sólido. A razão principal para isto é que o escoamento gás-sólido é inerentemente transiente e necessita de amplitude de passos razoavelmente pequenos. Assim a magnitude do termo fonte criada pelo método DC é usualmente pequena e não afeta de maneira adversa a convergência. Devido ao fato que o método DC utiliza um método de baixa ordem ($FOUP$) na formação do sistema algébrico, um sistema diagonalmente dominante é gerado. Este ganho na estabilidade proporcionado pelo método DC aumenta significativamente o desempenho computacional (velocidade de processamento) em comparação ao método DWF , enquanto mantém o mesmo grau de precisão.

3.4.8.2 Descrição do Método

O método DC foi primeiramente proposto por Rubin e Khosla (RUBIN & KHOSLA (1977)). Pode-se resumi-lo da seguinte maneira: as aproximações para o fluxo de alta ordem são calculadas explicitamente e esta aproximação é então

combinada com uma aproximação de baixa ordem, obtida implicitamente (utiliza somente valores nodais mais próximos).

O método *DC* utiliza a propriedade desejável de estabilidade de um método de baixa ordem, para formar o sistema algébrico dado pela equação (3.76).

Para capturar a resolução de um método de alta ordem um termo fonte adicional (S_{DC}) é introduzido:

$$a_p \Phi_p = \sum_{nb} a_{nb} \Phi_{nb} + S_p + S_{DC} \quad (3.78)$$

O termo fonte adicional é dado por:

$$S_{DC} = C_f (\Phi^{HO} - \Phi^{LO})_f \quad (3.79)$$

com *HO*: “high order” e *LO*: “low order” e o fator de convecção na face da célula é dado por:

$$C_f = (\varepsilon_m \rho_m)_f (v_i)_f A_f \quad (3.80)$$

A equação (3.79) é deduzida pela adição e subtração dos termos de convecção obtidos por FOUP dos termos de convecção de alta ordem. Os termos de convecção de alta ordem e os termos de convecção FOUP subtraídos são combinados para formar o termo fonte S_{DC} . Os termos de convecção FOUP adicionados aparecem implicitamente nos coeficientes a_p e a_{nb} . Desde que os termos de convecção FOUP adicionados e subtraídos cancelam-se, em convergência, não há nenhuma contribuição para a equação (3.78) de Φ^{LO} . Portanto, na convergência, a discretização utilizada na equação (3.78) é puramente de alta ordem.

3.4.9 Comparação de Tempo de Processamento

A tabela 3.2 compara o tempo computacional requerido pelos métodos *DWF* e *DC* para as mesmas condições computacionais listadas na figura 4.1 e considerando o esquema de discretização de segunda ordem Superbee. O tempo de processamento é dado em segundos e equivale ao tempo de processamento gasto para simular 100 s de operação do leito. Estes resultados mostram que o método *DC* pode melhorar de maneira significativa o tempo computacional quando esquemas de ordem superior são utilizados na discretização de termos convectivos. No caso da malha 3, o método *DWF*

divergiu enquanto o método *DC*, para as mesmas condições de simulação, não apresentou limitações.

Tabela 3.2 Análise Comparativa de tempo de processamento considerando o esquema de discretização Superbee com os métodos *DWF* e *DC* em três malhas computacionais

Malha computacional empregada	Tempo de processamento (horas) e razão <i>DWF/DC</i>
Malha 1	129,165/118,237=1,0924
Malha 2	231,651/215,441=1,0752
Malha 3	Divergiu/371,726

3.4.10 Considerações

A escolha de uma técnica de discretização está, tanto para escoamentos compressíveis como para incompressíveis, entre métodos centrados ou métodos “upwind”, pelo menos para os termos de convecção, desde que os termos difusivos são geralmente aproximados por diferenças centrais. A técnica de diferença central pode originar superestimativa ou subestimativa próximos a descontinuidades. Uma alternativa para a diferença central é aplicar esquemas “upwind” nos termos convectivos como uma função do sinal das componentes da velocidade.

Esta aproximação é largamente aplicada na prática, e particular atenção é dada para os aspectos multidimensionais da extrapolação “upwind”, por exemplo, em uma malha cartesiana em duas dimensões, as equações do fluxo são escritas como $\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial g}{\partial y} = 0$, onde *f* e *g* são as projeções em *x* e *y* do vetor de fluxo. Para um esquema selecionado, os fluxos numéricos podem ser definidos separadamente para as duas componentes e atribuídas para as faces da célula centrada no ponto (*i*, *j*) (Esta técnica é conhecida como separação de vetores de fluxo). Uma aproximação interessante foi apresentada por DICK (1988) (apud HIRSCH (1997b)) para a solução das equações de Navier-Stokes incompressíveis não transiente aplicando a técnica de separação de vetores de fluxo para os termos convectivos.

Está claro, entretanto, que a discretização “upwind” de primeira ordem produz uma excessiva dissipação numérica e não deveria ser aplicado em geral. Fórmulas de diferenças “upwind” de segunda ordem, deveriam ser aplicadas e para situações em que o escoamento apresenta gradientes severos, limitadores não lineares podem ser introduzidos com a finalidade de evitar o comportamento não monotônico da solução calculada. Muitas contribuições tem sido desenvolvidas nesta direção, particularmente para modelos de escoamento em regime permanente e incompressível, independentemente do progresso no campo dos escoamentos compressíveis em alta velocidade.

A principal conclusão destas investigações em direção a definição de precisão da discretização espacial para escoamentos complexos com recirculação é a confirmação da superioridade dos esquemas “upwind” de segunda ordem sobre sua contraparte de primeira ordem (HIRSCH (1997b)). Aplicações dos limitadores não lineares para esta família de escoamentos estáveis e incompressíveis foram reformuladas por GASKELL & LAU (1988) e LEONARD (1987) apud HIRSCH (1997b).

Para demonstrar a precisão dos esquemas TVD de alta ordem em relação à sua contra parte de primeira ordem (FOUP) quando aplicados a um problema incompressível procedeu-se à resolução de um teste clássico dado pela convecção oblíqua de uma espécie de gás, através de um domínio quadrado conforme figura 3.11. A fração de massa da espécie 1 é 0 (zero) ao longo da fronteira sul e 1 (um) ao longo da fronteira oeste e também considera-se nestas fronteiras (oeste e sul) uma velocidade constante na direção diagonal para o fluxo de gás com o valor de 15 cm/s. Utilizou-se uma malha uniforme de 90x90 células, totalizando 8.100 células computacionais. Inicialmente a fração de massa da espécie 1 é zero em todo o domínio computacional e a simulação é realizada por 7 (sete) segundos, tempo no qual observou-se que a solução alcançou o estado estacionário.

A solução analítica no estado estacionário para a fração de massa da espécie 1 é 0 (zero) na região delimitada pelo triângulo inferior (sul – leste) e 1 (um) na região delimitada pelo triângulo superior (norte – oeste) do domínio computacional (figura 3.11).

Observa-se na figura 3.12 que o esquema Superbee capturou de maneira precisa a solução analítica com uma transição abrupta na diagonal sem qualquer oscilação. Na mesma figura evidencia-se a influência da difusão numérica nos resultados de

simulação por meio da suavização da solução na região de transição (diagonal) para a espécie 1 quando da utilização do esquema de primeira ordem Foup.

Resultados semelhantes foram obtidos com os demais esquemas TVD com um certo grau de difusão numérica na seguinte ordem decrescente de precisão: Muscl, Van Leer e Minmod.

Figura 3.11. Domínio físico para a convecção de espécies: Distribuição inicial da espécie 1.

Figura 3.12. Comparação dos resultados de simulação para o problema de convecção de espécie de um gás considerando os diversos esquemas numéricos de discretização para o termo advectivo.

Nas figuras 3.13 a 3.17 pode-se evidenciar de forma mais evidente as conclusões obtidas a partir da figura 3.12, isto é, que na região de transição (diagonal) os resultados obtidos com o esquema Foup são mais difusivos do que os obtidos com os esquemas TVD de segunda ordem e entre os esquemas TVD a difusão numérica apresenta-se em grau decrescente nos esquemas Minmod, Vanleer, Muscl e Superbee seguindo a ordem inversa do grau de compressibilidade característico de cada esquema (figura 3.9b). Em todos os resultados a difusão numérica aumenta na região próxima ao canto norte-leste.

Figura 3.13. Distribuição da fração de massa da espécie 1 utilizando Foup.

Figura 3.14. Distribuição da fração de massa da espécie 1 utilizando Minmod.

Figura 3.15. Distribuição da fração de massa da espécie 1 utilizando Van Leer.

Figura 3.16. Distribuição da fração de massa da espécie 1 utilizando Muscl.

Figura 3.17. Distribuição da fração de massa da espécie 1 utilizando Superbee.

Diante das evidências da influência da viscosidade numérica introduzida quando se utiliza um esquema numérico para a discretização dos termos advectivos presentes nas equações de conservação, espera-se obter resultados de simulação para a hidrodinâmica do escoamento gás-sólido na coluna ascendente de um leito fluidizado circulante com as mesmas características. Ressalva se faz com relação às incertezas associadas ao processo de medida experimental e aos modelos matemáticos empregados, conforme se apresenta no capítulo 4.

3.5 Equação de Transporte Discreta

Retomando a equação de transporte (3.1), e aplicando as fórmulas discutidas das seções anteriores para o termo transiente, convectivo, difusivo e fonte, obtêm-se as seguintes versões discretas:

➤ Termo Transiente:

$$\int_{VC} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_m \rho_m \phi) dV \approx \left[(\alpha_m \rho_m \phi)_P - (\alpha_m \rho_m \phi)_P^{old} \right] \frac{\Delta V}{\Delta t} \quad (3.81)$$

➤ Termo Convectivo:

$$\begin{aligned} \int_{VC} \frac{\partial}{\partial x_i} (\alpha_m \rho_m v_{mi} \phi) dV \approx & \left\{ \xi_e (\alpha_m \rho_m \phi)_E + \bar{\xi}_e (\alpha_m \rho_m \phi)_P \right\} (u_m)_e A_e \\ & - \left\{ \xi_w (\alpha_m \rho_m \phi)_P + \bar{\xi}_w (\alpha_m \rho_m \phi)_W \right\} (u_m)_w A_w \\ & + \left\{ \xi_n (\alpha_m \rho_m \phi)_N + \bar{\xi}_n (\alpha_m \rho_m \phi)_P \right\} (v_m)_n A_n \\ & - \left\{ \xi_s (\alpha_m \rho_m \phi)_P + \bar{\xi}_s (\alpha_m \rho_m \phi)_S \right\} (v_m)_s A_s \\ & + \left\{ \xi_t (\alpha_m \rho_m \phi)_T + \bar{\xi}_t (\alpha_m \rho_m \phi)_P \right\} (w_m)_t A_t \\ & - \left\{ \xi_b (\alpha_m \rho_m \phi)_P + \bar{\xi}_b (\alpha_m \rho_m \phi)_B \right\} (w_m)_b A_b \end{aligned} \quad (3.82)$$

➤ Termo Difusivo:

$$\begin{aligned} \int_{VC} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) dV \approx & \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e A_e - \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w A_w \\ & + \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n A_n - \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s A_s \\ & + \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_t A_t - \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_b A_b \end{aligned} \quad (3.83)$$

$$\text{com } \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = (\Gamma_\phi)_e \frac{(\Phi_E - \Phi_P)}{\Delta x_e} \quad (3.84)$$

$$e \quad (\Gamma_\phi)_e = \left[\frac{1-f_e}{(\Gamma_\phi)_P} + \frac{f_e}{(\Gamma_\phi)_E} \right]^{-1} = \frac{(\Gamma_\phi)_P (\Gamma_\phi)_E}{f_e (\Gamma_\phi)_P + (1-f_e) (\Gamma_\phi)_E} \quad (3.85)$$

$$\text{onde } f_e = \frac{\Delta x_E}{\Delta x_P + \Delta x_E}. \quad (3.86)$$

➤ Termo Fonte:

$$\int_{VC} R_\phi dV \approx \bar{R}_\phi \Delta V - R'_\phi \phi_P \Delta V \quad (3.87)$$

Combinando as equações deduzidas acima, obtém-se:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{(\rho'_m \phi)_P - (\rho'_m \phi)^0}{\Delta t} \right) \Delta V + \\ & + \left\{ \xi_e (\rho'_m \phi)_E + \bar{\xi}_e (\rho'_m \phi)_P \right\} (u_m)_e A_e - \left\{ \xi_w (\rho'_m \phi)_P + \bar{\xi}_w (\rho'_m \phi)_W \right\} (u_m)_w A_w \\ & + \left\{ \xi_n (\rho'_m \phi)_N + \bar{\xi}_n (\rho'_m \phi)_P \right\} (v_m)_n A_n - \left\{ \xi_s (\rho'_m \phi)_P + \bar{\xi}_s (\rho'_m \phi)_S \right\} (v_m)_s A_s \\ & + \left\{ \xi_t (\rho'_m \phi)_T + \bar{\xi}_t (\rho'_m \phi)_P \right\} (w_m)_t A_t - \left\{ \xi_b (\rho'_m \phi)_P + \bar{\xi}_b (\rho'_m \phi)_B \right\} (w_m)_b A_b \\ & = \left\{ (\Gamma_\phi)_e \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x_e} A_e - (\Gamma_\phi)_w \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\Delta x_w} A_w \right\} + \left\{ (\Gamma_\phi)_n \frac{(\phi_N - \phi_P)}{\Delta y_n} A_n - (\Gamma_\phi)_s \frac{(\phi_P - \phi_S)}{\Delta y_s} A_s \right\} \\ & + \left\{ (\Gamma_\phi)_t \frac{(\phi_T - \phi_P)}{\Delta z_t} A_t - (\Gamma_\phi)_b \frac{(\phi_P - \phi_B)}{\Delta z_b} A_b \right\} + (\bar{R}_\phi - R'_\phi \phi_P) \Delta V \end{aligned} \quad (3.88)$$

$$\text{Onde se define as densidades macroscópicas como: } \rho'_m = \alpha_m \rho_m \quad (3.89)$$

A equação (3.88) pode ser rearranjada de forma a obter o seguinte sistema de equações lineares para ϕ :

$$a_P \phi_P = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + S_P \quad (3.90)$$

onde S_P é a contribuição da discretização dos termos transientes e a integral do termo fonte linearizado, o subscrito nb representa a contribuição das faces E, W, N, S, T e B da célula. Antes de utilizar a equação acima para a determinação de ϕ , é recomendado que a equação da continuidade discretizada multiplicada por ϕ seja subtraída de (3.90).

A razão para a manipulação acima é discutida em detalhes por PATANKAR (1980). A parte homogênea da equação diferencial parcial para ϕ (Eq. 3.1) admite infinitas soluções da forma $(\phi + c)$, onde c é uma constante arbitrária. A equação discretizada para ϕ deve admitir o mesmo número de soluções. Do contrário, uma pequena flutuação no balanço de massa durante as iterações pode produzir grandes

flutuações nos valores de ϕ , afetando de maneira adversa a convergência. Pode-se mostrar que as equações de diferenças finitas terão a propriedade desejada se:

$$a_P = \sum_{nb} a_{nb} \quad (3.91)$$

quando as contribuições das instabilidades e do termo fonte à a_P são descartadas. PATANKAR (1980) denomina esta restrição de *Regra 4*. Uma equação da forma (3.90) deduzida da equação (3.88) não satisfaz a *Regra 4*.

A forma discretizada da equação da continuidade pode ser obtida da equação (3.88), assumindo $\phi = 1$ e substituindo o termo fonte por $\sum_l R_l$. Então, subtraindo a equação da continuidade discretizada multiplicada por ϕ da equação (3.88), obtém-se uma equação linear da forma (3.90), na qual os coeficientes são definidos como segue:

$$a_E = D_e - \xi_e (\alpha_m \rho_m)_E (u_m)_e A_e \quad (3.92)$$

$$a_W = D_w - \bar{\xi}_w (\alpha_m \rho_m)_W (u_m)_w A_w \quad (3.93)$$

$$a_N = D_n - \xi_n (\alpha_m \rho_m)_N (v_m)_n A_n \quad (3.94)$$

$$a_S = D_s - \bar{\xi}_s (\alpha_m \rho_m)_S (v_m)_s A_s \quad (3.95)$$

$$a_T = D_t - \xi_t (\alpha_m \rho_m)_T (w_m)_t A_t \quad (3.96)$$

$$a_B = D_b - \bar{\xi}_b (\alpha_m \rho_m)_B (w_m)_b A_b \quad (3.97)$$

$$a_P = \sum_{nb} a_{nb} + a_P^0 + R'_\phi \Delta V + \left[\sum_l R_l \right] \Delta V \quad (3.98)$$

$$S_P = a_P^0 \phi_P^0 + \bar{R}_\phi \Delta V + \phi_P \left[- \sum_l R_l \right] \Delta V \quad (3.99)$$

$$a_P^0 = \frac{(\alpha_m \rho_m)^0}{\Delta t} \Delta V \quad (3.100)$$

$$D_k = \frac{(\Gamma_\phi)_k A_k}{\Delta x_k}, \quad k = e, w, n, s, t, b \quad (3.101)$$

3.5.1 Observações:

Diferentemente do escoamento monofásico, a equação da continuidade para escoamento multifásico apresenta um termo fonte $\left(\sum_l R_l \right)$ que contabiliza a transferência de massa na interface. Desde que ϕ vezes a equação da continuidade é subtraída da Eq. (3.90), o termo aparece na equação de transporte discretizada. A

inclusão deste termo no termo fonte diminuiria a velocidade de convergência, e a sua inclusão no coeficiente central desestabilizaria as iterações quando $\sum_l R_l < 0$. Portanto, o termo é manipulado de sorte que, sua contribuição para α_p é não negativa. Lembrando da definição da função de duplo colchete (equação 3.19):

$$[[R]] = \begin{cases} 0 & R \leq 0 \\ R & R > 0 \end{cases} \quad (3.102)$$

Da definição acima segue que:

$$R = [[R]] - [[-R]] \quad (3.103)$$

Então o termo de transferência de massa na interface pode ser escrito como:

$$\phi_p \sum_l R_l = \phi_p \left[\left[\sum_l R_l \right] \right] - \phi_p \left[\left[- \sum_l R_l \right] \right] \quad (3.104)$$

O primeiro termo do lado direito da equação acima contribui para o termo fonte (equação (3.98)) e o segundo contribui para o coeficiente central (equação (3.99)).

Se uma discretização em lei de potências é procurada, toma-se o fator de convecção como zero, isto é, $\xi = 0$ e $\bar{\xi} = 1$ e substitui-se D por $D A(P_e)$, em que P_e é o número de Péclet para a face. Por exemplo, substitui-se D_e na equação 3.92 por $D_e A(P_e)$

onde

$$A(P_e) = \left[(1 - 0,1|P_e|)^5 \right] \quad (3.106)$$

Há dois pontos a serem notados a respeito do uso de esquemas de discretização de ordem elevada. Nos esquemas com segunda ordem ou superior os fatores ξ na equação da continuidade discretizada podem diferir dos correspondentes fatores na equação de transporte da propriedade ϕ . Então a equação discretizada para ϕ obtida pela subtração de ϕ multiplicada pela equação da continuidade não deverá satisfazer a Regra 4. Portanto, se admite a hipótese que os fatores de convecção na equação da continuidade discretizada são os mesmos daqueles na equação de transporte da propriedade ϕ , e assim satisfazer a Regra 4.

O uso de métodos de ordem elevada pode resultar na violação da Regra 2 de PATANKAR (1980) em algumas regiões. A Regra 2 estabelece que todos os coeficientes α_{nb} na equação (3.90) devem possuir o mesmo sinal, dito positivo. As

bases físicas para esta regra é que o aumento (ou diminuição) no valor de ϕ em uma célula vizinha deveria causar um aumento (ou diminuição) nos valores de ϕ_p , não o contrário. Esta regra quando combinada com a Regra 4 também garante que a discretização produz um sistema de equações diagonalmente dominante. A regra é estritamente satisfeita pela equação acima somente quando utilizamos o esquema FOUP. Quando esquemas de ordem superior são utilizados, alguns coeficientes podem tornar-se negativos quando o comportamento local de ϕ é monotônica. Tais violações da Regra 2 não são motivos para inquietações, desde que o limitador utiliza considerações mais elaboradas para garantir que a solução é limitada e fisicamente realística.

3.6 Resumo do Algoritmo de Solução

Uma extensão do SIMPLE (PATANKAR (1980)) é utilizada para a resolução das equações discretizadas. Vários pontos importantes precisam ser discutidos quando este algoritmo, desenvolvido para escoamentos monofásicos, é estendido para resolver as equações de um escoamento multifásico. SPALDING (1980) lista três pontos (i), ii) e iii) a seguir), os quais são classificados de acordo com SPALDING (1980) como “o primeiro é óbvio, o segundo um tanto menos, e o terceiro pode facilmente passar sem ser notado”.

- i) Há mais campos de variáveis e, portanto mais equações comparadas com escoamentos monofásicos. Isto desacelera a computação, mas não torna o algoritmo mais complexo.
- ii) A pressão aparece nas três equações de quantidade de movimento para escoamento monofásico, mas não há uma equação conveniente para resolver o campo de pressão. O fundamental do algoritmo SIMPLE é a dedução de uma equação para a pressão – a equação de correção para a pressão. A correção da pressão propicia a correção para o campo da velocidade tal que a equação da continuidade é satisfeita exatamente (para a precisão da máquina). Não há uma única maneira para a dedução de tal equação para escoamento multifásico, desde que

há mais de uma equação para a continuidade no escoamento multifásico.

- iii) As equações de quantidade de movimento para o escoamento multifásico são fortemente acopladas por meio do termo de intercâmbio de quantidade de movimento. Fazer este termo totalmente implícito é essencial para o sucesso do esquema numérico. Esta é a principal idéia no “Implicit Multifield Field” (IMF), técnica de HARLOW & AMSDEN (1975), que está implementada no K-FIX “Kachina-Fully Implicit Exchange” programa de RIVARD & TORREY (1977). No MFIX, as equações de quantidade de movimento são resolvidas em todo o domínio computacional. Para tornar o termo de intercâmbio totalmente implícito todas as equações para cada componente de velocidade (tanto da fase gás como da fase sólida) devem ser resolvidas juntas, o que origina uma matriz com estrutura não padrão. Uma alternativa mais barata é utilizar o algoritmo de eliminação parcial (PEA – “Partial Elimination Algorithm”) de SPALDING (1980), que será discutido adiante.

No fluxo granular multifásico outros dois pontos críticos determinam o sucesso do esquema numérico. Um é o tratamento das regiões com altas concentrações de sólido (regiões próximas do empacotamento). A fração de volume do sólido varia de zero até um valor máximo em torno de 0,6 na região de empacotamento. O limite inferior é facilmente manipulável pela formulação das equações lineares tais que valores não-negativos da fração de volume são calculados. A restrição da fração de volume de sólido no ou abaixo do valor máximo é mais difícil. A formação da região de empacotamento é análoga à condensação do vapor compreensível em um líquido incompreensível. As forças de reação que resistem à compactação do meio granular resultam na pressão do sólido, a qual deve ser distinguida da pressão do fluido. Esta situação foi tratada nos modelos S^3 (PRITCHETT et al. (1978)) e IIT – “Illinois Institute of Technology” (GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983)) pela introdução de uma equação de estado que relaciona a pressão do sólido com a fração de volume do sólido. A função da pressão do sólido aumenta exponencialmente quando a fração volumétrica de sólido aproxima-se do limite do empacotamento, e assim retarda a compactação do sólido. Este método permite ao meio granular ser suavemente

compressível. O meio granular pode também ser considerado incompressível como foi feito por SYAMLAL & O'BRIEN (1988). É também o método utilizado no código *FLUENT*TM ("Fluent Users manual", 1996). Neste método nenhuma equação de estado para a pressão do sólido é necessária. A fração volumétrica de sólido no empacotamento máximo precisa ser especificada, que também é um parâmetro explícito ou implícito na equação de estado utilizada para o caso de suave compressibilidade.

Uma equação semelhante à equação para a correção da pressão do fluido pode ser desenvolvida para a pressão do sólido. Tal equação é resolvida no código *FLUENT*TM. O MFIX, ao invés disso, utiliza uma equação para a correção da fração volumétrica de sólido. A equação para a correção da pressão do sólido requer que $\frac{\partial P_s}{\partial \alpha_s}$ não desapareça quando $\alpha_s \rightarrow 0$. A equação para a correção da fração volumétrica de sólido não possui tal restrição, mas deve contabilizar o efeito da pressão do sólido tal que a computação seja estabilizada na região de empacotamento.

Uma segunda questão importante é a dificuldade no cálculo dos campos das variáveis nas interfaces nas quais uma fração volumétrica tende a zero. O campo de variáveis associado a uma fase não está definido nas regiões onde a fração volumétrica é zero, e assim podem admitir valores arbitrários. Entretanto, um algoritmo computacional não deve utilizar tal arbitrariedade no conjunto de valores. Como exemplo, em seção anterior mostrou-se que o uso de uma média harmônica para os cálculos dos valores dos coeficientes de difusão da face de uma célula prevenirá a difusão de ϕ nas regiões onde a fase associada com ela é ausente. O cálculo das componentes das velocidades em tais interfaces é mais difícil do que as quantidades escalares devido a linearização dos termos convectivos não lineares. Em uma interface onde a fração volumétrica da fase está próxima de zero a componente normal da velocidade torna-se muito grande. Desde que o produto da fração volumétrica da fase e da componente da velocidade é ainda próximo de zero, o erro na conservação de quantidade de movimento é negligenciável. Entretanto, valores elevados da velocidade da fase rapidamente desestabilizam os cálculos, e o método é necessário para prevenir tais desestabilizações. O MFIX utiliza um cálculo aproximado da velocidade normal nas interfaces (definido por um pequeno valor inicial para a fração volumétrica da fase).

Escoamentos gás-sólido são inerentemente instáveis. Cálculos no estado estável são possíveis somente para poucos casos, tais como transporte pneumático (diluído) de

sólidos. Para a maioria dos escoamentos gás-sólido, uma simulação transiente é conduzida e os resultados são médio-temporais. Simulações transientes divergem, se grande amplitude para o passo temporal é admitida. Passos temporais com amplitude muito pequena torna a computação muito lenta. O MFIX ajusta automaticamente a amplitude do passo, dentro de limites especificados pelo usuário, para reduzir o tempo de processamento.

