Serviço de Pós-Graduação EESC/USP
EXEMPLAR REVISADO
Data de entrada no Serviço: 15/05/03
Ass.: *Kawaguchi*

**MODELAGEM MATEMÁTICA E SIMULAÇÃO
NUMÉRICA DE ESCOAMENTOS BIFÁSICOS GÁS-
SÓLIDO EM COLUNAS DE LEITO FLUIDIZADO
CIRCULANTE**

Luben Cabezas Gómez

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.

DEDALUS - Acervo - EESC

31100043486

ORIENTADOR: Prof. Dr. Fernando Eduardo Milioli

São Carlos

2003

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato: Engenheiro **LUBEN CABEZAS GÓMEZ**

Tese defendida e julgada em 24-03-2003 perante a Comissão Julgadora:

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

Aprovado

Prof. Dr. **CLOVIS RAIMUNDO MALISKA**
(Universidade Federal de Santa Catarina/UFSC)

Aprovado

Prof. Dr. **ARISTEU DA SILVEIRA NETO**
(Universidade Federal de Uberlândia/UFU)

Aprovado

Prof. Dr. **HELIO APARECIDO NAVARRO**
(UNESP/Campus de Rio Claro)

Aprovado

Prof. Assoc. **MARCIO LUIZ DE SOUZA-SANTOS**
(Universidade Estadual de Campinas/UNICAMP)

Aprovado

Prof. Associado **ARTHUR JOSÉ VIEIRA PORTO**
Coordenador do Programa de Pós-Graduação
em Engenharia Mecânica

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

Dedico este trabalho aos meus pais **Hildefonso e Mirta**, a meus irmãos **Omar, Ivan e Loidel** e a meus avós **Mirta Maria, Miguel, Maria e Francisco** que me deram muito amor e educação. A minha esposa **Isara** e a nosso pequeno **Luben Miguel** fontes de inspiração.

Agradecimentos

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

Aos Professores Dr. Antônio Moreira dos Santos, Dr. Geraldo Lombardi, Dr. Josmar Davilson Pagluiso, Dr. Paulo Seleguin Junior e Dr. Sérgio Rodrigues Fontes, pela colaboração, incentivo, troca de informações e participação conjunta em atividades docentes.

Um agradecimento ao Professor Dr. José Maria Saiz Jabardo, pela transmissão de conhecimentos e material, discussões sobre escoamentos bifásicos e sua amizade.

Ao Professor Dr. Durval Duarte Junior pela amizade e transmissão de conhecimentos.

Ao Professor Dimitri Gidaspow do Illinois Institute of Technology pela troca de informações, fácil acesso e valiosos comentários que contribuíram com o desenvolvimento do trabalho.

Aos Professores Eric Peirano, Johannes Alfonsius Maria Kuipers, e Filip Johnsson pelo envio de suas teses de doutorado, material bibliográfico e informações muito proveitosas para o trabalho.

Ao amigo Professor Dr. Alexis Bruno Alfonso pela ajuda e amizade, discussões científicas e elaboração de programas do Mathematica para apresentação de resultados neste trabalho.

Ao amigo Professor Dr. Helio Aparecido Navarro pelo companheirismo, amizade e troca de conhecimentos.

Ao Prof. Dr. Júlio Romano Meneghini e o pesquisador MSc. Paulo José Saiz Jabardo pelo fornecimento de licença do FLUENT, instalação do Linux e colaboração.

Ao meu amigo Dr. Juan Carlos Horta Gutierrez que possibilitou com sua amizade e grande ajuda a realização deste trabalho.

Aos amigos de sala João Paulo Tureso, Marcio Turra de Ávila, Luciano Vieira de Souza, Fernando de Lima Camargo, Christian Lea Coelho da Costa e José Antônio da Silva pelos bons ensinamentos, agradável convivência e grande amizade.

Aos colegas de trabalho, Cecília, Erika, Fabiana, Gisleine, Grasiela, Juliana, Kelen, Selma, Paula, Vanessa, Viviane, Adriano, Felipe, Fernando Schiavon, Julio,

Keyll, Marcelo Valente, Manoel, Paulo, Renato, Rodrigo e Valdir, pela boa convivência, ajuda e amizade.

Aos colegas do Laboratório de Refrigeração Carlos, Enio, Evandro, Gherhardt, João Roberto, José Roberto, Marcelo, Richard, Samuel e Williams pela ajuda e amizade oferecidas.

Aos meus amigos Roberto Lourenço, Theodomiro Fernando, Artur Jahrmann, Pedro Pablo, Edgüin Capote, Luis Manuel, Camilo, Juan Francisco, Vladimir Regalado, Jesus Eduardo, Ramón Laureiro, Livan, Denis (in memoriam), Gilberto, Felix Echevarria, Barcelo, Osiris Perez, Lazaro Aramis, Andres Alfonso, Alain Rodriguez e Alain Valdes pelos ensinamentos de vida, convivência e grande amizade.

Aos técnicos Roberto Prata Vieira, Evandro Cesar Bueno, José Francisco Torres, Helio José Doniseti pelo seu apoio ao trabalho e amizade.

As secretarias do NETeF pelo atendimento e ajuda.

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

Aos membros da secretaria de graduação do Departamento de Engenharia Mecânica pelas indicações e ajuda recebidas.

Aos membros da secretaria de pós-graduação da EESC pelo atendimento e ajuda recebidas.

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

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

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

À Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), pela bolsa de estudos concedida e apoio financeiro durante a realização de todo o trabalho.

Sumário

LISTA DE FIGURAS	i
LISTA DE TABELAS	xi
LISTA DE SÍMBOLOS	xii
SIMBOLOGIA	xiii
RESUMO	xviii
ABSTRACT	xix
1. INTRODUÇÃO	1
1.1 Aplicações dos escoamentos gás-sólido fluidizados.....	1
1.2 Breve resenha histórica da modelagem numérica aplicada à fluidização	6
1.3 Linhas de modelagem matemática emLFC	8
1.4 Descrição das linhas gerais de modelagem matemática na área de fluidização de escoamentos gás-sólido para os modelos do terceiro tipo	11
1.5 Breve revisão bibliográfica em modelagem matemática e simulação numérica de escoamentos gás-sólido em LFC	14
1.5.1 Formulação Euler/Euler	14
1.5.2 Formulação Euler/Boltzmann (TCEG)	16
1.5.3 Procedimento numérico para formulações Eulerianas (KUIPERS & van SWAAIJ, 1997)	20
1.6 Objetivos e apresentação do trabalho	21
2. FORMULAÇÃO TEORICA	23
2.1 Introdução	23
2.2 Formulação Euleriana/Euleriana clássica	25
2.2.1 Procedimento para a formulação do modelo das duas fases separadas	26
2.2.1.1 Equações locais instantâneas	27
2.2.1.2 Procedimento de médias e equações médias	28
2.2.1.3 Leis de fechamento	31

2.2.1.3.1 Leis constitutivas	32
2.2.1.3.2 Leis de transferência	35
2.2.1.4 Sistema fechado de EDP geral para um escoamento bifásico gás-sólidos	38
2.2.2 Modelos hidrodinâmicos A e B, (IIT/ANL)	39
2.2.3 Condições de contorno	42
2.2.3.1 Análise das direções características do escoamento	44
2.2.3.2 Condições de contorno na parede	45
2.2.3.3 Condições de contorno de simetria	47
2.2.3.4 Condições de contorno na entrada do tubo ascendente (TSUO, 1989)	48
2.2.3.5 Condições de contorno na saída do tubo ascendente (TSUO, 1989)	49
3. METODOLOGIA DE SOLUÇÃO NUMÉRICA	52
3.1 Equações em diferenças finitas em coordenadas cilíndricas (Modelo B)	52
3.1.1 Equações da continuidade	54
3.1.2 Equações de conservação da quantidade de movimento	54
3.2 Técnica de solução (Código MICEFLOW, JAYASWAL, 1991)	59
3.2.1 Detalhes do procedimento iterativo	59
3.2.2 Procedimento para o cálculo iterativo da pressão em uma célula computacional	61
3.3 Prescrição das condições de contorno no programa computacional .	64
4. RESULTADOS DE SIMULAÇÃO	65
4.1 Introdução	65
4.2 Domínios computacionais e condições de contorno	65
4.3 Resultados de simulação com o código MULTIFIX modificado	68
4.3.1 Simulação para um valor fixo de μ_s	68
4.3.2 Simulação para vários valores de μ_s	71
4.4 Resultados de simulação com o código MICEFLOW	75

4.4.1 Estudo da influência de vários parâmetros sobre o escoamento gás-sólido no tubo ascendente de um LFC	75
4.4.1.1 Viscosidade dinâmica do sólido	76
4.4.1.2 Função de arrasto na interface	83
4.4.1.3 Pressão do sólido	90
4.4.1.4 Análise paramétrica sobre a influência de outros aspectos. (Modelo hidrodinâmico, sistema de coordenadas e malha computacional)	97
4.4.1.5 Análises adicionais de efeito da função de arrasto para 100 segundos de simulação com a malha 2	103
4.4.2 Avaliação de resultados de simulação numérica do escoamento gás-sólido no tubo ascendente de um LFC através de metodologia de identificação e caracterização de estruturas coerentes	110
4.4.2.1 Introdução	110
4.4.2.2 Identificação e características dos "clusters"	113
4.4.2.3 Análise das características dos "clusters" a partir dos resultados de simulação numérica	116
4.4.3 Efeito da função de arrasto na interface sobre a dinâmica de formação, dissipação e rompimento de estruturas coerentes	122
4.4.3.1 Introdução	122
4.4.3.2 Análise das características dos "clusters" a partir dos resultados de simulação numérica para as várias correlações de β	124
4.4.3.3 Análise da validade do critério proposto por SHARMA <i>et al.</i> (2000)	129
4.4.4 Estudo numérico de turbulência no escoamento gás-sólido num LFC através de simulação direta	131
4.4.4.1 Introdução	131
4.4.4.2 Cálculo de parâmetros turbulentos do escoamento	133

4.4.4.3 Análise dos parâmetros turbulentos a partir de resultados de simulação direta para ambas as fases	134
5. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	142
5.1 Considerações gerais	142
5.2 Conclusões	151
5.3 Recomendações para futuros trabalhos	153
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	155
APÊNDICE I	171
APÊNDICE II	176
APÊNDICE III	188
APÊNDICE IV	190
APÊNDICE V	193

Lista de Figuras

FIGURA 1.1	Diagrama esquemático de uma caldeira com um combustor de LFC. Instalação SCRUBGRASS (JONES <i>et al.</i> , 1995)	3
FIGURA 1.2	Métodos de modelagem matemática da hidrodinâmica em LFC, tomado de GRACE & LIM (1997)	10
FIGURA 1.3	Tendências atuais da modelagem matemática em fluidização baseada em equações fundamentais (modelos do terceiro tipo)	11
FIGURA 1.4	Fluxo de energia em escoamentos granulares e particulados multifásicos	17
FIGURA 2.1	Procedimentos adotados para modelar um escoamento bifásico (ISHII, 1975 e ISHII & MISHIMA, 1984)	24
FIGURA 2.2	Procedimento geral para a formulação do modelo de duas fases (ENWALD <i>et al.</i> , 1996)	26
FIGURA 2.3	Volume de controle fixo contendo duas fases com interface em movimento	27
FIGURA 2.4	Esquema de um LFC	43
FIGURA 2.5	Diagrama esquemático do domínio computacional	50
FIGURA 3.1	Malha e célula computacional típicas	52
FIGURA 3.2	Malha computacional desfasada para as equações de quantidade de movimento	54
FIGURA 3.3	Método da secante para a correção da pressão	62
FIGURA 3.4	Método restringido das duas secantes para correção da pressão	62
FIGURA 4.1	Geometria e condições iniciais e de contorno usadas na simulação da instalação do IIT (LUO, 1987) assumindo coordenadas cilíndricas 2D	66
FIGURA 4.2	Geometria e condições iniciais e de contorno usadas na simulação da instalação do IIT (LUO, 1987) assumindo coordenadas cartesianas 2D	67

FIGURA 4.3	Variação temporal da fração volumétrica de sólidos no tubo ascendente	69
FIGURA 4.4	Variação temporal do fluxo mássico da fase sólida G_s na altura de 5,3 metros	70
FIGURA 4.5	Perfis de velocidade axial média no tempo, para as fases gasosa e sólida respectivamente, 3,4 metros acima da entrada	71
FIGURA 4.6	Variação temporal do fluxo mássico da fase sólida G_s no tubo ascendente a 5,3 metros acima da entrada para vários valores de μ_s	72
FIGURA 4.7	Perfis radiais médios no tempo da velocidade axial local para ambas as fases 3,4 metros acima da entrada ..	73
FIGURA 4.8	Perfis radiais médios no tempo da fração volumétrica de sólido 3,4 metros acima da entrada	74
FIGURA 4.9	Variação temporal do fluxo mássico da fase sólida, G_s , no tubo ascendente 5,3 m acima da entrada para diferentes valores da viscosidade do sólido	76
FIGURA 4.10	Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 39,9 a 41,0 segundos, para $\mu_s = 0,509 \text{ kg/(ms)}$	77
FIGURA 4.11	Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 39,9 a 41,0 segundos, para $\mu_s = 1,00 \text{ kg/(ms)}$	78
FIGURA 4.12	Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 39,9 a 41,0 segundos, para $\mu_s = 0,00 \text{ kg/(ms)}$	79
FIGURA 4.13	Perfis radiais médios no tempo da velocidade axial para ambas as fases 3,4 metros acima da entrada	80
FIGURA 4.14	Perfis radiais médios no tempo da fração volumétrica de sólidos 3,4 metros acima da entrada	82
FIGURA 4.15	Variação temporal das oscilações da velocidade axial de baixa frequência da fase sólida calculadas 3,4 metros	

	acima da entrada, no centro da coluna, para diferentes valores de μ_s	82
FIGURA 4.16	Variação temporal do fluxo mássico da fase sólida G_s no tubo ascendente 5,3 metros acima da entrada, para várias correlações da função de arrasto	84
FIGURA 4.17	Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 61,5 a 62,6 segundos, com função de arrasto determinada pela correlação de WEN & YU (1966)	85
FIGURA 4.18	Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 70,0 a 71,1 segundos, com função de arrasto determinada pela correlação de DI FELICE (1994)	86
FIGURA 4.19	Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 59,8 a 60,9 segundos, com função de arrasto pela correlação de GIBILARO <i>et al.</i> (1985)	87
FIGURA 4.20	Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 39,9 a 41,0 segundos, considerando função de arrasto definida apenas pela correlação de ERGUN (1952) para toda a faixa da fração volumétrica de sólido α_s	88
FIGURA 4.21	Perfis radiais médios no tempo da velocidade axial para ambas as fases 3,4 metros acima da entrada	89
FIGURA 4.22	Perfis radiais médios no tempo da fração volumétrica de sólido 3,4 metros acima da entrada	89
FIGURA 4.23	Variação temporal das oscilações de baixa frequência da velocidade axial da fase sólida no centro da coluna, 3,4 metros acima da entrada, para diferentes correlações de função de arrasto	90

FIGURA 4.24	Variação temporal do fluxo mássico da fase sólida G_s 5,3 metros acima da entrada para várias correlações do módulo de elasticidade	91
FIGURA 4.25	Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 61,4 a 63,1 segundos, para módulo de elasticidade determinado pela correlação de ETTEHADIEH <i>et al.</i> (1984)	92
FIGURA 4.26	Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 61,4 a 63,1 segundos, para módulo de elasticidade determinado pela correlação de SHIH <i>et al.</i> (1987)	93
FIGURA 4.27	Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 61,4 a 63,1 segundos, para módulo de elasticidade determinado pela correlação de GIDASPOW <i>et al.</i> (1989)	93
FIGURA 4.28	Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 61,4 a 63,1 segundos, para módulo de elasticidade determinado pela correlação de RIETEMA & MUTSERS (1973) apud JAYASWAL (1991)	94
FIGURA 4.29	Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 61,4 a 63,1 segundos, para módulo de elasticidade determinado pela correlação de GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983) ...	94
FIGURA 4.30	Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 61,4 a 63,1 segundos, para módulo de elasticidade determinado pela correlação de JAYASWAL (1991) e SUN & GIDASPOW (1999)	95
FIGURA 4.31	Perfis radiais médios no tempo da fração volumétrica de sólido local 3,4 metros acima da entrada	95