Algoritmo 3.2

1. Início do passo temporal. Cálculo das propriedades físicas, coeficientes de intercâmbio e taxas de reação.
2. Cálculo do campo de velocidade baseado no campo de pressão atual: u_m^*, v_m^*, w_m^* .
3. Cálculo da correção da pressão do fluido P_g' .
4. Atualização do campo de pressão do fluido aplicando uma sob relaxação: $P_g = P_g^* + \omega_{pg} P_g'$. Calcula a “velocidade de correção” de P_g' e atualiza o campo de velocidade: $u_m = u_m^* + u_m'$, para $m = 0$ até M . (Para a fase sólida, u_m calculado neste passo é denotado como u_m^* no passo 6)
5. Calcula os gradientes $\frac{\partial P_m}{\partial \alpha_m}$ para utilizar na equação de correção da fração volumétrica de sólido. Calcula a correção da fração volumétrica de sólido α_m' .
6. Atualiza a fração volumétrica de sólido ($\alpha_m \rho_m$ no MFIX): $\alpha_m = \alpha_m^* + \omega_{ps} \alpha_m'$. Sob relaxação somente nas regiões onde $\alpha_0 < \alpha_{cp}$ e $\alpha_m > 0$; isto é, onde o sólido está densamente empacotado e a fração volumétrica de sólido está aumentando. Calcula-se a correção da velocidade para a fase sólida e atualiza o campo de velocidade da fase sólida: $u_m = u_m^* + u_m'$. (para $m=1$ até M).

7. Calcula a fração de vazio: $\alpha_0 = \alpha_v - \sum_{m \neq 0} \alpha_m$. (α_v é usualmente igual a 1).
 8. Calcula a pressão do sólido a partir da equação de estado $P_m = P_m(\alpha_m)$.
 9. Calcula a temperatura e espécies.
 10. Utiliza o resíduo normalizado calculado nos passos 2, 3, 5 e 9 para checar a convergência. Se o critério de convergência não é satisfeito continua as iterações (passo 2), senão incrementa-se o passo temporal. (passo 1).
-

3.7 Equação de Quantidade de Movimento

A discretização das equações de quantidade de movimento é semelhante àquela de transporte escalar, exceto que os volumes de controles estão deslocados. De acordo com PATANKAR (1980), dois problemas merecem destaque: o primeiro é a ordem de avaliação do gradiente de pressão para a equação da conservação da quantidade de movimento. Considere a avaliação do gradiente de pressão em relação à x e y no ponto P, mostrado na figura 3.18, dado por:

$$\left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_P \approx \frac{P_e - P_w}{\Delta x} \quad (3.107)$$

que, considerando uma aproximação linear para P, resulta em:

$$\left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_P \approx \frac{P_E - P_W}{\Delta x_e + \Delta x_w} \quad (3.108)$$

Para o gradiente em y , temos

$$\left. \frac{\partial P}{\partial y} \right|_P \approx \frac{P_n - P_s}{\Delta y} \quad (3.109)$$

e

$$\left. \frac{\partial P}{\partial y} \right|_P \approx \frac{P_N - P_S}{\Delta y_n + \Delta y_s} \quad (3.110)$$

O que se observa é que as equações do movimento para as direções x e y , ou seja, para as velocidades u_p e v_p , não envolvem a pressão no volume P_p , o que acarreta uma avaliação do gradiente de pressão em uma malha mais grosseira. Isto causaria a diminuição da precisão da solução.

O segundo problema, e de acordo com PATANKAR (1980) o mais importante, é a possibilidade de ocorrência de campos de pressões oscilatórios que não são detectados pelo gradiente de pressão. A figura 3.19 mostra um campo de pressão que não seria “visto” pelo gradiente de pressão, se a avaliação fosse feita de acordo com as Eqs. (3.108) e (3.110).

Figura 3.18: Arranjo co-localizado de variáveis

O campo oscilatório, mostrado na figura 3.19 (os números representam valores da pressão), não consegue ser detectado pelas equações do movimento, se o arranjo for co-localizado. Para o volume de controle para a velocidade centrada em P , os gradientes de pressão em x , bem como em y , serão zero, pois envolvem os pontos P_E, P_W, P_N e P_S . Assim, a variação de pressão no domínio (neste caso, ondulatório de 0 a 100) não será percebida por aqueles volumes de controle hachurados. O mesmo acontece caso o volume de controle para as velocidades seja centrado nos volumes não hachurados. Observa-se, então, que aquelas pressões armazenadas (localizadas) junto com as velocidades não entram na equação do movimento para aquele volume. Logo, parece

coerente localizar a velocidade u entre P_E e P_P ; P_P e P_W e a velocidade v entre P_N e P_P ; P_P e P_S , gerando-se uma malha deslocada para a velocidade e a pressão, dando consistência ao acoplamento pressão-velocidade. A figura 3.20 ilustra a malha deslocada para a componente x da equação de quantidade de movimento.

Fig. 3.19: Campo de pressões inconsistente

Figura 3.20: Volume de Controle para a componente x da equação de quantidade de movimento

3.7.1 Equação de Quantidade de Movimento Discreta

Para calcular a convecção na variação da quantidade de movimento, as componentes da velocidade são requeridas nas posições E, W, N e S. Elas são calculadas a partir dos valores vizinhos, por meio de uma média aritmética:

$$(u_m)_E = f_E (u_m)_p + (1 - f_E) (u_m)_e, \quad (3.111)$$

$$(v_m)_N = f_p (v_m)_{NW} + (1 - f_p) (v_m)_{NE}. \quad (3.112)$$

O valor da fração volumétrica requerida no centro da célula P é calculado de maneira semelhante:

$$(\alpha_m)_p = f_p (\alpha_m)_W + (1 - f_p) (\alpha_m)_E \quad (3.113)$$

em que

$$f_E = \frac{\Delta x_e}{\Delta x_p + \Delta x_e} \quad (3.114)$$

e

$$f_p = \frac{\Delta x_E}{\Delta x_W + \Delta x_E}. \quad (3.115)$$

Agora a componente x da equação de quantidade de movimento pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \alpha_p (u_m)_p = & \sum_{nb} \alpha_{nb} (u_m)_{nb} + b_p - A_p (\alpha_m)_p ((P_g)_E - (P_g)_W) + \\ & + \left(\sum_l F_{lm} (u_l - u_m)_p \right) \Delta V_e. \end{aligned} \quad (3.116)$$

A equação (3.116) é semelhante à equação de transporte escalar discretizada, descrita na seção 3.5, exceto pelos dois últimos termos: o termo do gradiente de pressão é determinado baseado no valor corrente de P_g (passo 2, seção 3.6) e é adicionado ao termo fonte da equação linear. O termo de transferência na interface acopla todas as equações para a mesma componente (x, y ou z). O procedimento para desacoplar as equações será discutido na próxima seção.

A definição dos termos restantes na Eq. (3.116) é dada nas dez relações (eqs. 117) abaixo:

$$\begin{aligned} \alpha_e &= D_E - \xi_E (\alpha_m \rho_m)_e (u_m)_E A_E \\ \alpha_w &= D_W - \bar{\xi}_W (\alpha_m \rho_m)_w (u_m)_W A_W \\ \alpha_n &= D_N - \xi_N (\alpha_m \rho_m)_n (v_m)_N A_N \\ \alpha_s &= D_S - \bar{\xi}_S (\alpha_m \rho_m)_s (v_m)_S A_S \\ \alpha_t &= D_T - \xi_T (\alpha_m \rho_m)_t (w_m)_T A_T \\ \alpha_b &= D_B - \bar{\xi}_B (\alpha_m \rho_m)_b (w_m)_B A_B \end{aligned} \quad (3.117)$$

$$\alpha_p = \sum_{nb} \alpha_{nb} + \alpha_p^0 + R'_{u_m} \Delta V_e + \left[\sum R_l \right] \Delta V_e + S'$$

$$b = \alpha_p^0 u_m^0 + \bar{R}_{u_m} \Delta V_e + u_m \left[- \sum R_l \right] \Delta V_e + (\alpha_m \rho_m)_e g_x \Delta V_e + \bar{S}$$

$$\alpha_p^0 = \frac{(\alpha_m \rho_m)^0}{\Delta t} \Delta V_e$$

$$D_E = \frac{(\mu_m)_E A_E}{\Delta x_E}$$

O coeficiente central α_p e o termo fonte b contêm os termos adicionais S' e $\bar{S}$, os quais contabilizam as fontes que surgem das coordenadas cilíndricas, do modelo de meio poroso e do termo das tensão de cisalhamento. Estes são discutidos nas sub-seções seguintes.

3.7.2 Coordenadas Cilíndricas

O sistema de coordenadas cilíndricas utilizado no MFIX é esquematizado na figura 3.21. A notação empregada no MFIX para as três componentes da equação da quantidade de movimento é dada a seguir:

Figura 3.21: Rótulo para as coordenadas no MFIX

➤ Componente x para a equação de quantidade de movimento:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho'_m u_m) + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} (\rho'_m x u_m^2) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho'_m u_m v_m) + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial z} (\rho'_m u_m w_m) =$$

$$\begin{aligned}
 &= -\alpha_m \frac{\partial P_g}{\partial x} + \frac{\rho'_m w_m^2}{x} - \frac{\partial P_m}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} [\lambda_m tr(D_m)] + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} (x \tau_{xx}) + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial z} \tau_{xz} - \\
 &- \frac{\tau_{zz}}{x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \rho'_m g_x + \sum_l F_l (u_l - u_m)
 \end{aligned} \quad (3.118)$$

➤ Componente y para a equação de quantidade de movimento:

$$\begin{aligned}
 &\frac{\partial}{\partial t} (\rho'_m v_m) + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} (\rho'_m x u_m v_m) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho'_m v_m^2) + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial z} (\rho'_m v_m w_m) = \\
 &= -\alpha_m \frac{\partial P_g}{\partial y} - \frac{\partial P_m}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} [\lambda_m tr(D_m)] + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} (x \tau_{xy}) + \frac{1}{x} \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial y} \tau_{yy} + \\
 &+ \rho'_m g_y + \sum_l F_l (v_l - v_m)
 \end{aligned} \quad (3.119)$$

➤ Componente z para a equação de quantidade de movimento:

$$\begin{aligned}
 &\frac{\partial}{\partial t} (\rho'_m w_m) + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} (\rho'_m x u_m w_m) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho'_m v_m w_m) + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial z} (\rho'_m w_m^2) = \\
 &= -\frac{\alpha_m}{x} \frac{\partial P_g}{\partial z} - \frac{\partial P_m}{x \partial z} + \frac{\partial}{x \partial z} [\lambda_m tr(D_m)] - \frac{\rho'_m u_m w_m}{x} + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} (x \tau_{xz}) + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial z} \tau_{zz} + \\
 &+ \frac{\tau_{xz}}{x} + \frac{\partial}{\partial y} \tau_{zy} + \rho'_m g_z + \sum_l F_l (w_l - w_m)
 \end{aligned} \quad (3.120)$$

As equações em coordenadas cartesianas são obtidas das equações acima, atribuindo o valor um para x e zero para os termos específicos de coordenadas cilíndricas. Também, para a fase fluido P_m é igual a zero.

O tensor das tensões $\overline{\tau}$ é definido como:

$$\overline{\tau} = 2\mu_m \overline{D}_m \quad (3.121)$$

em que

$$\overline{D}_m = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_m}{\partial x} & \frac{1}{2} \left[\frac{\partial v_m}{\partial x} + \frac{\partial u_m}{\partial y} \right] & \frac{1}{2} \left[\frac{\partial w_m}{\partial x} + \frac{1}{x} \frac{\partial u_m}{\partial z} - \frac{w_m}{x} \right] \\ \frac{1}{2} \left[\frac{\partial v_m}{\partial x} + \frac{\partial u_m}{\partial y} \right] & \frac{\partial v_m}{\partial y} & \frac{1}{2} \left[\frac{1}{x} \frac{\partial v_m}{\partial z} + \frac{\partial w_m}{\partial y} \right] \\ \frac{1}{2} \left[\frac{\partial w_m}{\partial x} + \frac{1}{x} \frac{\partial u_m}{\partial z} - \frac{w_m}{x} \right] & \frac{1}{2} \left[\frac{1}{x} \frac{\partial v_m}{\partial z} + \frac{\partial w_m}{\partial y} \right] & \left[\frac{1}{x} \frac{\partial w_m}{\partial z} + \frac{u_m}{x} \right] \end{bmatrix} \quad (3.122)$$

Os termos do tensor no lado direito da componente x da equação de quantidade de movimento ($L_D_x_QDM$) são como segue:

$$\begin{aligned}
 L_{-D-x_QDM} = & \dots + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \left[x 2 \mu_m \frac{\partial u_m}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu_m \left(\frac{\partial v_m}{\partial x} + \frac{\partial u_m}{\partial y} \right) \right] + \\
 & + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu_m \left(\frac{\partial w_m}{\partial x} + \frac{1}{x} \frac{\partial u_m}{\partial z} - \frac{w_m}{x} \right) \right] - \frac{2 \mu_m}{x} \left[\frac{1}{x} \frac{\partial w_m}{\partial z} + \frac{u_m}{x} \right]
 \end{aligned} \quad (3.123)$$

que pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned}
 L_{-D-x_QDM} = & \dots + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \left[x \mu_m \frac{\partial u_m}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu_m \frac{\partial u_m}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu_m \frac{\partial u_m}{x \partial z} \right] + \\
 & + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \left[x \mu_m \frac{\partial u_m}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu_m \frac{\partial v_m}{\partial x} \right] + \\
 & + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu_m \left(\frac{\partial w_m}{\partial x} - \frac{w_m}{x} \right) \right] - \frac{2 \mu_m}{x} \left[\frac{1}{x} \frac{\partial w_m}{\partial z} + \frac{u_m}{x} \right]
 \end{aligned} \quad (3.124)$$

Os três primeiros termos aparecem na eq. (3.118) como termos difusivos. Os demais são adicionados aos termos fontes adicionais S' e $\bar{S}$.

Denotando a fonte na componente x da equação de quantidade de movimento por F_{-x_QDM} , tem-se:

$$\begin{aligned}
 F_{-x_QDM} = & \frac{\rho'_m w_m^2}{x} + \frac{\partial}{\partial x} [\lambda_m tr(D_m)] + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \left[x \mu_m \frac{\partial u_m}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu_m \frac{\partial v_m}{\partial x} \right] + \\
 & + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu_m \left(\frac{\partial w_m}{\partial x} - \frac{w_m}{x} \right) \right] - \frac{2 \mu_m}{x^2} \frac{\partial w_m}{\partial z} - \frac{2 \mu_m u_m}{x^2}
 \end{aligned} \quad (3.125)$$

De maneira análoga pode-se determinar os termos fontes adicionais para as componentes y e w da equação de quantidade de movimento e são mostradas a seguir:

$$\begin{aligned}
 F_{-y_QDM} = & \frac{\partial}{\partial y} [\lambda_m tr(D_m)] + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \left[x \mu_m \frac{\partial u_m}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu_m \frac{\partial v_m}{\partial y} \right] + \\
 & + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu_m \frac{\partial w_m}{\partial y} \right]
 \end{aligned} \quad (3.126)$$

$$\begin{aligned}
 F_{-z_QDM} = & -\frac{\rho'_m u_m w_m}{x} + \frac{\partial}{\partial z} [\lambda_m tr(D_m)] + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \left[x \mu_m \left(\frac{1}{x} \frac{\partial u_m}{\partial z} - \frac{w_m}{x} \right) \right] + \\
 & + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu_m \frac{\partial v_m}{x \partial z} \right] + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu_m \left(\frac{\partial w_m}{x \partial z} + \frac{2 u_m}{x} \right) \right] + \frac{\mu_m}{x} \left[\frac{\partial w_m}{\partial x} + \frac{1}{x} \frac{\partial u_m}{\partial z} - \frac{w_m}{x} \right]
 \end{aligned} \quad (3.127)$$

3.7.3 Fórmulas Discretas

A discretização para as fórmulas dos termos fontes adicionais são dadas abaixo:

► Componente x:

$$\int \frac{\rho'_m w_m^2}{x} dV = \frac{(\rho'_m)_e (w_m)_e^2}{x_{i+1/2}} \Delta V_e \quad (3.128)$$

$$\int \frac{\partial}{\partial x} [\lambda_m tr(D_m)] dV = [(\lambda_m tr(D_m))_E - (\lambda_m tr(D_m))_W] A_p \quad (3.129)$$

$$\begin{aligned} \int \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \left[x \mu_m \frac{\partial u_m}{\partial x} \right] dV &= \left[\mu_m \frac{\partial u_m}{\partial x} \right]_E A_E - \left[\mu_m \frac{\partial u_m}{\partial x} \right]_W A_W = \\ &= [\mu_m]_{i+1} \frac{(u_m)_{i+3/2} - (u_m)_{i+1/2}}{\Delta x_{i+1}} A_{i+1} - [\mu_m]_i \frac{(u_m)_{i+1/2} - (u_m)_{i-1/2}}{\Delta x_i} A_i \end{aligned} \quad (3.130)$$

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu_m \frac{\partial v_m}{\partial x} \right] dV &= \left[\mu_m \frac{\partial v_m}{\partial x} \right]_{ne} A_{ne} - \left[\mu_m \frac{\partial v_m}{\partial x} \right]_{se} A_{se} = \\ &= [\mu_m]_{i+1/2, j+1/2, k} \frac{(v_m)_{i+1, j+1/2, k} - (v_m)_{i, j+1/2, k}}{\Delta x_{i+1/2}} A_{i+1/2, j+1/2, k} - \\ &- [\mu_m]_{i+1/2, j-1/2, k} \frac{(v_m)_{i+1, j-1/2, k} - (v_m)_{i, j-1/2, k}}{\Delta x_{i+1/2}} A_{i+1/2, j-1/2, k} \end{aligned} \quad (3.131)$$

$$\begin{aligned} \int \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu_m \left(\frac{\partial w_m}{\partial x} - \frac{w_m}{x} \right) \right] dV &= \left[\mu_m \left(\frac{\partial w_m}{\partial x} - \frac{w_m}{x} \right) \right]_{te} A_{te} - \left[\mu_m \left(\frac{\partial w_m}{\partial x} - \frac{w_m}{x} \right) \right]_{be} A_{be} = \\ &= [\mu_m]_{i+1/2, j, k+1/2} \left[\frac{(w_m)_{i+1, j, k+1/2} - (w_m)_{i, j, k+1/2}}{\Delta x_{i+1/2}} - \frac{(w_m)_{i+1, j, k+1/2} - (w_m)_{i, j, k+1/2}}{2x_{i+1/2}} \right] A_{i+1/2, j, k+1/2} - \\ &- [\mu_m]_{i+1/2, j, k-1/2} \left[\frac{(w_m)_{i+1, j, k-1/2} - (w_m)_{i, j, k-1/2}}{\Delta x_{i+1/2}} - \frac{(w_m)_{i+1, j, k-1/2} - (w_m)_{i, j, k-1/2}}{2x_{i+1/2}} \right] A_{i+1/2, j, k-1/2} \end{aligned} \quad (3.132)$$

$$\int -\frac{2\mu_m}{x} \left[\frac{1}{x} \frac{\partial w_m}{\partial z} + \frac{u_m}{x} \right] dV = -\frac{2[\mu_m]_e}{x_{i+1/2}} \left[\frac{1}{x_{i+1/2}} \left[\frac{\partial w_m}{\partial z} \right]_e + \frac{u_m}{x_{i+1/2}} \right] \Delta V_e \quad (3.133)$$

em que

$$\left[\frac{\partial w_m}{x \partial z} \right]_{i+1/2} = 0,5 \left\{ \frac{(w_m)_{i, j, k+1/2} - (w_m)_{i, j, k-1/2}}{x_i \Delta z_k} + \frac{(w_m)_{i+1, j, k+1/2} - (w_m)_{i+1, j, k-1/2}}{x_{i+1} \Delta z_k} \right\} \quad (3.134)$$

➤ Componente y:

$$\int \frac{\partial}{\partial y} [\lambda_m tr(D_m)] dV = [[\lambda_m tr(D_m)]_N - [\lambda_m tr(D_m)]_S] A_p \quad (3.135)$$

$$\begin{aligned} \int \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \left[x \mu_m \frac{\partial u_m}{\partial y} \right] dV &= \left[\mu_m \frac{\partial u_m}{\partial y} \right]_{ne} A_{ne} - \left[\mu_m \frac{\partial u_m}{\partial y} \right]_{nw} A_{nw} = \\ &= [\mu_m]_{i+1/2, j+1/2, k} \frac{(u_m)_{i+1/2, j+1, k} - (u_m)_{i+1/2, j, k}}{\Delta y_{j+1/2}} A_{i+1/2, j+1/2, k} - \\ &= -[\mu_m]_{i-1/2, j+1/2, k} \frac{(u_m)_{i-1/2, j+1, k} - (u_m)_{i-1/2, j, k}}{\Delta y_{j+1/2}} A_{i-1/2, j+1/2, k} \end{aligned} \quad (3.136)$$

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu_m \frac{\partial v_m}{\partial y} \right] dV &= \left[\mu_m \frac{\partial v_m}{\partial y} \right]_N A_N - \left[\mu_m \frac{\partial v_m}{\partial y} \right]_S A_S = \\ &= [\mu_m]_{i, j+1, k} \frac{(v_m)_{i, j+3/2, k} - (v_m)_{i, j+1/2, k}}{\Delta y_{j+1}} A_{i, j+1, k} - [\mu_m]_{i, j, k} \frac{(v_m)_{i, j+1/2, k} - (v_m)_{i, j-1/2, k}}{\Delta y_j} A_{i, j, k} \end{aligned} \quad (3.137)$$

$$\begin{aligned} \int \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu_m \frac{\partial w_m}{\partial y} \right] dV &= \left[\mu_m \frac{\partial w_m}{\partial y} \right]_{nt} A_{nt} - \left[\mu_m \frac{\partial w_m}{\partial y} \right]_{nb} A_{nb} = \\ &= [\mu_m]_{i, j+1/2, k} \frac{(w_m)_{i, j+1, k} - (w_m)_{i, j, k}}{\Delta y_{j+1/2}} A_{i, j+1/2, k} - \\ &- [\mu_m]_{i, j+1/2, k-1} \frac{(w_m)_{i, j+1, k-1} - (w_m)_{i, j, k-1}}{\Delta y_{j+1/2}} A_{i, j+1/2, k-1} \end{aligned} \quad (3.138)$$

➤ Componente z:

$$\int -\frac{\rho'_m u_m w_m}{x} dV = -\frac{(\rho'_m)_t (u_m)_t w_m}{x_i} \Delta V_t \quad (3.139)$$

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial}{x \partial z} [\lambda_m tr(D_m)] dV &= \{[\lambda_m tr(D_m)]_T - [\lambda_m tr(D_m)]_B\} A_p \quad (3.140) \\ \int \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \left[x \mu_m \left(\frac{1}{x} \frac{\partial u_m}{\partial z} - \frac{w_m}{x} \right) \right] dV &= \\ &= \left[\mu_m \left(\frac{1}{x} \frac{\partial u_m}{\partial z} - \frac{w_m}{x} \right) \right]_{te} A_{te} - \left[\mu_m \left(\frac{1}{x} \frac{\partial u_m}{\partial z} - \frac{w_m}{x} \right) \right]_{tw} A_{tw} = \\ &= [\mu_m]_{i+1/2, j, k+1/2} \left(\frac{(u_m)_{i+1/2, j, k+1} - (u_m)_{i+1/2, j, k}}{x_{i+1/2} \Delta z_{k+1/2}} - \frac{(w_m)_{i, j, k+1/2} + (w_m)_{i+1, j, k+1/2}}{2x_{i+1/2}} \right) A_{i+1/2, j, k+1/2} - \end{aligned}$$

$$-[\mu_m]_{i-1/2,j,k+1/2} \left(\frac{(u_m)_{i-1/2,j,k+1} - (u_m)_{i-1/2,j,k}}{x_{i-1/2} \Delta z_{k+1/2}} - \frac{(w_m)_{i,j,k+1/2} + (w_m)_{i-1,j,k+1/2}}{2x_{i-1/2}} \right) A_{i-1/2,j,k+1/2} \quad (3.141)$$

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu_m \frac{\partial v_m}{x \partial z} \right] dV &= \left[\mu_m \frac{\partial v_m}{x \partial z} \right]_{t_n} A_{t_n} - \left[\mu_m \frac{\partial v_m}{x \partial z} \right]_{t_s} A_{t_s} = \\ &= [\mu_m]_{i,j+1/2,k+1/2} \left(\frac{(v_m)_{i,j+1/2,k+1} - (v_m)_{i,j+1/2,k}}{x_i \Delta z_{k+1/2}} \right) A_{i,j+1/2,k+1/2} - \\ &- [\mu_m]_{i,j-1/2,k+1/2} \left(\frac{(v_m)_{i,j-1/2,k+1} - (v_m)_{i,j-1/2,k}}{x_i \Delta z_{k+1/2}} \right) A_{i,j-1/2,k+1/2} \end{aligned} \quad (3.142)$$

$$\begin{aligned} \int \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu_m \left(\frac{\partial w_m}{x \partial z} + \frac{2u_m}{x} \right) \right] dV &= \left[\mu_m \left(\frac{\partial w_m}{x \partial z} + \frac{2u_m}{x} \right) \right]_T A_T - \left[\mu_m \left(\frac{\partial w_m}{x \partial z} + \frac{2u_m}{x} \right) \right]_B A_B = \\ &= [\mu_m]_{i,j,k+1} \left(\frac{(w_m)_t - (w_m)_p}{x_i \Delta z_{k+1}} + \frac{2[(u_m)_{i+1/2,j,k+1} + (u_m)_{i-1/2,j,k+1}]}{2x_i} \right) A_{i,j,k+1} - \\ &- [\mu_m]_{i,j,k} \left(\frac{(w_m)_p - (w_m)_b}{x_i \Delta z_k} + \frac{2[(u_m)_{i+1/2,j,k} + (u_m)_{i-1/2,j,k}]}{2x_i} \right) A_{i,j,k} \end{aligned} \quad (3.143)$$

$$\int \frac{\mu_m}{x} \left[\frac{\partial w_m}{\partial x} + \frac{1}{x} \frac{\partial u_m}{\partial z} - \frac{w_m}{x} \right] dV = \frac{(\mu_m)_p}{x_i} \left[\left(\frac{\partial w_m}{\partial x} \right)_p + \frac{1}{x_i} \left(\frac{\partial u_m}{\partial z} \right)_p - \frac{w_m}{x_i} \right] \Delta V_p \quad (3.144)$$

$$\left(\frac{\partial w_m}{\partial x} \right)_p = \left(\frac{\partial w_m}{\partial x} \right)_{i,j,k+1/2} = \frac{1}{2} \left[\frac{(w_m)_{i+1} - (w_m)_i}{\Delta x_{i+1/2}} + \frac{(w_m)_i - (w_m)_{i-1}}{\Delta x_{i-1/2}} \right] \quad (3.145)$$

$$\left(\frac{\partial u_m}{x \partial z} \right) = \frac{1}{2} \left[\frac{(u_m)_{i+1/2,j,k+1} - (u_m)_{i+1/2,j,k}}{x_{i+1/2} \Delta z_{k+1/2}} + \frac{(u_m)_{i-1/2,j,k+1} - (u_m)_{i-1/2,j,k}}{x_{i-1/2} \Delta z_{k+1/2}} \right] \quad (3.146)$$

$$\frac{(\mu_m)_t}{x_i} \left(\frac{\partial w_m}{\partial x} \right)_t \Delta V_t = \frac{(\mu_m)_t}{2x_i} \left[\frac{(w_m)_{i+1} - (w_m)_i}{\Delta x_{i+1/2}} + \frac{(w_m)_i - (w_m)_{i-1}}{\Delta x_{i-1/2}} \right] \Delta V_t \quad (3.147)$$

$$tr(D_m) = \frac{\partial u_m}{\partial x} + \frac{\partial v_m}{\partial y} + \frac{\partial w_m}{x \partial z} + \frac{u_m}{x} = \frac{1}{x} \frac{\partial(xu_m)}{\partial x} + \frac{\partial v_m}{\partial y} + \frac{\partial w_m}{x \partial z} \quad (3.148)$$

3.7.4 Coeficiente Central Nulo

O coeficiente central da equação de quantidade de movimento discreta pode tornar-se nulo, sem que o lado direito tenha se anulado nos volumes de controle

próximos à interface. Um exemplo típico de um volume de controle para a componente y da equação de quantidade de movimento é mostrado na figura 3.22 em negrito. As células da base sombreadas representam uma porção densa do leito. As células levemente sombreadas no meio possuem uma pequena quantidade de sólido, estas células, no início das iterações, não apresentam qualquer quantidade de sólido. A situação ilustrada ocorre após algumas poucas iterações. As células do topo, ainda estão livres da presença de sólido. Examina-se o caso da componente da velocidade do sólido na direção y , o qual é determinado a partir do volume de controle ilustrado na figura.