FIGURA 4.32	Perfis radiais médios no tempo da velocidade axial para ambas as fases 3,4 metros acima da entrada	96
FIGURA 4.33	Perfis radiais médios no tempo da velocidade axial do gás e do sólido 3,4 metros acima da entrada	97
FIGURA 4.34	Perfis radiais médios no tempo da fração volumétrica de sólido 3,4 metros acima da entrada	98
FIGURA 4.35	Variação temporal do fluxo mássico da fase sólida G_s e oscilações de baixa frequência da velocidade axial do sólido no centro da coluna 5,3 e 3,4 metros acima da entrada, respectivamente para os modelos A e B	99
FIGURA 4.36	Variação temporal do fluxo mássico da fase sólida G_s , 5,3 metros acima da entrada considerando duas malhas computacionais	100
FIGURA 4.37	Perfis radiais médios no tempo da velocidade axial das fases gasosa e sólida 3,4 metros acima da entrada, considerando duas malhas computacionais	101
FIGURA 4.38	Perfis radiais médios no tempo da fração volumétrica de sólido 3,4 metros acima da entrada	101
FIGURA 4.39	Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 39,9 a 41,6 segundos para a malha 2 (22x297)	102
FIGURA 4.40	Perfis radiais médios no tempo da velocidade axial para ambas as fases 3,4 metros acima da entrada para várias correlações de β	104
FIGURA 4.41	Perfil radial da fração volumétrica de sólido média no tempo 3,4 metros acima da entrada para várias correlações da função de arrasto	105
FIGURA 4.42	Perfis temporais da fração volumétrica de sólido ao longo da altura da coluna para o procedimento de GIDASPOW (1994)	105
FIGURA 4.43	Perfis temporais da fração volumétrica de sólido ao longo da altura da coluna em dois instantes de tempo	

	para as várias correlações de β : (a) ERGUN (1952), (b) WEN & YU (1966), (c) DI FELICE (1994) e (d) GIDASPOW (1994)	106
FIGURA 4.44	Perfis temporais da fração volumétrica de sólido ao longo da altura da coluna em dois instantes de tempo para as várias correlações de β considerando a malha 1, obtidos na Workstation SUN: (a) ERGUN (1952), (b) WEN & YU (1966), (c) DI FELICE (1994) e (d) GIDASPOW (1994)	107
FIGURA 4.45	Perfis temporais da fração volumétrica de sólido em toda a coluna no intervalo de tempo de 39,9 a 41,6 segundos, para a malha 2 (22x297) (a) PC Pentium 4, (b) Workstation SUN Ultra 1	108
FIGURA 4.46	Variação temporal da fração volumétrica de sólido local típica resultante de simulação	114
FIGURA 4.47	Perfis radiais da fração volumétrica de sólido média no tempo em várias seções transversais da coluna, em comparação com resultados experimentais de LUO (1987) obtidos a 3,4 metros acima da seção de entrada .	117
FIGURA 4.48	Perfis radiais da concentração média de sólido nos "clusters", α_{sc} , em várias seções transversais da coluna .	118
FIGURA 4.49	Perfis médios na seção transversal da fração volumétrica de sólido média no tempo, $\langle\alpha_s\rangle$, da concentração média de sólido nos "clusters", $\langle\alpha_{sc}\rangle$, e do tempo de duração dos "clusters", $\langle\tau_c\rangle$, ao longo da coluna	118
FIGURA 4.50	Perfis radiais do tempo de duração dos "clusters", τ_c , em várias seções transversais do leito	119
FIGURA 4.51	Variação radial da fração de tempo de existência dos "clusters", F_c , e da frequência de ocorrência de "clusters", N_c , em várias seções transversais do leito	120

FIGURA 4.52	Valores médios na seção da fração de tempo de existência dos "clusters", $\langle F_c \rangle$, e da frequência de ocorrência de "clusters", $\langle N_c \rangle$, em função da altura da coluna	121
FIGURA 4.53	Perfis radiais da concentração média de sólido nos "clusters", α_{sc} , para várias correlações da função de arrasto	125
FIGURA 4.54	Comparação dos perfis médios na seção transversal da concentração média de sólido nos "clusters", $\langle \alpha_{sc} \rangle$, e da fração volumétrica de sólido média no tempo, $\langle \bar{\alpha}_s \rangle$, ao longo da coluna, para as várias correlações da função de arrasto	126
FIGURA 4.55	Perfis radiais do tempo de duração dos "clusters", τ_c , e perfis axiais do tempo de duração dos "clusters", médio na seção transversal, $\langle \tau_c \rangle$, para as várias correlações da função de arrasto	127
FIGURA 4.56	Fração de tempo de existência dos "clusters" em cada posição radial a 3,4 metros de altura, F_c , e fração de tempo de existência dos "clusters" média na seção, $\langle F_c \rangle$, em função da altura da coluna, para várias correlações de β	128
FIGURA 4.57	Variação radial da frequência de ocorrência de "clusters", N_c , aos 3,4 metros de altura e da frequência de ocorrência de "clusters", média na seção transversal, $\langle N_c \rangle$, ao longo da coluna, para as várias correlações de β	129
FIGURA 4.58	Variação temporal da fração volumétrica de sólido local, na coordenada, $r = -3,62$ cm, aos 3,4 metros de altura considerando a correlação de ERGUN (1952)	130
FIGURA 4.59	Perfis radiais das tensões de Reynolds normais, $\langle u_s' u_s' \rangle$, e cisalhantes, $\langle u_s' v_s' \rangle$, em várias seções transversais do leito	135

FIGURA 4.60	Perfis radiais das tensões de Reynolds normais, $\langle v_s'v_s' \rangle$, e da “temperatura granular” em várias seções transversais do leito	135
FIGURA 4.61	Perfis radiais médios no tempo (dos 20 aos 100 segundos) da velocidade radial para ambas as fases 3,4 metros acima da entrada	136
FIGURA 4.62	Perfis simulados radiais da “temperatura granular” e da fração volumétrica de sólido média no tempo obtidos neste trabalho (a) e por GIDASPOW (2000) (b)	139
FIGURA 4.63	Variação da “temperatura granular” calculados pela Eq. (4.10) (a), e obtidos por NERI & GIDASPOW (2000) através de solução da equação de “energia granular” (b), em função da fração volumétrica de sólido média no tempo	139
FIGURA 4.64	Valores da “temperatura granular” calculados pela Eq. (4.10) (a), e obtidos por GIDASPOW & HUILIN (1998) (b), em função da fração volumétrica de sólido média no tempo	140
FIGURA 4.65	Valores da viscosidade do sólido calculados pela Eq. (4.11) (a), e obtidos por NERI & GIDASPOW (2000) (b), em função da fração volumétrica de sólido média no tempo	141
FIGURA 5.1	Raio e comprimento de aresta mínimos em função da fração volumétrica de sólido calculados pelas Eqs. (5.1) e (5.2)	149
FIGURA B1.1	Módulo de elasticidade da fase sólida segundo as correlações do tipo da Eq. (B1.1) (Eqs. 2.20, B1.5, B1.6, B1.9 da Tabela B1.1)	178
FIGURA B1.2	Módulo de elasticidade da fase sólida segundo as correlações do tipo da Eq. (B1.2) (Eqs. B1.4, B1.7, B1.8, B1.10 da Tabela B1.1)	178

FIGURA B2.1	Comparação das funções de arrasto baseadas no coeficiente de arrasto C_D	183
FIGURA B2.2	Comparação das funções de arrasto baseadas no gradiente de pressão	183
FIGURA B2.3	Comparação das funções de arrasto baseadas no coeficiente de arrasto C_D e no gradiente de pressão $\Delta P/L$	185
FIGURA B2.4	Comparação das funções de arrasto de DING & GIDASPOW (1990), ERGUN (1952) e WEN & YU (1966), para uma velocidade relativa de 1,0 m/s	186
FIGURA B2.5	Comparação das funções de arrasto de DING & GIDASPOW (1990), ERGUN (1952) e WEN & YU (1966), para uma velocidade relativa de 10,0 m/s	186
FIGURA C1.1	Direções características para ambas as fases no tubo ascendente	187
FIGURA E11.1	Comparação de várias correlações da literatura para a viscosidade dinâmica do sólido, μ_s	197
FIGURA E11.2	Comparação de várias correlações da literatura da viscosidade dinâmica do sólido, μ_s , quando $\alpha_s \rightarrow 0$	198
FIGURA E11.3	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)	199
FIGURA E11.4	Ilustração da influência do coeficiente de restituição e sobre a viscosidade dinâmica do sólido μ_s	201
FIGURA E22.5	Comparação de várias correlações da literatura para a função radial de distribuição, g_0	202
FIGURA E22.6	Comparação de várias correlações da literatura para a função radial de distribuição, g_0 . Visualização para o valor limite da concentração de sólidos $\alpha_s \rightarrow 0$	203
FIGURA E22.7	Comparação de várias correlações da literatura para a função radial de distribuição, g_0 com os dados de simulação de ALDER & WAINWRIGHT (1960)	204

FIGURA E22.8 Ilustração da influencia da função radial de distribuição g_0 sobre a viscosidade dinâmica do sólido μ_s	206
--	-----

Lista de Tabelas

TABELA 1.1	Comparação dos modelos fundamentais com os modelos globais (KUIPERS <i>et al.</i> , 1998)	9
TABELA 1.2	Comparação entre modelos contínuos (MC) e discretos (MD) (KUIPERS <i>et al.</i> , 1998)	13
TABELA 2.1	Modelos hidrodinâmicos A e B, (GIDASPOW, 1994) ..	40
TABELA 4.1	Tipos de agrupamentos de partículas (particle clustering) observados em risers de LFCs (BI <i>et al.</i> apud HARRIS <i>et al.</i> , 2002)	111
TABELA 4.2	Dados da temperatura granular para um escoamento no regime que assume o particulado como fluido ideal. (GIDASPOW & HUILIN, 1998)	138
TABELA B1.1	Varias correlações da literatura para o modulo de elasticidade $G(\alpha_g)$	177
TABELA B2.1	Modelos de arrasto na interface	180
TABELA E1.1	Resumo de correlações da literatura para formulação das leis constitutivas segundo a TCEG	193

Simbologia

A	Área da superfície do volume de controle, [m ²]
A_I	Área da interface, [m ²]
B_1, B_2	Constantes na Eq. (B1.1)
c	Constante na Eq. (B1.2)
C	Velocidade do som no gás, [m/s]
C_D	Coefficiente de arrasto para uma partícula numa suspensão de partículas
C_{Ds}	Coefficiente de arrasto para uma partícula num meio infinito
d_p	Diâmetro médio da partícula, [m]
D	Derivada total
D_{ij}	Resíduo da fase gasosa, [kg/m ³]
e	Coefficiente de restituição partícula-partícula
f	Função geral na Eq. (2.7); Função definida pela Eq. (4.7)
F_{arrasto}	Força de arrasto estacionária na interface, [N]
F_{Basset}	Força de Basset, [N]
F_c	Fração temporal de existência dos clusters
$F_{\text{massavirtual}}$	Força denominada como massa virtual, carregada, aparente ou adicionada, [N]
F_{Magnus}	Força ascensional de Magnus, [N]
F_{outras}	Outras forças que atuam na interface, [N]
F_{Saffman}	Força ascensional de Saffman, [N]
g	Aceleração da gravidade, [m/s ²]
g_0	Função radial de distribuição
G	Modulo de elasticidade da fase sólida, [Pa]
G_s	Fluxo mássico da fase sólida, [kg/m ² s]
$\bar{I}$	Tensor unitário
k	Energia cinética turbulenta das partículas, [m ² /s ²]
k_s	Condutividade "granular" do sólido, [kg/m-s]
L_p	Caminho livre médio das partículas segundo a Eq. (2.178), [m]
$\dot{m}_k$	Fluxo de massa da fase k por unidade de área da interface, [kg/(m ² -s)]

M_{kl}	Termo de transferência de quantidade de movimento na interface para a fase k, [N/m ³]
M_{kl}^d	Força de arrasto generalizada na interface da fase k, [N/m ³]
n	Vetor unitário normal externo à superfície; direção normal; número de clusters
$\hat{n}_k$	Vetor unitário normal externo à superfície da fase k
n_p	Número de partículas por unidade de volume, [partículas/m ³]
N	Número de vetores no cálculo da média temporal
N_c	Frequência de ocorrência dos clusters [1/s]
P	Pressão termodinâmica, [Pa]
P_g	Pressão da fase gasosa, [Pa]
P_s	Pressão do sólido, [Pa]
r	Raio, [m]; Direção radial, [m]
R	Constante universal dos gases ideais, [J/kg-K] ($R = 8314$ J/kg-K)
R_w	Raio interno do leito circulante, [m]
R_{min}	Raio mínimo do volume de controle, [m]
Re	Número adimensional de Reynolds
t	Tempo, [s]
T	Temperatura, [K]
$\overline{T}_k$	Tensor das tensões da fase k, [Pa]
u_l	Velocidade de deslocamento da interface, [m/s]
u_k	Velocidade local instantânea da fase k, [m/s]
u_g, v_g	Velocidades radial e axial da fase gasosa médias no volume de controle, [m/s]
u_s, v_s	Velocidades radial e axial da fase sólida médias no volume de controle, [m/s]
v_a	Velocidade de deslocamento da superfície geométrica, [m/s]
v_k	Vetor da velocidade da fase k média no volume de controle, [m/s]
v_r	Vetor da velocidade relativa entre as fases, [m/s]
v_0	Velocidade de deslizamento, [m/s]
V	Volume, [m ³]
V_1, V_2	Volumes das fases 1 e 2, respectivamente, [m ³]

W	Fator de ponderação
x	Coordenada das abcissas, [m]
X_k	Parâmetro densidade de fase
y	Coordenada das ordenadas, [m]; Direção axial, [m], Normal, [m]
z	Direção axial, [m]

Símbolos gregos

α_g	Fração de vazio
α_k	Fração volumétrica da fase k
α_s	Fração volumétrica da fase sólida
$\alpha_{s,max}$	Fração volumétrica da fase sólida de empacotamento
α_{sc}	Concentração média de sólidos nos clusters, [1/clusters]
β	Função de arrasto na interface, [kg/m ³ -s]
β_A, β_B	Função de arrasto na interface para os modelos A e B, [kg/m ³ -s]
δ	Derivada parcial; distancia, [m]
δ_g	Tolerância especificada, [kg/m ³]
δt	Intervalo de tempo, [s]
ϕ_s	Esfericidade da partícula, [-]
γ	Dissipação de energia devido as colisões, [W/m ³]
$\eta_{i,j}$	Parâmetro definido pelas Eqs. (3.22, 3.24 e 3.27)
λ_g, λ_s	Viscosidade volumétrica das fases gasosa e sólida, [kg/m-s]
λ_k	Viscosidade volumétrica da fase k, [kg/m-s]
λ_p	Parâmetro de deslizamento definido pela Eq. (2.180), [m]
$\lambda_{1, 2, 3, 4}$	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]; Direção azimutal, [rad]
ρ_g, ρ_s	Densidade do gás e do sólido, respectivamente, [kg/m ³]
ρ_k	Densidade da fase k, [kg/m ³]
ρ_p	Densidade do particulado, [kg/m ³]

σ	Desvio padrão
τ	Tensor das tensões viscosas para um contínuo, [Pa]; Tempo total
τ_c	Tempo médio de duração do cluster, [s]
τ_{ck}	Tensões devido as forças coesivas no sólido, [Pa]
τ_i	Tempo de duração do cluster, [s]
$\tau_g \tau_s$	Tensor das tensões viscosas do gás e do sólido, respectivamente, [Pa]
τ_k	Tensor das tensões viscosas para a fase k, [Pa]
ϖ	Massa aparente, [kg]
ω	Parâmetro de relaxação (Eq. 3.23)
ξ_s	Viscosidade volumétrica da fase sólida, [kg/m-s]
ψ_k	Propriedade intensiva transportada e conservada

Subscritos

g	Fase gasosa
i	subíndice nas equações discretizadas em diferenças finitas indicando a direção radial ou horizontal
I	Interface
j	subíndice nas equações discretizadas em diferenças finitas indicando a direção axial ou vertical
k	Índice da fase, 1 gasosa, 2 sólida
f	Fluido
mf	Mínima fluidização
s	Fase sólida
p	Particulado, partícula
r	Relativa
w	Parede
1, 2	Fase gasosa e sólida, respectivamente

Sobrescritos

cin	Cinéticos
-----	-----------

col	Colisões
gas	Gás
n	nível de tempo nas equações discretizadas em diferenças finitas
w	Ponderação de um parâmetro dado
$\rightarrow$	Vetor
=	Tensor
–	Valor médio no tempo
'	Flutuação de um parâmetro dado

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
DNS	Direct Numerical Simulation
EDF	Electricité de France
EDO	Equação diferencial ordinária
EDP	Equação diferencial parcial
ICE	Implicit Continuos-fluid Eulerian
IIT	Illinois Institute of Technology
IMF	Implicit Multi Fluid
LES	Large Eddy Simulation
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
TCEG	Teoria cinética dos escoamentos granulares
Tel-Tek/ Hit-TF	Telemark Technologycal R&D Centre/Telemark Institute of Technology
VSSCG	Rotina numérica para calcular as tensões viscosas da fase gasosa
VSSCS	Rotina numérica para calcular as tensões viscosas da fase sólida

Resumo

Cabezas-Gómez, L. (2003). *Modelagem matemática e simulação numérica de escoamentos bifásicos gás-sólido em colunas de leito fluidizado circulante*. São Carlos, 2003. 208 p. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

Foram desenvolvidos estudos de modelagem e simulação numérica de escoamentos bifásicos gás-sólido na coluna ascendente de leitos fluidizados circulantes utilizando um modelo Euleriano de duas fases separadas. O sistema de equações diferenciais parciais conservativas governantes foi obtido através de um procedimento tradicional. Ambas as fases foram assumidas como meio contínuo. Aplicou-se o procedimento de médias estatísticas de Euler, enfatizando a obtenção dos modelos hidrodinâmicos A e B desenvolvidos no IIT/ANL. Realizou-se análise comparativa de correlações para transferência de quantidade de movimento na interface. Discutiu-se a formulação de condições de contorno apropriadas. As equações diferenciais parciais médias foram discretizadas em volumes de controle Eulerianos. As equações de continuidade foram resolvidas implicitamente. As equações de quantidade de movimento foram resolvidas através de um procedimento explícito-implícito. Foram desenvolvidas simulações numéricas para uma coluna ascendente típica de leitos fluidizados circulantes. Desenvolveu-se análise paramétrica da influência de vários aspectos físicos e matemáticos sobre o escoamento. Avaliou-se resultados de simulação através de metodologia de identificação e caracterização de estruturas coerentes. Estudou-se o efeito da função de arrasto na interface sobre os processos dinâmicos que caracterizam estas estruturas coerentes. Foram realizados estudos numéricos de turbulência a partir de resultados de simulação direta. Várias conclusões e recomendações para futuros trabalhos foram propostas com base nas análises realizadas. Foram apresentadas algumas considerações gerais relativas a aspectos críticos na modelagem e simulação com modelo das duas fases separadas.

Palavras-chave: escoamentos bifásicos gás-sólido, modelo das duas fases separadas, modelagem matemática, simulação numérica, leitos fluidizados circulantes, risers, clusters.

Abstract

Cabezas-Gómez, L. (2003). *Mathematical modeling and numerical simulation of gas-solid two-phase flows in risers of circulating fluidized beds*. São Carlos, 2003. 208 p. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

Studies were carried out on modeling and numerical simulation of gas-solid two-phase flows in the riser of circulating fluidized beds using an Eulerian two-fluids model. The system of conservative partial differential governing equations was derived through a traditional procedure. Both phases were assumed as a continuum. The Euler averaging procedure was applied emphasizing the derivation of the so called hydrodynamic models A and B developed at IIT/ANL. A comparative analysis was performed among correlations for momentum transfer at the interface. The formulation of suitable boundary conditions was discussed. The average partial differential conservative equations were discretized on Eulerian control volumes. The continuity equations were solved implicitly. The momentum equations were solved through an explicit-implicit procedure. Numerical simulation was performed for a typical circulating fluidized bed riser. A parametric analysis was carried out regarding the influence on the flow of various physical and mathematical aspects. Results of simulation were evaluated through a methodology of identification and characterization of coherent structures. The effect of the interface drag function on dynamic features of those coherent structures was addressed. Numerical studies on turbulence were performed from results of direct simulation. Several conclusions and recommendations for future work were put forward on the basis of the performed analyses. Some general considerations were presented regarding critical features of modeling and simulation through Eulerian two-fluids models.

Keywords: Two-phase gas-solid flow, two-fluid model, mathematical modeling, numerical simulation, circulating fluidized bed, riser, clusters.

CAPÍTULO 1. INTRODUÇÃO

1.1 – Aplicações dos escoamentos gás-sólido fluidizados

A fluidização gás-sólido tem variadas aplicações industriais 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 termoelétrica de energia em larga escala, e no craqueamento catalítico do petróleo para a produção de gasolina e outros derivados.

Há vários tipos de reatores de leito fluidizado com aplicação industrial, sendo os mais utilizados os reatores de leito fluidizado borbulhante (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, onde 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. Para os leitos circulantes de combustão (LFCC) de carvão a velocidade do gás e a taxa de recirculação de sólidos são tipicamente 5-8 m/s e

menos de $40 \text{ kg/m}^2 \text{ s}$, respectivamente. Por outro lado, no craqueamento catalítico (LFCCC) estas variáveis são substancialmente mais altas, e.g., 15-20 m/s (na saída do tubo ascendente) e maior que $300 \text{ kg/m}^2 \text{ s}$, respectivamente (FAN & ZHU, 1998). Outras diferenças significativas destes dois sistemas referem-se a razão altura/diâmetro, sendo cerca de 10 para os sistemas LFCC e maior de 20 para os sistemas LFCCC, e na forma da seção transversal, tipicamente retangular para o primeiro tipo de sistema e circular no segundo (PEIRANO & LECKNER, 1998).

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 uso da combustão estagiada permite um bom controle das emissões de óxidos de nitrogênio NO_x e uma boa taxa de recirculação no tubo ascendente. O grande contato entre o gás e o sólido assim como o relativamente grande tempo de residência do sólido no leito permitem uma melhor captura do enxofre para uma dada razão Ca/S de alimentação, (TSUO, 1989).

A Figura 1.1 mostra o diagrama esquemático da instalação industrial de uma caldeira a vapor com um combustor de LFC desenvolvida pela empresa Scrubgrass Generating Company. O objetivo desta instalação é a geração de energia elétrica (95 MW) a partir de duas unidades de LFCC projetadas para a queima de resíduos de carvão betuminoso numa ampla faixa (JONES *et al.*, 1995). As partes principais desta instalação são o sistema de alimentação de carvão (1), a fornalha no tubo ascendente do leito circulante (2), o recipiente separador do vapor de água (3), os ciclones separadores quentes que recirculam o leito (4), os trocadores de calor de superaquecimento do vapor de água (5), o economizador para preaquecimento da água de alimentação (6), os trocadores de calor de aquecimento do ar primário de alimentação do leito (7) e o sistema utilizado para recolher as cinzas de carvão do processo de combustão (8).

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 à 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.

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

A tecnologia de fluidização gás-sólido apresenta ainda problemas a serem resolvidos, tais como a forte erosão das superfícies internas ao leito, tubos de troca de calor, válvulas, etc., e a possível bloqueio das partículas finas no tubo ascendente. Além disso, devido à sensibilidade do escoamento fluidizado à escala e às condições operacionais, o processo de escalonamento torna-se extremamente complexo (DING, 1990). Os estudos hidrodinâmicos podem contribuir de forma significativa para o melhor conhecimento e solução desses problemas.

A hidrodinâmica do escoamento em colunas de 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. Estuda-se perfis axiais da fração de vazão 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 sólido em toda a coluna ("overall solids holdup") (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 as colisões partícula-partícula e a sua difusão, e devido aos efeitos das colisões partícula-parede. Esses efeitos provocam um achatamento 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.* (1989a) 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 constatado 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 das 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 "cluster" 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 complexas condições de escoamento provêm um intenso contato superficial entre gases e sólidos, garantindo as altas taxas de reação, necessárias aos processos reativos.

HORIO (1997) apontou, que no caso dos LFCCC, a existência de "clusters" e de um fluxo descendente de sólido ao longo das paredes provocam uma circulação interna de sólidos não favorável devido ao incremento da mistura do gás (backmixing) e o conseqüente decréscimo da produção. Para os LFCC esta circulação de sólido na região superior dispersa é favorável a transferência de calor para as paredes e para transportar a energia gerada 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; e permite a determinação de concentrações de gases gerados no processo, incluindo emissões de poluentes.

1.2 – Breve resenha histórica da modelagem numérica aplicada à 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. Através 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 já desenvolvido.

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 (DING, 1990). 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 as 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 de difícil execução. Assim, o desenvolvimento de modelagem representa também um estímulo ao desenvolvimento de novas técnicas e métodos experimentais.

1.3 – Linhas de modelagem matemática em LFC

Segundo PUGSLEY & BERRUTI (1996) existem três tipos de modelos matemáticos utilizados para modelar os processos de fluidização gás-sólido em LFC:

1. Os modelos que predizem a variação axial da densidade da suspensão de sólidos, mas que não caracterizam a variação radial.
2. Os modelos que predizem a variação radial da densidade da suspensão de sólidos e as altas velocidades médias de deslizamento, assumindo duas ou mais regiões com diferentes características de escoamento (por exemplo, os modelos pistonado anular e de escoamento anular com agregados).
3. Os modelos que utilizam as equações fundamentais da dinâmica dos fluidos para prever o escoamento bifásico gás-sólido.

Os dois primeiros tipos de modelo são preferencialmente utilizados como ferramentas de projeto, para investigar os efeitos das condições de operação e das dimensões do tubo ascendente do leito na estrutura do escoamento. Estes modelos

podem ser facilmente acoplados à modelos cinético-químicos para simular o desempenho dos reatores de LFC (PUGSLEY & BERRUTY, 1996). Os modelos do terceiro tipo são mais adequados para pesquisar as estruturas locais do escoamento, e para verificar a influência local da geometria sobre o escoamento (PUGSLEY & BERRUTY, 1996). KUIPERS *et al.* (1998) observam que a utilização destes modelos para projeto e operação de reatores de leito fluidizado experimentará uma significativa expansão num futuro próximo. Estes autores apresentam uma breve comparação, mostrada a seguir na Tabela 1.1, entre os vários tipos de modelo. Na tabela os modelos do 3ro tipo são denominados modelos de micro balanços detalhados ou modelos fundamentais, enquanto os modelos do 1ro e 2do tipos são denominados modelos globais do sistema ou modelos de reatores clássicos. Os modelos fundamentais são também referidos como baseados em primeiros princípios, e os globais como fenomenológicos.

Tabela 1.1 Comparação dos modelos fundamentais com os modelos globais
(KUIPERS *et al.*, 1998).

Modelos fundamentais	Modelos globais
Vantagens	Vantagens
Disponibilidade de uma solução mais exata; o fenômeno descreve-se por cálculos de forma direta; pode-se obter equações de balanço formais de maneira rigorosa; pode-se visualizar o processo.	Modelos e soluções simples que facilitam a compreensão do fenômeno; modelos adaptáveis à informação requerida; uma capacidade limitada de cálculo é suficiente; pode-se obter predição exata do comportamento do sistema por posterior ajuste de parâmetros.
Desvantagens	Desvantagens
Requer-se: Conhecimento detalhado de processos elementares; redução de dados; grande capacidade de cálculo; esforço computacional adicional para cada problema específico; e o comportamento macroscópico nem sempre é obtido com exatidão.	Necessita-se de conhecimento prévio do fenômeno além de imaginação; necessita-se de validação experimental prévia e ajuste de parâmetros; o sentido dos parâmetros é as vezes pouco claro devido às considerações médias feitas.

Da Tabela 1.1 pode-se notar que existem vantagens e desvantagens no uso de determinado tipo de modelo. De fato, segundo PUGSLEY & BERRUTY (1996),

existe grande controvérsia entre os pesquisadores quanto a que tipo de filosofia de modelagem seria mais válida.

GRACE & LIM (1997) apresentam classificação de procedimentos para desenvolvimento de modelos matemáticos para LFC mais abrangente que a apresentada por PUGSLEY & BERRUTY (1996). Basicamente, dividem os modelos matemáticos em três grupos (Figura 1.2):

1. Modelos unidimensionais ou de uma região. Inclui-se dois modelos, os que permitem gradientes axiais das variáveis hidrodinâmicas (primeiro tipo) e os que não permitem estes gradientes.
2. Modelos de duas regiões, central e anular (core/annulus models), sem considerar e considerando gradientes axiais das variáveis hidrodinâmicas (segundo tipo).
3. Outros modelos mais sofisticados tais como: modelos bifásicos gás/aglomerados, modelos de fluxos ascendentes/descendentes, modelo de Monte Carlo, modelos baseados em equações fundamentais da mecânica dos fluidos (modelos do terceiro tipo), e modelos transientes.

Figura 1.2. Métodos de modelagem matemática da hidrodinâmica em LFC, tomado de GRACE & LIM (1997).

Esta classificação deixa claro a dificuldade de escolha do tipo de modelo e do estabelecimento de sua validade na simulação de processos de fluidização em LFC.

1.4 – Descrição das linhas gerais de modelagem matemática na área de fluidização de escoamentos gás-sólido para os modelos do terceiro tipo

Neste trabalho desenvolve-se modelagem do terceiro tipo. A Figura 1.3 apresenta as linhas ou tendências atuais da modelagem nessa classe de modelos.

Figura 1.3. Tendências atuais da modelagem matemática em fluidização baseada em equações fundamentais (modelos do terceiro tipo).

O método de Euler ou formulação Euleriana tem sido muito utilizado na modelagem dos processos de fluidização, tendo resultado em dois procedimentos principais: os modelos tradicional e o baseado na teoria cinética dos escoamentos granulares (TCEG). O modelo tradicional, também denominado **modelo das duas fases separadas** é bastante explorado na literatura. Entre as inúmeras publicações relevantes destaca-se GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983), SYAMLAL & GIDASPOW (1985), GIDASPOW (1986), BOUILLARD *et al.* (1989), KUIPERS *et al.* (1993), entre outras. A desvantagem do modelo tradicional consiste na necessidade de introduzir a viscosidade dinâmica do sólido, μ_s , como um dado obtido

experimentalmente, por exemplo, mediante um balanço de quantidade de movimento, como mostrado em MILLER & GIDASPOW (1992). Devido a esse fato este modelo é também denominado modelo das duas fases separadas de viscosidade constante.

Os modelos baseados na TCEG para tratamento da fase sólida são atualmente adotados pela maioria dos pesquisadores, embora ainda não tenha sido demonstrado que possam produzir resultados mais realistas que os obtidos através do modelo das duas fases com viscosidade constante (KUIPERS & VAN SWAAIJ, 1997). A TCEG foi desenvolvida por vários pesquisadores com base na teoria cinética dos gases densos (CHAPMAN & COWLING, 1961). A grande vantagem dos modelos baseados nessa teoria é que permitem calcular diretamente o valor de μ_s . Suas desvantagens são a maior complexidade numérica e a necessidade de mais tempo de processamento computacional. Alguns dos trabalhos que utilizam a TCEG são DING & GIDASPOW (1990), BOEMER *et al.* (1995), KIM & ARASTOOPOUR (1995), e SAMUELSBERG & HJERTAGER (1996a,b), entre outros.

A formulação de Euler-Lagrange constitui outra linha de modelagem numérica atualmente utilizada em fluidização. Nessa formulação, em geral, a fase gasosa é modelada como uma fase continua pelo método das médias de Euler, enquanto a fase sólida é modelada utilizando a formulação Lagrangeana. De maneira geral essa linha de modelagem permite uma melhor compreensão da forma em que as partículas interagem. Também é útil como uma ferramenta para obter novos modelos reológicos das suspensões fluidizadas, e portanto para melhorar a formulação das leis de fechamento, necessárias nos modelos contínuos (KUIPERS & VAN SWAAIJ, 1997).

Há três procedimentos gerais deste tipo de formulação: o procedimento das partículas discretas, o modelo da dinâmica de Stokes, e o método das pseudo partículas. No procedimento das partículas discretas o movimento das partículas individuais é calculado diretamente a partir das forças que atuam sobre elas, levando em consideração as interações partícula-partícula e partícula-parede, assim como o arrasto entre as partículas e a fase gasosa intersticial. Os trabalhos de TSUJI *et al.* (1993, 1998), XU & YU (1997,) e de HOOMANS *et al.* (1996) são representativos

deste procedimento. Os três primeiros trabalhos utilizam o modelo das partículas brandas, considerando que as partículas são esferas que se deformam durante as interações entre si. O último trabalho utiliza o modelo das partículas duras, considerando as partículas como esferas quase rígidas que não sofrem deformações durante as interações.

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

A formulação Lagrangeana aplicada à fase sólida implica em que um conjunto de equações (segunda e terceira leis de Newton) seja gerado e resolvido para cada partícula no domínio físico de cálculo. Esse fato dificulta tremendamente sua aplicação à escoamentos contendo grandes quantidades de partículas, como é o caso de escoamentos em LFC, em vista das limitações dos recursos computacionais atuais.

Na Tabela 1.2 mostra-se uma comparação entre modelos contínuos (Euler-Euler) e discretos (Euler-Lagrange), tomada de KUIPERS *et al.* (1998). Segundo estes autores, a variedade e o grau de complexidade dos sistemas de fluidização demandam um procedimento integrado de modelagem, onde modelos mais sofisticados devem ser usados para alimentar modelos com forte base empírica. Nesse contexto, os modelos discretos oferecem uma ferramenta para desenvolver leis de fechamento para as interações partícula-partícula e partícula-parede, que podem ser usadas e testadas em modelos contínuos.

Tabela 1.2. Comparação entre modelos contínuos (MC) e discretos (MD) (KUIPERS *et al.*, 1998).

	MC	MD
Utilidade para predições de processos em escala real.	+	–
Incorporação dos efeitos distribuídos sob a fase dispersa (sólida)	–	+
Esforço computacional	+	–
Nível de detalhamento computacional	–	+
Fechamento das equações	–	+

1.5 – Breve revisão bibliográfica em modelagem matemática e simulação numérica de escoamentos gás-sólido em LFC

O desenvolvimento de trabalhos de modelagem matemática e simulação numérica de escoamentos gás-sólido em LFB e LFC abrange, na atualidade, a atenção de muitos grupos de pesquisa no mundo todo. De acordo com ENWALD *et al.* (1996), ao longo de quinze anos (até a data de publicação), tinham-se destacado oito grupos de pesquisa importantes. Um resumo dos trabalhos desenvolvidos por esses grupos apresenta-se no artigo de Enwald *et al.* e em CABEZAS-GÓMEZ (1999). Na atualidade, outros grupos de pesquisa têm-se desenvolvido e trabalham intensivamente nesta área de investigação. A seguir comenta-se trabalhos e metodologias relevantes considerando as seguintes temáticas fundamentais: formulação Euler/Euler, formulação Euler/Boltzman e métodos de solução numérica para escoamentos multifásicos seguindo KUIPERS & van SWAAIJ (1997).

1.5.1 – Formulação Euler/Euler

Na formulação Euleriana/Euleriana ambas as fases são modeladas como meio contínuo. No processo de obtenção destas equações, surgem termos que representam o transporte na interface das propriedades conservadas (massa, quantidade de movimento e energia). A modelagem destes termos, assim como a formulação do modelo reológico, constituem o problema fundamental da modelagem Euleriana. Frequentemente assume-se a hipótese de fluido Newtoniano para ambas as fases. No caso da fase sólida esta consideração implica na procura de um valor, fisicamente coerente, para a viscosidade dinâmica da fase sólida μ_s . Uma solução oferecida na literatura é a aplicação de um balanço de quantidade de movimento para a mistura na seção transversal, como feito em MILLER & GIDASPOW (1992). Aplica-se à equação resultante perfis experimentais radiais da velocidade axial e da fração volumétrica do sólido, e do gradiente axial de pressão da fase gasosa, e determina-se o valor de μ_s . Outra solução encontrada na bibliografia é a formulação e uso da

TCEG, através da qual o valor de μ_s é obtido teoricamente. Nos modelos tradicionais considera-se apenas o primeiro tipo de procedimento.

O trabalho pioneiro na simulação de escoamentos gás-sólido em LFC utilizando o modelo tradicional das duas fases separadas com viscosidade constante foi o de TSUO & GIDASPOW (1990) desenvolvido pelo grupo do IIT (Illinois Institute of Technology). Neste trabalho apresentou-se um estudo de simulação numérica sobre a formação de "clusters" considerando dois aspectos básicos: a descrição de várias características dos "clusters" e a discussão sobre o efeito de vários parâmetros no seu processo de formação. Apesar da atual tendência de utilização da TCEG, trabalhos de simulação recentes têm sido desenvolvidos com o modelo de viscosidade constante (BENYAHIA *et al.*, 1998 e SUN & GIDASPOW, 1999). No trabalho de SUN & GIDASPOW (1999) foi predito um efeito até então desconhecido, i.e. um perfil radial da velocidade mássica do sólido com valor máximo deslocado do centro da coluna do leito. Este efeito foi comparado satisfatoriamente com dados experimentais (BERRUTI *et al.*, 1995).