Figura 3.22: Exemplo de condições na interface

As velocidades médias na face da célula (m/s) estão ilustradas na figura. Os valores da viscosidade do sólido são nulos no centro de seis células, pois são baseados nas condições do passo temporal anterior. Quando o esquema “upwind” de primeira ordem é utilizado para discretizar as equações, todos os coeficientes vizinhos tornam-se nulos, isto é,

$$a_e = a_w = a_n = a_s = 0 \quad (3.149)$$

Desde que as células estão inicialmente livre da presença de sólidos α_p^0 também é nulo. Portanto, o coeficiente central α_p é nulo, quando não há nenhum termo fonte de

quantidade de movimento. O lado direito da eq.(3.116), entretanto, é não nulo devido à contribuição do termo do gradiente de pressão do fluido:

$$-A_N(\alpha_m)_p \left((P_g)_N - (P_g)_S \right) = 1,76 \quad (3.150)$$

e do termo da gravidade

$$(\alpha_m \rho_m)_p g_y \Delta V_n = -11. \quad (3.151)$$

Utilizando os valores do passo anterior $((\alpha_s)_p = 0)$, pode-se fazer com que o lado direito também vá para zero, e assim, evita-se a singularidade nas equações. Esta não é uma solução adequada, desde que esta quantia torna a componente da velocidade indeterminada, em um local onde ela está definida. Embora o valor exato da velocidade não é de importância (considerando o baixo valor da fração volumétrica de sólido), a singularidade na equação de quantidade de movimento discreta deve ser removida para dar continuidade no processo de computação. Isto é feito, por meio da utilização de uma aproximação para o balanço de quantidade de movimento em tais células, conforme está ilustrado abaixo.

Se (o lado direito) $b > 0$ então $(v_m)_p > 0$. Agora $(v_m)_N = f_N(v_m)_p + (1 - f_N)(v_m)_n = (v_m)_p > 0$, devido a condição de deslizamento livre na interface. E

$$(v_m)_S = f_S(v_m)_p + (1 - f_S)(v_m)_s = f_S(v_m)_p > 0 \quad (3.152)$$

assumindo $(v_m)_p \gg (v_m)_s$. Então,

$$\alpha_p = \alpha_s = (\alpha_m \rho_m)_S f_S(v_m)_p A_s \quad (3.153)$$

e pode-se resolver para a componente da velocidade como

$$(v_m)_p = \sqrt{\frac{b}{(\alpha_m \rho_m)_S f_S A_s}}. \quad (3.154)$$

Se $b < 0$ um argumento semelhante, originará:

$$(v_m)_p = -\sqrt{\frac{-b}{(\alpha_m \rho_m)_S f_S A_s}}. \quad (3.155)$$

3.7.5 Condições de Contorno

Na simulação de um escoamento gás-sólido bidimensional, utilizou-se para a fase gasosa a hipótese de plena aderência na parede. POZRIKIDIS (1997) apresenta uma discussão física sobre o estabelecimento desta condição de contorno do ponto de vista microscópico. RICHARDSON (1973) apresenta uma análise alternativa do ponto de vista macroscópico. O princípio físico microscópico baseia-se no caso dos gases, em que a “adsorção” das moléculas pela superfície acontece num período de tempo muito longo com respeito ao tempo de estabelecimento do equilíbrio térmico. Para o caso dos líquidos baseia-se na formação de enlaces de curta vida entre o líquido e as moléculas do sólido devido às forças intermoleculares fracas. Do ponto de vista macroscópico a plena aderência deve-se as irregularidades inerentes da superfície sólida. A hipótese de plena aderência implica na condição de contorno denominada condição de não deslizamento na parede. Esta estabelece que as componentes normal e tangencial do vetor velocidade numa parede estacionária são nulas, isto é, $u_{g,w} = v_{g,w} = 0$. No caso da fase sólida o estabelecimento das condições de contorno na parede é mais complicado devido à dificuldade da caracterização da interação das partículas com a parede. As condições de contorno na parede, implementadas no MFIX para a solução da equação linear são dadas a seguir. A componente da velocidade na direção y na parede leste é utilizada como um exemplo, figura 3.23. A implementação para as outras componentes e localizações é análoga.

1. Deslizamento Livre na parede

$$v_m(i, j + \frac{1}{2}, k) - v_m(i - 1, j + \frac{1}{2}, k) = 0 \quad (3.156)$$

2. Plena Aderência na parede

$$v_m(i, j + \frac{1}{2}, k) + v_m(i - 1, j + \frac{1}{2}, k) = 0 \quad (3.157)$$

3. Deslizamento Parcial na parede

$$\frac{\partial v_m}{\partial n} + h_v(v_m - v_w) = 0 \quad (3.158)$$

onde $\frac{\partial}{\partial n}$ denota a diferenciação ao longo da direção normal (exterior).

Deve-se ressaltar aqui a inclusão de uma quarta condição de contorno na parede para a fase sólida, condição esta que foi devidamente implementada no MFIX para a execução deste trabalho. 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 assumem que as partículas deslizam parcialmente na parede. O modelo utilizado por estes autores se expressa como:

$$v_{s,w} = -\lambda_p \left(\frac{\partial v_{s,w}}{\partial y} \right) \quad (3.159)$$

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

$$\lambda_p = \frac{1}{(\alpha_s)^{1/3}} d_p \quad (3.160)$$

A componente normal do vetor velocidade da fase sólida na parede assume-se igual a zero, isto é, $u_s = 0$.

Figura 3.23: Condição de Deslizamento Livre e de Plena Aderência na parede leste

A forma discreta da eq. (3.158), por exemplo, na face leste é:

$$v_m(i, j + \frac{1}{2}, k) \left(\frac{h_v}{2} + \frac{1}{\Delta x_E} \right) + v_m(i-1, j + \frac{1}{2}, k) \left(\frac{h_v}{2} - \frac{1}{\Delta x_E} \right) = h_v v_w \quad (3.161)$$

A equação acima é uma condição de deslizamento generalizada, que pode descrever a condição de não deslizamento ($h_v \rightarrow \infty, v_w = 0$), deslizamento livre ($h_v = 0$) e uma condição de deslizamento parcial ($h_v \rightarrow \infty, v_w \neq 0$).

3.8 Eliminação Parcial do Acoplamento na Interface

A presença dos termos de transferência na interface é uma característica que distingue as equações do escoamento multifásico das do monofásico. Usualmente, os termos de transferência na interface acoplam fortemente as componentes da velocidade e temperatura de cada fase às correspondentes variáveis da outra fase. O desacoplamento das equações por meio do cálculo dos termos de transferência na interface a partir dos valores da iteração anterior tornará as iterações instáveis ou forçará passos temporais pequenos. No outro extremo, a resolução de todas as equações discretas para uma certa componente gerará uma matriz não padrão de ordem elevada. Uma alternativa efetiva que mantém um alto grau de acoplamento entre as equações enquanto fornece uma matriz septadiagonal padrão (3D) é o algoritmo de eliminação parcial de SPALDING (1980). O algoritmo é ilustrado com a seguinte equação modelo:

$$\alpha_m \rho_m \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \alpha_m \rho_m (v_m)_i \frac{\partial \Phi_m}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_{\Phi_m} \frac{\partial \Phi_m}{\partial x_i} \right) + R_{\Phi_m} - \Phi_m \left(\sum R_{lm} \right) + \sum_{l=0}^M F_{lm} (\Phi_l - \Phi_m) \quad (3.162)$$

(Note que $F_{lm} = F_{ml}$ e $F_{mm} = 0$.)

A equação correspondente discreta é:

$$(\alpha_m)_P (\Phi_m)_P = \sum_{nb} (\alpha_m)_{nb} (\Phi_m)_{nb} + b_m + \Delta V \sum_{l=0}^M F_{lm} [(\Phi_l)_P - (\Phi_m)_P] \quad (3.163)$$

que é semelhante em forma à equação discreta da quantidade de movimento, discutida na seção 3.7.1.

Primeiramente, discuti-se o problema com um desacoplamento direto das equações. Por exemplo, considere o caso do fluxo de duas fases ($M = 1$):

$$(\alpha_0)_P (\Phi_0)_P = \sum_{nb} (\alpha_0)_{nb} (\Phi_0)_{nb} + b_0 + \Delta V F_{10} [(\Phi_1)_P - (\Phi_0)_P] \quad (3.164)$$

$$(\alpha_1)_P (\Phi_1)_P = \sum_{nb} (\alpha_1)_{nb} (\Phi_1)_{nb} + b_1 + \Delta V F_{10} [(\Phi_0)_P - (\Phi_1)_P] \quad (3.165)$$

Quando $F_{10} \rightarrow 0$ as duas equações estão desacopladas e a solução para $(\Phi_0)_P$, por exemplo, é:

$$(\Phi_0)_P = \frac{\sum_{nb} (a_0)_{nb} (\Phi_0)_{nb} + b_0}{(a_0)_P} \quad (3.166)$$

Quando $F_{10} \rightarrow \infty$ as equações estão fortemente acopladas e as soluções são:

$$(\Phi_0)_P = (\Phi_1)_P = \frac{\sum_{nb} (a_0)_{nb} (\Phi_0)_{nb} + b_0 + \sum_{nb} (a_1)_{nb} (\Phi_1)_{nb} + b_1}{(a_0)_P + (a_1)_P}. \quad (3.167)$$

Um esquema iterativo que trata o termo de transferência na interface meramente como um termo fonte fornecerá a solução correta para valores pequenos de F_{10} , mas falhará no caso em que $F_{10} \rightarrow \infty$. Portanto, para tal aproximação, a amplitude do passo temporal deve ser tomada suficientemente pequena tal que o valor de F_{10} seja pequeno em comparação aos valores de b_0 e b_1 . Para obter convergência enquanto utilizam-se grandes amplitudes para o passo temporal, o esquema iterativo deve ser projetado tal que ele possa calcular as duas soluções limitadas acima. Por esta razão, SPALDING (1980) sugere o seguinte algoritmo de eliminação parcial:

Resolve-se para $(\Phi_1)_P$ da eq. (3.165) para obter:

$$(\Phi_1)_P = \frac{\sum_{nb} (a_1)_{nb} (\Phi_1)_{nb} + b_1 + \Delta VF_{10} (\Phi_0)_P}{(a_1)_P + \Delta VF_{10}}. \quad (3.168)$$

Substituí na eq. (3.164) para obter-se:

$$\begin{aligned} \left[(a_0)_P + \frac{(a_1)_P \Delta VF_{10}}{(a_1)_P + \Delta VF_{10}} \right] (\Phi_0)_P &= \sum_{nb} (a_0)_{nb} (\Phi_0)_{nb} + b_0 + \\ &+ \frac{\Delta VF_{10}}{(a_1)_P + \Delta VF_{10}} \left\{ \sum_{nb} (a_1)_{nb} (\Phi_1)_{nb} + b_1 \right\}. \end{aligned} \quad (3.169)$$

Um procedimento semelhante pode ser utilizado para a dedução da equação para a outra fase:

$$\begin{aligned} \left[(a_1)_P + \frac{(a_0)_P \Delta VF_{10}}{(a_0)_P + \Delta VF_{10}} \right] (\Phi_1)_P &= \sum_{nb} (a_1)_{nb} (\Phi_1)_{nb} + b_1 + \\ &+ \frac{\Delta VF_{10}}{(a_0)_P + \Delta VF_{10}} \left\{ \sum_{nb} (a_0)_{nb} (\Phi_0)_{nb} + b_0 \right\}. \end{aligned} \quad (3.170)$$

O conjunto de equações lineares para Φ_0 e Φ_1 são desacoplados por meio do tratamento dos últimos termos nas eqs. (3.169) e (3.170) como termos fontes avaliados

com $(\Phi_0)_{nb}$ e $(\Phi_1)_{nb}$ da iteração anterior. Quando $F_{10} \rightarrow 0$ ou $F_{10} \rightarrow \infty$, pode-se recorrer aos limitantes das soluções das equações acima. Portanto, a expectativa é que um esquema iterativo baseado na equação anterior convirja para todos os valores de F_{10} .

3.9 Equação para a Correção da Pressão do Fluido

Nesta seção procede-se à dedução da equação discreta para a pressão do fluido (passo 3 no algoritmo 3.2).

3.9.1 Formulação

A componente x para a equação da quantidade de movimento discreta (seção 3.7.1) para duas fases, por exemplo, é:

$$\begin{aligned} \alpha_{0P}(u_0)_P = \sum_{nb} \alpha_{0nb}(u_0)_{nb} + b_0 - A_P(\alpha_0)_P((P_g)_E - (P_g)_W) + \\ + F_{10}[(u_1)_P - (u_0)_P] \Delta V \end{aligned} \quad (3.171)$$

e

$$\begin{aligned} \alpha_{1P}(u_1)_P = \sum_{nb} \alpha_{1nb}(u_1)_{nb} + b_1 - A_P(\alpha_1)_P((P_g)_E - (P_g)_W) + \\ + F_{10}[(u_0)_P - (u_1)_P] \Delta V - A_P((P_s)_E - (P_s)_W) \end{aligned} \quad (3.172)$$

onde 0 denota a fase fluido e $P_s = P_s(\alpha_1)$ é a pressão do sólido.

Como estabelecido na seção 3.6, primeiramente resolve-se as eqs (3.171) e (3.172) utilizando o campo de pressão P_g^* e o campo da fração de vazio α_0^* , obtidos da iteração anterior para calcular uma tentativa para os campos de velocidade u_0^* , u_1^* e outras componentes da velocidade.

$$\begin{aligned} \alpha_{0P}(u_0^*)_P = \sum_{nb} \alpha_{0nb}(u_0^*)_{nb} + b_0 - A_P(\alpha_0^*)_P((P_g^*)_E - (P_g^*)_W) + \\ + F_{10}[(u_1^*)_P - (u_0^*)_P] \Delta V \end{aligned} \quad (3.173)$$

e

$$\alpha_{1P}(u_1^*)_P = \sum_{nb} \alpha_{1nb}(u_1^*)_{nb} + b_1 - A_P(\alpha_1^*)_P((P_g^*)_E - (P_g^*)_W) +$$

$$+ F_{10} [(u_0^*)_P - (u_1^*)_P] \Delta V - A_P [(P_s^*)_E - (P_s^*)_W]. \quad (3.174)$$

Os valores reais diferem das tentativas (valores estrelas) pelas seguintes correções:

$$\begin{aligned} (P_g)_E &= (P_g^*)_E + (P'_g)_E; \\ (P_s)_E &= (P_s^*)_E + (P'_s)_E; \\ (u_0)_P &= (u_0^*)_P + (u'_0)_P; \\ (u_1)_P &= (u_1^*)_P + (u'_1)_P \end{aligned} \quad (3.175)$$

para as outras componentes da velocidade as fórmulas são semelhantes.

Substituem-se as correções eq. (3.175) nas eqs. (3.171) e (3.172), e da equação resultante subtraem-se as eqs. (3.173) e (3.174) para obter-se:

$$a_{0P}(u'_0)_P = \sum_{nb} a_{0nb}(u'_0)_{nb} - A_P (\alpha_0^*)_P [(P'_g)_E - (P'_g)_W] + F_{10} [(u'_1)_P - (u'_0)_P] \Delta V \quad (3.176)$$

$$\begin{aligned} a_{1P}(u'_1)_P &= \sum_{nb} a_{1nb}(u'_1)_{nb} - A_P (\alpha_1^*)_P [(P'_g)_E - (P'_g)_W] + F_{10} [(u'_0)_P - (u'_1)_P] \Delta V - \\ &- A_P [(P'_s)_E - (P'_s)_W]. \end{aligned} \quad (3.177)$$

Para desenvolver uma equação aproximada para a correção do fluido, omitiu-se os termos de convecção para a quantidade de movimento e pressão do sólido, e assim obtêm-se:

$$a_{0P}(u'_0)_P = -A_P (\alpha_0^*)_P [(P'_g)_E - (P'_g)_W] + F_{10} [(u'_1)_P - (u'_0)_P] \Delta V; \quad (3.178)$$

$$a_{1P}(u'_1)_P = -A_P (\alpha_1^*)_P [(P'_g)_E - (P'_g)_W] + F_{10} [(u'_0)_P - (u'_1)_P] \Delta V. \quad (3.179)$$

Note que as simplificações acima não afetariam a precisão da solução convergida, entretanto, podem afetar a taxa de convergência das iterações.

Da eq. (3.179), obtém-se:

$$(a_{1P} + F_{10} \Delta V)(u'_1)_P = -A_P (\alpha_1^*)_P [(P'_g)_E - (P'_g)_W] + F_{10} (u'_0)_P \Delta V. \quad (3.180)$$

Substituindo na eq. (3.178), obtém-se:

$$\begin{aligned} a_{0P}(u'_0)_P &= -A_P (\alpha_0^*)_P [(P'_g)_E - (P'_g)_W] + \\ &+ F_{10} \left[\frac{-A_P (\alpha_1^*)_P [(P'_g)_E - (P'_g)_W] + F_{10} (u'_0)_P \Delta V}{a_{1P} + F_{10} \Delta V} - (u'_0)_P \right] \Delta V. \end{aligned} \quad (3.181)$$

que se pode reescrever como:

$$(u'_0)_P = -d_{0P} \left((P'_g)_E - (P'_g)_W \right) \quad (3.182)$$

onde

$$d_{0P} = \frac{A_P \left[(\alpha_0^*)_P + \frac{(\alpha_1^*)_P F_{10} \Delta V}{a_{1P} + F_{10} \Delta V} \right]}{\left[a_{0P} + \frac{F_{10} \Delta V a_{1P}}{a_{1P} + F_{10} \Delta V} \right]}. \quad (3.183)$$

Semelhantemente,

$$(u'_1)_P = -d_{1P} \left((P'_g)_E - (P'_g)_W \right) \quad (3.184)$$

onde

$$d_{1P} = \frac{A_P \left[(\alpha_1^*)_P + \frac{(\alpha_0^*)_P F_{10} \Delta V}{a_{0P} + F_{10} \Delta V} \right]}{\left[a_{1P} + \frac{F_{10} \Delta V a_{0P}}{a_{0P} + F_{10} \Delta V} \right]}. \quad (3.185)$$

Logo as correções para as velocidades são dadas por:

$$(u_m)_P = (u_m^*)_P - d_{mP} \left((P'_g)_E - (P'_g)_W \right) \quad (3.186)$$

Substituindo a equação acima e equações semelhantes para as demais componentes da velocidade na equação da continuidade (eq. 3.88, com $\Phi = 1$) para a fase fluido, obtém-se uma equação para a correção da pressão.

$$\begin{aligned} & \left(\frac{(\alpha_0 \rho_0)_P - (\alpha_0 \rho_0)_P^0}{\Delta t} \right) \Delta V + \\ & + \left\{ \xi_e (\alpha_0 \rho_0)_E + \bar{\xi}_e (\alpha_0 \rho_0)_P \right\} \left[(u_0^*)_e - d_{0e} \left((P'_g)_E - (P'_g)_P \right) \right] A_e - \\ & - \left\{ \xi_w (\alpha_0 \rho_0)_P + \bar{\xi}_w (\alpha_0 \rho_0)_W \right\} \left[(u_0^*)_w - d_{0w} \left((P'_g)_P - (P'_g)_W \right) \right] A_w + \\ & + \left\{ \xi_n (\alpha_0 \rho_0)_N + \bar{\xi}_n (\alpha_0 \rho_0)_P \right\} \left[(v_0^*)_n - d_{0n} \left((P'_g)_N - (P'_g)_P \right) \right] A_n - \\ & - \left\{ \xi_s (\alpha_0 \rho_0)_P + \bar{\xi}_s (\alpha_0 \rho_0)_S \right\} \left[(v_0^*)_s - d_{0s} \left((P'_g)_P - (P'_g)_S \right) \right] A_s + \\ & + \left\{ \xi_t (\alpha_0 \rho_0)_T + \bar{\xi}_t (\alpha_0 \rho_0)_P \right\} \left[(w_0^*)_t - d_{0t} \left((P'_g)_T - (P'_g)_P \right) \right] A_t - \\ & - \left\{ \xi_b (\alpha_0 \rho_0)_P + \bar{\xi}_b (\alpha_0 \rho_0)_B \right\} \left[(w_0^*)_b - d_{0b} \left((P'_g)_P - (P'_g)_B \right) \right] A_b = \\ & = \Delta V \sum_l (R_{lm})_P, \end{aligned} \quad (3.187)$$

a qual pode ser escrita na forma padrão:

$$a_P (P'_g)_P = \sum_{nb} a_{nb} (P'_g)_{nb} + b \quad (3.188)$$

onde

$$\begin{aligned}
 a_E &= \{\xi_e(\alpha_0 \rho_0)_E + \bar{\xi}_e(\alpha_0 \rho_0)_P\} d_{0e} A_e; \\
 a_W &= \{\xi_w(\alpha_0 \rho_0)_P + \bar{\xi}_w(\alpha_0 \rho_0)_W\} d_{0w} A_w; \\
 a_N &= \{\xi_n(\alpha_0 \rho_0)_N + \bar{\xi}_n(\alpha_0 \rho_0)_P\} d_{0n} A_n;
 \end{aligned} \tag{3.189}$$

$$\begin{aligned}
 a_S &= \{\xi_s(\alpha_0 \rho_0)_P + \bar{\xi}_s(\alpha_0 \rho_0)_S\} d_{0s} A_s; \\
 a_T &= \{\xi_t(\alpha_0 \rho_0)_T + \bar{\xi}_t(\alpha_0 \rho_0)_P\} d_{0t} A_t; \\
 a_B &= \{\xi_b(\alpha_0 \rho_0)_P + \bar{\xi}_b(\alpha_0 \rho_0)_B\} d_{0b} A_b; \\
 a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B;
 \end{aligned} \tag{3.190}$$

$$\begin{aligned}
 b &= - \left\{ \left(\frac{(\alpha_0 \rho_0)_P - (\alpha_0 \rho_0)_P^0}{\Delta t} \right) \Delta V + \right. \\
 &+ \{\xi_e(\alpha_0 \rho_0)_E + \bar{\xi}_e(\alpha_0 \rho_0)_P\} (u_0^*)_e A_e - \\
 &- \{\xi_w(\alpha_0 \rho_0)_P + \bar{\xi}_w(\alpha_0 \rho_0)_W\} (u_0^*)_w A_w + \\
 &+ \{\xi_n(\alpha_0 \rho_0)_N + \bar{\xi}_n(\alpha_0 \rho_0)_P\} (v_0^*)_n A_n - \\
 &- \{\xi_s(\alpha_0 \rho_0)_P + \bar{\xi}_s(\alpha_0 \rho_0)_S\} (v_0^*)_s A_s + \\
 &+ \{\xi_t(\alpha_0 \rho_0)_T + \bar{\xi}_t(\alpha_0 \rho_0)_P\} (w_0^*)_t A_t - \\
 &- \{\xi_b(\alpha_0 \rho_0)_P + \bar{\xi}_b(\alpha_0 \rho_0)_B\} (w_0^*)_b A_b - \\
 &\left. - \Delta V \sum_I (R_{lm})_P \right\}
 \end{aligned} \tag{3.191}$$

Após resolver a eq. (3.188) para a correção da pressão do fluido, as velocidades do fluido e do sólido são corrigidas. Note que quando uma tentativa para o campo de velocidade do fluido satisfaz a equação da continuidade, a correção para a pressão vai à zero. Além de que o campo de velocidade corrigida para o fluido é tal que satisfaz a equação da continuidade.

3.9.2 Condições de Contorno

As condições de contorno para as equações de correção da pressão nas fronteiras de entrada e saída de fluxo são formuladas como seguem. A figura 3.24 ilustra as células fictícias e as internas adjacentes para ambos os casos. As células fictícias estão sombreadas. Nenhuma equação para a correção da pressão é disponível nessas células.

A equação para a correção da pressão para as células internas adjacentes é modificada como segue, pelo uso da informação das condições de contorno.

➤ Velocidade Especificada

Para a condição de entrada ilustrada na figura 3.24, a substituição da velocidade especificada na eq. (3.147), resulta em:

$$a_s = 0;$$

$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_T + a_B \quad (3.192)$$

note que $(v_0^*)_s$ no termo b (eq.(3.191)) é o mesmo que $(v_0)_s$ especificado na fronteira de entrada. As demais fronteiras de entrada são tratadas de maneira semelhante.

A condição de contorno nas paredes impermeáveis é semelhante àquela das fronteiras de entrada, desde que a velocidade normal (à parede) é especificada como zero.

➤ Pressão Especificada

Quando a pressão é especificada numa célula, a pressão corrigida naquela célula é zero, e para a condição ilustrada na figura 3.24.

$$(p'_g)_n = 0. \quad (3.193)$$

Figura 3.24: Condições de Contorno para o Fluxo

CAPÍTULO 4

RESULTADOS DE SIMULAÇÃO

4.1 – Introdução

Neste capítulo apresentam-se resultados de simulação numérica do escoamento hidrodinâmico gás-sólido no tubo ascendente de um LFC considerando dois procedimentos para o cálculo do tensor de tensões da fase sólida. Estes são: o procedimento tradicional que utiliza correlações empíricas para o computo da viscosidade e pressão do sólido e o baseado na teoria cinética dos escoamentos granulares - TCEG.