Recentemente AGRAWAL *et al.* (2001) sugerem que o procedimento adotado por TSUO & GIDASPOW (1990) é válido se o valor de μ_s for determinado a partir de simulação em malha bem refinada (a nível das mesoescalas), que possibilite considerar a influência das flutuações de microescala. Neste caso seria obtida uma correlação para μ_s em função da fração volumétrica de sólido e da taxa de deformação a partir de soluções numéricas, numa malha bem fina, em domínio computacional equivalente a uma célula da malha mais grossa, sobre a qual seria resolvido o escoamento macroscópico. A desvantagem deste procedimento é a necessidade de usar uma malha computacional grossa uniforme. Isso é necessário devido ao fato de que μ_s resulta dependente do domínio computacional da malha refinada. No presente trabalho assume-se o procedimento de TSUO & GIDASPOW (1990).

1.5.2 – Formulação Euler/Boltzmann (TCEG)

O modelo das duas fases separadas para escoamentos gás-sólido necessita de leis constitutivas para a formulação do tensor das tensões em cada fase analisada. Para fases contínuas frequentemente considera-se modelo reológico Newtoniano, o que é bastante razoável. No caso de fases dispersas em geral assume-se essa mesma hipótese, o que constitui uma aproximação muito 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).

Atribui-se a BAGNOLD (1954) os primeiros desenvolvimentos que levaram a atual formulação da TCEG. Através do uso de uma expressão bastante simples para a frequência das colisões das partículas, este autor derivou uma expressão para a pressão “repulsiva” das partículas num escoamento cisalhante uniforme. Esta pressão “repulsiva” é diretamente proporcional ao quadrado do gradiente de velocidade e do diâmetro das partículas, e inversamente proporcional à densidade do particulado. Esta mesma relação de dependência é encontrada nas teorias modernas (GIDASPOW, 1994).

OGAWA, UMEMURA & OSHIMA (1980) sugeriram que a energia mecânica de um escoamento granular é transformada primeiramente em energia de movimento aleatório do particulado, que é então convertida em energia interna, como se mostra na Figura 1.4. Estes autores formularam uma equação de conservação da energia na qual a energia cinética do movimento aleatório do particulado é produzida por cisalhamento e dissipada como um fluxo de calor e uma fonte. SAVAGE & JEFFREY (1981) relacionaram esta velocidade flutuante ao valor absoluto do gradiente das tensões cisalhantes, e observaram que a teoria cinética para gases

densos, como descrita em CHAPMAN & COWLING (1961), poderia ser usada. Anteriormente SOO (1967) usou um procedimento similar. JENKINS & SAVAGE (1983) continuaram o desenvolvimento do procedimento da TCEG fazendo uma modificação do tratamento clássico da dinâmica do encontro entre duas partículas através da introdução do conceito do coeficiente de restituição, e utilizando a equação de transporte de Boltzmann para gases densos (GIDASPOW, 1994).

Figura 1.4. Fluxo de energia em escoamentos granulares e particulados multifásicos.

Dentre os principais trabalhos relacionados ao desenvolvimento da TCEG destaca-se SAVAGE (1983), JENKINS & SAVAGE (1983), LUN *et al.* (1984), JENKINS & RICHMAN (1985). Outros trabalhos serviram como ponto de partida para o desenvolvimento da TCEG voltada para escoamentos multifásicos gás-sólido de aplicação industrial, fundamentalmente em processos de fluidização gás-sólido. Entre estes, destaca-se SINCLAIR & JACKSON (1989), DING & GIDASPOW (1990), BOEMER *et al.* (1995) e KIM & ARASTOPOUR (1995), entre outros.

A formulação da TCEG para o modelo dos dois fluidos, segundo PEIRANO & LECKNER (1998), pode ser desenvolvida através de dois procedimentos fundamentais: o primeiro que considera um escoamento granular seco, sem influência do gás intersticial (DING, 1990; DING & GIDASPOW, 1990), e o segundo que considera o efeito do gás intersticial entre as partículas (MA & AHMADI, 1988; BALTZER *et al.*, 1995). No contexto deste trabalho discute-se o primeiro procedimento. PEIRANO & LECKNER (1998) apresentam uma detalhada discussão do segundo procedimento aplicado a escoamentos turbulentos gás-sólido em LFC.

SINCLAIR & JACKSON (1989) foram os primeiros a propor uma descrição fundamental das tensões na fase sólida no contexto do modelo das duas fases usando a TCEG, aplicando o procedimento especificamente ao escoamento em LFC. Estes autores descrevem de maneira sucinta o significado físico da "temperatura granular", que constitui uma definição análoga a da temperatura de um gás como descrito nas termodinâmicas clássica e estatística.

Após o trabalho pioneiro de SINCLAIR & JACKSON (1989), DING (1990) e DING & GIDASPOW (1990) aplicaram pela primeira vez a TCEG na simulação hidrodinâmica de um LFB considerando escoamento granular seco. Neste caso a função distribuição de velocidade do sólido é modelada através da distribuição de Maxwell, o que faz válido este procedimento apenas para escoamentos gás-sólido densos (LFB). Entretanto, esta metodologia foi estendida para escoamentos dispersos (GIDASPOW, 1994), possibilitando o seu uso na simulação de LFC (GIDASPOW *et al.*, 1992 e THERDTHIANWONG, 1994). No primeiro trabalho foi simulado processos reativos no circuito completo de um LFC. Utilizou-se a TCEG e foi modelada a turbulência da fase gasosa usando a técnica LES (*large eddy simulation*).

Em trabalhos posteriores, KIM & ARASTOPOUR (1995, 2002) estudaram o efeito das forças coesivas entre partículas em escoamentos em LFC fazendo uso da TCEG, e considerando a turbulência para a fase gasosa. NIEUWLAND *et al.* (1996) modelaram o escoamento gás-sólido num LFC utilizando o modelo das duas fases, introduzindo turbulência na fase sólida através da TCEG, e na fase gasosa utilizando o modelo modificado do comprimento de mistura de Prandtl. Nesse contexto deve-se destacar que muitos autores tratam a TCEG como uma teoria que modela a turbulência da fase sólida. Porém, isto ainda é questão não resolvida como se infere da revisão apresentada por SINCLAIR (1997). Sinclair observa que a "temperatura granular" é definida a partir das flutuações de velocidade de partículas individuais, enquanto as flutuações de velocidade de coleções de partículas definem a energia cinética turbulenta da fase sólida. São estas últimas flutuações de velocidade que devem ser modeladas através de modelos de turbulência. Alguns autores têm utilizado uma extensão do modelo k- ϵ de escoamentos monofásicos para esse fim (DASGUPTA *et al.*, 1994, 1998, HRENYA & SINCLAIR, 1997, entre outros). Esses

modelos contém certa quantidade de empirismo tomado dos modelos turbulentos para escoamentos monofásicos e portanto, devem ser melhorados para uso em escoamentos gás-sólido. Exemplo de outros trabalhos recentes que utilizam a TCEG na simulação do escoamento em LFC são os de NERI & GIDASPOW (2000), BENYAHIA *et al.* (2000), IBSEN *et al.* (2001) e WANG & LI (2001).

O grupo de pesquisa do Tel-Tek/HiT-TF (*Telemark Technological R&D Centre/Telemark Institute of Technology*) tem realizado simulações do processo de fluidização em LFCs, considerando três fases de particulado e uma de gás. O modelo utilizado baseia-se na TCEG para cada uma das fases sólidas em escoamento granular seco, e utiliza a técnica LES para a fase gasosa. Entre os trabalhos desenvolvidos tem-se: SAMUELSBERG & HJERTAGER (1996a,b), MATHIESEN *et al.* (1998, 2000a,b), e MATHIESEN *et al.* (1999). Segundo PEIRANO & LECKNER (1998) os resultados obtidos no Tel-Tek/HiT-TF parecem prever corretamente os efeitos de segregação e as flutuações de velocidade das partículas. HUILIN *et al.* (2001) e MATHIESEN *et al.* (2000a) tomando como base o trabalho de JENKINS & MANCINI (1987) apresentam a dedução das equações de balanço da TCEG. Porém, um modelo da TCEG para várias fases sólidas que inclua o efeito do fluido intersticial ainda não foi desenvolvido. Recentemente van WACHEM *et al.* (2001) desenvolveram um modelo da TCEG considerando uma mistura de duas espécies de partículas, cada uma delas caracterizada por uma distribuição do tamanho de partícula característica. Em vez de obter uma equação da "temperatura granular" para cada espécie, formulou-se apenas uma equação considerando uma mistura binária de partículas esféricas lisas e quase elásticas. Apesar de serem obtidos resultados de simulação apenas para um LFB, a extensão do procedimento para LFC pode representar uma outra via de utilização da TCEG.

Uma das análises mais completas utilizando o modelo das duas fases separadas incluindo a TCEG tem sido realizada pelo grupo da EDF (*Electricité de France*) (PEIRANO, 1998). A TCEG desenvolvida por este grupo leva em conta a influência do fluido intersticial, o que possibilita aplicar o modelo para todas as concentrações de sólido, assim como modular a turbulência do escoamento. Entende-se por modulação a consideração do efeito da presença das partículas sobre a

turbulência da fase gasosa e vice-versa (CROWE, 2000). As simulações desenvolvidas utilizam modelos de turbulência completos para ambas as fases (de segunda ordem), e resolvem quatro equações de transporte acopladas entre si. Os autores assumem temperatura granular é igual à três meios da energia cinética turbulenta da fase sólida, em contraposição à proposta do grupo de Princeton (SINCLAIR, 1997), mas em concordância com muitos trabalhos da literatura (NERI & GIDASPOW, 2000, MATHIESEN *et al.*, 2000a,b, entre outros). Simulações tridimensionais, inclusive de instalações industriais de LFC, são apresentadas 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.

1.5.3 – Procedimento numérico para formulações Eulerianas (KUIPERS & van SWAAIJ, 1997)

O desenvolvimento dos métodos computacionais de Euler para escoamentos multifásicos foi iniciado por HARLOW & AMSDEN (1975) no laboratório científico Los Alamos. Estes autores desenvolveram um método numérico semi-implícito (KUIPERS *et al.*, 1993) denominado IMF (Implicit Multi Fluid), que é uma extensão do método ICE (Implicit Continuous-Fluid Eulerian) desenvolvido em trabalho anterior (HARLOW & AMSDEN, 1971). Devido ao carácter implícito incorporado no método ICE a limitação sônica no avanço temporal (critério CFL), usualmente encontrada nas técnicas de diferenças finitas explícitas, é removida (KUIPERS *et al.*, 1993). O método IMF é a base de muitos desenvolvimentos posteriores tais como RIVARD & TORREY (1977, 1979) apud KUIPERS & VAN SWAAIJ (1997) e COOK *et al.* (1981).

Variados códigos computacionais têm sido desenvolvidos usando este método para aplicação em fluidização. Como exemplo cita-se os códigos desenvolvidos no grupo de pesquisa do IIT/ANL: K-FIX modificado (ETTEHADIEH, 1982),

MULTIFIX (SYAMLAL, 1985), FLUFIX (BOUILLARD, 1986), IFAP (DING, 1990), MICEFLOW (JAYASWAL, 1991), IFAP3D (GAMWO, 1992). Outros códigos numéricos foram desenvolvidos por KUIPERS (1990), ENWALD & PEIRANO (1997) e PEIRANO (1997) (GEMINI-I e GEMINI2D, respectivamente).

1.6 – Objetivos e apresentação do trabalho

Os principais objetivos deste trabalho são: 1) estudo de formulações teóricas do modelo das duas fases separadas usado na modelagem matemática de escoamentos bifásicos gás-sólido em leitos fluidizados. 2) Simulação computacional e análise de resultados.

O trabalho subdivide-se em cinco capítulos sumarizados a seguir.

Capítulo 1. Apresentação sucinta do problema de interesse oferecendo uma breve resenha histórica da modelagem numérica de escoamentos gás-sólido em fluidização, apresentação das linhas de modelagem matemática em LFC, descrição geral das linhas de modelagem matemática de escoamentos gás-sólido na área de fluidização, e revisão bibliográfica da modelagem matemática e simulação numérica de escoamentos gás-sólido em LFC.

Capítulo 2. Expõe-se a formulação teórica do modelo das duas fases separadas utilizando o procedimento tradicional, enfatizando a obtenção dos modelos hidrodinâmicos A e B utilizados no IIT/ANL. Analisa-se as leis de fechamento para escoamentos bifásicos gás-sólido. Apresenta-se uma análise comparativa das correlações usadas na formulação das leis de transferência, especificamente de quantidade de movimento. Finalmente apresenta-se uma discussão de aspectos referentes a condições iniciais e de contorno.

Capítulo 3. Apresentação e discussão sucinta do código computacional MICEFLOW (JAYASWAL, 1991) desenvolvido no IIT e utilizado neste trabalho.

Capítulo 4. Discussão dos resultados de simulação numérica 2D obtidos com o modelo B no tubo ascendente da instalação de transporte do IIT. Apresenta-se várias metodologias de análise e discussão dos resultados de simulação incluindo: análise paramétrica da influência de vários aspectos físicos e matemáticos sobre o

escoamento; avaliação de resultados de simulação numérica através de metodologia de identificação e caracterização de estruturas coerentes; estudo do efeito da função de arrasto na interface sobre a dinâmica de formação, dissipação e rompimento de estruturas coerentes características do escoamento; e estudo numérico de turbulência através de simulação direta.

Capítulo 5. Comentários finais são apresentados com análise crítica dos desenvolvimentos apresentados ao longo do trabalho. Finalmente apresenta-se as conclusões do trabalho e recomendações para futuros trabalhos.

CAPÍTULO 2. FORMULAÇÃO TEÓRICA

2.1 – Introdução

Os modelos matemáticos utilizados na modelagem numérica em fluidos são baseados fundamentalmente em sistemas de equações diferenciais parciais (EDP), com condições iniciais e de contorno prescritas, que representam matematicamente os fenômenos físicos que ocorrem no processo. Na obtenção 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 da 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 (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, resulta num problema de multifronteiras, com posição de interfaces desconhecida. Isso torna impraticável para a maioria dos casos a obtenção de modelos matemáticos e portanto de soluções (ISHII & MISHIMA, 1984). Esses autores resumem os três procedimentos principais adotados para desenvolver modelos matemáticos de escoamentos bifásicos ou multifásicos, a partir de um ponto de vista macroscópico, eliminando parcialmente os detalhes da formulação local instantânea como mostra-se na Figura 2.1.

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

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

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 subdividem-se 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 pode-se nomear as seguintes: formulação de Euler/Euler, formulação de Euler/Lagrange, e formulação de Euler/Boltzmann. Como já observado no Capítulo 1, nesse trabalho aplica-se formulação Euler/Euler.

2.2 – Formulação Euleriana/Euleriana clássica

A formulação Euleriana/Euleriana clássica é bem descrita na literatura (SLATTERY, 1967a,b, WHITAKER, 1969, ISHII, 1975, DELHAYE & ACHARD, 1976, 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 respectivamente. 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 através da interface.

A seguir apresenta-se inicialmente a obtenção do sistema fechado geral de EDPs do modelo das duas fases separadas para um escoamento bifásico gás-sólido. Posteriormente apresenta-se uma discussão sobre dois tipos de modelo de duas fases separadas, os denominados modelos hidrodinâmicos A e B (o modelo B é uma modificação do modelo das duas fases separadas clássico denominado como modelo A) que são amplamente utilizados na simulação de escoamentos multifásicos gás-sólido em fluidização.

2.2.1 – 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 2.2 (ENWALD *et al.* 1996). A idéia geral é formular balanços integrais de massa, quantidade de movimento e energia para um volume de controle fixo que contenha as duas fases. Posteriormente aplicando os teoremas de Leibniz e de Gauss-Ostrogradskii (Apêndice I) os balanços integrais dão origem à equações locais instantâneas para cada uma das fases e equações de salto locais instantâneas na interface que representam a interação entre as fases. Numa segunda etapa aplica-se o procedimento de médias de Euler às equações locais. Aplica-se então leis de fechamento com o objetivo de modelar os termos não conhecidos nas equações de balanço. Por último são estabelecidas condições iniciais e de contorno, completando a formulação do modelo das duas fases separadas.

Figura 2.2. 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) e em CABEZAS-GÓMEZ e MILIOLI (2001). Os tópicos a seguir descrevem sucintamente a obtenção do modelo das duas fases separadas para escoamentos bifásicos gás-sólido.

2.2.1.1 – Equações locais instantâneas

As equações locais instantâneas constituem a base fundamental para todos os modelos bifásicos obtidos a partir de procedimentos de médias. De fato, quando cada sub-região limitada pelas interfaces é definida como um contínuo, a formulação local instantânea assume caracter de extremo rigor matemático. Assim é recomendável que todos os modelos de escoamentos bifásicos sejam desenvolvidos a partir desta formulação, aplicando-se algum procedimento de médias. Além disso, as equações locais instantâneas permitem a modelagem direta de escoamentos separados (estratificados, de películas, anulares) de ampla aplicação industrial, por exemplo nos processos de ebulição e condensação (ISHII, 1975).

Para a obtenção das equações e condições de salto na interface locais instantâneas desenvolve-se balanços integrais para uma variável ψ_k transportada dada num volume de controle Euleriano (fixo no espaço) como aquele representado na Figura 2.3. O volume de controle contém ambas as fases ($k = 1$ para o gás e $k = 2$ para o sólido) separadas pela interface de área $A_i(t)$ movimentando-se com certa velocidade $\bar{u}_i$, que pode ser diferente da velocidade da fase $\bar{u}_k$. Posteriormente mediante a aplicação dos teoremas de Leibniz e de Gauss-Ostrogradskii, obtêm-se as equações desejadas.

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

Utilizando essa metodologia obtém-se as seguintes equações locais instantâneas:

Conservação da massa (massa é a variável transportada)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_k \vec{u}_k) = 0 \quad (2.1)$$

Condição de salto de massa na interface

$$\sum_{k=1}^2 \dot{m}_k = 0 \quad (2.2)$$

Conservação da quantidade de movimento ("momentum" é a variável transportada)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \vec{u}_k) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_k \vec{u}_k \vec{u}_k) - \vec{\nabla} \cdot \vec{T}_k - \rho_k \vec{g} = 0 \quad (2.3)$$

Condição de salto de quantidade de movimento na interface

$$\sum_{k=1}^2 (\dot{m}_k \vec{u}_k - \vec{T}_k \cdot \hat{n}_k) = 0 \quad (2.4)$$

onde ρ_k e $\vec{u}_k$ são a densidade e a velocidade local e instantânea da fase k , $\hat{n}_k$ é o vetor unitário normal externo com respeito à interface do volume ocupado pela fase k , $\vec{T}_k$ é o tensor das tensões, $\vec{g}$ é a aceleração da gravidade e $\dot{m}_k$ representa o fluxo de massa da fase k na interface, definido como

$$\dot{m}_k = \rho_k (\vec{u}_k - \vec{u}_1) \cdot \hat{n}_k \quad (2.5)$$

2.2.1.2 – Procedimento de médias e equações médias

Através do processo de médias elimina-se as flutuações locais instantâneas do escoamento, possibilitando a obtenção de quantidades e propriedades médias do

escoamento a nível do volume de controle empregado. Assim modela-se os aspectos macroscópicos do escoamento, de maior interesse em engenharia (ISHII, 1975). Através do procedimento de médias obtém-se as equações conservativas e condições de salto médias que, aplicadas em conjunto com as leis de fechamento e condições iniciais e de contorno, possibilitam a simulação do escoamento multifásico.

A obtenção das equações médias divide-se em duas etapas fundamentais. Primeiramente aplica-se as equações locais instantâneas, previamente multiplicadas pela função densidade de fase X_k , um operador médio geral que satisfaz os axiomas de Reynolds:

$$X_k(\vec{r}, t) = \begin{cases} 1, & \text{se } \vec{r} \in k \\ 0, & \text{se } \vec{r} \notin k \end{cases} \quad (2.6)$$

Posteriormente as medias de produtos são transformadas em produto de médias através da aplicação da decomposição de Reynolds e da aplicação de médias ponderadas das variáveis dependentes.

Na literatura utilizam-se três tipos fundamentais de operadores médios, os operadores médios temporais, os médios volumétricos e os que representam valores médios estatísticos (ensemble average). Estes últimos são os mais representativos de processos não homogêneos e transientes como é o caso dos escoamentos bifásicos (DELAYE & ACHARD, 1976). No entanto a avaliação dos resultados obtidos através destes operadores médios estatísticos resulta quase impossível, devido à irrepetibilidade dos experimentos. Porém, normalmente considera-se válida a hipótese de Ergodicidade, segundo a qual os três operadores são equivalentes. Usando esta hipóteses pode-se comparar, por exemplo, resultados numéricos obtidos através da aplicação de um operador médio estatístico com resultados experimentais médios no espaço e no tempo. Uma descrição detalhada dos operadores e dos processos de médias pode ser encontrada em ISHII (1975), DELHAYE & ACHARD (1976, 1977) e DELHAYE (1981).

A aplicação da decomposição de Reynolds e do procedimento de médias ponderadas tem como objetivo expressar as médias de produtos em termos do produto das médias das variáveis em questão. Durante a aplicação da decomposição

de Reynolds surgem termos adicionais nas equações envolvendo flutuações, como mostra-se na Eq. (2.7) para uma variável geral f

$$f = \langle f \rangle^w + f' \quad (2.7)$$

Na Eq. (2.7) $\langle f \rangle^w$ representa o valor médio ponderado e f' representa a flutuação em torno deste valor médio. O valor médio ponderado é definido como

$$\langle f \rangle^w = \langle Wf \rangle / \langle W \rangle \quad (2.8)$$

onde W é um fator de ponderação qualquer. Existem dois procedimentos diferentes de ponderação. Num, as variáveis são ponderadas através da função densidade da fase, e denomina-se como média de fase, Eq. (2.9), e no outro, as variáveis são ponderadas através da função densidade de fase vezes a densidade, e denomina-se como média ponderada mássica ou média de Favre, Eq. (2.10)

$$\langle f \rangle^{X_k} = \langle X_k f \rangle / \langle X_k \rangle \quad (2.9)$$

$$\langle f \rangle^{X_k \rho_k} = \langle X_k \rho_k f \rangle / \langle X_k \rho_k \rangle \quad (2.10)$$

Usando o procedimento acima obtém-se as seguintes equações médias decompostas e ponderadas:

Equação de conservação da massa média (continuidade)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_k \rho_k^{X_k}) + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k^{X_k} \bar{\mathbf{v}}_k) = 0 \quad (2.11)$$

Equação de conservação da quantidade de movimento média

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_k \rho_k^{X_k} \bar{\mathbf{v}}_k) + \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k^{X_k} \bar{\mathbf{v}}_k \bar{\mathbf{v}}_k) = \bar{\nabla} \cdot (\alpha_k (\bar{T}_k^{X_k} + \bar{T}_k^{Re})) + \alpha_k \rho_k \bar{\mathbf{g}} + M_{kl} \quad (2.12)$$

onde $\overline{T}_k^{\text{Re}}$ representa a flutuação do tensor das tensões da fase k , $\overline{T}_k^{\text{X}_k}$. M_{kl} representa a transferência da quantidade de movimento na interface para a fase k , determinada como

$$M_{kl} = -\langle \overline{T}_k \cdot \vec{\nabla} X_k \rangle \quad (2.13)$$

Os detalhes completos da derivação são apresentados em ENWALD *et al.* (1996) e CABEZAS-GÓMEZ (1999).

2.2.1.3 – Leis de fechamento

As leis de fechamento permitem modelar os termos não conhecidos nas equações conservativas médias de balanço. As leis de fechamento são classificadas em três tipos:

1. Leis constitutivas – relatam propriedades físicas das fases utilizando dados experimentais ou axiomas. Através das leis constitutivas são modelados o tensor das tensões viscosas, a viscosidade dinâmica, a viscosidade volumétrica e a pressão para todas as fases.
2. Leis de transferência – equações empíricas que descrevem as diferentes interações de interface entre as fases. Através das leis de transferência modela-se, na interface, o transporte de quantidade de movimento considerando o arrasto na interface em função da velocidade relativa entre as fases.
3. Leis topológicas – descrevem a distribuição espacial de uma variável específica do escoamento (e.g. escoamento bifásico).

A formulação das leis de fechamento merece um tópico bastante extenso devido a grande variedade de leis de fechamento formuladas na literatura e a grande quantidade de fenômenos físicos envolvidos na sua formulação. De fato vários princípios básicos devem ser considerados na escolha das leis de fechamento dependendo do modelo matemático em questão. Discussões detalhadas relativas à princípios básicos considerados na formulação de leis de fechamento são apresentados em ARNOLD *et al.* (1990), TRUESDELL & TOUPIN (1960) e ARIS (1962).

Neste seção são apresentadas apenas as leis de fechamento adotadas no modelo clássico das duas fases separadas para escoamentos bifásicos gás-sólido.

2.2.1.3.1 – Leis constitutivas

A seguir são formuladas as leis constitutivas usadas para modelar as seguintes propriedades: o tensor das tensões viscosas, a viscosidade dinâmica, a viscosidade volumétrica e a pressão para ambas as fases. Normalmente estes parâmetros são obtidos por dois procedimentos fundamentais. O primeiro faz uso de modelos empíricos com base nas propriedades das partículas, fração volumétrica de sólido e outras propriedades. Este denomina-se procedimento tradicional. O segundo utiliza a TCEG para o cálculo direto de propriedades, eliminando o empirismo na formulação de leis constitutivas.

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

Em vista disto o tensor das tensões viscosas $\bar{\tau}_k$, para ambas as fases, é modelado assumindo a relação tensão/deformação para um fluido Newtoniano, tendo em conta a hipótese de Stokes como mostra-se em ARIS (1962) e WHITE (1991)

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

O tensor das tensões $\bar{T}_k^{X_k}$, determina-se através da seguinte relação

$$\bar{T}_k^{X_k} = -P_k \bar{I} + \bar{\tau}_k \quad (2.15)$$

Viscosidade dinâmica μ_k : Na determinação do coeficiente de viscosidade dinâmica da fase sólida, μ_s , utiliza-se os dois procedimentos gerais acima comentados. Um exemplo do primeiro procedimento é o empregado por TSUO (1989) e TSUO & GIDASPOW (1990). Estes autores, utilizando a equação de conservação da quantidade de movimento para a mistura na direção axial, integrada na seção transversal, obtiveram a seguinte equação usada na determinação de μ_s

$$-\mu_s \frac{\partial v_s}{\partial r} = \frac{R_w}{2} \left(-\frac{\partial P}{\partial z} - \frac{2}{R_w^2} \int_0^{R_w} \alpha_s \rho_s r \, dr - \frac{2}{R_w^2} \int_0^{R_w} \frac{\partial(\alpha_s \rho_s v_s^2)}{\partial z} r \, dr \right) \quad (2.16)$$

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

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

Neste primeiro procedimento os efeitos de turbulência da fase sólida são desprezados. A desvantagem deste método é que o modelo de cálculo requer um valor de μ_s obtido experimentalmente, ao contrario do segundo procedimento, no qual o valor de μ_s é calculado diretamente da TCEG. Porém, o segundo método é mais complexo e requer mais tempo de computação.

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

Viscosidade volumétrica λ_k : A viscosidade volumétrica λ_k é calculada pela Eq. (2.17), considerando a hipótese de Stokes

$$\lambda_k = -\frac{2}{3} \mu_k \quad (2.17)$$

Para a fase sólida, de forma similar à obtenção de μ_s , λ_s também pode ser calculado utilizando a TCEG (ver BOEMER *et al.*, 1995).

Pressão do gás: A pressão do gás é igual à pressão termodinâmica

$$P_g = P \quad (2.18)$$

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

De forma semelhante ao que acontece com a viscosidade dinâmica da fase sólida, podem ser utilizados os dois procedimentos gerais, acima descritos, para definir a pressão do sólido. O segundo procedimento, baseado no uso da TCEG, pode ser consultado nos trabalhos de GIDASPOW (1994), BOEMER *et al.* (1995) e ENWALD *et al.* (1996), entre outros. A seguir apresenta-se brevemente a formulação obtida assumindo o procedimento tradicional. Para uma melhor compreensão do conceito e formulação da pressão pode-se consultar os trabalhos antes mencionados, além de GIDASPOW (1986), CAMPBELL & WANG (1991), CABEZAS-GÓMEZ (1999) entre outros.

Na determinação da pressão do particulado pelo método tradicional são considerados três efeitos: um correspondente ao transporte de quantidade de movimento causado pelas flutuações da velocidade das partículas, P_s^{cin} , outro causado pela interação das partículas entre si (colisões entre partículas), P_s^{col} , e o último é uma contribuição da pressão da fase gasosa, P_s^{gas} , ENWALD *et al.* (1996). Desprezando o efeito causado pelas flutuações da velocidade das partículas o gradiente de pressão para a fase sólida é representado por

$$\vec{\nabla}(\alpha_s P_s) = \vec{\nabla}(\alpha_s P_s^{col}) + \vec{\nabla}(\alpha_s P_g) = -G(\alpha_g) \vec{\nabla} \alpha_g + \vec{\nabla}(\alpha_s P_g) \quad (2.19)$$

onde $G(\alpha_g)$ é denominado módulo de elasticidade para a fase de particulado, ou coeficiente de interação de partícula com partícula, que é modelado empiricamente. Na literatura existem várias correlações para calcular $G(\alpha_g)$ mostradas na Tabela B1.1 do Apêndice II. Uma destas correlações é a obtida por GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983) mediante uma interpolação dos dados experimentais obtidos por RIETEMA & MUTSERS (1973) apud GIDASPOW (1986)

$$G(\alpha_g) = 10^{-8,76\alpha_g + 5,43} \quad (2.20)$$

Segundo estes autores a Eq. (2.20) tem significado numérico quando a fração de vazio atinge um valor abaixo daquele para a condição de mínima fluidização. O termo contribui ainda para tornar o sistema de equações num sistema matematicamente bem posto, já que converte as direções características imaginárias em reais. Segundo GIDASPOW (1986), em alguns cálculos é necessário ajustar $G(\alpha_g)$, como em SYAMLAL (1985), para impedir que a fração de vazio atinja valores muito baixos resultando em concentrações de particulado maiores que a concentração máxima possível. Muitos autores determinam o termo da pressão do sólido devido às colisões e as flutuações das partículas através da TCEG. ENWALD *et al.* (1996) observam que apesar das diferentes correlações diferirem muito entre si, isto pouco afeta as soluções médias temporais da pressão, velocidades e frações volumétricas das fases. Salienta-se que esse efeito deve ser pesquisado.

2.2.1.3.2 – Leis de Transferência

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

No presente modelo considera-se apenas a transferência de quantidade de movimento na interface representada pelo termo M_{ki} (Eq. 2.13). Sua modelação é efetuada utilizando equações empíricas, onde as condições de salto impõem as necessárias restrições. A formulação do termo M_{ki} é apresentada detalhadamente no

trabalho de ENWALD *et al.* (1996) e de CABEZAS-GÓMEZ (1999). A seguir apresenta-se sucintamente os resultados desse procedimento.

Na teoria clássica M_{kl} é assumida aproximadamente igual à denominada força de arrasto generalizada por unidade de volume sobre uma suspensão de partículas de diâmetro médio d_p na interface (M_{kl}^d). Esta força é composta da somatória de várias forças que atuam na interface:

- F_{arrasto} : força de arrasto estacionária na interface.
- F_{Saffman} : força ascensional (lift force) que atua sobre a partícula, devido a existência de gradiente de velocidade.
- F_{Magnus} : força ascensional (lift force) causada pela existência de gradiente de pressão provocado por diferencial de velocidade devido a rotação da partícula.
- $F_{\text{massavirtual}}$: força requerida para a aceleração da massa da fase circundante quando a fase é acelerada. Denomina-se força da massa virtual, carregada, aparente ou adicionada.
- F_{Basset} : força de Basset. Esta força surge como resultado da difusão de quantidade de movimento através da camada limite da fase analisada. Resulta da aceleração de uma fase com respeito à outra, e avalia o efeito da aceleração já ocorrida sobre a resistência que a fase oferece ao movimento.
- F_{outras} : são outras forças que atuam sobre uma partícula. Exemplos destas forças são: forças que atuam sobre uma esfera num escoamento perfeito (ENWALD *et al.* 1996). A força radiométrica causada por gradiente de temperatura. Forças de campo e interpartículas (forças de campo elétrico e magnético, de Van der Waals, e electrostáticas). FAN & ZHU (1998) e CROWE *et al.* (1998) apresentam discussão detalhada sobre as forças descritas, além de outras não mencionadas.

Das forças em questão, na presente análise, por razões de simplificação matemática, considera-se apenas a força devido ao arrasto estacionário na interface. Estudos posteriores deverão considerar termos como o da força de massa virtual. F_{arrasto} é determinada através de dois procedimentos gerais:

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

Na literatura existem vários modelos para determinar F_{arrasto} utilizando ambos os procedimentos. O objetivo da modelagem de F_{arrasto} é expressa-la em função das variáveis dependentes do sistema de equações governantes. Independentemente do procedimento adotado, a força de arrasto estacionária na interface é definida em função da velocidade relativa entre fases, $\vec{v}_r$, e do coeficiente de transferência de quantidade de movimento na interface, também denominado função de arrasto β . Portanto, M_{kl} modela-se como

$$M_{kl} \cong M_{kl}^d \cong n_p F_{\text{arrasto}} = \beta \vec{v}_r = \beta (\vec{v}_g - \vec{v}_s) \quad (2.21)$$

sendo n_p o número de partículas por unidade de volume. O valor da função de arrasto β depende do procedimento adotado. Utilizando o primeiro procedimento, a função de arrasto calcula-se pela seguinte equação

$$\beta \vec{v}_r = \frac{3}{4d_p} (1 - \alpha_g) \alpha_g C_{Ds} \rho_g |\vec{v}| \vec{v} f(\alpha_g) \quad (2.22)$$

onde $\vec{v}$ pode ser definida como a velocidade relativa $\vec{v}_r$ ou como a velocidade de deslizamento $\vec{v}_0$, dependendo da velocidade para a qual C_D é determinado. Na Eq. (2.22), a função dependente da fração volumétrica de gás, $f(\alpha_g)$, é introduzida para levar em consideração a influência das demais partículas da suspensão no coeficiente de arrasto para uma partícula isolada, C_{Ds} . A velocidade de deslizamento é definida como

$$\vec{v}_0 = \alpha_g (\vec{v}_g - \vec{v}_s) \quad (2.23)$$

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

$$\beta \vec{v}_r = \alpha_g \vec{\nabla} P \quad (2.24)$$

As Eqs. (2.22) e (2.24) fornecem resultados com razoável generalidade, que dependem das correlações usadas para o cálculo do coeficiente de arrasto C_{Ds} , da definição da velocidade $\vec{v}$, da função $f(\alpha_g)$ e do gradiente de pressão $\Delta P/L$. Na Tabela B2.1 do Apêndice II são apresentadas as correlações para β mais usadas na literatura. Nessa mesma seção apresenta-se uma discussão física sobre estas correlações. Análises mais rigorosas sobre os procedimentos de obtenção de funções de arrasto são apresentados em ENWALD *et al.* (1996) e em CABEZAS-GÓMEZ (1999).