Para realizar as simulações aqui apresentadas utilizou-se o código MFIX - “Multiphase Flow with Interphase eXchanges” desenvolvido no NETL (National Energy Technology Laboratory) (SYAMLAL *et al.* (1993)). Foram feitas alterações no código com o intuito de utilizar o modelo tradicional, pois o mesmo apresenta em sua forma original uma versão simplificada do modelo (viscosidade constante e desconsidera o efeito da pressão do sólido, isto é $P_s \equiv zero$).

Para o desenvolvimento do trabalho utilizaram-se três computadores: um Pentium IV com processador Intel de 1,4 Ghz e 512 Mbytes de memória RAM – “Random Access Memory”, um AMD-ATHLON dual com processadores de 2,0 Ghz e 1,5 Gbytes de memória RAM e um AMD-ATHLON com processador de 3,0 Ghz e 1,0 Gbytes de memória RAM. Utilizou-se como plataforma para o código MFIX o sistema operacional LINUX, que é gratuito e regido pelas normas de software livre, na versão MANDRAKE 9.1, além do compilador Fortran-Intel versão 7.0 e versão 8.0 para a linguagem de programação Fortran, distribuído gratuitamente pela INTEL (www.intel.com).

As simulações e análises realizadas tanto com o procedimento tradicional como com a TCEG apresentam subdivisões. Quando empregado o procedimento tradicional a viscosidade do sólido é calculada por meio de duas correlações diferentes: uma linear e outra derivada da TCEG (HUILIN & GIDASPOW (2003)) (ver tabela 4.1). Para a

TCEG considerou-se a formulação algébrica (utiliza uma equação algébrica para o computo da temperatura granular) e a formulação que utiliza uma equação diferencial parcial para o computo da temperatura granular (ver tabela 4.4). No caso da TCEG algébrica foi considerado o cálculo da pressão do sólido através da TCEG propriamente dita (ver tabela 4.2) e também com uma correlação empírica tomada do procedimento tradicional (modelo “ad-hoc”) (ver tabela 4.3). Os dois coeficientes de viscosidade são calculados pelas relações da TCEG algébrica. Desta forma o procedimento geral da TCEG algébrica considera o uso de dois modelos matemáticos diferentes. Embora o segundo modelo seja “ad-hoc”, o mesmo tem-se mostrado bastante efetivo na obtenção de resultados mais representativos dos dados experimentais em relação a TCEG algébrica originalmente concebida e disponível no código MFIX.

Incluem-se resultados de simulação numérica para três tamanhos de malha e diversos esquemas de interpolação diferentes do termo advectivo (Foup, Superbee, Van Leer, Muscl). Apresentam-se resultados de simulação apenas para a instalação de Luo (LUO (1987)).

Na Figura 4.1 mostra-se o domínio computacional empregado nas simulações desenvolvidas. Considerou-se o sistema cartesiano de coordenadas. As dimensões geométricas e condições iniciais e de contorno de entrada estão especificadas na Figura. As condições de contorno nas paredes foram assumidas iguais em todas as simulações. No caso da fase gasosa considerou-se a condição de não deslizamento. Para a fase sólida utilizou-se a condição de deslizamento parcial na direção tangencial à parede de acordo com DING & GIDASPOW (1990) (esta condição de deslizamento parcial para a fase sólida foi implementada no MFIX para o desenvolvimento deste trabalho) para todos os casos exceto quando se considera a TCEG com a resolução da equação diferencial parcial para o computo da temperatura granular. Neste caso utilizou-se o modelo padrão no MFIX proposto por Johnson & Jackson (1987). Na direção normal considerou-se velocidade nula. Para a pressão e a fração de sólido nas paredes considerou-se deslizamento livre, ou seja, gradiente nulo na direção normal à parede.

Ainda que diversos tipos de resultados e análises podem ser apresentados, neste trabalho aborda-se o comportamento das principais variáveis (fração volumétrica de sólido, velocidade axial de ambas as fases e velocidade mássica da fase sólida) para as quais se possui dados experimentais.

Estendem-se as análises com o estudo da influência dos esquemas de discretização dos termos advectivos para o comportamento instantâneo do leito, dando ênfase à velocidade mássica e à avaliação dos resultados de simulação numérica por meio da metodologia de identificação e caracterização de estruturas coerentes características do escoamento (análise de “clusters”) em diferentes seções do leito. Para esta análise, baseiam-se os estudos na metodologia empregada por CABEZAS-GÓMEZ (2003), que é descrita de maneira sucinta na seção 4.2.4.

Embora as simulações apresentadas representem os testes numéricos desenvolvidos com o código, acredita-se que os resultados obtidos são bastante representativos. Comparações destes resultados com os obtidos anteriormente por [CABEZAS-GÓMEZ-2003] e [CABEZAS-GÓMEZ & MILIOLI-2003] comprovam esse fato, indicando coerência física dos resultados com o MFIX.

Dados da simulação:

Diâmetro das partículas: $d_p = 520 \mu\text{m}$

Densidade do sólido: $\rho_s = 2620 \text{ kg/m}^3$

Fluxo mássico da fase sólida: $G_s = 24,9 \text{ kg/(m}^2\text{s)}$

Viscosidade do gás: $\mu_g = 1,8 \times 10^{-5} \text{ Pa s}$

Condições iniciais:

Tubo ascendente sem sólido

$P = 101,325 \text{ kPa}$

$T = 300 \text{ K}$

Condições de contorno na entrada:

$v_s = 0,386 \text{ m/s}$

$v_g = 4,979 \text{ m/s}$

$\alpha_s = 0,0246$

$P = 120,6639 \text{ kPa}$

$T = 300 \text{ K}$

Condições de contorno na saída:

Condição de continuidade: $\frac{\partial f}{\partial n} = 0$

onde f pode ser α_s , u_g ou u_s .

Pressão do gás fixa: $P = 117,2049 \text{ kPa}$

Condições de contorno nas paredes:

Fase gasosa: não deslizamento

Fase sólida: deslizamento parcial

$$\vec{v}_{s,w} = -\frac{d_p}{\alpha_s^{1/3}} \frac{\partial \vec{v}_s}{\partial n}$$

Fração de sólido e pressão do gás: deslizamento

livre

Condições computacionais:

Malhas computacionais empregadas:

Malha 1: (10x146) 1460 nós: $\delta x = 0,762 \text{ cm}$, $\delta y = 3,81 \text{ cm}$

Malha 2: (15x146) 2190 nós: $\delta x = 0,508 \text{ cm}$, $\delta y = 3,81 \text{ cm}$

Malha 3: (20x146) 2920 nós: $\delta x = 0,381 \text{ cm}$, $\delta y = 3,81 \text{ cm}$

Tempo real de cálculo : $t = 100 \text{ s}$

Figura 4.1. Geometria e condições iniciais e de contorno usadas nas simulações assumindo coordenadas cartesianas. (Dados para a instalação do IIT, Luo, 1987).

Tabela 4.1. Modelo hidrodinâmico B considerando o procedimento tradicional para o cálculo das relações constitutivas do tensor de tensões da fase sólida.

1. Equação da continuidade, fase k (k = g, s) $\frac{\partial(\rho_k \alpha_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \mathbf{v}_k) = 0$	6. Definição da fração volumétrica $\alpha_g + \alpha_s = 1$
2. Equação da Quantidade de movimento, Modelo B Fase gasosa: $\frac{\partial(\rho_g \alpha_g \mathbf{v}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \alpha_g \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g) = -\nabla P$ $- \beta_B (\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s) + \nabla \cdot (\alpha_g \tau_g) + \rho_g \mathbf{g}$ Fase sólida: $\frac{\partial(\rho_s \alpha_s \mathbf{v}_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s \alpha_s \mathbf{v}_s \mathbf{v}_s) = \beta_B (\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s)$ $+ \nabla \cdot (\alpha_s \tau_s) - G \nabla \alpha_s + (\rho_s - \rho_g) \alpha_s \mathbf{g}$	7. Equação de estado (fase gasosa como gás ideal) $\rho_g = P/(R_g T) \text{ e } \rho_s = \rho_s \text{ (constante)}$
3. Tensor das tensões, fase k (k = g, s) $\tau_k = \mu_k \left[\nabla \mathbf{v}_k + (\nabla \mathbf{v}_k)^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}_k) \mathbf{I} \right]$	8. Função de arrasto na interface, β , Modelo B Ergun (1952) para $\alpha_s \geq 0,2$: $\beta = 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g^2 (d_p \phi_s)^2} + 1.75 \frac{\rho_g \alpha_s \mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s }{(\alpha_g d_p \phi_s)}$
4. Modulo de elasticidade do sólido $G(\alpha_g) = 10^{-8,76\alpha_g + 5,43} \text{ Pa/m}^2$	Wen and Yu (1966) para $\alpha_s < 0,2$: $\beta = \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{\rho_g \alpha_s \alpha_g \mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s }{(\alpha_g d_p \phi_s)} \alpha_g^{-2,65}$
5. Viscosidade do sólido 5.1 Modelo Linear: $\mu_s = 0,5\alpha_s$ 5.2 Modelo Gidaspow_Huilin: $\mu_s = 0,165\alpha_s^{1/3} g_0$ e $g_0 = \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,\max}} \right)^{1/3} \right]^{-1}$	Onde $C_{Ds} = \begin{cases} \frac{24}{Re_s} (1 + 0.15 \cdot Re_s^{0.687}) & Re_s < 1000 \\ 0.44 & Re_s \geq 1000 \end{cases}$ e $Re_s = \frac{\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s d_p \phi_s}{\mu_g}$

Tabela 4.2. Modelo hidrodinâmico B considerando a TCEG algébrica “default” para o cálculo das relações constitutivas do tensor de tensões da fase sólida.

1. Equação da continuidade, fase k (k = g, s)	onde
$\frac{\partial(\rho_k \alpha_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \mathbf{v}_k) = 0$	$D_s = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{v}_s + (\nabla \mathbf{v}_s)^T), K_1 = 2(1 + e) \rho_s g_0,$
2. Equação da Quantidade de movimento, Modelo B	$K_2 = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} d_p \rho_s (1 + e) \alpha_s g_0 - \frac{2}{3} K_3,$
Fase gasosa:	$K_3 = \frac{d_p \rho_s \sqrt{\pi}}{6(3-e)} \left[1 + \frac{2}{3} (1 + e) (3e - 1) \alpha_s g_0 \right]$
$\frac{\partial(\rho_g \alpha_g \mathbf{v}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \alpha_g \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g) = -\nabla P$	$+ \frac{8 d_p \rho_s \alpha_s}{10 \sqrt{\pi}} g_0 (1 + e),$
$-\beta_B (\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s) + \nabla \cdot (\alpha_g \boldsymbol{\tau}_g) + \rho_g \mathbf{g}$	$K_4 = \frac{12(1-e^2) \rho_s g_0}{d_p \sqrt{\pi}} e$
Fase sólida:	$g_0 = \frac{(2 - \alpha_s)}{2(1 - \alpha_s)^3}.$
$\frac{\partial(\rho_s \alpha_s \mathbf{v}_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s \alpha_s \mathbf{v}_s \mathbf{v}_s) = \beta_B (\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s)$	8. Definição da fração volumétrica
$+ \nabla \cdot (\alpha_s \boldsymbol{\tau}_s) - \nabla P_s + (\rho_s - \rho_g) \alpha_s \mathbf{g}$	$\alpha_g + \alpha_s = 1.$
3. Tensor das tensões, fase gasosa	9. Equação de estado (fase gasosa como gás ideal)
$\boldsymbol{\tau}_g = \mu_g \left[\nabla \mathbf{v}_g + (\nabla \mathbf{v}_g)^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}_g) \mathbf{I} \right]$	$\rho_g = P / (R_g T) \text{ e } \rho_s = \rho_s \text{ (constante)}$
4. Tensor das tensões, fase sólida	10. Função de arrasto na interface, β , Modelo B Ergun (1952) para $\alpha_s \geq 0,2$:
$\boldsymbol{\tau}_s = 2\mu_s (\nabla \mathbf{v}_s + (\nabla \mathbf{v}_s)^T) + \lambda_s (\nabla \cdot \mathbf{v}_s) \mathbf{I}$	$\beta = 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g^2 (d_p \phi_s)^2} + 1.75 \frac{\rho_g \alpha_s \mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s }{(\alpha_g d_p \phi_s)}$
5. Pressão do sólido	Wen and Yu (1966) para $\alpha_s < 0,2$:
$P_s = K_1 \alpha_s^2 \theta$	$\beta = \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{\rho_g \alpha_s \alpha_g \mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s }{(\alpha_g d_p \phi_s)} \alpha_g^{-2.65}$
6. Viscosidade dinâmica e volumétrica da fase sólida	Onde
$\mu_s = K_3 \alpha_s \sqrt{\theta}, \quad \lambda_s = K_2 \alpha_s \sqrt{\theta}$	$C_{Ds} = \begin{cases} \frac{24}{Re_s} (1 + 0.15 \cdot Re_s^{0.687}) & Re_s < 1000 \\ 0.44 & Re_s \geq 1000 \end{cases}$
7. Temperatura granular algébrica	$Re_s = \frac{\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s d_p \phi_s}{\mu_g}$
$\theta = \left(\frac{-(K_1 \alpha_s + \rho_s) tr(D_s) + \sqrt{[(K_1 \alpha_s + \rho_s)^2 tr^2(D_s) + 4K_4 \alpha_s [2K_3 tr(D_s^2) + K_2 tr^2(D_s)]]}}{2\alpha_s K_4} \right)$	

Tabela 4.3. Modelo hidrodinâmico B considerando a TCEG algébrica “modificada” para o cálculo das relações constitutivas do tensor de tensões da fase sólida.

1. Equação da continuidade, fase k (k = g, s)	onde
$\frac{\partial(\rho_k \alpha_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \mathbf{v}_k) = 0$	$D_s = \frac{1}{2} (\nabla \bar{\mathbf{v}}_s + (\nabla \bar{\mathbf{v}}_s)^T),$
2. Equação da Quantidade de movimento, Modelo B	$K_1 = 2(1 + e) \rho_s g_0,$
Fase gasosa:	$K_2 = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} d_p \rho_s (1 + e) \alpha_s g_0 - \frac{2}{3} K_3,$
$\frac{\partial(\rho_g \alpha_g \mathbf{v}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \alpha_g \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g) = -\nabla P$	$K_3 = \frac{d_p \rho_s \sqrt{\pi}}{6(3-e)} \left[1 + \frac{2}{5} (1 + e) (3e - 1) \alpha_s g_0 \right]$
$- \beta_B (\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s) + \nabla \cdot (\alpha_g \boldsymbol{\tau}_g) + \rho_g \bar{\mathbf{g}}$	$+ \frac{8 d_p \rho_s \alpha_s}{10 \sqrt{\pi}} g_0 (1 + e),$
Fase sólida:	$K_4 = \frac{12(1-e^2) \rho_s g_0}{d_p \sqrt{\pi}} e$
$\frac{\partial(\rho_s \alpha_s \mathbf{v}_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s \alpha_s \mathbf{v}_s \mathbf{v}_s) = \beta_B (\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s)$	$g_0 = \frac{(2 - \alpha_s)}{2(1 - \alpha_s)^3}$
$+ \nabla \cdot (\alpha_s \boldsymbol{\tau}_s) - \nabla P_s + (\rho_s - \rho_g) \alpha_s \bar{\mathbf{g}}$	
3. Tensor das tensões, fase gasosa	8. Definição da fração volumétrica
$\boldsymbol{\tau}_g = \mu_g \left[\nabla \mathbf{v}_g + (\nabla \mathbf{v}_g)^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}_g) \mathbf{I} \right]$	$\alpha_g + \alpha_s = 1$
4. Tensor das tensões, fase sólida	9. Equação de estado (fase gasosa como gás ideal)
$\boldsymbol{\tau}_s = 2\mu_s (\nabla \mathbf{v}_s + (\nabla \mathbf{v}_s)^T) + \lambda_s (\nabla \cdot \mathbf{v}_s) \mathbf{I}$	$\rho_g = P/(R_g T) \text{ e } \rho_s = \rho_s \text{ (constante)}$
5. Pressão do sólido	10. Função de arrasto na interface, β , Modelo B
$\nabla P_s = G \nabla \alpha_s$	Ergun (1952) para $\alpha_s \geq 0,2$:
Modulo de elasticidade do sólido	$\beta = 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g^2 (d_p \phi_s)^2} + 1,75 \frac{\rho_g \alpha_s \mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s }{(\alpha_g d_p \phi_s)}$
$G(\alpha_g) = 10^{-8,76\alpha_g + 5,43} \text{ Pa/m}^2$	Wen and Yu (1966) para $\alpha_s < 0,2$:
6. Viscosidade dinâmica e volumétrica da fase sólida	$\beta = \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{\rho_g \alpha_s \alpha_g \mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s }{(\alpha_g d_p \phi_s)} \alpha_g^{-2,65}$
$\mu_s = K_3 \alpha_s \sqrt{\theta}, \quad \lambda_s = K_2 \alpha_s \sqrt{\theta}$	Onde
7. Temperatura granular algébrica	$C_{Ds} = \begin{cases} \frac{24}{Re_s} (1 + 0,15 \cdot Re_s^{0,687}) & Re_s < 1000 \\ 0,44 & Re_s \geq 1000 \end{cases}$
$\theta = \left(\frac{-(K_1 \alpha_s + \rho_s) r(D_s) + \sqrt{[(K_1 \alpha_s + \rho_s)^2 t r^2(D_s)]}}{+ 4 K_4 \alpha_s [2 K_3 t r(D_s^2) + K_2 t r^2(D_s)]} \right)$	$e \quad Re_s = \frac{\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s d_p \phi_s}{\mu_g}$

Tabela 4.4. Modelo hidrodinâmico B considerando a TCEG com uma equação diferencial parcial para o computo da temperatura granular θ .

<p>1. Equação da continuidade, fase k (k = g, s)</p> $\frac{\partial(\rho_k \alpha_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \mathbf{v}_k) = 0$ <p>2. Equação da Quantidade de movimento, Modelo B</p> <p>Fase gasosa:</p> $\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \vec{v}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g \vec{v}_g) = -\vec{\nabla} P + \rho_g \vec{g} + \alpha_g \nabla \cdot \tau_g - \vec{f}$ <p>Fase sólida:</p> $\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \vec{v}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{v}_s \vec{v}_s) = \alpha_s (\rho_s - \rho_g) \vec{g} + \alpha_s \nabla \cdot \tau_s - \nabla \cdot P_s + \vec{f}$ <p>3. Equação para o balanço da energia pseudo-térmica (i.e. da temperatura granular) das flutuações da velocidade das partículas:</p> $\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s \theta) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{v}_s \theta) \right] = -\vec{\nabla} \cdot \vec{q} - \tau_s : \nabla \vec{v}_s + \Gamma_{desl} - J_{col} - J_{vis}$ <p>em que:</p> $\Gamma_{desl} = \frac{81 \alpha_s \mu_g^2 \vec{v}_g - \vec{v}_s }{g_0 d_p^3 \rho_s \sqrt{\pi \theta}} : \text{Taxa de produção de energia granular devido ao deslizamento gás-partícula;}$ $J_{col} = \frac{48}{\sqrt{\pi}} \eta (1 - \eta) \frac{\rho_s \alpha_s^2}{d_p} g_0 \theta^{3/2} : \text{Taxa de dissipação de energia granular através das colisões inelásticas;}$ $J_{vis} = 3 \beta \theta : \text{Taxa de dissipação de energia granular através do amortecimento viscoso.}$ <p>Relações constitutivas e de fechamento:</p> <p>4. Tensor de tensões da fase gasosa:</p> $\tau_g = -\mu_g \left[\nabla \vec{v}_g + (\nabla \vec{v}_g)^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v}_g I \right]$ <p>5. Arrasto entre as fases gás e sólida:</p> $\vec{f} = \beta (\vec{v}_g - \vec{v}_s) \text{ e } \beta \text{ dado por:}$ <p>Função de arrasto na interface, β, Modelo B</p> <p>Ergun (1952) para $\alpha_s \geq 0,2$:</p> $\beta = 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g^2 (d_p \phi_s)^2} + 1.75 \frac{\rho_g \alpha_s \mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s }{(\alpha_g d_p \phi_s)}$
--

Continuação tabela 4.4

Wen and Yu (1966) para $\alpha_s < 0,2$:

$$\beta = \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{\rho_g \alpha_s \alpha_g |\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s|}{(\alpha_g d_p \phi_s)} \alpha_g^{-2.65}$$

Onde

$$C_{Ds} = \begin{cases} \frac{24}{Re_s} (1 + 0.15 \cdot Re_s^{0.687}) & Re_s < 1000 \\ 0.44 & Re_s \geq 1000 \end{cases}$$

$$e \quad Re_s = \frac{\alpha_g \rho_g |\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s| d_p \phi_s}{\mu_g}$$

6. Tensor de tensões para a fase sólida:

$$\tau_s = [\alpha_s \rho_s (1 + 4\eta \alpha_s g_0) \theta - \eta \mu_b (\nabla \cdot \bar{\mathbf{v}}_s)] \mathbf{I} - \left(\frac{2 + \alpha}{3} \right) \left\{ \frac{2\mu^*}{g_0 \eta (2 - \eta)} \left(1 + \frac{5}{8} \alpha_s g_0 \right) \left(1 + \frac{5}{8} \eta (3\eta - 2) \alpha_s g_0 \right) + \frac{6}{5} \eta \mu_b \right\} \mathbf{S}$$

com:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} (\nabla \bar{\mathbf{v}}_s + (\nabla \bar{\mathbf{v}}_s)^T) - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \bar{\mathbf{v}}_s) \bar{\mathbf{I}}, \quad g_0 = \frac{(2 - \alpha_s)}{2(1 - \alpha_s)^3}, \quad \mu^* = \frac{\mu}{1 + \frac{2\beta\mu}{(\rho_s \alpha_s)^2 g_0 \theta}},$$

$$\mu = \frac{5\rho_s d_p \sqrt{\pi\theta}}{96}, \quad \mu_b = \frac{256\mu \alpha_s^2 g_0}{5\pi}, \quad \eta = \frac{(1 + e)}{2}$$

7. Pressão para a fase sólida:

$$P_s = \rho_s \alpha_s \theta [1 + 2(1 + e) g_0 \alpha_s].$$

8. Fluxo difusivo de energia granular:

$$\bar{\mathbf{q}} = -\frac{\lambda^*}{g_0} \left\{ \left(1 + \frac{12}{5} \eta \alpha_s g_0 \right) \left(1 + \frac{12}{5} \eta^2 (4\eta - 3) \alpha_s g_0 \right) + \frac{64}{25\pi} (41 - 33\eta) \eta^2 \alpha_s^2 g_0^2 \right\} \nabla \theta,$$

$$E \quad \lambda^* = \frac{\lambda}{1 + \frac{6\beta\lambda}{5(\rho_s \alpha_s)^2 g_0 \theta}}, \quad \lambda = \frac{75\rho_s d_p \sqrt{\pi\theta}}{48\eta(41 - 33\eta)}.$$

9. Condição de contorno para a fase sólida (Johnson & Jackson (1987))

$$\bar{\mathbf{n}} \cdot \tau_s \cdot \mathbf{t} + \frac{\pi}{2\sqrt{3}\alpha_{s\max}} \phi' \rho_s \alpha_s g_0 \theta^{1/2} v_{sl} = 0,$$

$$\bar{\mathbf{n}} \cdot \bar{\mathbf{q}} = \frac{\pi\sqrt{3}}{6\alpha_{s\max}} \phi' \rho_s \alpha_s g_0 \theta^{1/2} |v_{sl}| - \frac{\pi\sqrt{3}}{4\alpha_{s\max}} (1 - e_w^2) \rho_s \alpha_s g_0 \theta^{3/2}$$

$$v_{sl} = v - v_w$$

O modelo apresentado na tabela 4.4 é idêntico ao modelo de AGRAWAL *et al* (2001), apresentado e comentado no capítulo 2, seção 2.6, com as seguintes modificações: a correlação para a função de distribuição radial g_0 é devida a Carnahan & Starling (1969) e opção padrão no código MFIX. Outra consideração refere às equações de quantidade de movimento para ambas as fases em que considera o modelo B e uma última diferença é devida ao modelo de arrasto considerado.

4.2 Resultados de simulação

4.2.1 Considerações sobre a influência da malha computacional nos resultados de simulação

Nesta seção procede-se à análise da influência nos resultados de simulação quando emprega-se diferentes tamanhos de malha computacional, neste caso as três malhas descritas na figura 4.1. Para este fim comparam-se os resultados obtidos com as malhas a partir do modelo tradicional com a correlação linear para a viscosidade do sólido, $\mu_s = 0,5\alpha_s$, descrita na tabela 4.1.

Nota-se a influência exercida pela ordem do esquema numérico utilizado para a discretização do termo advectivo presente na equação de transporte para ambas fases. Uma análise mais elaborada abrangendo também os modelos físicos apresentados nas tabelas 4.1 a 4.4 será motivo de estudo em seção posterior.

Nas Figuras 4.2, 4.3 e 4.4 mostram-se os perfis radiais médios no tempo da velocidade axial das fases sólida e gasosa e da fração volumétrica de sólido 3,4 metros acima da entrada do leito e a figura 4.5 mostra os perfis radiais médios no tempo da velocidade mássica do sólido 5,3 metros acima da entrada do leito. Em todas as figuras são considerados na análise os três tamanhos de malha mostrados na Figura 4.1. Os resultados são comparados com os dados experimentais de LUO (1987), considerando o esquema “upwind” (Foup) e o esquema de segunda ordem Superbee. Nas figuras observa-se que as soluções nas malhas utilizadas apresentam comportamento qualitativo semelhante independentemente da ordem do esquema numérico utilizado para a

discretização dos termos advectivos. Os resultados de simulação obtidos com o emprego das malhas 2 e 3 apresentam pequenos desvios entre si e grandes desvios em relação à malha 1. Esta característica pode ser devida ao modelo matemático empregado (modelo tradicional com a correlação linear para a viscosidade do sólido). Caso seja considerado o comportamento instantâneo do leito, o tamanho de malha deverá continuar influenciando os resultados de simulação.

Comparando os resultados (perfis radiais de fração de sólido, velocidade do sólido e velocidade do gás) obtidos com as simulações com valores experimentais (LUO (1987)), nota-se de forma geral que as predições apresentam um comportamento mais adequado perto das paredes e menos favorável no centro da coluna. Observa-se que os resultados obtidos na malha 1 apresentam em relação aos dados experimentais desvios menores para a velocidade do gás em toda a seção transversal da coluna e para a velocidade do sólido no centro da coluna. Para esta última variável, não se observa diferença no comportamento perto das paredes para as três malhas empregadas. No caso da fração volumétrica de sólido, as malhas 2 e 3 mostram um melhor comportamento em relação aos valores experimentais. Entretanto, em todos os casos o modelo superestima o valor médio temporal desta variável.