2.2.1.4 – Sistema fechado de EDPs geral para um escoamento bifásico gás-sólido

Considerando o procedimento clássico, o sistema fechado de EDPs geral para um escoamento bifásico gás-sólido compõe-se das seguintes equações conservativas: Equação de conservação da massa

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{v}_k) = 0 \quad (2.25)$$

Equação de conservação da quantidade de movimento

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k \vec{v}_k) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{v}_k \vec{v}_k) = & -\alpha_k \vec{\nabla} P - \vec{\nabla}(\alpha_s P_s^{col}) + \\ & \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k \vec{\tau}_k) + \alpha_k \rho_k \vec{g} + M_{kl}^d \end{aligned} \quad (2.26)$$

As Eqs. (2.25) e (2.26) foram obtidas considerando as seguintes hipóteses: escoamento bifásico não reativo, sem transferência de massa na interface, escoamento isotérmico para ambas as fases, consideração de ambas as fases como meio contínuo, e particulado homogêneo caracterizado por um diâmetro médio, d_p .

Este sistema de EDPs caracteriza a estrutura básica do modelo das duas fases separadas clássico, denominado também na literatura de modelo hidrodinâmico A. Observe-se que a turbulência não está sendo modelada.

Na Eq. (2.26) vários termos precisam ser modelados. O gradiente de pressão do sólido devido às colisões, $\vec{\nabla}(\alpha_s P_s^{\text{col}})$, é considerado apenas para a fase sólida, e é modelado utilizando as Eqs. (2.19 e 2.20) ou uma das correlações da Tabela B1.1. O tensor das tensões viscosas é modelado pela Eq. (2.14) para ambas as fases. A força de arrasto generalizada na interface, M_{kl}^d , é modelada utilizando a Eq. (2.21) e Eqs. (2.22) ou (2.24).

2.2.2 – Modelos hidrodinâmicos A e B, (IIT/ANL)

O modelo das duas fases separadas é obtido através da aplicação, ao sistema geral fechado 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, apresenta-se na Tabela 2.1 os modelos hidrodinâmicos A e B do IIT/ANL.

Como modelo hidrodinâmico A denomina-se o modelo tradicional, acima exposto, composto pelo sistema fechado de EDPs descrito na seção 2.2.1.4, e as correspondentes equações para os vários termos nas Eqs. (2.25) e (2.26). No modelo A o gradiente de pressão do gás está incluído em cada equação de quantidade de movimento para cada fase. No modelo hidrodinâmico 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 Arquimedes e a relação usual de mínima fluidização dada em KUNII & LEVENSPIEL (1991) (BOUILLARD *et al.*, 1989). Este modelo foi adotado devido ao mal condicionamento do modelo A, causado pela existência de direções características complexas (BOUILLARD *et al.*, 1989). Considera-se que o modelo B transforma o sistema de equações mal-acondicionado do modelo A num sistema de EDPs bem posto. 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 condicionado 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:	
$\frac{\partial(\rho_g \cdot \alpha_g)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_g \alpha_g \vec{v}_g) = 0$	(2.27)
Fase sólida:	
$\frac{\partial(\rho_s \cdot \alpha_s)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_s \alpha_s \vec{v}_s) = 0$	(2.28)
Equações de conservação da quantidade de movimento. Modelo A	
Fase gasosa:	
$\frac{\partial(\rho_g \alpha_g \vec{v}_g)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_g \alpha_g \vec{v}_g \vec{v}_g) = -\alpha_g \vec{\nabla} P - \beta_A (\vec{v}_g - \vec{v}_s) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_g \vec{\tau}_g) + \rho_g \alpha_g \vec{g}$	(2.29)
Fase sólida:	
$\frac{\partial(\rho_s \alpha_s \vec{v}_s)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_s \alpha_s \vec{v}_s \vec{v}_s) = -\alpha_s \vec{\nabla} P + \beta_A (\vec{v}_g - \vec{v}_s) - G(\alpha_g) \vec{\nabla} \alpha_s + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_s \vec{\tau}_s) + \rho_s \alpha_s \vec{g}$	(2.30)
Equações de conservação da quantidade de movimento. Modelo B	
Fase gasosa:	
$\frac{\partial(\rho_g \alpha_g \vec{v}_g)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_g \alpha_g \vec{v}_g \vec{v}_g) = -\vec{\nabla} P - \beta_B (\vec{v}_g - \vec{v}_s) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_g \vec{\tau}_g) + \rho_g \alpha_g \vec{g}$	(2.31)
Fase sólida	
$\frac{\partial(\rho_s \alpha_s \vec{v}_s)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_s \alpha_s \vec{v}_s \vec{v}_s) = \beta_B (\vec{v}_g - \vec{v}_s) - G(\alpha_g) \vec{\nabla} \alpha_s + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_s \vec{\tau}_s) + (\rho_s - \rho_g) \alpha_s \vec{g}$	(2.32)

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

Equações de Fechamento	
Equações de estado	
$\rho_g = \frac{P}{R_g T}$	(2.33)
e $\rho_s = \text{const}$	(2.34)
Definição da fração volumétrica	
$\alpha_g + \alpha_s = 1$	(2.35)
Função de arrasto na interface, β_A. Modelo A.	
$\beta_A = 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g (d_p \phi_s)^2} + 1,75 \frac{\rho_g \alpha_s \vec{v}_g - \vec{v}_s }{(d_p \phi_s)}$	$\alpha_g \leq 0,8$ ERGUN (1952) (2.36)
e	e
$\beta_A = \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{\rho_g \alpha_s \alpha_g \vec{v}_g - \vec{v}_s }{(d_p \phi_s)} \alpha_g^{-2,65}$	$\alpha_g > 0,8$ ROWE (1961) (2.37)
onde	
$C_{Ds} = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0,15 \cdot Re_p^{0,687}) & Re_p < 1000 \\ 0,44 & Re_p \geq 1000 \end{cases}$	(2.38)
e	e
$Re_p = \frac{\alpha_g \rho_g \vec{v}_g - \vec{v}_s d_p}{\mu_g}$	(2.39)
Função de arrasto na interface, β_B. Modelo B.	
$\beta_B = \frac{\beta_A}{\alpha_g}$	(2.40)
Tensor das tensões viscosas para ambas as fases	
$\bar{\tau}_k = \mu_k \left[\vec{\nabla} \vec{v}_k + (\vec{\nabla} \vec{v}_k)^T - \frac{2}{3} (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}_k) \bar{I} \right]$	(2.14)
Módulo de elasticidade da fase sólida (Eq. 2.20)	
$G(\alpha_g) = 10^{-8,76\alpha_g + 5,43}$	(2.20)

Nos trabalhos de CABEZAS-GÓMEZ (1999) e CABEZAS-GÓMEZ e MILIOLI (2001) utiliza-se o modelo hidrodinâmico B semelhante ao apresentado em GIDASPOW (1994), (ver Tabela 2.1), mas calculando a função de arrasto β_B segundo BOUILLARD *et al.* (1989) como segue

$$\beta_B = \frac{\beta_A}{\alpha_g} \frac{\rho_s}{(\rho_s - \rho_g)} \quad (2.41)$$

TSUO & GIDASPOW (1990) usaram o mesmo modelo hidrodinâmico B apresentado em BOUILLARD *et al.*, (1989). CABEZAS-GÓMEZ (1999) e CABEZAS-GÓMEZ e MILIOLI (2001) usaram a Eq. (2.41) para o cálculo de β_B e as Eqs. (2.31) e (2.32) para conservação de quantidade de movimento. JAYASWAL (1991) afirma que a Eq. (2.41) não é aplicável para partículas de empuxo neutro. A relação produz um resultado negativo de β_B se a densidade das partículas (ou bolhas) é menor que a densidade do fluido. Isso significa que, para um escoamento estacionário, desenvolvido e invíscido, bolhas de gás num líquido vão descer (JAYASWAL, 1991). Portanto a relação do arrasto na interface dada pela Eq. (2.41) necessita ser modificada. Essa modificação resulta na Eq. (2.40) mostrada na Tabela 2.1. A Eq. (2.41) não deve ser usada, sobretudo quando as densidades das duas fases são da mesma ordem. No caso de escoamentos gás-sólido o erro introduzido pelo uso dessa relação é pequeno, pois $\rho_s \gg \rho_g$ e $\rho_s/(\rho_s - \rho_g) \approx 1$. No Apêndice I mostra-se sucintamente a obtenção do modelo hidrodinâmico B modificado usando a análise apresentada em JAYASWAL (1991).

2.2.3 – Condições de contorno

Para obter um problema matematicamente bem posto deve ser prescrito um número suficiente de condições de contorno (TSUO, 1989). A seguir serão abordados alguns dos aspectos referentes ao tratamento e formulação destas condições para escoamentos bifásicos gás-sólido. O sistema a ser modelado neste estudo é um LFC. O diagrama esquemático de um LFC é mostrado na Figura 2.4 (DING, 1990).

Figura 2.4. Esquema de um LFC.

Um LFC é um sistema transporte-reator composto por quatro partes principais mostradas na Figura 2.4. Estas são, o tubo ascendente (riser), o ciclone separador, o tubo descendente (standpipe) e a seção de alimentação. O tubo ascendente é o núcleo do leito circulante pois nele acontece a maioria das reações químicas nos processos industriais pertinentes. No caso de uma instalação de geração de energia elétrica, no tubo ascendente ocorre a maioria das reações de combustão do carvão e de remoção do enxofre por calcário.

Neste trabalho estuda-se a modelagem numérica de um escoamento gás-sólido no tubo ascendente de um LFC. O domínio computacional tem fronteiras definidas pelas paredes do tubo ascendente, e pelas seções de entrada e saída do escoamento.

2.2.3.1 – Análise das direções características do escoamento

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

GIDASPOW (1994) apresenta uma descrição detalhada da aplicação da análise das características à escoamentos bifásicos gás-sólido. Essencialmente aplica-se a análise das características por duas razões. A primeira, para determinar se o sistema de EDPs representa um problema bem condicionado matematicamente. A segunda, para prever onde devem ser prescritas as condições de contorno para um problema matematicamente bem posto (GIDASPOW, 1994).

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

$$\lambda_{1,2} = v_g \pm \sqrt{\frac{C^2}{\alpha_g}} \quad (2.42)$$

$$\lambda_{3,4} = v_s \pm \sqrt{\frac{G}{\rho_s}} \quad (2.43)$$

onde C é a velocidade do som do gás à temperatura constante (GIDASPOW, 1994) dada por

$$C = \sqrt{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho_g} \right)_T} \quad (2.44)$$

Esta análise não é aplicável aos escoamentos viscosos. Entretanto, a análise invíscida provê uma guia útil para determinar onde devem ser prescritas as condições de contorno (TSUO & GIDASPOW, 1990).

No presente trabalho utiliza-se esta metodologia para orientar a aplicação das condições de contorno na entrada e saída do leito para ambas fases.

2.2.3.2 – Condições de contorno na parede

Analisa-se um escoamento bifásico gás-sólido bidimensional. Para a fase gasosa considera-se 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 as 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, i.e.

$$u_{g,w} = v_{g,w} = 0 \quad (2.45)$$

No caso da fase sólida o estabelecimento das condições de contorno na parede é mais complicado devido a dificuldade da caracterização da interação das partículas com a parede. Existem várias propostas na literatura de formulação dessa

condição de contorno, porém esta é uma questão aberta que merece estudos mais profundos. Usualmente assume-se que a velocidade na direção tangencial na parede oscila entre a condição de não deslizamento (plena aderência) e a condição de deslizamento livre. Segundo TSUO & GIDASPOW (1990) pode-se especular que as partículas finas deslizam pela parede e as partículas mais grosseiras rolam ao longo da parede. SOO (1983) apud TSUO & GIDASPOW (1990), modelou essa condição de contorno através da seguinte relação

$$v_{s,w} = L_p \left(\frac{\partial v_{s,w}}{\partial y} \right) \quad (2.46)$$

onde L_p é o caminho livre médio das partículas calculado como

$$L_p = \left(\frac{\pi}{6\alpha_s} \right)^{\frac{1}{3}} d_p \quad (2.47)$$

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

$$v_{s,w} = -\lambda_p \left(\frac{\partial v_{s,w}}{\partial y} \right) \quad (2.48)$$

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

$$\lambda_p = \frac{1}{(\alpha_s)^{1/3}} d_p \quad (2.49)$$

A componente normal do vetor velocidade da fase sólida na parede assume-se igual a zero.

$$u_s = 0 \quad (2.50)$$

A formulação das condições de contorno na parede para as variáveis escalares α_g e P usualmente considera o gradiente nulo na direção normal à superfície

$$\frac{\partial \alpha_{g,w}}{\partial y} = \frac{\partial P_w}{\partial y} = 0 \quad (2.51)$$

Nos códigos computacionais MULTIFIX e MICEFLOW assume-se essa condição de contorno na parede.

2.2.3.3 – Condições de contorno de simetria

A condição de contorno de simetria equivale a uma condição de deslizamento livre ou parede fictícia, e modela-se de igual maneira para ambas as fases. A parede fictícia é uma superfície (ou linha) vertical no centro da coluna. Neste caso as componentes normais da velocidade para ambas as fases são nulas e as componentes tangenciais da velocidade para ambas fases, assim como a fração de vazio e a pressão do gás possuem gradientes nulos na direção normal ao eixo de simetria

$$u_{g,w} = u_{s,w} = 0 \quad (2.52)$$

$$\frac{\partial v_{g,w}}{\partial y} = \frac{\partial v_{s,w}}{\partial y} = 0 \quad (2.53)$$

$$\frac{\partial \alpha_{g,w}}{\partial y} = \frac{\partial P_w}{\partial y} = 0 \quad (2.54)$$

Usualmente as condições de simetria são formuladas para reduzir o domínio computacional. No entanto esta simplificação leva, na maioria dos casos, a resultados físicos incoerentes, devido a consideração de simetria em escoamentos altamente assimétricos, como são os escoamentos bifásicos gás-sólido. A principal consequência da adoção deste tipo de condição de contorno é a não consideração da transferência de massa, quantidade de movimento e energia através de superfícies (ou linhas) de simetria. NERI & GIDASPOW (2000) e CABEZAS-GÓMEZ & MILIOLI (2002) consideraram o efeito que tem esta condição de contorno na formação de agregados no tubo ascendente de um LFC. Observaram um acúmulo maior de sólidos na zona central do tubo ascendente em relação as paredes. Como consequência, obtiveram uma concentração de sólidos média temporal maior no centro da coluna, o que não é característico deste tipo de escoamentos.

2.2.3.4 – Condições de contorno na entrada do tubo ascendente (TSUO, 1989)

O número de condições de contorno necessárias em qualquer fronteira é igual ao número de direções características apontando para o domínio de interesse (TSUO, 1989, GIDASPOW, 1994).

A Eq. (2.42) mostra que para a fase gasosa na entrada apenas uma direção característica é positiva, i.e. aponta para dentro do domínio computacional. Portanto a especificação do fluxo mássico do gás constante é suficiente

$$\rho_g \alpha_g v_g = \text{constante} \quad (2.55)$$

Embora a Eq. (2.43) mostre que a direção característica para o sólido é similar à do gás, o valor G/ρ_s é pequeno. A raiz quadrada deste termo é da ordem de 1 m/s para escoamentos densos com uma fração volumétrica α_s aproximadamente igual a 0,6. Para escoamentos dispersos o termo torna-se muito pequeno. Assim, para o sólido, as duas direções características são positivas e apontam para dentro do domínio computacional. Então, como condições de contorno na entrada para a fase

sólida especifica-se a velocidade axial do sólido e a sua fração volumétrica constantes, ou seja

$$v_s = \text{constante} \quad \text{e} \quad \alpha_s = \text{constante} \quad (2.56)$$

As especificações acima baseiam-se em análise unidimensional. Para o caso bidimensional assume-se, na entrada, um escoamento pistonado unidimensional. No caso do uso da TCEG e da consideração de um escoamento não isotérmico devem ser especificados os valores da temperatura granular e das temperaturas termodinâmicas de ambas as fases na entrada do tubo ascendente (JAYASWAL, 1991).

2.2.3.5 – Condições de contorno na saída do tubo ascendente (TSUO, 1989)

Devido a dificuldade de simulação da instalação como um todo, normalmente simula-se o escoamento apenas no tubo ascendente, que é a região de maior interesse de um LFC. Portanto deve existir uma região de saída aberta no tubo ascendente. A região de saída aberta pode ser modelada como uma seção de saída vertical do tubo ascendente (Figura 2.5a), ou como uma seção de saída lateral (Figura 2.5b). Esta última situação corresponde melhor às condições experimentais e à prática industrial. No entanto do ponto de vista computacional a simulação da primeira seção de saída é mais fácil.

Considerando este caso, tem-se pela análise das características, que na seção de saída do tubo ascendente todas as direções características do sólido apontam para fora do domínio computacional, segundo a Eq (2.43). Portanto, não é necessário especificar qualquer condição de contorno para a fase sólida. Porém, a hidrodinâmica da coluna de um LFC é muito complexa, e na saída do leito pode existir um escoamento inverso das partículas sólidas formando “clusters” descendentes. Neste caso as direções características apontam para o domínio computacional (Figura C1.1 do Apêndice III). Então, há necessidade de especificação de condições de contorno para o sólido na saída do leito. Porém, condições de contorno na saída do leito que

considerem o escoamento descendente de agregados são de difícil formulação, e até o momento não foram formuladas na literatura, segundo o melhor conhecimento do autor.

Figura 2.5. Diagrama esquemático do domínio computacional.