Figura 4.2. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo para a fase sólida 3,4 metros acima da entrada para os três tamanhos de malha mostrados na Figura 4.1. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].

Figura 4.3. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo para a fase gasosa 3,4 metros acima da entrada para os três tamanhos de malha mostrados na Figura 4.1. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].

Figura 4.4. Perfis radiais da fração volumétrica da fase sólida média no tempo 3,4 metros acima da entrada para os três tamanhos de malha mostrados na Figura 4.1. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].

Figura 4.5. Perfis radiais da velocidade mássica da fase sólida média no tempo 5,3 metros acima da entrada para os três tamanhos de malha mostrados na Figura 4.1. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].

A figura 4.5 mostra o comportamento radial médio no tempo da velocidade mássica do sólido. Os perfis apresentam características qualitativas e quantitativas semelhantes para as malhas estudadas quando são considerados os esquemas de discretização de forma separada. Mas também torna evidente uma diferença substancial para a velocidade mássica nos resultados de simulação quando se compara o esquema numérico de discretização Foup e Superbee. Os resultados de simulação sugerem que se necessita de mais tempo de simulação para estabelecer-se a velocidade mássica oscilante em torno do valor médio experimental de $24,9 \text{ kg/m}^2\text{s}$ na seção 5,3 metros acima da entrada do leito, obtido por LUO (1987), quando se utiliza um esquema de alta ordem.

Este fato é reforçado quando se analisa a figura 4.6, em que se mostra o sinal temporal médio na seção da velocidade mássica, 5,3 metros acima da entrada do leito. Nesta figura está claro que o padrão para o fluxo mássico nesta seção (oscilante em torno do valor médio experimental de $24,9 \text{ kg/m}^2\text{s}$) estabelece-se depois de decorridos mais de 70 segundos de simulação quando se emprega o esquema Superbee enquanto que para o esquema Foup não leva mais do que 25 segundos. Este fato é determinante para as diferenças observadas na figura 4.5, pois as médias foram tomadas no intervalo de tempo entre 20 e 100 segundos para os esquemas considerados.

Figura 4.6. Variação temporal média na seção da velocidade mássica do sólido a 5,3 metros acima da entrada do leito para a viscosidade do sólido linear, considerando-se a malha 3 e esquemas Foup e Superbee.

Ao se calcular o valor médio entre 20 e 150 segundos para a velocidade mássica do sólido considerando-se o esquema Superbee, pode-se observar que os resultados de simulação tornam-se melhores quando comparados com os dados experimentais, como mostra a figura 4.7.

Figura 4.7. Perfis radiais da velocidade mássica da fase sólida média no tempo 5,3 metros acima da entrada. Considera-se os esquemas Foup, com médias tomadas entre 20 e 100 s e Superbee com médias entre 20 e 100 s e entre 20 e 150 s. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].

A partir dos resultados apresentados nas figuras 4.5, 4.6 e 4.7 pode-se ver que o esquema de primeira ordem, Foup, superestimou os valores médios para a velocidade mássica do sólido. Os resultados obtidos com o esquema Superbee aparentam mais adequados com relação aos dados experimentais, além de capturar uma influência mais intensa da geometria do leito por meio do fluxo descendente na parede esquerda (valores negativos da velocidade mássica do sólido).

As diferenças apontadas nas figuras 4.5 a 4.7 sugerem que os resultados estariam sob considerável influência da difusão numérica típica dos esquemas de primeira ordem discutida no capítulo 3. Infelizmente uma afirmação taxativa não se torna possível com as simulações presentes, pois se necessitaria de simulações em malhas mais finas para se poder minimizar a influência da malha. Malhas mais finas reduzem a difusão numérica com qualquer esquema de interpolação. Contudo, variações mais significativas nos resultados devem ocorrer para esquemas interpolativos de primeira ordem.

A malha mais fina (malha 3) utilizada nas simulações presentes tem duas vezes mais células (2920 células) do que a malha mais grossa (malha 1 com 1460 células). Embora isto representa um certo grau de refinamento, a malha mais fina utilizada ainda é muito deficiente. As malhas utilizadas neste trabalho foram estimadas considerando as limitações computacionais (descritas na seção 4.1), e possivelmente estão distantes da precisão requerida para a independência de malha dos resultados preditos. Experimentos adicionais nesta linha são claramente necessários.

A partir deste ponto as análises serão feitas tomando-se por base os resultados de simulação obtidos com o emprego da malha 3, ou referir-se-ão às demais quando em contrário.

4.2.2 Análise comparativa entre duas correlações empíricas para a viscosidade do sólido

Nos resultados apresentados na seção anterior, utilizou-se uma correlação empírica para a viscosidade do sólido devida a Miller e Gidaspow (MILLER & GIDASPOW (1992)). Eles determinaram a viscosidade do sólido a partir de um balanço de quantidade de movimento da mistura, negligenciando os efeitos transientes e

assumindo que os gradientes de velocidade do gás e do sólido são de mesma ordem. Encontraram que a viscosidade do sólido pode ser aproximada pela concentração de sólido multiplicada por uma constante; $\mu_s = 0,5\alpha_s$. Mais recentemente HUILIN & GIDASPOW (2003) propuseram uma outra correlação para a viscosidade do sólido, parcialmente baseada na TCEG, e expressa na seguinte forma: $\mu_s = 0,165\alpha_s^{1/3}g_0$, onde g_0 é a função de distribuição radial de contato (Ver detalhes na tabela 4.1).

Os resultados que se seguem visam comparar o comportamento médio das variáveis analisadas no que tange às correlações empíricas para a viscosidade do sólido e à influência de alguns dos esquemas de discretização para os termos advectivos. A principal motivação para este estudo reside no fato que o modelo tradicional amplamente utilizado na literatura parece ser fortemente influenciado pelas relações de fechamento utilizadas (CABEZAS-GÓMEZ (2003), CABEZAS-GÓMEZ & MILIOLI (2003) e CABEZAS-GÓMEZ & MILIOLI (2005)), e a utilização de diferentes esquemas de discretização para os termos advectivos tornam mais evidentes estas diferenças, como se constata adiante.

As simulações foram realizadas fixando-se a malha 3 e variando-se apenas os esquemas de discretização. Novamente foram considerados 100 segundos de fluidização real e as médias temporais foram tomadas no intervalo entre 20 e 100 segundos.

Nos resultados apresentados para a velocidade de ambas as fases e para a fração volumétrica de sólido, figuras 4.8- 4.10, constata-se que não há diferenças significativas entre os resultados médios para o esquema Foup e, mesmo quando se empregam esquemas de alta ordem, neste caso Muscl e Superbee, a diferença quantitativa é pequena.

O comportamento qualitativo apresenta-se, de modo geral, adequado. A menos da influência da geometria, que se apresenta melhor no modelo que utiliza a correlação para a viscosidade do sólido parcialmente baseado na TCEG. Esta afirmação baseia-se no fato de que a coluna do leito deve apresentar um fluxo descendente de sólido com maior intensidade na parede esquerda em relação à direita, visto que possui uma única saída na lateral direita (ver figura 4.1). Este maior fluxo descendente de sólido na parede esquerda vai influenciar nos perfis de velocidade mássica e da fração de sólido, gerando perfis médios com um certo grau de distorção, conforme mostrado nas figuras 4.10 e 4.14.

Nas figuras 4.8 - 4.14 evidencia-se um fato de caráter numérico que surge quando se compara os resultados enfocando os esquemas de discretização dos termos advectivos utilizados (Foup, Muscl e Superbee). Os resultados parecem sofrer a influência da difusão numérica intrínseca aos esquemas. Este fato foi mencionado no capítulo 3, seção 3.4 quando se discute a discretização dos termos de convecção-difusão. Naquela seção concluiu-se, após uma análise dos esquemas, que os resultados de simulação numérica deveriam apresentar um certo grau decrescente de difusão numérica intrínseca aos esquemas de discretização quando da utilização dos seguintes esquemas: Foup, Minmod, Vanleer, Muscl e Superbee.

Figura 4.8. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo para a fase gasosa 3,4 metros acima da entrada para as duas correlações para a viscosidade do sólido considerada e esquemas Foup, Muscl e Superbee para os termos advectivos. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].

As figuras 4.8 e 4.9 mostram perfis de velocidades axiais mais achatados para o esquema Foup, possivelmente devido à difusão numérica mais intensa. As diferentes correlações para μ_s produziram maiores diferenças nos resultados para os esquemas de ordens superiores. Talvez isso se deva à difusão numérica ser mais significativa em relação à difusão física para o esquema de primeira ordem.

Figura 4.9. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo para a fase sólida 3,4 metros acima da entrada para as duas correlações para a viscosidade do sólido considerada e esquemas Foup, Muscl e Superbee para os termos advectivos. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].

Figura 4.10. Perfis radiais da fração volumétrica da fase sólida média no tempo 3,4 metros acima da entrada para as duas correlações para a viscosidade do sólido considerada e esquemas Foup, Muscl e Superbee para os termos advectivos. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].

Nas figuras 4.11 - 4.14 apresentam-se comparações adicionais com o intuito de observar a influência exercida pelos esquemas de discretização no comportamento médio do leito, quando consideradas separadamente as correlações para a viscosidade do sólido.

Segundo PEIRANO & LECKNER (1998), num sistema típico de produção de energia elétrica o perfil axial da concentração média de sólidos divide-se em três zonas. Na base da coluna (zona inferior) tem-se uma região de entrada de gases e sólidos com fração volumétrica média de sólidos constante entre 0,2 e 0,4. Logo acima se forma uma região densa – “splash zone” caracterizada por uma variação exponencial da concentração de sólidos com a altura ($\alpha_s < 0,2$). Acima da região densa forma-se a região de transporte (ou região de arrasto) que domina o escoamento em colunas circulantes, caracterizada por fração volumétrica média de sólidos entre 0,02 e 0,05. Essa região também apresenta uma variação exponencial da concentração média de sólidos, porém mais suave com relação à zona anterior.

Na figura 4.11 (a) e (b) observa-se que da base do leito até à sua metade, ocorre uma acentuada variação da fração volumétrica de sólido para todos os μ_s e todos os esquemas de interpolação. Em todos os casos, os resultados são coerentes com o comportamento experimental. Os esquemas de alta ordem (Superbee e Muscl) predizem maiores α_s em relação ao de primeira ordem. Acredita-se essa diferença deva-se à difusão numérica.

Figura 4.11. Perfis axiais da fração volumétrica da fase sólida média no tempo para: (a) correlação linear para a viscosidade do sólido e (b) correlação baseada na TCEG para a viscosidade do sólido. Considerando os esquemas Foup, Superbee e Muscl para os termos advectivos.

A figura 4.12 ilustra o comportamento da componente radial da velocidade do sólido, 3,4 metros acima da entrada do leito, e nela observa-se que apesar de apresentar valores absolutos baixos e de mesma ordem de grandeza, há uma diferença notável dos resultados obtidos entre os esquemas. A principal consequência induzida pelos resultados apresentados é a expectativa que o fluxo de sólido nas paredes deve ser maior para os esquemas de ordem elevada.

Este comportamento observa-se parcialmente na figura 4.13 em que se mostra uma comparação da velocidade mássica média no tempo na seção 5,3 metros acima da entrada do leito.

Figura 4.12. Perfis médios no tempo para a componente radial da velocidade para a fase sólida, 3,4 metros acima da entrada, considerando as duas correlações para a viscosidade do sólido e esquemas Foup e Superbee para os termos advectivos.

A figura 4.13 mostra que o esquema de interpolação dos termos advectivos afeta menos os resultados quando se aplica μ_s baseado na TCEG. Isso sugere que, nesse caso, a difusão numérica torna-se menos significativa diante da difusão física.

No final da seção 4.2.1 levantou-se a hipótese que o emprego do modelo tradicional com a correlação linear para o computo da viscosidade do sólido necessita de maior tempo de simulação real do leito para poder estabelecer o fluxo mássico oscilante em torno do valor médio experimental de $24,9 \text{ kg/m}^2\text{s}$ obtido por Luo (1987) (ver figuras 4.6 e 4.7).

O resultado mostrado na figura 4.14 contribui para esta evidência e, pode-se adicionar que a viscosidade numérica intrínseca aos esquemas de discretização atenua este fenômeno.

Figura 4.13. Perfis médios no tempo para a velocidade mássica para a fase sólida, 5,3 metros acima da entrada, considerando a correlação linear e a baseada na TCEG para a viscosidade do sólido e os esquemas Foup, Superbee e Muscl para os termos advectivos.

Figura 4.14. Variação temporal média na seção da velocidade mássica do sólido a 5,3 metros acima da entrada do leito para a correlação da viscosidade do sólido baseada na TCEG, considerando-se a malha 3 e esquemas Foup e Superbee.

Na tabela 4.5, apresenta-se o custo computacional, considerando o tempo de processamento, para as duas correlações empíricas da viscosidade do sólido. A razão tempo de processamento é tomada a partir do quociente entre o tempo de processamento para a viscosidade linear e a parcialmente baseada na TCEG, isto é:

$$R_{tmp} = \frac{t_{\mu_s=0,5\alpha_s}}{t_{\mu_s=0,165\alpha_s^{1/3}g_0}}.$$

Na tabela 4.5, nota-se que o modelo que utiliza a viscosidade linear apresenta um menor custo computacional para os esquemas Foup e Superbee. Este comportamento era esperado devido ao número de operações necessárias para o comuto de μ_s com o modelo baseado na TCEG em relação ao modelo de μ_s linear. Com o esquema Muscl inverteu-se o desempenho. Este comportamento pode ser atribuído ao maior grau de difusão numérica intrínseca a este método em relação ao Superbee o que poderia ter influenciado na estabilidade do sistema de equações lineares originada pelo processo de discretização das variáveis, necessitando assim de maior número de iterações para sua solução e conseqüentemente maior tempo de processamento.

Tabela 4.5: Análise de custo para o tempo de processamento em relação às correlações empíricas para a viscosidade do sólido

Esquemas	Foup	Muscl	Superbee
Razão tempo de processamento	0,855783563	1,036663259	0,9522673

Pode-se concluir com base nos resultados apresentados nas seções 4.2.1 e 4.2.2 que a correlação para a viscosidade do sólido dada por: $\mu_s = 0,165\alpha_s^{1/3}g_0$ com

$$g_0 = \left[1 - \left(\alpha_s / \alpha_{s\max} \right)^{1/3} \right]^{-1}$$

apresentou resultados mais consistentes em relação à

correlação dada pela relação: $\mu_s = 0,5\alpha_s$. Estas diferenças foram evidenciadas quando se empregaram esquemas de discretização de segunda ordem de precisão para ambas as correlações e comparando com os resultados experimentais. Adiciona-se a isto que a difusão numérica presente em maior grau no esquema Foup “suavizou” a solução de tal forma que ambas as correlações proporcionaram resultados qualitativamente e

quantitativamente iguais. As diferenças foram notadas em um grau crescente quando se utilizou o esquema Muscl e Superbee, culminando na necessidade de um maior tempo de simulação para o estabelecimento do fluxo mássico oscilante em torno do valor médio experimental obtido por Luo (1987) para o modelo de viscosidade linear com o esquema Superbee. Este procedimento não se torna necessário quando se emprega a correlação baseada na TCEG.

4.2.3 Resultados de simulação considerando a formulação tradicional e a baseada na TCEG

Nesta seção procede-se à análise da influência nos resultados de simulação quando se considera o modelo tradicional e TCEG para o cálculo da viscosidade e da pressão do sólido.

Ressalta-se que no modelo tradicional as análises são feitas considerando-se a correlação para a viscosidade do sólido dada por $\mu_s = 0,165 \alpha_s^{1/3} g_0$ (HUILIN & GIDASPOW (2003)) e o termo do gradiente da pressão do sólido presente na equação de variação de quantidade de movimento para a fase sólida é modelado segundo a correlação dada na tabela 4.1. A escolha por este modelo para μ_s deve-se aos melhores resultados obtidos em relação à correlação linear para a viscosidade do sólido. (ver seção 4.2.2)

Nas simulações com a TCEG considera-se a formulação algébrica e o modelo de uma equação para a temperatura granular, θ [m^2/s^2] que passa a ser denominada de TCEG_edp. Nas simulações com a TCEG algébrica o cálculo da pressão do sólido foi realizado por meio da TCEG algébrica propriamente dita, descrita na tabela 4.2 e que passa a ser denominada de TCEG_def e com o auxílio de uma correlação empírica tomada do procedimento tradicional, descrita na tabela 4.3 e denominada de TCEG_mod. Os dois coeficientes de viscosidade (μ_s, λ_s) são calculados pelas relações da TCEG algébrica.

Desta forma o procedimento geral da TCEG algébrica considera o uso de dois modelos matemáticos diferentes. Embora o segundo modelo seja “ad-hoc”, o mesmo tem-se mostrado bastante efetivo na obtenção de resultados mais representativos com

respeito aos dados experimentais em relação a TCEG algébrica originalmente implementada e disponível no código MFIX.

As análises foram feitas considerando-se o esquema numérico Superbee para a discretização dos termos advectivos, a malha 3 e condições iniciais e de contorno explicitadas na figura 4.1.

4.2.3.1 Comparação dos resultados de simulação obtidos pelo procedimento tradicional e a TCEG algébrica

Primeiramente considera-se o modelo tradicional e as duas versões para a Tceg na sua formulação algébrica.

Considerando os resultados de simulação obtidos com a TCEG_def. As figuras 4.15 - 4.17 fornecem perfis médios distorcidos para as quantidades observadas. No caso da fração de sólido usando a TCEG_def (figura 4.15) ocorre uma superestimativa da variável com valores completamente fora da faixa de operação do leito. Os perfis de velocidade do sólido e do gás (figuras 4.16 e 4.17) apresentam elevadas distorções caracterizando em termos médios um escoamento ascendente na parede direita e um descendente na parede esquerda do leito.

Figura 4.15. Perfis radiais da fração volumétrica da fase sólida média no tempo 3,4 metros acima da entrada considerando os modelos tradicional, TCEG_def e TCEG_mod.

Figura 4.16. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo da fase sólida 3,4 metros acima da entrada considerando os modelos tradicional, TCEG_def e TCEG_mod.

Figura 4.17. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo da fase gasosa 3,4 metros acima da entrada considerando os modelos tradicional, TCEG_def e TCEG_mod.

Figura 4.18. Perfis médios no tempo para a velocidade mássica para a fase sólida, 5,3 metros acima da entrada, considerando os modelos tradicional, TCEG_def e TCEG_mod.

Como consequência dos resultados apresentados acima conclui-se que os resultados de simulação obtidos a partir da TCEG_def são inconsistentes e não são representativos da hidrodinâmica do escoamento gás-sólido na coluna ascendente do leito fluidizado circulante, objeto deste estudo (LUO - 1987).

Sobre esta conclusão vale a seguinte consideração: ao invés de resolver a equação completa para o balanço da energia pseudo-térmica (i.e. da temperatura granular) das flutuações da velocidade das partículas (item 3 da tabela 4.4), uma expressão algébrica foi proposta por Syamlal *et al.* (1993). Esta aproximação assume que a energia granular é dissipada localmente, negligenciando os efeitos de convecção e difusão e admitindo somente os termos de geração e de dissipação de energia granular.

Esta aproximação é válida somente sob a hipótese que a fração volumétrica da fase sólida mantenha-se elevada e a velocidade do sólido mantenha-se relativamente baixa (van Wachem – 2000). Este regime é típico de um LFB onde a maior parte da energia granular é dissipada localmente. A estas simplificações do modelo adiciona-se o cálculo da pressão da fase sólida, que neste caso é considerada apenas o efeito devido à colisão das partículas desprezando-se o efeito cinético, que é predominante na hidrodinâmica de um LFC.

Na tentativa de manter a característica de baixo custo computacional obtido com o modelo da TCEG_def e considerar o efeito cinético na contabilização da pressão do sólido realizou-se testes de simulação com o modelo TCEG_mod, que basicamente é o modelo TCEG_def com a consideração de uma correlação empírica oriunda do modelo tradicional (ver tabela 4.3) para a contabilização do gradiente da pressão do sólido presente na equação de balanço de quantidade de movimento para a fase sólida.

Nas figuras 4.15 – 4.18 pode-se avaliar o desempenho deste modelo.

O perfil de fração volumétrica de sólido (figura 4.15) apresenta-se qualitativamente adequado, observando-se uma boa concordância com os dados experimentais. As maiores diferenças quantitativas entre os resultados de simulação e os obtidos pelo experimento (LUO (1987)) são detectados na região mais próxima à parede, muito embora estas diferenças também são observadas no modelo tradicional e provavelmente deve-se à condição de contorno empregada nestas simulações (figura 4.1).

Nas figuras 4.16 e 4.17 apresentam-se os perfis radiais médios no tempo da velocidade axial para as fases sólida e gasosa respectivamente. Neste caso pode-se observar uma menor diferença quantitativa em relação aos dados experimentais do que os obtidos pelo modelo tradicional, principalmente na região central do leito.

Em relação aos dados médios, a única deficiência em relação aos modelos (tradicional e TCEG_def) comparados é o baixo fluxo mássico na seção 5,3 metros acima da entrada do leito para a simulação com a TCEG_mod, de acordo com a figura 4.18.

De maneira geral os resultados de simulação para o LFC com dados de LUO (1987) obtidos com o modelo “ad-hoc” TCEG_mod mostram-se claramente superiores aos obtidos com a TCEG_def, não apresentando perfis distorcidos e irreais, e além disso apresenta resultados mais representativos (quantitativamente) em termos médios aos obtidos com o modelo tradicional (discutido nas seções 4.2.1 e 4.2.2).

A grande vantagem deste modelo reside no fato de utilizar a formulação algébrica para a TCEG na predição do escoamento gás-sólido em uma coluna ascendente de um LFC, sendo possível uma variedade de testes com as mais diversas correlações para as leis constitutivas da TCEG disponíveis na literatura, conforme discutido no capítulo 2, com a expectativa de um baixo custo computacional.

Evidentemente novas investigações neste modelo “ad-hoc” são necessárias, principalmente testes em outras instalações para verificar a sua eficiência na predição do escoamento gás-sólido em um LFC, onde o modelo da TCEG algébrica é reconhecidamente falho.

4.2.3.2 Comparação dos resultados de simulação obtidos pela TCEG algébrica e TCEG com o modelo de uma equação para o compute da temperatura granular

Na seção anterior constatou-se a deficiência da TCEG na sua formulação algébrica quando utilizada na predição da hidrodinâmica do escoamento gás-sólido em um LFC. A principal razão para esta deficiência reside na consideração de uma expressão algébrica para o compute da temperatura granular (Syamlal *et al.* (1993)) ao invés de resolver a equação completa para o balanço da energia pseudo-térmica (i.e. da temperatura granular) das flutuações da velocidade das partículas.

Nas figuras 4.19 – 4.22 encontram-se resultados de simulação comparativos para os modelos que utilizam a TCEG_edp, TCEG_mod e dados experimentais.

Na figura 4.19 mostra-se o comportamento da fração volumétrica de sólido. Como visto anteriormente os resultados de simulação para TCEG_mod estão qualitativamente corretos e apresentam os maiores desvios na região próxima à parede em relação aos dados experimentais. Quando se considera a TCEG_edp os resultados também apresentam-se mais adequados na região próxima à parede.

O ganho na qualidade dos resultados é melhor observado nas figuras 4.21 e 4.22, em que se mostra os perfis de velocidade da fase gasosa e velocidade mássica para a fase sólida, respectivamente. Há uma concordância tanto na região central como próximo à parede do leito.

Somente na figura 4.20, em que se mostra o perfil para a velocidade da fase sólida, é que se evidencia uma distorção para o modelo da TCEG_edp na região central do leito em comparação aos dados experimentais e aos obtidos com a TCEG_mod. Na região próxima à parede os resultados são superiores aos obtidos pela TCEG_mod e muito próximos dos dados experimentais.

Figura 4.19. Perfis radiais da fração volumétrica da fase sólida média no tempo 3,4 metros acima da entrada considerando os modelos TCEG_mod e TCEG_edp.

Figura 4.20. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo da fase sólida 3,4 metros acima da entrada considerando os modelos TCEG_mod e TCEG_edp.

Figura 4.21. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo da fase gasosa 3,4 metros acima da entrada considerando os modelos TCEG_mod e TCEG_edp.

Figura 4.22. Perfis médios no tempo para a velocidade mássica para a fase sólida, 5,3 metros acima da entrada, considerando os modelos TCEG_mod e TCEG_edp.

Nos resultados aqui apresentados evidencia-se a superioridade do modelo baseado na TCEG na sua forma mais elaborada, isto é, utilizando o modelo de uma equação. O maior problema enfrentado neste estudo é o não conhecimento da temperatura granular no contorno do domínio computacional para este leito (LUO (1987)). Este é um parâmetro fundamental para a utilização deste modelo, pois envolve a resolução de uma EDP para o computo de θ [m^2/s^2] e assim sendo necessita dos seus valores iniciais e de contorno para o domínio estudado.

O produto deste estudo é resultado de experimentos numéricos realizados para várias condições iniciais e de contorno para θ dentre outros parâmetros. Logo os resultados estão sob forte influência do empiricismo computacional empregado.

4.2.4 Metodologia de identificação e caracterização de estruturas coerentes – “clusters”

4.2.4.1 – Introdução

O escoamento em LFCs é caracterizado pela formação de “clusters”, isto é agregados com alta concentração de particulado em comparação à concentração de sólido média na coluna. Estes grupos de partículas se movimentam como um conjunto, apresentando apenas pequenos movimentos relativos (HELLAND *et al.*, 2002). Recentemente HARRIS *et al.* (2002) observaram que talvez a questão mais importante para os pesquisadores envolvidos em investigações em LFC é adotar um método consistente e eficiente para descrever e definir coleções de partículas em “risers” verticais. Notaram que a literatura apresenta numerosas descrições para os grupos de partículas observados. Termos tais como “streamers”, “stands”, “ribbons”, “dense packets”, “swarms”, “sheets” e “clusters” tem sido utilizados para descrever agregados de partículas. Zethraeus & Ljungdahl apud HARRIS *et al.* (2002) definem “clusters” como um conjunto de partículas tão juntas que sua troca de quantidade de movimento faz com que as mesmas se movimentem com uma velocidade de deslizamento global semelhante. De acordo com HORIO & CLIFT (1992), aglomerados são partículas

mantidas juntas devido as forças inter-partículas, enquanto “clusters” são grupos de partículas mantidas juntas como resultado de efeitos hidrodinâmicos.

Outro aspecto importante que pode ajudar a definir as coleções de partículas ou “clusters” está relacionado a sua forma geométrica. HORIO & KUROKI (1994) desenvolveram um estudo de visualização tridimensional do escoamento em LFC utilizando a técnica de lâmina laser – “Laser sheet technique”. Dos seus estudos observaram que os “clusters” são estruturas com forma de parabolóide na parte inferior, com uma esteira de gás na parte superior. DAVIDSON (2000) afirma que os “clusters” são grupos de partículas em forma de laminas verticais com uma razão largura/altura pequena (<1), e que mantém a sua coerência durante uma distância de queda considerável. BUSSING & REH (2001) indicaram que os “clusters” são agregados não esféricos com uma razão comprimento/diâmetro de até 10, em contraposição ao descrito nos trabalhos do grupo de Horio (HORIO & KUROKI, 1994; TSUKADA *et al.*, 1997; entre outros). Em relação a essa discrepância, LACKERMEIER *et al.* (2001) notaram que a técnica “Laser” utilizada por Horio e colaboradores possibilita obter imagens externas do escoamento o que restringe à consideração de frações volumétricas de sólido muito baixas (G_s entre 0,01 e 0,05 Kg/(m²s)). Por esse motivo utilizaram a mesma técnica, porém com filmagem interna do escoamento. Isto possibilitou o estudo de escoamentos considerando valores de G_s característicos de LFC. A forma geométrica dos “clusters” detectados assemelhou-se mais à descrita por DAVIDSON (2000).

A descrição mais completa de coleções de partículas observadas em “risers” verticais foi desenvolvida por BI *et al.* apud HARRIS *et al.* (2002). Sua classificação, apresentada na Tabela 4.6, foi realizada por meio de observações experimentais num LFC bidimensional, e por meio de análises de resultados de literatura.

Da tabela 4.6 pode-se notar a grande variedade de formas e estruturas diferentes assumidas pelas coleções de partículas em “risers” verticais de LFC. HARRIS *et al.* (2002) consideraram apenas a região do “riser” próxima à parede, recomendaram o uso da palavra genérica “clusters” para todas as coleções de partículas. Eles mesmos identificaram os “clusters” como coleções de partículas com uma densidade média significativamente maior que aquela das regiões dispersas da vizinhança. Esta é uma definição que permite utilizar muitos dados experimentais publicados na literatura.

Tabela 4.6. Tipos de agrupamentos de partículas “particle clustering” observados em “risers” de LFCs (BI *et al.* apud HARRIS *et al.*, 2002).

Tipo	Região	Característica
“Clusters”	Pistão central e região anular	Grupos de partículas congregadas no “riser” para minimizar o arrasto efetivo em cada grupo. Várias formas geométricas descritas.
“Streamers/stands”	Pistão central	Bandas densas de partículas de tamanho maior que os clusters observados no “riser”.
“Swarms”	Parede	Conjuntos de partículas relativamente densas na parede do “riser”, principalmente observadas sob condições de escoamento diluído.
“Sheets”	Região anular	Camadas bidimensionais de partículas densas caindo próximo as paredes do “riser”.

Em adição a estas definições qualitativas propostas por Bi *et al.*, outros pesquisadores têm proposto definições para “clusters” com base nas técnicas experimentais usadas para detectá-los. Segundo HARRIS *et al.* (2002), o critério mais abrangente é aquele desenvolvido por SOONG *et al.* (1993, 1995) apud HARRIS *et al.* (2002) e publicado posteriormente em TUZLA *et al.* (1998) e SHARMA *et al.* (2000). Os autores propuseram um critério com base em técnica de medição usando uma sonda capacitiva intrusiva. Esta metodologia é utilizada no presente trabalho.

LINTS & GLICKSMAN (1993) apud HARRIS *et al.* (2002) desenvolveram definição similar com base na sua técnica de medição com sonda de impacto de partícula. Todos estes procedimentos definem os “clusters” considerando um critério limite. Quando a concentração local de sólido é maior que um dado valor específico (critério limite), assume-se que o “cluster” existe. JOHNSSON & JOHNSSON (2001) observaram que a definição do limite para ocorrência de “clusters” afeta as suas propriedades medidas. RUDNICK & WERTHER (1993) apud HARRIS *et al.* (2002) usaram o modelo das duas fases separadas para definir o limite de existência de “cluster” na tentativa de eliminar esta influência (HARRIS *et al.*, 2002).

TSUO & GIDASPOW (1990) também utilizaram o modelo das duas fases separadas para estudar a formação de “clusters”. Apresentaram descrição de várias características dos “clusters” (densidade, tamanho e padrão de escoamento), e discussão

sobre o efeito de vários parâmetros no processo de formação dos “clusters”. Os parâmetros considerados foram: a velocidade do gás de entrada, a velocidade mássica do sólido, o tamanho de partícula, o diâmetro do tubo (“riser”), a altura do tubo e a fração de partículas finas. Mostraram que a diminuição de G_s e do tamanho de partícula, e o aumento da velocidade do gás de entrada, da fração de partículas finas e do diâmetro do tubo produziram diminuição da população de “clusters” no tubo ascendente.

Trabalhos semelhantes foram desenvolvidos usando a formulação euleriana-lagrangeana (HOOMANS *et al.*, 1998; OUYANG & LI, 1999; HELLAND *et al.*, 2000, 2002; entre outros).

Nesta seção aplica-se a metodologia proposta por SHARMA *et al.* (2000) para a caracterização dos “clusters” utilizando resultados de simulação. No trabalho de SHARMA *et al.* (2000) são propostos três critérios para a identificação e definição dos “clusters”, com base nos critérios propostos por SOONG *et al.* (1993) apud SHARMA *et al.* (2000). Além disso, são descritas quatro características básicas dos “clusters” que permitem quantificar a influência de alguns parâmetros do escoamento. SHARMA *et al.* (2000) determinaram essas a partir de medições da fração de sólido local instantânea com sonda capacitiva num LFC de 15 cm de diâmetro. Foi investigado o efeito que o tamanho de partícula e a velocidade superficial do gás tem sobre os “clusters”. Apesar da metodologia ter sido originalmente aplicada a resultados experimentais (SOONG *et al.*, 1993 e SHARMA *et al.*, 2000), foi também aplicada por HELLAND *et al.* (2002) utilizando resultados de simulação numérica.

Esta seção foi baseada em CABEZAS-GÓMEZ (2003).

4.2.4.2 Identificação e caracterização dos “clusters”

SOONG *et al.* (1993) apud SHARMA *et al.* (2000) basearam-se nas seguintes diretrizes para definir os “clusters”:

- A concentração de sólido no “cluster” deve ser significativamente maior que a concentração de sólido local média no tempo para as condições de operação dadas.

- A perturbação na concentração de sólido devida aos “clusters” deve ser maior que as flutuações aleatórias de fundo da fração de sólido.
- Esta perturbação da concentração deve ser medida num volume de amostragem com um comprimento de escala característico uma ou duas ordens de grandeza maior que o diâmetro de partícula.

Considerando estas diretrizes Soong *et al.* propuseram o seguinte critério: a fração volumétrica de sólido local instantânea para o “cluster” deve ser maior que a sua média temporal em pelo menos duas vezes o desvio padrão (critério 2σ). Desta maneira os “clusters” podem ser identificados, e considerados como tal, se a concentração instantânea de sólido excede este limite. Este critério foi utilizado por TUZLA *et al.* (1998) para detectar “clusters” num leito fluidizado tipo “downer”.

SHARMA *et al.* (2000) modificaram ligeiramente o critério com base em evidências visuais. Em adição aos desenvolvimentos de Soong *et al.*, Sharma *et al.* propuseram os seguintes critérios de vida do “cluster”:

- O “cluster” é detectado quando a concentração instantânea de sólido é maior que o valor médio no tempo mais duas vezes o desvio padrão (critério 2σ).
- O momento inicial de vida do “cluster” corresponde ao último valor temporal para o qual a sua densidade excede a densidade média, antes de satisfazer ao critério 2σ .
- O momento final de vida do “cluster” corresponde ao primeiro valor temporal para o qual a sua densidade é menor que a concentração média no tempo, depois de ter satisfeito ao critério 2σ .

A proposição de SHARMA *et al.* (2000), denominada critério médio de referência, implica num tempo de duração do “cluster” maior que aquele obtido com o critério 2σ de SOONG *et al.*

Figura 4.23. Variação temporal da fração volumétrica de sólido local típica resultante de simulação e aplicação da proposição de SHARMA *et al* (2000) para quantificação do tempo de vida de um cluster.

O procedimento proposto por SHARMA *et al.*(2000) adotado neste trabalho é ilustrado na figura 4.23. A figura 4.23a ilustra um sinal temporal da fração volumétrica de sólido local típico resultante de simulação numérica. São indicados a concentração de sólido média no tempo $\bar{\alpha}_s$ e o limiar $\bar{\alpha}_s + 2\sigma$. Na figura 4.23b apresenta-se uma ampliação deste sinal entre 80 e 85 segundos, em que se observa a existência de um “cluster” no intervalo T_a e T_b .

Uma vez que os “clusters” são identificados pelo critério médio de referência, as quatro características básicas dos “clusters” podem ser calculadas, isto é, o tempo médio de duração, a frequência de ocorrência, a fração temporal de existência e a concentração média de sólidos. As seguintes definições são utilizadas:

- Tempo médio de duração (τ_c): Define-se como o tempo médio de duração de todos os “clusters” no volume de amostragem (no caso de SHARMA *et al.*(2000), onde resultados experimentais são usados, trata-se do volume de abrangência da sonda capacitiva utilizada; quando resultados de simulação são usados, trata-se do volume de uma célula computacional). Considerando τ_i como o tempo de duração do “cluster”

i , τ_c resulta:

$$\tau_c = \frac{\sum_{i=1}^n \tau_i}{n} \quad (4.1)$$

onde n é o número total de “clusters” detectado no período de observação considerado.

- Frequência de ocorrência (N_c): Frequência na qual os “clusters” são observados no volume de amostragem calculada como o número médio de “clusters” por segundo observados no tempo total de observação.
- Fração temporal de existência (F_c): fração do tempo total (τ) correspondente à existência de “clusters” no volume de amostragem.

$$F_c = \frac{\sum_{i=1}^n \tau_i}{\tau} \quad (4.2)$$

- Concentração média de sólidos (α_{sc}): Soma das frações médias de sólido no tempo para cada “cluster” sobre o número de “clusters” (n) detectados no tempo de observação, isto é,

$$\alpha_{sc} = \frac{\sum_{i=1}^n \bar{\alpha}_{s,i}}{n} \quad (4.3)$$

Em adição, são determinados valores médios dos parâmetros acima na seção transversal do tubo ascendente, isto é,

$$\langle f \rangle = \frac{1}{2R} \int_0^{2R} f(x) dx \quad (4.4)$$

onde x é a coordenada na direção horizontal e $2R$ é o comprimento da seção transversal do tubo ascendente (duas vezes o raio do leito).

Esta seção foi baseada em CABEZAS-GÓMEZ (2003).

4.2.4.3 Análise das características dos “clusters” a partir dos resultados de simulação numérica

4.2.4.3.1 Influência da malha computacional empregada considerando o modelo tradicional

Os resultados a seguir foram obtidos com o modelo tradicional utilizando a correlação linear para o computo da viscosidade do sólido. Os resultados foram tomados entre 20 e 100 segundos de simulação.

Nas figuras 4.24 a 4.26 ilustra-se a influência das malhas computacionais empregadas no computo das propriedades de clusters expostas na seção anterior, neste caso, fração de sólido média do “cluster”, tempo de duração médio do “cluster” e número de “clusters” observados em função da altura do leito.

Nelas se evidencia claramente a influência exercida pela malha computacional nos resultados de simulação, sendo que o tempo de duração médio do “cluster” (figura 4.25) e o número de “clusters” observados ao longo da coluna (figura 4.26) apresentam os maiores desvios na malha 1 quando comparados com a malha 2 e 3 independentemente do esquema de discretização para o termo advectivo empregado.

Figura 4.24. Perfis axiais da concentração média de sólido nos “clusters”, α_{sc} em função da altura do leito, considerando três malhas computacionais e os esquemas advectivos FOUP e Superbee.

Figura 4.25. Perfis axiais do tempo de duração dos “clusters”, τ_c , em função da altura do leito, considerando as três malhas computacionais e os esquemas advectivos FOUP e Superbee.

Figura 4.26. Número de “clusters” observados em função da altura do leito, considerando as três malhas computacionais e os esquemas advectivos FOUP e Superbee.

Os resultados mostrados nas figuras 4.24 a 4.26 evidenciam que o tamanho da malha continuará influenciando os resultados de quantificação e caracterização de “clusters” segundo a metodologia empregada. Ao refinar a malha reduz-se o volume de observação, com impacto evidente nos parâmetros de caracterização de clusters. Então, as diferenças encontradas para diferentes malhas devem-se a resultados com diferentes precisões, e a volumes de observação diferentes.

4.2.4.3.2 Influência do esquema de discretização para o termo advectivo e do modelo físico empregado na quantificação das características dos “clusters”

Para as análises realizadas nesta seção se emprega a malha 3 e os esquemas Foup e “Superbee” e comparam-se os resultados de simulação (100s de fluidização real) obtidos a partir do modelo tradicional, TCEG algébrica modificada e TCEG modelo de uma equação a temperatura granular. Usa-se a mesma nomenclatura utilizada na seção 4.2.3 para representar os resultados obtidos com as diferentes formulações da TCEG isto é, TCEG_mod e TCEG_edp respectivamente. Deve-se observar que não se realizaram análises a partir dos resultados de simulação obtidos com a TCEG algébrica default (TCEG_def) pois, como visto na seção anterior os mesmos apresentaram-se inconsistentes.

Nas figuras 4.29, 4.30 e 4.31 apresentam-se comparações entre as propriedades de “clusters” obtidas a partir de resultados de simulação com os esquemas Foup e “Superbee” e os modelos físicos considerados em três seções distintas do leito. Estas seções caracterizam regiões que variam da densa à dispersa de acordo com a figura 4.27. Deve-se observar que apesar do critério médio de referência detectar “clusters” na região inferior do leito, esta não foi considerada para fins de análise das propriedades de “clusters”, pois a mesma é uma região caracterizada pela alta concentração de sólido sendo que seu desempenho assemelha-se ao de um leito borbulhante (JOHNSSON *et al.*, 2000) e assim os “clusters” podem não existir de fato. Para maiores detalhes consultar CABEZAS-GÓMEZ (2003).

Figura 4.27. Fração volumétrica de sólido média na seção em função da altura do leito para os modelos considerados e esquemas Foup e Superbee.

Ao se observar as regiões mais densa e mais dispersa do leito na figura 4.27 constata-se a existência de uma diferença quantitativa no computo da fração volumétrica de sólido pelos diferentes esquemas de discretização e modelos físicos considerados. Esta diferença influencia o computo das propriedades de “clusters” como pode ser observado nas figuras 4.29 e 4.31.

Tanto na região mais densa representada pela figura 4.29 como na região mais dispersa representada na figura 4.31 observa-se diferenças significativas para a frequência média de ocorrência de “clusters”, $\langle N_c \rangle$ e para a fração de tempo de existência média dos “clusters”, $\langle F_c \rangle$ quando considerado o modelo da TCEG_edp em relação aos demais. Para estas propriedades evidencia-se uma inversão na ordem dos valores, isto é, na região mais densa tanto $\langle N_c \rangle$ como $\langle F_c \rangle$ computados a partir dos resultados de simulação obtidos com a TCEG_edp apresentam valores menores em comparação aos demais enquanto que na região mais dispersa ocorre o contrário, concordando com o comportamento quantitativo da fração volumétrica média de sólido nestas regiões e representadas na figura 4.27. Para o tempo de duração médio $\langle \tau_c \rangle$ e

para a fração de sólido médio $\langle \alpha_{sc} \rangle$ dos “clusters” as maiores diferenças encontram-se nas regiões próximas à parede.

Ao considerar-se os esquemas de discretização para os termos advectivos a região dispersa é a que fornece os dados mais interessantes. A Figura 4.27 evidencia que independentemente do modelo utilizado os resultados de simulação com o esquema “Superbee” caracterizam a partir dos 4,75 metros acima da entrada do leito uma região mais dispersa do que a obtida quando se utiliza o esquema Foup. E mesmo assim os “clusters” observados nesta região apresentam maior concentração de sólido e conseqüentemente menor tempo de duração, evidenciando assim que as flutuações da fração volumétrica da fase sólida (α_s) são mais intensas e melhor capturadas com o esquema de alta ordem. Este fenômeno evidencia o alto grau de viscosidade numérica presente no esquema Foup acarretando assim a suavização do gradiente de α_s , como mostrado na figura 4.28.

Este deve ser um dos aspectos a serem considerados quando se objetiva investigar a influência da difusão numérica nos resultados de simulação de um leito fluidizado circulante.

Figura 4.28. Variação temporal da fração volumétrica de sólido a 5,5 m da entrada do leito obtida a partir de resultado de simulação com o modelo TCEG_edp.

Seção 3,5 metros

Figura 4.29. Propriedades de “clusters” médias na seção 3,5 metros acima da entrada do leito obtidas com os modelos tradicional, Tceg_mod e Tceg_edp.

Seção 4,5 metros

Figura 4.30. Propriedades de “clusters” médias na seção 4,5 metros acima da entrada do leito obtidas com os modelos tradicional, Tceg_mod e Tceg_edp.

Seção 5,5 metros

Figura 4.31. Propriedades de “clusters” médias na seção 5,5 metros acima da entrada do leito obtidas com os modelos tradicional, Tceg_mod e Tceg_edp.

Na região intermediária representada na figura 4.30 as propriedades calculadas a partir dos resultados de simulação com os diferentes modelos não apresentam diferenças significativas com exceção de $\langle \tau_c \rangle$ e de $\langle \alpha_{sc} \rangle$ nas regiões próximas às paredes do leito.

Constata-se na região dispersa (figura 4.31) que todos os modelos capturaram a influência da geometria do leito (saída lateral à direita), apresentando “clusters” com maior densidade e maior tempo de duração na parede esquerda, região caracterizada por recirculação e acúmulo de sólido.

Com base nas figuras 4.29 a 4.31 e nas definições das propriedades de “clusters” (eqs. 4.1 – 4.3) pode-se estabelecer as seguintes relações quando se considera a ordem do esquema de discretização para os termos advectivos:

- i) Os esquemas de alta ordem proporcionam a captura de “clusters” com maior densidade e com menor tempo de duração ao longo da coluna;
- ii) Por apresentarem menor tempo de duração, os “clusters” capturados quando se emprega esquemas de alta ordem apresentam uma menor frequência de tempo de existência, $\langle F_c \rangle$, em relação aos capturados quando utiliza-se o esquema de primeira ordem;
- iii) A frequência de ocorrência de “clusters”, $\langle N_c \rangle$, parece estar relacionada com a concentração da fração volumétrica de sólido, α_s , na região observada. E dessa forma apresenta valores maiores na região densa e intermediária com os diferentes modelos para os resultados obtidos com o esquema de alta ordem e na região dispersa os maiores valores são os obtidos com o esquema de primeira ordem “Foup”, conforme mostrado na figura 4.32.
- iv) Uma consequência imediata da situação apresentada no item iii) é que o número de “clusters” observados ao longo da coluna apresenta o mesmo comportamento, como pode ser evidenciado na figura 4.33.

As relações iii) e iv) são afirmações baseadas nos resultados de simulação obtidos, sendo necessária uma investigação mais cuidadosa, principalmente sobre a influência do refino de malha nos resultados bidimensionais aqui apresentados.

Figura 4.32. Frequência de ocorrência média de “clusters” ao longo da coluna com os diferentes modelos e esquemas “Foup” e “Superbee”.

Figura 4.33. Número de “clusters” observados ao longo da coluna com os diferentes modelos e esquemas “Foup” e “Superbee”.

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

5.1 – Comentários finais

Da apreciação teórica apresentada no segundo capítulo pode-se inferir a complexidade envolvida na realização deste trabalho, apesar das simplificações adotadas nos modelos analisados, sendo a mais significativa, desde o ponto de vista hidrodinâmico, a consideração de apenas uma fase sólida caracterizada por um diâmetro médio de particulado d_p . Os estudos experimentais e teóricos desenvolvidos em leitos circulantes mostram que no tubo ascendente existe segregação de particulado em função da diferença de tamanho das partículas MATHIESEN *et al.* (1999). A não consideração dos efeitos turbulentos na fase gasosa é outra grande simplificação dos modelos apresentados no capítulo 2.

Dos estudos desenvolvidos com o código MFIX, observou-se à influência da difusão numérica, presente no esquema de discretização de primeira ordem, sobre o desempenho das propriedades médias do leito (fração de sólido, velocidade axial da fase sólida/gás, velocidade mássica da fase sólida). Esta influência se fez presente independentemente do modelo físico empregado (modelo tradicional / TCEG).

No estudo teórico realizado no capítulo 3, constatou-se que uma alternativa ao emprego do esquema de primeira ordem para o termo advectivo seria a utilização dos esquemas TVD, que fornecem resultados com ordem de precisão elevada (maior do que 1) e com redução das oscilações numéricas espúrias, comuns quando se utilizam esquemas de alta ordem. Nessa linha de pesquisa realizaram-se simulações com os esquemas Van Leer, Muscl, MinMod e Superbee. E pode-se inferir que na instalação simulada LUO, (1987), os resultados médios apresentam-se qualitativamente superiores.

Outra consideração importante e talvez mais fundamental é devido à natureza instável e transiente que caracteriza o escoamento bifásico gás-sólido. Nestas condições, a precisão da discretização da derivada temporal na equação de transporte 3.1, também deve ser determinante no processo de obtenção da solução numérica. Nas simulações realizadas e apresentadas no capítulo 4, utilizou-se o esquema de Euler implícito para a

derivada temporal (esquema padrão no MFIX), este esquema é de primeira ordem, isto é, seu erro de truncamento local – ETL – é $O(\Delta t)$. É importante deixar claro que a discretização de primeira ordem, não é a única forma de aproximação para a derivada temporal. Na realidade, o uso do método de Euler deve ser evitado em problemas transientes, em virtude do seu ETL ser apenas de $O(\Delta t)$ FORTUNA (2000), como mencionado acima. Quando estudamos fenômenos transientes, métodos de $O(\Delta t)^2$ são recomendados. O método de Crank-Nicolson é muito utilizado exatamente por ser de $O(\Delta t)^2$ FORTUNA (2000).

Neste contexto, surgem duas questões a serem esclarecidas; a primeira reside no fato que para ter uma precisão aceitável com o método de Euler implícito, deve-se assumir valores muito pequenos do passo Δt , fato este que é comum em simulações de escoamento gás-sólido (em torno de $DT \times 1E-4s$ SYAMLAL *et al.* (1993)); então quão “melhor” seria a solução com o método de Crank-Nicolson nesta situação (“melhor” no sentido de desempenho computacional e qualidade da solução). Uma segunda questão foca-se na influência da malha computacional e o uso do método de Crank-Nicolson, conforme relata FLETCHER (1992), experimentos numéricos sugerem que, quando a malha é grossa, as fórmulas de alta ordem não necessariamente fornecem aproximações melhores que as fórmulas de ordens menores. Em malhas finas, porém, o resultado muda com as fórmulas de alta ordem se destacando pela precisão e pelo maior custo computacional.

5.2 Principais contribuições obtidas com a realização deste trabalho

A realização deste trabalho propiciou ao grupo de simulação do NETeF o conhecimento e domínio do código aberto MFIX e com ele uma série de vantagens sendo a principal a possibilidade de realizar estudos de simulação numérica em gás-sólido sem custos adicionais, tais como licenças para sistema operacional, compiladores e para uso do próprio software.

Destacam-se ainda algumas contribuições mais específicas a saber:

- Aplicação do método DC na discretização das equações que modelam o escoamento gás-sólido em colunas de LFC;

- Implementação no código MFIX da condição de contorno para a fase sólida;
- Proposta de modificação no modelo para a TCEG algébrica;
- Resultados com TCEG (uma equação) para o leito de LUO (1987).

5.3 – Principais conclusões do trabalho

Considerando as diferentes análises desenvolvidas no presente trabalho obtiveram-se as seguintes conclusões:

1. Resultados de simulação numérica de escoamentos gás-sólido são bastante dependentes do tamanho de malha, ainda mais quando consideradas as variações instantâneas do escoamento. Apesar de ter sido obtido resultados de simulação em três malhas computacionais diferentes, ainda são necessários mais experimentos computacionais de refinamento de malha. AGRAWAL *et al.* (2001) afirmaram que não é possível obter resultados independentes do tamanho de malha devido à natureza instável do tipo de escoamento estudado. Entre as três malhas consideradas, a malha mais fina foi a que permitiu obter os melhores resultados em relação aos dados experimentais considerados.
2. O tipo de esquema de interpolação utilizado na discretização dos termos advectivos exerce uma influência considerável nos resultados de simulação numérica em escoamentos gás-sólido. Considerando as análises apresentadas, evidencia-se que esquemas menos difusivos permitem obter resultados de melhor qualidade. Entre os esquemas aplicados o Superbee foi o que melhor resultado apresentou, mostrando-se o menos difusivo e permitindo comprovar que o modelo da TCEG com resolução de EDP para computo da temperatura granular é superior aos outros modelos físicos empregados.
3. Entre os vários modelos físicos testados, o que melhores resultados apresentou foi o modelo que faz uso da TCEG e considera a resolução de uma EDP para o cálculo da temperatura granular. Outro modelo que também apresentou bons resultados foi o da TCEG algébrica modificado. Este modelo é inédito e pode servir para obter resultados preliminares de uma instalação industrial considerando uma malha computacional que seja viável de ser utilizada. Os resultados com o modelo tradicional mostraram uma forte dependência do tempo

de simulação, sobretudo quando usados esquemas de interpolação de alta ordem. Resultados com este modelo dependem bastante do tipo de correlação utilizada, o que reduz a sua aplicabilidade na simulação de diferentes instalações. Considerando os presentes desenvolvimentos, destaca-se a necessidade de realização de estudos posteriores do desempenho dos diferentes modelos existentes e a eventual proposta de novos modelos.

4. Diversas observações foram constatadas da análise de clusters utilizando uma das metodologias desenvolvidas na literatura (SHARMA *et al.*, 2000) e também no presente grupo de pesquisa (CABEZAS-GÓMEZ & MILIOLI, 2004; entre outros). De forma geral os presentes resultados indicam a necessidade de obter simulações 3D para poder caracterizar melhor as estruturas coerentes, “clusters”, e obter resultados mais conclusivos sobre o assunto.

5.4 – Recomendações para futuros trabalhos

A seguir sugerem-se algumas recomendações para o desenvolvimento de futuras pesquisas na área com base nos resultados e experiência adquirida durante a realização da presente investigação.

1. Realização de simulações numéricas em malhas computacionais mais refinadas a fim de investigar a dependência dos resultados numéricos em escoamentos multifásicos gás-sólido para o tamanho de malha. Este estudo pode ser combinado com um estudo paramétrico da influência que os diferentes esquemas de interpolação exercem sobre os resultados, considerando que o tamanho de malha está intimamente ligado ao efeito do esquema de interpolação. Simulações tridimensionais devem ser consideradas para estabelecer mais criteriosamente as respectivas conclusões sobre esses estudos.
2. Teste da influência do uso de esquemas de discretização dos termos temporais de segunda ordem como o de Crank-Nicolson. Este tipo de estudo requer da disponibilidade de grande capacidade computacional.
3. Obtenção de dados experimentais detalhados dos campos de velocidade, frações volumétricas e demais variáveis em instalações de leito fluidizado circulante para comparação exaustiva com os resultados de simulação numérica.