Essa é a razão fundamental pela qual opta-se por modelar a geometria da saída do leito seguindo a Figura 2.5b (saída lateral). Esta modificação do domínio computacional introduz a condição de contorno válida para o sólido na região de escoamento descendente, quando este existe, ou seja, componente normal da velocidade do sólido é nula, $v_s = 0$, no topo da coluna. Então, a condição de contorno na saída lateral do tubo ascendente é formulada pela condição de continuidade para todas as variáveis dependentes do escoamento, ou seja considera-se escoamento plenamente desenvolvido nesta região. A condição de continuidade expressa-se como

$$\frac{\partial f}{\partial n} = 0 \quad (2.57)$$

onde f pode ser a pressão, P , a fração de vazio, α_g , as componentes normais das velocidades de ambas as fases, u_g e u_s , ou as temperaturas termodinâmicas, T_g e T_s do gás e do sólido respectivamente, no caso de escoamento não isotérmico. As componentes tangenciais das velocidades de ambas as fases v_g e v_s são nulas.

Esta condição de saída, Eq. (2.57), é amplamente utilizada na literatura. Porém é uma condição forte para o tipo de escoamento analisado, levando em conta as flutuações de baixa frequência características de um LFC e o carácter transiente do escoamento. Para a fase gasosa pode-se utilizar qualquer tipo de geometria de saída, pois estima-se que o gás passa através dos “clusters” descendentes sem recircular (TSUO & GIDASPOW, 1990).

Finalmente é importante destacar que as condições de contorno acima descritas são válidas para escoamento gás-sólido sem modelagem de turbulência. No caso de considerar modelos de turbulência novas condições de contorno devem ser formuladas para as quantidades turbulentas. PEIRANO & LECKNER (1998) apresentam um bom resumo da formulação das condições de contorno para escoamentos gás-sólido quando modelada a turbulência em ambas as fases. Nesse caso, na modelagem das condições de contorno na parede, utiliza-se funções de parede e a TCEG para as fases gasosa e sólida, respectivamente. Segundo os autores os trabalhos de JENKINS (1992) e JENKINS & LOUGE (1997) apresentam a formulação mais rigorosa destas condições de contorno para a fase sólida.

CAPÍTULO 3. METODOLOGIA DE SOLUÇÃO NUMÉRICA

Neste capítulo apresenta-se uma descrição sucinta da técnica numérica utilizada pelo grupo do IIT/ANL, e que é também utilizada no presente trabalho. O procedimento numérico integra os códigos MULTIFIX (SYAMLAL, 1985) e MICEFLOW (JAYASWAL, 1991). De fato, utiliza-se o código MULTIFIX modificado pela introdução dos procedimentos VSSCG e VSSCS, desenvolvidos por DING (1990), para calcular o tensor das tensões viscosas das fases gasosa e sólida (CABEZAS-GÓMEZ, 1999 e CABEZAS-GÓMEZ & MILIOLI, 2001). O código MICEFLOW é a versão bidimensional mais desenvolvida dos códigos do IIT disponíveis na literatura. Foi aplicado com sucesso por GIDASPOW *et al.* (1990), GIDASPOW *et al.* (1991) e JAYASWAL *et al.* (1990).

3.1 – Equações em diferenças finitas em coordenadas cilíndricas

As equações do modelo hidrodinâmico B são discretizadas em diferenças finitas de acordo com o procedimento de HARLOW & AMSDEN (1975), técnica IMF. Neste procedimento as equações de conservação de massa são discretizadas implicitamente, enquanto as equações de conservação de quantidade de movimento, de energia e de energia granular são discretizadas de forma explícita-implícita.

A malha computacional é composta de células fixas num espaço bidimensional (malha Euleriana) de dimensões não uniformes. A Figura 3.1 mostra a malha computacional e uma célula típica. As variáveis escalares (α_k , ρ_k , P , θ_k) são localizadas no centro da célula, e as variáveis vetoriais (u_k , v_k) nas fronteiras. A numeração na malha indica o tipo de célula computacional, representando as

fronteiras do sistema, regiões de escoamento e obstáculos. O significado dos números de cada célula computacional é como segue:

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

Figura 3.1. Malha e célula computacional típicas.

3.1.1 – Equações de continuidade

As equações de continuidade são discretizadas implicitamente como segue:

$$(\alpha_k \rho_k)_{i,j}^{n+1} = (\alpha_k \rho_k)_{i,j}^n - \frac{\delta t}{r_i \delta r_i} \langle r(\alpha_k \rho_k) u_k \rangle_{i,j}^{n+1} - \frac{\delta t}{\delta z_j} \langle (\alpha_k \rho_k) v_k \rangle_{i,j}^{n+1} \quad (3.1)$$

Os termos representados entre colchetes angulares representam uma discretização “upwind” de primeira ordem, e são dados por

$$\begin{aligned} \langle r(\alpha_k \rho_k) u_k \rangle_{i,j}^{n+1} = (ru_k)_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} & \begin{cases} (\alpha_k \rho_k)_{i,j}^n & \text{para } (u_k)_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} > 0 \\ (\alpha_k \rho_k)_{i+1,j}^n & \text{para } (u_k)_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} < 0 \end{cases} \\ - (ru_k)_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} & \begin{cases} (\alpha_k \rho_k)_{i-1,j}^n & \text{para } (u_k)_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} > 0 \\ (\alpha_k \rho_k)_{i,j}^n & \text{para } (u_k)_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} < 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (3.2)$$

e

$$\begin{aligned} \langle (\alpha_k \rho_k) v_k \rangle_{i,j}^{n+1} = (v_k)_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} & \begin{cases} (\alpha_k \rho_k)_{i,j}^n & \text{para } (v_k)_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} > 0 \\ (\alpha_k \rho_k)_{i,j+1}^n & \text{para } (v_k)_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} < 0 \end{cases} \\ - (v_k)_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1} & \begin{cases} (\alpha_k \rho_k)_{i,j-1}^n & \text{para } (v_k)_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1} > 0 \\ (\alpha_k \rho_k)_{i,j}^n & \text{para } (v_k)_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1} < 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (3.3)$$

3.1.2 – Equações de conservação da quantidade de movimento

As equações de conservação de quantidade de movimento são discretizadas em malha desfasada (Figura 3.2) usando um esquema de discretização explícito – implícito. Os termos associados à pressão do fluido, pressão do sólido, transferência de quantidade de movimento na interface e gravitacionais, são tratados implicitamente. Os termos convectivos e das interações viscosas são tratados

explicitamente. A seguir apresenta-se as equações discretizadas para as duas fases.

Figura 3.2. Malha computacional desfasada para as equações de quantidade de movimento.

Fase gasosa, direção radial (r)

$$(\alpha_g \rho_g u_g)_{i+1/2,j}^{n+1} = (\overline{\alpha_g \rho_g u_g})_{i+1/2,j}^n - \frac{\delta t}{\delta r_{i+1/2}} \left((P_g)_{i+1,j}^{n+1} - (P_g)_{i,j}^{n+1} \right) + \delta t (\rho_g)_{i+1/2,j}^{n+1} g_r - \delta t (\beta)_{i+1/2,j}^n (u_g - u_s)_{i+1/2,j}^{n+1} \quad (3.4)$$

Fase gasosa, direção axial (z)

$$(\alpha_g \rho_g v_g)_{i,j+1/2}^{n+1} = (\overline{\rho_g \alpha_g v_g})_{i,j+1/2}^n - \frac{\delta t}{\delta z_{j+1/2}} \left((P_g)_{i,j+1}^{n+1} - (P_g)_{i,j}^{n+1} \right) + \delta t (\rho_g)_{i,j+1/2}^{n+1} g_z - \delta t (\beta)_{i,j+1/2}^n (v_g - v_s)_{i,j+1/2}^{n+1} \quad (3.5)$$

Fase sólida, direção radial (r)

$$\begin{aligned}
 (\alpha_s \rho_s u_s)_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} &= \left(\overline{\alpha_s \rho_s u_s} \right)_{i+\frac{1}{2},j}^n - \frac{\delta t}{\delta r_{i+\frac{1}{2}}} \left((P_s)_{i+1,j}^{n+1} - (P_s)_{i,j}^{n+1} \right) + \\
 &\delta t \left(\alpha_s (\rho_s - \rho_g) \right)_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} g_r + \delta t (\beta_r)_{i+\frac{1}{2},j}^n (u_g - u_s)_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} + \frac{\delta t}{\delta r_{i+\frac{1}{2}}} \left[(\tau_{ck})_{i+1,j}^{n+1} - (\tau_{ck})_{i,j}^{n+1} \right] \quad (3.6)
 \end{aligned}$$

Fase sólida, direção axial (z)

$$\begin{aligned}
 (\alpha_s \rho_s v_s)_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} &= \left(\overline{\alpha_s \rho_s v_s} \right)_{i,j+\frac{1}{2}}^n - \frac{\delta t}{\delta z_{j+\frac{1}{2}}} \left((P_s)_{i,j+1}^{n+1} - (P_s)_{i,j}^{n+1} \right) + \\
 &\delta t \left(\alpha_s (\rho_s - \rho_g) \right)_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} g_z + \delta t (\beta_r)_{i,j+\frac{1}{2}}^n (v_g - v_s)_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} + \frac{\delta t}{\delta z_{j+\frac{1}{2}}} \left[(\tau_{ck})_{i,j+1}^{n+1} - (\tau_{ck})_{i,j}^{n+1} \right] \quad (3.7)
 \end{aligned}$$

onde τ_{ck} representa tensões devido as forças coesivas no sólido. A pressão do sólido P_s pode-se calcular pela TCEG ou através da Eq. (2.19), desconsiderando o termo que envolve a pressão do gás P_g , já que trata-se do modelo hidrodinâmico B.

Os termos grifados com barra superior são discretizados explicitamente para ambas as fases como segue

$$\begin{aligned}
 \left(\overline{\alpha_k \rho_k u_k} \right)_{i+\frac{1}{2},j}^n &= (\alpha_k \rho_k u_k)_{i+\frac{1}{2},j}^n - \frac{\delta t}{r_{i+\frac{1}{2}} \delta r_{i+\frac{1}{2}}} \langle r (\alpha_k \rho_k u_k) u_k \rangle_{i+\frac{1}{2},j}^n - \frac{\delta t}{\delta z_j} \langle (\alpha_k \rho_k u_k) v_k \rangle_{i+\frac{1}{2},j}^n + \\
 &\delta t (\vec{\nabla} \cdot \tau_{kr})_{i+\frac{1}{2},j}^n - \frac{\delta t}{r_{i+\frac{1}{2}}} (\tau_{k\theta\theta})_{i+\frac{1}{2},j}^n \quad (3.8)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \left(\overline{\alpha_k \rho_k v_k} \right)_{i,j+\frac{1}{2}}^n &= (\alpha_k \rho_k v_k)_{i,j+\frac{1}{2}}^n - \frac{\delta t}{r_i \delta r_i} \langle r (\alpha_k \rho_k v_k) u_k \rangle_{i,j+\frac{1}{2}}^n - \frac{\delta t}{\delta z_{j+\frac{1}{2}}} \langle (\alpha_k \rho_k v_k) v_k \rangle_{i,j+\frac{1}{2}}^n - \\
 &\delta t (\vec{\nabla} \cdot \tau_{kz})_{i,j+\frac{1}{2}}^n \quad (3.9)
 \end{aligned}$$

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

$$(\vec{\nabla} \cdot \tau_{kr})_{i+\frac{1}{2},j}^n = \frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}} \delta r_{i+\frac{1}{2}}} \left[(r\tau_{kr})_{i+1,j}^n - (r\tau_{kr})_{i,j}^n \right] + \frac{1}{\delta z_j} \left[(\tau_{kzr})_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n - (\tau_{kzr})_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n \right] \quad (3.10)$$

$$(\vec{\nabla} \cdot \tau_{kz})_{i,j+\frac{1}{2}}^n = \frac{1}{r_i \delta r_i} \left[(r\tau_{kz})_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n - (r\tau_{kz})_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n \right] + \frac{1}{\delta z_{j+\frac{1}{2}}} \left[(\tau_{kzz})_{i,j+1}^n - (\tau_{kzz})_{i,j}^n \right] \quad (3.11)$$

A discretização dos componentes do tensor das tensões em diferenças centrais e dos termos representados entre colchetes angulares, considerando um esquema "upwind" de primeira ordem, nas Eqs. (3.8) e (3.9) resulta

$$(\tau_{k\theta\theta})_{i+\frac{1}{2},j}^n = \mu_k (\alpha_k)_{i+\frac{1}{2},j} \left[\frac{2}{r_{i+\frac{1}{2}}} (u_k)_{i+\frac{1}{2},j} - \frac{1}{3r_{i+\frac{1}{2}} \delta r_i} \left((ru_k)_{i+\frac{3}{2},j} - (ru_k)_{i+\frac{1}{2},j} \right) + \frac{1}{\delta z_j} \left((v_k)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - (v_k)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} \right) \right] \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} (\vec{\nabla} \cdot \tau_{kr})_{i+\frac{1}{2},j}^n &= \frac{\mu_k}{r_{i+\frac{1}{2}} \delta r_i} \left\{ (r\alpha_s)_{i+1}^j \left[\frac{2}{\delta r_i} \left((u_k)_{i+\frac{3}{2}}^j - (u_k)_{i+\frac{1}{2}}^j \right) - \frac{2}{3} \left[\frac{1}{r_{i+1} \delta r_i} \left((ru_k)_{i+\frac{3}{2}}^j - (ru_k)_{i+\frac{1}{2}}^j \right) + \frac{1}{\delta z_j} \left((v_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} - (v_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j-\frac{1}{2}} \right) \right] \right] - (r\alpha_k)_i^j \left[\frac{2}{\delta r_i} \left((u_k)_{i+\frac{1}{2}}^j - (u_k)_{i-\frac{1}{2}}^j \right) - \frac{2}{3} \left[\frac{1}{r_i \delta r_i} \left((ru_k)_{i+\frac{1}{2}}^j - (ru_k)_{i-\frac{1}{2}}^j \right) + \frac{1}{\delta z_j} \left((v_k)_i^{j+\frac{1}{2}} - (v_k)_i^{j-\frac{1}{2}} \right) \right] \right] \right\} \\ &+ \frac{\mu_k}{\delta z_j} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{(\alpha_k)_{i+1}^{j+1} + (\alpha_k)_i^j}{2} + \frac{(\alpha_k)_{i+1}^{j+1} + (\alpha_k)_{i+1}^j}{2} \right) \left[\frac{1}{\delta z_j} \left((u_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} - (u_k)_{i+\frac{1}{2}}^j \right) + \frac{1}{\delta r_i} \left((v_k)_{i+1}^{j+\frac{1}{2}} - (v_k)_i^{j+\frac{1}{2}} \right) \right] - \frac{1}{2} \left(\frac{(\alpha_k)_i^j + (\alpha_k)_i^{j-1}}{2} + \frac{(\alpha_k)_{i+1}^j + (\alpha_k)_{i+1}^{j-1}}{2} \right) \left[\frac{1}{\delta z_j} \left((u_k)_{i+\frac{1}{2}}^j - (u_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j-1} \right) + \frac{1}{\delta r_i} \left((v_k)_{i+1}^{j-\frac{1}{2}} - (v_k)_i^{j-\frac{1}{2}} \right) \right] \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned}
(\vec{\nabla} \cdot \tau_{kz})_{i,j+\frac{1}{2}}^n &= \frac{\mu_s}{r_i \delta r_i} \left\{ \frac{r_{i+\frac{1}{2}}}{2} \left(\frac{(\alpha_k)_{i+1}^{j+1} + (\alpha_k)_i^j}{2} + \frac{(\alpha_k)_{i+1}^{j+1} + (\alpha_k)_{i+1}^j}{2} \right) \left\{ \frac{1}{\delta z_j} \left((u_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} - (u_k)_{i+\frac{1}{2}}^j \right) + \right. \right. \\
&\frac{1}{\delta r_i} \left((v_k)_{i+1}^{j+\frac{1}{2}} - (v_k)_i^{j+\frac{1}{2}} \right) \left. \right\} - \frac{r_{i-\frac{1}{2}}}{2} \left(\frac{(\alpha_k)_{i-1}^{j+1} + (\alpha_k)_{i-1}^j}{2} + \frac{(\alpha_k)_i^{j+1} + (\alpha_k)_i^j}{2} \right) \cdot \left\{ \frac{1}{\delta z_j} \left((u_k)_{i-\frac{1}{2}}^{j+1} - \right. \right. \\
&\left. \left. - (u_k)_{i-\frac{1}{2}}^j \right) + \frac{1}{\delta r_i} \left((v_k)_i^{j+\frac{1}{2}} - (v_k)_{i-1}^{j+\frac{1}{2}} \right) \right\} \left. \right\} + \frac{\mu_k}{\delta z_j} \left\{ (\alpha_k)_i^{j+1} \left\{ \frac{2}{\delta z_j} \left((v_k)_i^{j+\frac{3}{2}} - (v_k)_i^{j+\frac{1}{2}} \right) - \frac{2}{3} \left[\frac{1}{r_i \delta r_i} \cdot \right. \right. \right. \\
&\left. \left. \left((ru_k)_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} - (ru_k)_{i-\frac{1}{2}}^{j+1} \right) + \frac{1}{\delta z_j} \left((v_k)_i^{j+\frac{3}{2}} - (v_k)_i^{j+\frac{1}{2}} \right) \right] \right\} - (\alpha_k)_i^j \left\{ \frac{2}{\delta z_j} \left((v_k)_i^{j+\frac{1}{2}} - (v_k)_i^{j-\frac{1}{2}} \right) - \frac{2}{3} \left[\frac{1}{r_i \delta r_i} \cdot \right. \right. \\
&\left. \left. \left((ru_k)_{i+\frac{1}{2}}^j - (ru_k)_{i-\frac{1}{2}}^j \right) + \frac{1}{\delta z_j} \left((v_k)_i^{j+\frac{1}{2}} - (v_k)_i^{j-\frac{1}{2}} \right) \right] \right\} \right\} \quad (3.14)
\end{aligned}$$