4. Implementação de modelos de turbulência em ambas as fases, ou apenas na fase gasosa para comparação de resultados de simulação e investigação da turbulência no escoamento.
5. Simulação do escoamento considerando várias fases sólidas com o intuito de estudar segregação e obter resultados de simulação mais próximos das condições reais de operação da instalação.

REFÊRENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AGRAWAL *et al.* (2001). Agrawal, K.; Loezos, P.N.; Syamlal, M.; Sundaresan, S. The role of meso-scale structures in rapid gas-solid flows. *Journal of Fluid Mechanics*, v.445, p.151-185. 2001.
- ALDER & WAINWRIGHT (1960). Alder, B. J. and Wainwright, T. E. (1960). Studies in molecular dynamics. II. Behaviour of a small number of elastic spheres. *J. Chem. Phys.*, 33:1439-1451.
- ANDERSON & JACKSON (1967). Anderson, T.B.; Jackson, R. A fluid mechanical description of fluidized beds. *Ind. Eng. Chem. Fund.*, v.6, n.4, p.527-539. 1967.
- ANDERSON *et al.* (1995). Anderson, K.; Sundaresan, S. and Jackson, R. Instabilities and the formation of bubbles in fluidized beds. *J. Fluid Mech.* 303 (1995) 327 – 366.
- BALZER *et al.* (1995). Balzer G.; Boelle, A.; Simonin, O. Eulerian gas-solid flow modeling of dense fluidized bed. In: LARGE, J.-F.; LAGUÉRIE, C. eds. *Fluidization VII*. Proceedings of the Eighth Foundation Conference on Fluidization, Engineering Foundation, New York, p. 409-418. 1995.
- BALZER *et al.* (1996). Balzer, G.; Simonin, O.; Boelle, A. and Lavieville, J. A unifying modeling approach for the numerical prediction of dilute and dense gas-solid two phase flow. *Circulating Fluidized Bed V*, Beijing, May 28 – June 1, 1996.
- BALZER & SIMONIN (1993). Balzer, G. and Simonin, O. (1993). Extension of eulerian gas-solid flow modeling to dense fluidized bed. In Viollet, P.L., editor, *Proc. 5th Int. Symp. On Refined Flow Modelling and Turbulence Measurements*, pages 417-424. Paris.
- BALZER (2000). Balzer G. Gas-solid flow modelling on the kinetic theory of granular media: validation, applications and limitations. *Powder Technology*, v. 113, p.299-309. 2000.

- BATCHELOR (1988). Batchelor, G. K. A new theory of the instability of a uniform fluidized bed. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 193, p. 75-110. 1988.
- BOEMER *et al.* (1995). Boemer, A.; Qi H.; Renz, U.; Vasquez, S.; Boysan, F. Eulerian computation of fluidized hydrodynamics-a comparison of physical models. In: *Proc.13th Int. Conf. on Fluidized Bed Combustion*, v.2, p.775-787. 1995.
- BOUILLARD *et al.* (1989). Bouillard, J.X.; Lyczkowski, R.W.; Gidaspow, D. Porosity distributions in a fluidized bed with an immersed obstacle. *AIChE Journal* 1989, v.35, n.6, p.908-922.
- BUSSING, W.; REH, L. (2001). On viscous momentum transfer by solids in gas-solids flow through risers. *Chemical Engineering Science*, v.56, n.12, p.3803-3813.
- CABEZAS-GÓMEZ (1999). Cabezas-Gómez, L. *Um estudo da modelagem matemática e simulação numérica de escoamentos bifásicos gás-sólidos*. Dissertação de mestrado, Escola de Engenharia de São Carlos, USP, São Carlos, Brasil. 1999.
- CABEZAS-GÓMEZ & MILIOLI (2001). Cabezas-Gómez, L.; Milioli, F.E. Gas-solids two-phases flow in the riser of circulating fluidized bed: mathematical modelling and numerical simulation. *J. of the Braz. Soc. Mechanical Sciences*, vol. XXIII, Nº2, p. 179-200. 2001.
- CABEZAS-GÓMEZ (2003). Cabezas Gómez L. *Modelagem Matemática e Simulação Numérica de Escoamentos Bifásicos Gás-Sólido em Colunas de Leito Fluidizado Circulante*. Tese de Doutorado, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos - SP, 2003.
- CABEZAS-GÓMEZ & MILIOLI (2003). Cabezas-Gómez, L.; Milioli, F.E. (2003). Numerical Study on the Influence of Various Physical Parameters over the Gas-solid Two-phase Flow in the 2D Riser of a Circulating Fluidized Bed, *Powder Technology*, vol. 132, p. 216-225.
- CABEZAS-GÓMEZ & MILIOLI (2005). Cabezas-Gómez, L.; Milioli, F.E. (2005). Collisional Solid's Pressure Impact on Numerical Results from a Traditional Two-Fluid Model, *Powder Technology*, vol. 149, p. 78-83.

- CARNAHAN & STARLING (1969). Carnahan, N.F. and Starling, K.E. (1969). Equations of state for non-attracting rigid spheres. *J. Chem. Phys.*, 51:635-636.
- CHAPMAN & COWLING (1961). Chapman, S.; Cowling, T.G. *The mathematical theory of non-uniform gases*. 2nd Ed. Cambridge University Press, Cambridge, U.K. 1961.
- COLLINS (1965). Collins, R. An extension of Davidson's theory of bubbles in fluidized beds. *Chem. Eng Sci.* 20 (1965) 747- 755.
- COURANT *et al.* (1952). Courant, R., Isaacson, E., and Reeves, M. On the solution of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences. *Comm. Pure and Applied Mathematics*, 5, pp. 243-255. 1952.
- CHRISTIE *et al.* (1998). Christie, I.; Ganser, G.; Wilder, J. Numerical solutions of a two-dimensional fluidized bed model, *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 28 (1998) 381-394.
- CROWE (2000). Crowe, C. T. On models for turbulence modulation in fluid-particle flows. *Int. Journal of Multiphase Flow*, v. 26, p.719-727. 2000.
- DAVIDSON, J.F. (2000). Circulating fluidised bed hydrodynamics. *Powder Technology*, v.113, n.3, p.249-260.
- DELHAYE (1981). Delhay, J. M. *Thermohydraulics of two-phase systems for industrial design and nuclear engineering*. ed. J. M. Delhay. 1981.
- DELHAYE & ACHARD (1976). Delhay, J. M.; Achard, J.L. On the averaging operators introduced in two-phase flow modeling. *Specialists' Meeting on Transient Two-Phase Flow*, Agosto 3-4, Toronto 1976.
- DELHAYE & ACHARD (1977). Delhay, J. M.; Achard, J.L. 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. 1977.
- DICK (1988). Dick, E. A flux vector splitting method for steady Navier-Stokes equations. *Int. Journal Numerical Methods Fluids*, 8, pp. 317-326. 1988.
- DING (1990). Ding, J. *A fluidization model using kinetic theory of granular flow*. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology, Chicago. 1990.

- DING & GIDASPOW (1990). Ding, J.; Gidaspow, D. A bubbling model using kinetic theory of granular flow. *AIChE Journal*, v.36, n.4, p.523-538. 1990.
- deVAHL & MALLISON (1976). deVahl, G.; Mallison, G.D. An evaluation of upwind and central difference approximations by a study of recirculating flow. *Comp. Fluids.*, 4, 29-32. 1976.
- DREW (1983). Drew, D.A. Mathematical modeling of two-phase flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v.15, p.261-291. 1983.
- DREW & LAHEY, (1993). Drew, D.A. and Lahey, R.T. (1993). *In Particulate Two-phase Flow*, Ch. 16, pp.509-566, Butterworth-Heinemann, Boston.
- ELGOBASHI (1991). Elgobashi, S. Particle-laden turbulent flows: direct simulation and closure models. *Applied Scientific Research*, v.48, p.301-314.
- ENWALD *et al.* (1996). Enwald, H.; Peirano, E; Almstedt, A.-E. Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. *Int. Journal of Multiphase Flow*, v.22, p.21-66, 1996, Supplement.
- ETTEHADIEH (1982). Ettehadieh, B. *Hydrodynamic analysis of gas-solids fluidized beds*. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology 1982, Chicago.
- FAN & ZHU (1998). Fan, L. S.; Zhu, C. *Principles of gas-solid flows*. Cambridge University Press, United Kingdom. 1998.
- FERREIRA (2001). Ferreira V. G. Análise e implementação de esquemas de convecção e modelos de turbulência para simulação de escoamentos incompressíveis envolvendo superfícies livres. Ph.D. Thesis, Department of Computer Science and Statistics, USP, São Carlos Brazil, 2001.
- FERZIGER (2000). Ferziger, Joel H. Simulation of turbulence techniques and possibilities. *Brazil Spring School on Turbulence and Transition*, A Short Course, Uberlândia, Brazil. 2000.
- FERZIGER & PERIC (1999). Ferziger, Joel H. & Peric, Milovan. Computational Methods for Fluid Dynamics. *Springer-Verlag, New York*. 1999. Second edition.

- FORTUNA (2000). Fortuna, A. O. Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações. *Editora da Universidade de São Paulo. São Paulo*, 2000.
- FROMM (1968). Fromm, J.E. A method for reducing dispersion in convective difference schemes. *Journal Computational Physics*, 3, pp. 176-189. 1968.
- GASKELL & LAU (1988). Gaskell, P. H., Lau, A. K. C. Curvature-Compensated Convective Transport: SMART, a new boundedness preserving transport algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 1988; 8: 617 – 641.
- GIDASPOW (1986). Gidaspow, D. Hydrodynamics of fluidization and heat transfer: Supercomputing modeling. *Applied Mechanical Reviews*, v.39, n.1, p.1-23. 1986.
- GIDASPOW (1994). Gidaspow, D. *Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions*. Academic Press Inc. 1994, Boston.
- GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983). Gidaspow, D.; Ettehadieh, B. Fluidization in two-dimensional beds with a jet 2. Hydrodynamics modeling. *Ind. Eng. Chem. Fund.*, v.22, p.193-201. 1983.
- GIDASPOW & HUILIN (1998). Gidaspow, D.; Huilin, H.L. Equation of state and radial distribution functions of FCC particles in a CFB. *AIChE Journal*, v.44, n.2, p.279-293. 1998.
- GIDASPOW *et al.* (1989). Gidaspow, D.; Tsuo, Y. P.; Luo, K. M. Computed and Experimental Cluster Formation and Velocity Profiles in Circulating Fluidized Beds. In: Grace, J. R.; Shemilt; Bergougnou, Eds. *Fluidization VI*. 1989. Engineering Foundation, New York.
- GIDASPOW *et al.* (1992). Gidaspow, D.; Bezburuah, R.; Ding, J. Hydrodynamics of Circulating Fluidized Beds: Kinetic Theory Approach. In: POTTER, O.E.; NICKILN, D. J., eds. *Fluidization VII*. Engineering Foundation 1992, p.75-82.
- GLASSER *et al.* (1996). Glasser B.; Kevrekidis, I. and Sundaresan S. One and two-dimensional traveling wave solutions in gas-fluidized beds, *J. Fluid Mech.* 306 (1996) 183 – 221.

- GORE & CROWE (1989). Gore, R.A.; Crowe, C.T. Effect of particle size on modulating turbulence intensity. *Int. J. Multiphase Flow*. 15. p. 279 – 285. 1989.
- GUENTHER & SYAMLAL (2001). C. Guenther and M. Syamlal. The Effect of Numerical Diffusion on Simulation of Bubbles in a Gas-Solid Fluidized Bed. *Powder Technology*, 116, p.142-154. (2001).
- HARLOW & AMSDEN (1975). Harlow, F.H.; Amsdem, A.A. Numerical calculation of multiphase fluid flow. *Journal of Computational Physics* 1975, v.17, p.19-52.
- HARRIS, A.T.; DAVIDSON, J.F.; THORPE, R.B. (2002). The prediction of particle cluster properties in the near wall region of a vertical riser. *Powder Technology*, v.127, p.128-143.
- HARTEN (1983). Harten, A. High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. *Journal of Computational Physics* 1983; 49: 357-393.
- HARTEN (1984). Harten, A. On a Class of High Resolution Total-Variation_stable Finite-Difference Schemes. *SIAM Journal of Numerical Analysis* 1984; 21(1): 1 – 23.
- HARTGE *et al.* (1986). Hartge, E.-U.; Li, Y.; Werther, J. Analysis of the local structure of the two phase flow in a fast fluidized bed. In: BASU, P. ed. *Circulating Fluidized Bed Technology* 1986. Pergamon Press, Toronto.
- HELLAND, E.; OCCELLI, R.; TADRIST, L. (2000). Numerical study of cluster formation in a gas-particle circulating fluidized bed. *Powder Technology*, v.110, n.3, p.210-221.
- HELLAND, E.; OCCELLI, R.; TADRIST, L. (2002). Computational study of fluctuating motions and cluster structures in gas-particle flows. *Int. Journal of Multiphase Flow*, v.28, n.2, p.199-223.
- HERB *et al.* (1992). Herb, B.; Dou, S.; Tuzla, K.; Chen, J. C. Solid mass fluxes in circulating fluidized beds. *Powder Technology*, 1992. v.70, n.3, p.197-205.
- HIRSCH (1997a). Hirsch, C. *Numerical computation of internal and external flows. V.1: Fundamentals of numerical discretization*. John Wiley & Sons. New York, 1997.

- HIRSCH (1997b). Hirsch, C. *Numerical computation of internal and external flows. V.2: Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows*. John Wiley & Sons. New York, 1997.
- HOOMANS et al. (1996). Hoomans, B.P.B.; Kuipers, J.A.M.; Briels, W.J.; Van Swaaij, W.P.M. Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidized bed: a hard-sphere approach. *Chemical Engineering Science*. v.51, n.1, p.99-118. 1996.
- HOOMANS, B.P.B.; KUIPERS, J.A.M.; VAN SWAAIJ, W.P.M. (1998). Granular dynamics simulation of cluster formation in riser flow. In: *Third International Conference on Multiphase Flow*, Lyon, France.
- HORIO (1997). Horio, M. Hydrodynamics. In: Grace, J. R. et al. *Circulating Fluidized Beds*. Chapman & Hall 1997. Cap. 5, p.21-85.
- HORIO & CLIFT (1992). Horio, M.; Clift, R. A note on terminology – clusters and agglomerates. *Powder Technology*, 1992. v.70, n.3, p.196-196.
- HORIO, M.; KUROKI, H. (1994). 3-dimensional flow visualization of dilutely dispersed solids in bubbling and circulating fluidized-beds. *Chemical Engineering Science*, v.49, n.15, p.2413-2421.
- HRENYA & SINCLAIR (1997). Hrenya, C.M.; Sinclair, J.L. Effects of particle-phase turbulence in gas-solid flows. *AIChE Journal*, v.43, n.4, p.853-869. 1997.
- HUILIN & GIDASPOW (2003). Huilin, L., Gidaspow, D. Hydrodynamic Simulations of Gas-Solid Flow in a Riser. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2003, 42, 2390 – 2398.
- ISHII (1975). *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow*. Eyrolles. Paris 1975.
- ISHII & MISHIMA (1984). Ishii, M.; Mishima, K. Two-fluid model and hydrodynamic constitutive relations. *Nuclear Engineering and Design* 1984. v.82, p.107-126.
- JACKSON (2000). Jackson, R. *The Dynamics of Fluidized Particles*. Cambridge Univ. Press. 2000.

- JAYASWAL (1991). Jayaswal, U. Hydrodynamics of multiphase flows: separation, dissemination and fluidization. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology, Chicago.
- JENKINS & SAVAGE (1983). Jenkins, J.T.; Savage, S.B. A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles, *Journal of Fluid Mechanics*, v.130, p.187-102. 1983.
- JOHNSON & JACKSON (1987). Johnson, P.C. & Jackson, R. Frictional-collisional constitutive relations for granular materials with applications to plane shearing. *J. Fluid Mech.* 130, pp187-202.
- JOHNSSON, F.; ZIJERVELD, R.C.; SCHOUTEN, J.C.; VAN DEN BLEEK, C.M.; LECKNER, B. (2000). Characterization of fluidization regimes by time-series analysis of pressure fluctuations. *Int. Journal of Multiphase Flow*, v.26, n.4, p.663-715.
- JOHNSSON, H.; JOHNSSON, K. (2001). Measurements of local solids volume fraction in fluidized bed boilers. *Powder Technology*, v.115, p.13-26.
- KAIBARA *et al.* (2004). Kaibara, M. K., Ferreira, V. G., Navarro, H. A. Upwinding Finite-Difference Schemes for Convection Dominated Problems. Part I: Theoretical Results. *Notas do ICMC-USP São Carlos*, 2004.
- KOCH (1990). Koch, D.L. Kinetic theory for a monodisperse gas-solid suspension. *Physics of Fluids A*, v.2, n.10, p.1711-1723. 1990.
- KOCH & SANGANI (1999). Koch, D.L. & Sangani, A.S. 1999. Particle pressure and marginal stability limits for a homogeneous monodisperse gas fluidized bed: kinetic theory and numerical simulations. *J. Fluid Mech.* 400, 229-263.
- KUIPERS & VAN SWAAIJ (1997). Kuipers, J.A.M.; Van Swaaij, W.P.M. Application of computational fluid dynamics to chemical reaction engineering. *Reviews in Chemical Engineering* 1997, v.13, n.3.
- KUNII & LEVENSPIEL (1990). Kunii, D.; Levenspiel, O. Entrainment of solids from fluidized beds. I Holdup of solids in the freeboard. II Operation of fast fluidized beds. *Powder Technology*, 1990. v.61, p193.
- KUNII & LEVENSPIEL (1991). Kunii, D.; Levenspiel, O. (1991). *Fluidization Engineering*. 2nd Ed., Butterworth-Heinemann, Boston.

- LACKERMEIER, U.; RUDNICK, C.; WERTHER, J.; BREDEBUSCH, A.; BURKHARDT, H. (2001). Visualization of flow structures inside a circulating fluidized bed by means of laser sheet and image processing. *Powder Technology*, v.114, n.(1-3), p.71-83.
- LEONARD & MOKHTARI (1990). Leonard, B. P. and Mokhtari, Simin. Beyond First-Order Upwinding: The Ultra-Sharp Alternative for Non-Oscillatory Steady-State Simulation of Convection. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 30, pp 729-766. 1990.
- LEONARD (1979). Leonard, B. P. A stable and accurate convective modeling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 19, pp. 59-98. 1979.
- LEONARD (1987). Leonard, B. P. SHARP simulation of discontinuities in highly convective steady flows. *NASA Report TM-100240, ICOMP-87-9*, NASA Lewis Research Center.
- LEONARD (1988). Leonard, B. P.. Simple High-Accuracy Resolution Program for Convective Modeling of Discontinuities. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 1988; 8: 1291 – 1318.
- LEONARD (1991). Leonard, B. P. The ULTIMATE Conservative Difference Scheme Applied to Unsteady One-dimensional Advection. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 1991; 88: 17- 74.
- LIN & CHIENG (1991). Lin, H., Chieng, C.C. Characteristic-based flux limiter of an essentially 3rd-order flux-splitting for hyperbolic conservation laws. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 13(3), pp. 287-301. 1991.
- LUO (1987). Luo, K. M. Dilute, Dense-Phase and Maximum Solids-Gas Transport. Tese (doutorado), 1987, Illinois Institute of Technology, Chicago.
- LUN *et al.* (1984). Lun, C.K.K.; Savage, S.B.; Jeffrey, D.J.; Chepurniy, N. Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield. *Journal of Fluid Mechanics*, v.140, p.223-256. 1984.

- LUN & SAVAGE (1986). Lun, C.K.K. and Savage, S.B. (1986). The effects of an impact velocity dependent coefficient of restitution on stresses developed by sheared granular materials. *Acta Mechanica*, 63:15-44.
- MA & AHMADI (1988). Ma, D.; Ahmadi, G. A kinetic-model for rapid granular flows of nearly elastic particles including interstitial fluid effects. *Powder Technology*, v.56, n.3, p.191-207. 1988.
- MALISKA (1995). Maliska, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional: Fundamentos, Coordenadas Generalizadas*. LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A. Rio de Janeiro.
- MATHIESEN *et al.* (1999). Mathiesen, V.; Solberg, T.; Arastoopour, H.; Hjertager, B.H. Experimental and computational study of multiphase gas/particle flow in a CFB riser. *AIChE Journal*, v.45, n.12, p.2503-2518. 1999.
- MATHIESEN *et al.* (2000a). Mathiesen, V.; Solberg, T.; Hjertager, B.H. An experimental and computational study of multiphase flow behavior in a circulating fluidized bed. *Int. Journal of Multiphase Flow*, v.26, n.3, p.387-419. 2000.
- MATHIESEN *et al.* (2000b). Mathiesen, V.; Solberg, T.; Hjertager, B.H. Prediction of gas/particle flow with an Eulerian model including a realistic particle size distribution. *Powder Technology*, v.112, n.(1-2), p.34-45. 2000.
- MILLER & GIDASPOW (1992). Miller, A.; Gidaspow, D. Dense, vertical gas-solid flow in a pipe. *AIChE J.*, 1992, 38, 1801.
- NERI & GIDASPOW (2000). Neri, A.; Gidaspow, D. Riser hydrodynamic: simulation using kinetic theory. *AIChE Journal*, v.46, n.1, p.52-67. 2000.
- NIEUWLAND *et al.* (1996). Nieuwland J.J.; Van Sint Annaland, M.; Kuipers, J.A.M.; Van Swaaij, J.P.M. Hydrodynamics modeling of gas/particle flows in riser reactors. *AIChE Journal*, v.42, n.6, p.1569-1582. 1996.
- OGAWA *et al.* (1980). Ogawa, S.; Umemura, A.; Oshima, N. On the equations of fully fluidized granular materials. *Journal of Applied Mathematical Physics*, v.31, n.4, p.483-493. 1980.

- OUYANG, J.; LI, J.H. (1999). Particle-motion-resolved discrete model for simulating gas-solid fluidization. *Chemical Engineering Science*, v.54, n(13-14), p.2077-2083.
- PATANKAR (1980). Patankar, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere, New York, 1980.
- PEIRANO (1996). Peirano, E. *The Eulerian/Eulerian formulation applied to gas-solid flows*. Report A96-218, Department of Energy Conversion, Chalmers University of Technology 1996, Sweden.
- PEIRANO (1998). Peirano, E. *Modelling and Simulation of turbulent gas-solid flows applied to fluidization*. Tese (doutorado), Department of Energy Conversion, Chalmers University of Technology 1998, Sweden.
- PEIRANO & LECKNER (1998). Peirano, E.; Leckner, B. Fundamentals of turbulent gas-solid flows applied to circulating fluidized bed combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 1998, v.24, n.4, p.259-296.
- PING-LI *et al.* (2003). Ping-Li H., Wen-Quan T., Mao-Zheng T. Refinement of the convective boundedness criterion of Gaskell and Lau. *Engineering Computations* 2003; 20(8):1023-1043.
- POZRIKIDIS (1997). Pozrikidis, C. *Introduction to theoretical and computational fluid dynamics*. Oxford University Press, New York. 1997.
- PRICE *et al.* (1966). Price, H. S.; Varga, R. S.; Warren, J. E. Applications of oscillation matrices to diffusion-correction equations. *J. Math. Physics*, 45, 301-311. 1966.
- PRITCHETT *et al.* (1978). Pritchett, J. W.; Blake, T. R.; Garg, S. K. A numerical model of gas fluidized beds. *AIChE Symposium Series*. v.74, n176, p.134-148. 1978.
- RAITHBY (1976). Raithby, D.D. Skew upstream differencing schemes for problems involving fluid flow. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 9, 153-164. 1976.
- RHODES & GELDART (1987). Rhodes, M. J.; Geldart, D. A model for the circulating fluidized bed. *Powder Technology*, 1987. v.53, n.3, p.155-162.

- RHODES *et al.* (1992). Rhodes, M. J.; Wang, X. S.; Cheng, H.; Hiram, T.; Gibbs, B. M. Similar profiles of solids flux in circulating fluidized bed risers. *Chemical Engineering Science* 1992. v.47, n.7, p.1635-1643.
- RICHARDSON (1973). Richardson, S. No-slip boundary-condition. *Journal of Fluid Mechanics*. v.59, p.707-719. 1973.
- RICHARDSON (1973). Richardson, S. On the no-slip boundary condition. *Journal of Fluid Mechanics*, v.59, p.107-119. 1973.
- RIVARD & TORREY (1977). Rivard, W.C., and Torrey, M.D. K-FIX: A computer program for transient, two-dimensional, two-fluid flow, *LA-NUREG-6623*, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos. 1977.
- RUBIN & KHOSLA (1977). Rubin, S., Khosla, P. Polynomial interpolation method for viscous flow calculations, *J. Comput. Phys.* 24, pp. 217-244. 1977.
- SANYAL (1995). Sanyal, J. *Computational simulation of the hydrodynamics of gas-fluidized beds*, PhD thesis. Hoboken, Stevens Institute of Technology, NJ, 1995.
- SAVAGE (1983). Savage, S.B. Granular Flows at High Shear Rates. In: MEYER, R.E., ed. *Theory of Dispersed Multiphase Flow*. New York, Academic Press, p.339-358. 1983.
- SCHARFF *et al.* (1982). Scharff, M.F.; Chan, R.K.-C; Chiou, M.J.; Dietrich, D.E.; Dion, D.D.; Klein, H.H.; Laird, D.N.; Levine, H.R.; Meister, C.A.; Srinivas, B. *Computer modeling of mixing and agglomeration in coal conversion reactors*. Vols. I & II, DOE/ET/10329-1211, JAYCOR, 1982.
- SCHNEYER *et al.* (1981). Schneyer, G.P.E.; Peterson, W.; Chen, P.J.; Brownell, D. H.; Blake, T.R. *Computer modeling of coal gasification reactors*. Final Report for June 1975-1980 DOE/ET/10247, Systems, Science and Software.
- SHARMA *et al.* (2000). SHARMA, A.K.; TUZLA, K.; MATSEN, J.; CHEN, J.C. Parametric effects of particle size and gas velocity on cluster characteristics in fast fluidized beds. *Powder Technology*, v.111, n.(1-2), p.114-122. 2000.
- SINCLAIR (1997). Sinclair, J.L. Hydrodynamic Modeling. In: GRACE, J.R. et al. *Circulating Fluidized Beds*. Chapman & Hall. Cap. 5, p.149-180. 1997.

- SINCLAIR & JACKSON (1989). Sinclair, J.L.; Jackson, R. Gas-solid flows in a vertical pipe with particle-particle interactions. *AIChE Journal*, v35, n.9, p.1473-1486. 1989.
- SLATTERY (1967 a). Slattery, J. C. General balance equation for a phase interface. *Ind. Eng. Chem. Fund.* 1967, v.6, n.1, p.108-&.
- SLATTERY (1967 b). Slattery, J. C. Flow of viscoelastic fluid through porous media. *AIChE Journal* 1967, v13. n.6, p.1066-&.
- SONG *et al.* (2000). Song, B., Liu, G. R., Lam, K. Y., Amano, R. S.. On a Higher-Order Discretization Scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 2000; 32: 881 – 897.
- SOO (1990). Soo, S.L. Multiphase fluid dynamics. Beijing: Science Press; Brookfield, USA: Gower Technical. 1990.
- SPALDING (1972). Spalding, D.B. A novel finite-difference formulation for differential expressions involving both first and second derivatives. *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, 4, 551-559. 1972.
- SPALDING (1980). Spalding, D.B. Numerical computation of multi-phase fluid flow and heat transfer, in *Recent Advances in Numerical Methods in Fluids*, C. Taylor et al., eds, Pineridge Press. 1980.
- STEWART (1968). Stewart, P. Isolated bubbles in fluidised beds-theory and experiment. *Tran. Inst. Chem. Eng.* 46 (1968) 60 – 68.
- SWEBY (1984). Sweby, P. K.. High Resolution Schemes Using Flux Limiters for Hyperbolic Conservation Laws. *SIAM Journal of Numerical Analysis* 1984; 21(5): 995-1011.
- SYAMLAL & GIDASPOW (1985). Syamlal, M.; Gidaspow, D. hydrodynamics of fluidization: prediction of wall to bed heat transfer coefficients. *AIChE Journal* 1985, v.31, n.1, p.127-135.
- SYAMLAL & O'BRIEN (1988). Syamlal, M. and O'Brien T.J. Simulation of Granular Layer Inversion in Liquid Fluidized Beds, *Int. J. Multiphase Flow*, 14, pp. 473-481. 1988.

- SYAMLAL *et al.* (1993). Syamlal, M.; Rogers, W.; O'Brien T.J. (1993). MFIX Documentation Theory Guide. U.S. Department of Energy, Morgantown Energy Technology Center, Technical Note DOE/MET-94/1004.
- SYAMLAL (1998). Syamlal, M. MFIX Documentation: Numerical Technique, EG and G *technical report*, DE-AC21-95M31346, 1998.
- TADMOR (1998). Tadmor, E.. Convenient Total Variation Diminishing Conditions for Nonlinear Difference Schemes. *SIAM Journal of Numerical Analysis* 1998; 25(5): 1002 – 1014.
- THEOLOGOS & MARKATOS (1992). Theologos, K. N.; Markatos, N. C. Modelling of flow and heat transfer in fluidized catalytic cracking riser-type reactors, *Transactions of the Institute of Chemicals Engineers* 1992, v.70, (Part A), p.239-245.
- THERDTHIANWONG (1994). Therdthianwong, A. *Hydrodynamic and SO₂ sorption in a circulating fluidized bed*. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology, Chicago. 1994.
- TSUJI *et al.* (1984). Tsuji, Y.; Morikawa, Y.; Shiomi, H. LDV measurements of an air-solid two-phase flow in a vertical pipe. *Journal of Fluid Mechanics*, v.139, p.417-434. 1984.
- TSUKADA, M.; ITO, M.; KAMIYA, H.; HORIO, M. (1997). Three-dimension imaging of particle clusters in dilute gas-solid suspension flow. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, v.75, n.2, p.466-470.
- TSUO (1989). Tsuo, Y. P. *Computational of flow regimes in circulating fluidized beds*. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology, Chicago. 1989.
- TSUO & GIDASPOW (1990). Tsuo, Y. P.; Gidaspow, D. Computation of flow patterns in circulating fluidized beds. *AIChE Journal* 1990, v.36, n.6, p.885-896.
- TUZLA, K.; SHARMA, A.K.; CHEN, J.C.; SCHIEWE, T.; WIRTH, K.E.; MOLERUS, O. (1998). Transient dynamics of solid concentration in downer fluidized bed. *Powder Technology*, v.100, n.(2-3), p.166-172.

- VAN LEER (1974). Van Leer, B.. Towards the ultimate conservative difference scheme II. Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *Journal of Computational Physics* 1974; 14: 361 – 370.
- van WACHEM *et al.* (1998). Van Wachem, B.G.M., Schouten, J.C., Krishna, R., and den Bleek, C.M. Van (1998). Eulerian simulations of bubbling behaviour in gas-solid fluidized beds. *Computers Chem. Eng.*, 22:s299-s306.
- van WACHEM *et al.* (1999). van Wachem, B.G.M.; Schouten, J.C.; van Den Bleek, C.M.; Krishna, R. CFD modeling for gas-solid flows: qualitative and quantitative analysis of the various treatments. In: *Proceedings of the 3rd ASME/JSME Joint Fluids Engineering Conference*, San Francisco, California. 1999.
- van WACHEM *et al.* (2001). van Wachem, B.G.M.; Schouten, J.C.; van Den Bleek, C.M.; Krishna, R.; Sinclair, J.L. CFD modeling of Gas-Fluidized Beds with a Bimodal Particle Mixture. *AIChE Journal*, v.47, n.6, p.1292-1302. 2001.
- WHITAKER (1969). Whitaker, S. Advances in theory of fluid motion in porous media. *Ind. Eng. Chem.* 1969, v.61, n.12, p.14-&.
- YANG (1992). Yang, W.C. The hydrodynamics of circulating fluidized beds. In: CHEREMISINOFF, N, P. eds. *The supplements of the Encyclopedia of fluid Mechanics*. 1992. Gulf Publishing, Houston.
- YU *et al.* (2001). Yu B., Tao W. Q., Zhang D. S., Wang Q. W. Discussion on numerical stability and boundedness of convective discretized scheme. *Numerical Heat Transfer, Part B* 2001; 40: 343-365.
- YUAN & MICHAELIDES, (1992). Yuan, Z.; Michaelides, EE. Turbulence modulation in particulate flows – a theoretical approach. *Int. J. Multiphase Flow*. 18. p.779 – 785. 1992.
- ZHANG & REESE (2001). Zhang, Y.; Reese, J. M. Particle-gas turbulence interactions in a kinetic theory approach to granular flows. *Int. Journal of Multiphase Flow*, v.27, p.1945-1964. 2001.

ANEXOS

ANEXO A - Teoremas Integrais

Teorema de Leibniz

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

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

Teorema de Gauss-Ostragradskii

Função escalar (tensor de ordem zero)

$$\int_V \vec{\nabla} \circ f dV = \int_A f \circ \hat{n} dA . \quad (\text{A2})$$

Função vetorial (tensor de primeira ordem)

$$\int_V \vec{\nabla} \circ \vec{f} dV = \int_A \vec{f} \circ \hat{n} dA . \quad (\text{A3})$$

Função tensorial (tensor de segunda ordem)

$$\int_V \vec{\nabla} \circ \bar{\bar{f}} dV = \int_A \bar{\bar{f}} \circ \hat{n} dA . \quad (\text{A4})$$

ANEXO B – Obtenção do modelo hidrodinâmico B (JAYASWAL, 1991)

O termo de arrasto na interface para o modelo hidrodinâmico B deve ser modificado para satisfazer a lei generalizada de Darcy, sendo que o termo que representa a força de campo gravitacional deve ser modificado para satisfazer o princípio de Arquimedes e a usual relação de mínima fluidização dada em KUNNI & LEVENSPIEL (1991). A análise apresentada por GIDASPOW (1986) traça os passos requeridos para cumprir estas condições necessárias.

Obtenção da fórmula manométrica

As equações de quantidade de movimento para os modelos hidrodinâmicos A e B desprezando os efeitos de aceleração e o tensor das tensões podem-se escrever como;

Fase fluida: (modelo A)

$$0 = -\alpha_f \vec{\nabla} P - \beta_A (\vec{v}_f - \vec{v}_s) + \rho_f \alpha_f \vec{g} \quad (B1)$$

Fase sólida: (modelo A)

$$0 = -\alpha_s \vec{\nabla} P - \beta_A (\vec{v}_f - \vec{v}_s) + \rho_s \alpha_s \vec{g} \quad (B2)$$

Fase fluida: (modelo B)

$$0 = -\vec{\nabla} P - \beta_B (\vec{v}_f - \vec{v}_s) + \varpi_f \vec{g} \quad (B3)$$

Fase sólida: (modelo B)

$$0 = \beta_B (\vec{v}_f - \vec{v}_s) + \varpi_s \vec{g} \quad (B4)$$

onde ϖ_f e ϖ_s podem-se denominar como massas aparentes a serem determinadas posteriormente. A soma das equações (B1 e B2) e também das equações (B3 e B4) separadamente resulta na equação da quantidade de movimento, denominada de fórmula manométrica:

$$\vec{\nabla} P = (\alpha_f \rho_f + \alpha_s \rho_s) \vec{g} = (\varpi_f + \varpi_s) \vec{g}. \quad (B5)$$

Desta maneira a massa total suportada pelos modelos A e B é a mesma.

$$(\alpha_f \rho_f + \alpha_s \rho_s) = (\varpi_f + \varpi_s). \quad (B6)$$

Obtenção da Lei de Darcy para a fase fluida

Em ausência da força gravitacional, reescrevendo as equações de quantidade de movimento da fase fluida para os dois modelos (A e B), a relação entre o gradiente de pressão e a velocidade relativa pode ser escrita de forma análoga à lei de Darcy como segue:

$$\vec{\nabla}P = \frac{\beta_A}{\alpha_f}(\vec{v}_s - \vec{v}_f) = \beta_B(\vec{v}_s - \vec{v}_f). \quad (B7)$$

Eliminando o gradiente a pressão e rearranjando os termos, obtém-se:

$$\left(\frac{\beta_A}{\alpha_f} - \beta_B\right)(\vec{v}_s - \vec{v}_f) = 0. \quad (B8)$$

Já que as velocidades do fluido e da fase sólida são arbitrárias, a relação anterior é satisfeita identicamente apenas se

$$\beta_B = \frac{\beta_A}{\alpha_f}. \quad (B9)$$

Se o termo gravitacional é importante, substituindo as relações para o arrasto na interface acima derivadas com as equações de quantidade de movimento do fluido para os modelos A e B, a massa aparente da fase fluida para o modelo B é derivada simplesmente como a densidade do fluido,

$$\varpi_f = \rho_f. \quad (B10)$$

Formulação do princípio do empuxo de Arquimedes

Eliminando o gradiente de pressão da equação B2 da fase sólida para o modelo A e reorganizando, obtém-se:

$$\beta_A(\vec{v}_f - \vec{v}_s) = \alpha_s(\alpha_s\rho_s + \alpha_f\rho_f - \rho_s)\vec{g}. \quad (B11)$$

As equações B4 e B11 sugerem que a massa aparente para a fase sólida em ambos os modelos hidrodinâmicos (A e B) devem depender linearmente entre elas, porque a velocidade da fase sólida pode assumir valores arbitrários. Então, pode-se escrever:

$$\varpi_s = A\alpha_s(\rho_s - \alpha_f\rho_f - \alpha_s\rho_s) \quad (\text{B12})$$

$$\text{e} \quad \beta_B = A\beta_A \quad (\text{B13})$$

onde A é uma constante arbitrária de proporcionalidade.

Combinando as equações B6, B10 e B12, e para valores arbitrários das densidades do fluido da fase sólida, obtém-se, $\left(A = 1/\alpha_f\right)$. Portanto a massa aparente para a fase sólida no modelo hidrodinâmico B define-se por:

$$\varpi_s = \frac{\alpha_s}{\alpha_g}(\rho_s - \alpha_f\rho_f - \alpha_s\rho_s). \quad (\text{B14})$$

Para o escoamento bifásico, o balanço entre as fases fluida e sólida para uma aceleração nula do particulado, efeitos de paredes desprezíveis e tensões nulas para o sólido, pode-se simplificar da seguinte maneira:

$$\alpha_s(\rho_s - \rho_f)\vec{g} = \beta_B(\vec{v}_f - \vec{v}_s). \quad (\text{B15})$$

Esta equação é igual ao balanço de forças entre o empuxo e o arrasto dado por BATCHELOR (1988). Esta análise é uma simplificação da apresentada em JAYASWAL (1991). Nessa referência desenvolve-se as relações acima descritas para um escoamento multifásico, composto por uma fase contínua (gás ou líquido) e várias fases dispersas.

ANEXO C - Critério de Convecção Limitada

A solução numérica obtida pela discretização do termo de convecção utilizando um esquema limitado nunca transporá os valores máximo e mínimo inerentemente determinados pelo processo físico. Se a solução numérica apresenta super ou subestimativa, elas sempre ocorrerão onde uma inclinação excessiva do gradiente das variáveis dependentes existir. A ausência de saltos em um esquema numérico (Boundedness of a scheme) pode ser definida como a não geração de oscilações não físicas em regiões com uma inclinação elevada do gradiente. A ausência de saltos é de imensa importância a fim de manter os resultados numéricos razoáveis.

Gaskell e Lau (GASKELL & LAU (1988)) propõem um critério denominado “Convection Boundedness Criterion” – CBC com a finalidade de garantir que um esquema de convecção possua a característica de ausência de saltos. Este critério é principalmente aplicado a escoamentos incompressíveis. Em seu trabalho, eles colocam que uma função contínua ou contínua por partes $\tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_f(\tilde{\phi}_U^n)$ possua a característica de ausência de saltos se as seguintes condições são satisfeitas:

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_f &= \tilde{\phi}_f(\tilde{\phi}_U) = \tilde{\phi}_U \quad \text{para } \tilde{\phi}_U \leq 0 \\ \tilde{\phi}_f &= \tilde{\phi}_f(\tilde{\phi}_U) = \tilde{\phi}_U \quad \text{para } \tilde{\phi}_U \geq 1 \\ \tilde{\phi}_U &\leq \tilde{\phi}_f(\tilde{\phi}_U) \leq 1 \quad \text{para } 0 \leq \tilde{\phi}_U \leq 1. \end{aligned} \quad (C1)$$

A correspondente região no diagrama de variável normalizada é ilustrada na figura C1.

Figura C1: Região CBC no plano $\tilde{\phi}_f - \tilde{\phi}_U$

Gaskell e Lau (GASKELL & LAU (1988)), reivindicam que a linha de definição de um esquema limitado deveria estar localizado dentro desta região e vice-versa.

O CBC e a correspondente região no NVD tem sido aceitas como condições necessárias e suficientes para um esquema possuir a característica de ausência de saltos. Recentemente YU *et al.* (2001) indicaram que o CBC é somente uma condição suficiente, e proporam outro critério, denominado “Extended CBC” (ECBC).

PING-LI *et al.* (2003), baseados no NVD revelaram a debilidade do CBC por meio de um exemplo numérico e fizeram refinamentos no CBC baseados em uma cuidadosa consideração da suavidade do padrão de variação de perfil da variável normalizada. A análise feita por eles demonstrou que a primeira e a segunda restrição do CBC (Eq. C1) são suficientes e a terceira condição é necessária e suficiente para a ausência de saltos. O CBC pode somente garantir a ausência de saltos, sem qualquer consideração a respeito da precisão. O novo CBC proposto garante não somente a ausência de saltos, mas também elevado grau de precisão. Eles proporam que uma função contínua ou contínua por partes $\tilde{\phi}_f = F(\tilde{\phi}_U^n)$, possui a propriedade de ausência de saltos com elevada precisão se as seguintes condições forem satisfeitas:

$$\begin{aligned}
 \tilde{\phi}_U \in (-\infty, 0), \quad \tilde{\phi}_f(\tilde{\phi}_U) &\in [\tilde{\phi}_U, 0.5\tilde{\phi}_U] \\
 \tilde{\phi}_U \in [0, 0.5), \quad \tilde{\phi}_f(\tilde{\phi}_U) &\in [1.5\tilde{\phi}_U, 0.5(1+\tilde{\phi}_U)] \\
 \tilde{\phi}_U \in [0.5, 2/3), \quad \tilde{\phi}_f(\tilde{\phi}_U) &\in [0.5(1+\tilde{\phi}_U), 1.5\tilde{\phi}_U] \\
 \tilde{\phi}_U \in [2/3, 1], \quad \tilde{\phi}_f(\tilde{\phi}_U) &\in [0.5(1+\tilde{\phi}_U), 1] \\
 \tilde{\phi}_U \in (1, +\infty), \quad \tilde{\phi}_f(\tilde{\phi}_U) &\in (0.5(1+\tilde{\phi}_U), \tilde{\phi}_U]
 \end{aligned} \tag{C2}$$

A correspondente região no NVD é ilustrada na figura C2.

PING-LI *et al.* (2003) reivindica em seu trabalho que a linha de definição de um esquema limitado com elevada precisão deveria estar localizado dentro desta região e vice-versa.

Figura C2: região ECBC no plano $\hat{\phi}_f - \hat{\phi}_U$

Relação entre o diagrama de Sweby e Variáveis Normalizadas

As equações 3.32 e 3.33, na forma de variáveis normalizadas são escritas (LEONARD (1991)), respectivamente, como

$$\hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U + \frac{1}{2}(1-\nu)\phi_{i+1/2}(1-\hat{\phi}_U) \quad (C3)$$

$$r_{i+1/2} = \frac{\hat{\phi}_U}{1-\hat{\phi}_U}. \quad (C4)$$

Das relações 3.38 e C4, o relacionamento funcional entre $\hat{\phi}_f$ e $\hat{\phi}_U$, tal que satisfaça os princípios TVD, podem ser expressos como:

$$\begin{cases} \hat{\phi}_U \leq \hat{\phi}_f \leq \min \{1-\nu + \nu\hat{\phi}_U, (2-\nu)\hat{\phi}_U\} & \text{para } 0 < \hat{\phi}_U < 1 \\ \hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U, & \text{para } \hat{\phi}_U \leq 0 \text{ ou } \hat{\phi}_U \geq 1 \end{cases} \quad (C5)$$

Esta região está plotada na figura C3(a) para $\nu = 0,25$.

Para cada valor de $\nu \in [0,1]$, a região TVD associada com ν deve permanecer contida na região TVD global (que corresponde a $\nu = 0$, para o caso estável) plotado na figura C3(b), que é definida pelas desigualdades:

$$\begin{cases} \hat{\phi}_U \leq \hat{\phi}_f \leq \min\{1, 2\hat{\phi}_U\} & \text{para } 0 < \hat{\phi}_U < 1 \\ \hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U, & \text{para } \hat{\phi}_U \leq 0 \text{ ou } \hat{\phi}_U \geq 1 \end{cases} \quad (C6)$$

Observação C2.1:

A restrição TVD é mais restritiva do que o critério CBC. Esquemas que satisfazem a restrição TVD são sempre limitados, mas a recíproca não é verdadeira.

Observação C2.2:

Em geral, o requisito TVD é aplicado a escoamentos compressíveis, onde a variável convectiva pode experimentar variações bruscas no gradiente ou descontinuidades numa posição onde ondas de choque se fazem presentes. A restrição TVD pode garantir que nenhum resultado não realístico ocorra na solução do escoamento compressível. O critério CBC é aplicado principalmente a escoamentos incompressíveis.

a) $\nu = 0,25$

b) Região Global

Figura C3: Região TVD em Variáveis Normalizadas

ANEXO D – Propriedades dos Métodos de Solução Numérica

Em geral, os problemas práticos de interesse da engenharia e da física dão origem a sistemas de equações complexos sobre cujos comportamentos matemáticos pouco se conhece. Por exemplo, quando se tem um problema governado por uma única equação, e ainda linear, existem ferramentas matemáticas que podem provar se uma determinada aproximação numérica é estável e convergente. Quando se trabalha com sistemas de equações não lineares, resolvidas em geral de forma sequencial, onde acoplamentos delicados estão presentes, é muito difícil provar matematicamente que uma aproximação numérica é estável e convergente. Seria um presente maravilhoso aos usuários de métodos numéricos se os analistas numéricos pudessem fornecer as condições (tamanho de malha, tamanho do intervalo de tempo, coeficientes de relaxação, etc.) para que as aproximações numéricas dos problemas acoplados e não-lineares fossem estáveis e convergentes.

Por não se ter esses parâmetros é que simular numericamente, além de exigir o perfeito conhecimento da física do problema requer experiência para encontrar os parâmetros que levem o processo iterativo para convergência (MALISKA (1995)).

Dessa forma quando se resolve uma EDP numericamente, é natural questionar se a solução calculada se aproxima, de alguma forma, da solução real da EDP. Para se determinar, fundamentalmente, quando e sob que condições a solução das equações lineares é representativa da solução real da EDP observa-se certas propriedades que um método de solução deveria possuir. Na maioria dos casos, não é possível analisar o método de solução completo. Então se analisa os componentes do método; se os componentes não possuem as propriedades desejadas, o método completo também não possuirá, mas o contrário não é necessariamente verdadeiro. As propriedades mais importantes são resumidas abaixo. Para mais detalhes consultar FERZIGER & PERIC (1999).

1. **Consistência:** A discretização deveria tornar-se exata quando o espaçamento de malha tender a zero. A diferença entre a equação discreta e a exata é denominada de *erro de truncamento*. Para um método ser *consistente*, o erro de truncamento deve tornar-se zero quando o espaçamento de malha $\Delta t \rightarrow 0$ e/ou $\Delta x_i \rightarrow 0$. O erro de truncamento é

normalmente proporcional a uma potência do espaçamento de malha espacial Δx , e/ou do passo temporal Δt . Se o termo mais importante é proporcional a $(\Delta x)^n$ ou $(\Delta t)^n$ o método é dito uma aproximação de n -ésima ordem; $n > 0$ é requerido para consistência. Idealmente, todos os termos deveriam ser discretizados com aproximações de mesma ordem de precisão; entretanto, alguns termos (termos convectivos em escoamentos com elevado número de Reynolds ou termos difusivos em escoamentos com baixo número de Reynolds) podem ser dominantes em um escoamento particular e pode ser mais razoável o tratamento desses termos com mais precisão do que os outros. Mesmo que as aproximações sejam consistentes, não significa necessariamente que a solução do sistema de equações discretas tornar-se-á a solução exata da equação diferencial no limite inferior para o tamanho do passo. Para isto acontecer, o método de solução tem que ser *estável*; isto é definido abaixo.

2. **Estabilidade:** Um método de solução numérica é dito ser *estável* se ele não aumenta o erro que surge ao longo do processo de solução numérica. Para problemas temporais, estabilidade garante que o método produz uma solução limitada se a solução da equação exata é limitada. Para métodos iterativos, um método estável é aquele que não diverge. A estabilidade pode ser difícil de investigar, especialmente quando condições de contorno e não-linearidades estão presentes. Por esta razão, é comum investigar a estabilidade de um método para problemas lineares com coeficientes constantes sem condições de contorno. A experiência mostra que os resultados obtidos desta forma frequentemente podem ser aplicados a problemas mais complexos, mas há notáveis exceções.
3. **Convergência:** Um método numérico é dito *convergente* se a solução das equações discretas tendem à solução exata da equação diferencial quando o espaçamento da malha tende a zero. Para um problema linear de valor inicial, o Teorema de Equivalência de Lax (Richtmyer e Morton, 1967 apud FERZIGER & PERIC (1999)) estabelece que “dado um problema linear de valor inicial corretamente posto e uma aproximação em diferenças finitas para ele que satisfaça a condição de consistência, a

estabilidade é a condição necessária e suficiente para a convergência”. Obviamente, um esquema consistente é inútil a menos que o método de solução convirja. Para problemas não-lineares os quais são fortemente influenciados pelas condições de contorno, a estabilidade e convergência de um método são difíceis de demonstrar. Então a convergência é checada geralmente utilizando experimentos numéricos, isto é repetindo os cálculos em uma série de malhas refinadas sucessivamente. Se o método é estável e se todas as aproximações utilizadas no processo de discretização são consistentes, geralmente encontra-se que a solução converge para uma *solução que é independente da malha*.

4. **Conservação:** Desde que as equações a serem resolvidas são leis conservativas, o esquema numérico também deveria em ambas as bases local e global respeitar estas leis. Isto significa que no regime plenamente estabelecido com ausência de fontes, a quantidade de uma certa propriedade saindo de um volume de controle é igual à quantidade entrando naquele volume. O tratamento do termo fonte deveria ser consistente de forma que a fonte total no domínio é igual à variação da propriedade conservada através das fronteiras. Esta é uma importante propriedade do método de solução, desde que ele impõe uma restrição no erro da solução. Se a conservação da massa, quantidade de movimento e energia estão garantidas, o erro pode somente distribuir de maneira imprópria estas quantidades sobre o domínio de solução.
5. **Limitação:** Soluções numéricas deveriam permanecer dentro de limites próprios. Fisicamente quantidades não negativas (como densidade, energia cinética da turbulência) devem ser sempre positivas; outras quantidades, tais como concentração, devem permanecer entre 0% e 100%. Na ausência de fontes, algumas equações (por exemplo, a equação do calor para a temperatura quando fontes de calor não estão presentes) requerem que valores mínimo e máximo dessas variáveis sejam encontrados nas fronteiras do domínio. Estas condições deveriam ser herdadas pela aproximação numérica.
6. **Realização:** Modelos de fenômenos que são muito complexos de tratar diretamente (por exemplo, turbulência, combustão ou escoamento

multifásico) deveriam ser projetados para garantir soluções fisicamente realísticas. Esta não é uma questão numérica *per se*, mas modelos que não são realizáveis podem resultar em soluções fisicamente incoerentes ou originar métodos numéricos que divergem.

7. Precisão: Soluções numéricas de escoamento de fluidos e problemas de transferência de calor são somente soluções aproximadas. Em adição aos erros que podem ser introduzidos ao longo do desenvolvimento do algoritmo de solução, na programação ou determinação das condições de contorno, soluções numéricas sempre incluem três tipos de erros sistemáticos:

- i) *Erros de modelamento:* são definidos como a diferença entre o escoamento real e a solução exata do modelo matemático;
- ii) *Erros de discretização:* definidos como a diferença entre a solução exata das equações de conservação e a solução exata do sistema de equações algébricas obtidas pela discretização destas equações;
- iii) *Erros de iteração:* definido como a diferença entre as soluções iterativa e exata do sistema de equações algébricas.

O erro de modelagem depende das hipóteses feitas na dedução das equações de transporte para as variáveis. O erro pode ser considerado negligenciável quando se investigam os escoamentos laminares, desde que as equações de Navier-Stokes representam um modelo suficientemente preciso do escoamento. Entretanto, para escoamentos turbulentos, escoamentos de duas fases, combustão, etc., a modelagem do erro pode ser muito maior – a solução exata das equações do modelo podem estar qualitativamente erradas. Erros de modelagem são também introduzidos pela simplificação da geometria do domínio de solução, pela simplificação das condições de contorno etc.