e

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

$$\begin{aligned}
\langle (\rho_k \alpha_k v_k) v_k \rangle_{i,j+\frac{1}{2}}^n &= (v_k)_{i,j+1}^n \begin{cases} (\rho_k \alpha_k v_k)_{i,j+\frac{1}{2}} \rightarrow \text{para } (v_k)_{i,j+1}^n > 0 \\ (\rho_k \alpha_k v_k)_{i,j+\frac{3}{2}} \rightarrow \text{para } (v_k)_{i,j+1}^n < 0 \end{cases} \\
- (v_k)_{i,j}^n &\begin{cases} (\rho_k \alpha_k v_k)_{i,j-\frac{1}{2}} \rightarrow \text{para } (v_k)_{i,j}^n > 0 \\ (\rho_k \alpha_k v_k)_{i,j+\frac{1}{2}} \rightarrow \text{para } (v_k)_{i,j}^n < 0 \end{cases} \quad (3.16)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle (\rho_k \alpha_k u_k r) u_k \rangle_{i+\frac{1}{2},j}^n &= (u_k)_{i+1,j}^n \begin{cases} (\rho_k \alpha_k u_k r)_{i+\frac{1}{2},j} \rightarrow \text{para } (u_k)_{i+1,j}^n > 0 \\ (\rho_k \alpha_k u_k r)_{i+\frac{3}{2},j} \rightarrow \text{para } (u_k)_{i+1,j}^n < 0 \end{cases} \\
 - (u_k)_{i,j}^n &\begin{cases} (\rho_k \alpha_k u_k r)_{i-\frac{1}{2},j} \rightarrow \text{para } (u_k)_{i,j}^n > 0 \\ (\rho_k \alpha_k u_k r)_{i+\frac{1}{2},j} \rightarrow \text{para } (u_k)_{i,j}^n < 0 \end{cases}
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

$$\begin{aligned}
 \langle (\rho_k \alpha_k v_k r) u_k \rangle_{i,j+\frac{1}{2}}^n &= (u_k)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n \begin{cases} (\rho_k \alpha_k v_k r)_{i,j+\frac{1}{2}} \rightarrow \text{para } (u_k)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n > 0 \\ (\rho_k \alpha_k v_k r)_{i+1,j+\frac{1}{2}} \rightarrow \text{para } (u_k)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n < 0 \end{cases} \\
 - (u_k)_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n &\begin{cases} (\rho_k \alpha_k v_k r)_{i-1,j+\frac{1}{2}} \rightarrow \text{para } (u_k)_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n > 0 \\ (\rho_k \alpha_k v_k r)_{i,j+\frac{1}{2}} \rightarrow \text{para } (u_k)_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n < 0 \end{cases}
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

3.2 – Técnica de solução (Código MICEFLOW)

3.2.1 – Detalhes do procedimento iterativo

Para resolver as equações discretizadas em diferenças finitas utiliza-se um procedimento iterativo. As equações de conservação da quantidade de movimento, Eqs. (3.4-3.7), são expressas em forma matricial como segue

$$\begin{pmatrix} \delta t(\beta_r)^n + (\alpha_g \rho_g)^{n+1} & -\delta t(\beta_r)^n \\ -\delta t(\beta_r)^n & \delta t(\beta_r)^n + (\alpha_s \rho_s)^{n+1} \end{pmatrix}_{i+\frac{1}{2},j} \begin{pmatrix} u_g \\ u_s \end{pmatrix}_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} = \begin{pmatrix} \left(\overline{(\alpha_g \rho_g u_g)}^n - \frac{\delta t}{\delta r} ((P_g)_{i+1,j}^{n+1} - (P_g)_{i,j}^{n+1}) + (\rho_g)^{n+1} g_r \delta t \right) \\ \left(\overline{(\alpha_s \rho_s u_s)}^n - \frac{\delta t}{\delta r} ((P_s)_{i+1,j}^{n+1} - (P_s)_{i,j}^{n+1}) + (\alpha_s (\rho_s - \rho_g))^{n+1} g_r \delta t \right) \end{pmatrix}_{i+\frac{1}{2},j} \tag{3.19}$$

$$\begin{pmatrix} \delta t(\beta_z)^n + (\alpha_g \rho_g)^{n+1} & -\delta t(\beta_z)^n \\ -\delta t(\beta_z)^n & \delta t(\beta_z)^n + (\alpha_s \rho_s)^{n+1} \end{pmatrix}_{i,j+\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} v_g \\ v_s \end{pmatrix}_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} = \begin{pmatrix} (\overline{\alpha_g \rho_g v_g})^n - \frac{\delta t}{\delta z} ((P_g)_{i,j+1}^{n+1} - (P_g)_{i,j}^{n+1}) + (\rho_g)^{n+1} g_z \delta t \\ (\overline{\alpha_s \rho_s v_s})^n - \frac{\delta t}{\delta z} ((P_s)_{i,j+1}^{n+1} - (P_s)_{i,j}^{n+1}) + (\alpha_s (\rho_s - \rho_g))^{n+1} g_z \delta t \end{pmatrix}_{i,j+\frac{1}{2}} \quad (3.20)$$

A equação de continuidade para a fase gasosa, Eq. (3.1), pode ser escrita como

$$D_{i,j} = -(\alpha_g \rho_g)_{i,j}^{n+1} + (\alpha_g \rho_g)_{i,j}^n - \frac{\delta t}{r_i \delta r_i} \langle r(\alpha_g \rho_g) u_g \rangle_{i,j}^{n+1} - \frac{\delta t}{\delta z_j} \langle (\alpha_g \rho_g) v_g \rangle_{i,j}^{n+1} \quad (3.21)$$

onde $D_{i,j}$ é o resíduo da continuidade da fase gasosa, e deve tender a zero para que haja convergência absoluta. No procedimento numérico a pressão em cada célula computacional é corrigida iterativamente até que $D_{i,j}$ atinja o critério de convergência ($D_{i,j} \leq 0,00001$). O processo iterativo prossegue até que o critério de convergência seja atingido em todas as células computacionais simultaneamente.

Os detalhes do procedimento iterativo são os seguintes:

1. São calculadas as quantidades grifadas com barra superior, Eqs. (3.8-3.9).
2. Calcula-se os coeficientes de arrasto.
3. Estima-se as velocidades num nível de tempo $n+1$ usando as Eqs. (3.19) e (3.20).
4. Calcula-se o coeficiente $\eta_{i,j}$ pela equação

$$\begin{aligned} \frac{1}{\eta_{i,j}} = \frac{\partial D_{i,j}}{\partial (P_g)_{i,j}} = \frac{(\alpha_g)_{i,j}}{(C_{i,j})^2} + \frac{(\delta t)^2}{r_i (\delta r_i)^2} \left(r_{i+\frac{1}{2}} (\alpha_g)_{i+\frac{1}{2},j} + r_{i-\frac{1}{2}} (\alpha_g)_{i-\frac{1}{2},j} \right) \\ + \frac{(\delta t)^2}{(\delta z_j)^2} \left((\alpha_g)_{i,j+\frac{1}{2}} + (\alpha_g)_{i,j-\frac{1}{2}} \right) \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde $C_{i,j}$ é a velocidade do som no ar.

A equação 3.22 para $\eta_{i,j}$ é obtida derivando a Equação 3.21 em relação à pressão. Aplica-se ao resultado as equações de conservação da quantidade de movimento, e assume-se algumas hipóteses simplificativas. Esse procedimento é detalhado no Apêndice IV.

5. O valor da pressão é corrigido iterativamente de acordo com o procedimento descrito na seção 3.2.2. A correção da pressão é efetuada em cada célula computacional até que seja atingido o critério de convergência, ou até que o número de iterações seja maior que um número de iterações especificado (400 iterações). Se não é atingido o critério de convergência em alguma das células computacionais, o ciclo é repetido. O número de ciclos de cálculo é restringido por um número externo de iterações especificado (5 iterações externas).

3.2.2 – Procedimento para o cálculo iterativo da pressão em uma célula computacional

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

- a) Calcula-se $D_{i,j}$ utilizando a Eq. (3.21). Se $D_{i,j} < \delta_g$ (tolerância especificada), avança-se para o passo e).
- b) Se $D_{i,j} > \delta_g$, a pressão na célula precisa ser ajustada.

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

$$(P_g)_{i,j}^{m+1} = (P_g)_{i,j}^m - \omega \cdot \eta_{i,j}^m \cdot D_{i,j}^m \quad (3.23)$$

onde ω é um parâmetro de relaxação. O método de Newton-Raphson é utilizado apenas uma vez em cada célula computacional. Em seguida efetua-se a correção da pressão usando o método da secante, Figura 3.3, onde

* Os índices m e $m+1$ representam os níveis de iteração. Durante a primeira iteração o valor da pressão em m é o valor inicial da pressão segundo as condições iniciais dadas.

$$\eta_{i,j}^m = \frac{(P_g)_1^{m-1} - (P_g)_2^m}{D_1^{m-1} - D_2^m} \quad (3.24)$$

O método da secante é aplicado até que o resíduo $D_{i,j}$ mude de sinal. Posteriormente, é utilizada uma combinação do método da secante com o método da bisseção denominado método restringido das duas secantes, ilustrada na Figura 3.4. Segundo este método, dados os três pontos 1, 2, e 3, dos quais 1 e 2 englobam a pressão desejada e 3 fica entre eles, as pressões P_A e P_B e seus respectivos resíduos de massa são determinadas por extrapolação e interpolação linear. O novo valor estimado da pressão no nível de tempo avançado é calculado como

$$(P_g)_{i,j}^{m+1} = \frac{1}{2}(P_A + P_B) \quad (3.25)$$

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

$$P_A = \frac{1}{2}(P_1 + P_3) \quad (3.26)$$

Depois de estimar o valor da pressão $(P_g)_{i,j}^{m+1}$, o ponto 2 é descartado e os pontos 1 e 3 são retidos como os limites melhorados para a nova estimativa da pressão. Quando $D_{i,j}$ muda de sinal o valor de $\eta_{i,j}$ é recalculado para próximas iterações como

$$\eta_{i,j} = \frac{P_1 - P_2}{D_1 - D_2} \quad (3.27)$$

- c) Calcula-se as velocidades utilizando as equações (3.19) e (3.20).
- d) Calcula-se os fluxos de massa de ambas as fases.
- e) A equação da continuidade do sólido é resolvida para calcular α_s .
- f) Calcula-se o valor de α_g da equação $\alpha_g + \alpha_s = 1$.
- g) Se $|D_{i,j}| > \delta_g$ retorna-se ao passo b).

Figura 3.3. Método da secante para a correção da pressão.

Figura 3.4. Método constringido das duas secantes para correção da pressão.

3.3 – Prescrição das condições de contorno

No programa computacional as condições de contorno são prescritas utilizando as células computacionais fictícias mostradas na Figura 3.1, e formuladas na seção 2.2.4.

Para representar a condição de contorno de simetria utiliza-se as células computacionais fictícias de número 2. Estas células representam a condição de contorno de deslizamento livre na parede modelada pelas Eqs. (2.52 - 2.54).

Na modelagem da condição de contorno de não deslizamento utiliza-se as células computacionais fictícias representadas pelo número 3. Esta condição de contorno é modelada pelas Eqs. (2.45, 2.48, 2.50 e 2.51).

As condições de contorno na entrada do tubo ascendente são modeladas utilizando as células computacionais fictícias de números 5 e 6. Neste caso as condições de contorno são prescritas pelas Eqs. (2.55 e 2.56).

Para modelar a condição de contorno de continuidade, formulada através da Eq. (2.57), na saída do tubo ascendente utiliza-se as células computacionais representadas pelos números 4 e 7. Para a célula 7 fixa-se a pressão do gás na saída igual a um valor experimental disponível.

No trabalho de JAYASWAL (1991) apresenta-se uma análise mais completa da técnica computacional acima descrita. O autor apresenta esta técnica para o caso de um escoamento multifásico (por exemplo, escoamentos gás-sólido-sólido, gás-líquido-sólido, etc.). Também acrescenta a metodologia de solução da equação de energia para o caso de escoamentos não isotérmicos, e da energia granular usando a TCEG. Além disso apresenta a formulação das condições de contorno e iniciais usadas no código numérico, e o programa de cálculo em FORTRAN, e instruções necessárias para seu uso.

CAPÍTULO 4. RESULTADOS DE SIMULAÇÃO

4.1 – Introdução

Apresenta-se simulação numérica do escoamento hidrodinâmico gás-sólido no tubo ascendente de um LFC visando estudo de aspectos problemáticos do escoamento. Desenvolve-se vários estudos incluindo: a) análise da influência de vários aspectos físicos e matemáticos sobre o escoamento, tais como: pressão e viscosidade do sólido, função de arrasto na interface, sistema de coordenadas e tamanho da malha computacional; b) avaliação de resultados de simulação numérica através de metodologia de identificação e caracterização de estruturas coerentes; c) estudo do efeito da função de arrasto na interface sobre a dinâmica de formação, dissipação e rompimento de estruturas coerentes; e d) estudo numérico de turbulência no escoamento gás-sólido através de simulação direta usando o modelo tradicional.

4.2 – Domínios computacionais e condições de contorno

As Figuras 4.1 e 4.2 mostram domínios e condições iniciais e de contorno considerados utilizando os sistemas cilíndrico e cartesiano de coordenadas, respectivamente. A situação da Figura 4.1 é utilizada nas simulações com MULTIFIX e MICEFLOW; a situação da Figura 4.2 é utilizada apenas nas simulações com MICEFLOW.

Esclarecimentos são necessários com relação à especificação de condições de contorno para pressão na entrada da coluna. De acordo com a análise das direções características esta condição não deve ser fornecida na entrada para a fase gasosa, sendo suficiente especificá-la apenas na saída. Entretanto, no tipo de simulação desenvolvido no trabalho a pressão também é especificada na entrada para calcular o

fluxo mássico de gás. A razão para isso é a consideração de fase gasosa compressível, sendo sua densidade calculada via equação de estado de gás ideal, considerando o valor da pressão na seção de entrada (JAYASWAL, 1991). Nesse caso portanto está-se usando a configuração das condições de contorno mais recomendada na bibliografia, i.e. prescrição de velocidade ou fluxo mássico na entrada, e da pressão na saída. Argumenta-se que esta configuração é mais robusta do ponto de vista numérico e matematicamente consistente.

Figura 4.1. Geometria e condições iniciais e de contorno usadas na simulação da instalação do IIT (LUO, 1987) assumindo coordenadas cilíndricas 2D.

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

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (4.2)$$

onde f pode ser α_g , u_g ou u_s Pressão fixa: $P = 117,2049 \text{ kPa}$ Condições de contorno nas paredes:

Fase gasosa: Eq. (2.45)

Fase sólida: Eqs. (2.48 – 2.50)

Fração de sólido e pressão do gás: Eq. (2.51)

Condições computacionais:

Malha computacional:

Malha 1: (12x75) 900 nós: $\delta x = 0,762$; $\delta y = 7,62 \text{ (cm)}$ Malha 2: (22x297) 6534 nós: $\delta x = 0,381$; $\delta y_1 = 11 \times 1,66$; $\delta y_2 = 280 \times 1,905$; $\delta y_3 = 6 \times 1,524 \text{ (cm)}$

Tempo real de cálculo e intervalo temporal de integração:

 $t = 100 \text{ s}$ e $\delta t = 0,00005 \text{ s}$

Figura 4.2. Geometria e condições iniciais e de contorno usadas na simulação da instalação do IIT (LUO, 1987) assumindo coordenadas cartesianas 2D.

É importante esclarecer que existem diversos códigos computacionais acadêmicos e comerciais que incluem escoamentos gás-sólido, e que tratam a formulação numérica das condições de contorno de forma diferente. Exemplo de alguns códigos acadêmicos são o MFIX (SYAMLAL *et al.*, 1993; SYAMLAL, 1998), o GEMINI I e II (PEIRANO, 1998), e o FLOWTRAS (SAMUELSBERG & HJERTAGER, 1996a). As diferenças parecem ter origem na dificuldade inerente do problema de formulação de condições de contorno apropriadas, na existência de diferentes tipos de modelos matemáticos e metodologias numéricas de solução, e na falta de um tratamento teórico unificado para o tema. Nesse trabalho decidiu-se aplicar os procedimentos originados da técnica numérica de HARLOW & AMSDEN (1975) tendo em vista o grande destaque na literatura dessa linha de desenvolvimento.

4.3 – Resultados de simulação com o código MULTIFIX modificado

A seguir mostra-se os resultados obtidos com o código MULTIFIX modificado. Basicamente foi estudada a influência da viscosidade dinâmica do sólido, μ_s , sobre o escoamento. Primeiramente, apresenta-se resultados de simulação para um único valor médio experimental de μ_s , igual a 0,509 kg/(ms), calculado por TSUO (1989). Posteriormente, faz-se uma análise da influência desta propriedade da fase sólida, arbitrando vários valores de μ_s em torno do seu valor médio experimental.

4.3.1 – Simulação para um valor fixo de μ_s

A Figura 4.3 mostra os contornos de fração volumétrica de sólidos no tubo ascendente (a fração volumétrica é maior para tons de cinza menos intensos). A figura mostra a formação e dissipação de clusters, formando-se o primeiro aos 1,5 segundos aproximadamente. Os resultados são qualitativamente semelhantes aos obtidos por TSUO (1989), que modelou essa mesma instalação utilizando coordenadas cartesianas 2D. Porém, contrariamente aos resultados de TSUO (1989), que não assumiu condições de simetria no centro da coluna, o sólido acumula-se principalmente ao longo do eixo de simetria. Por outro lado, NERI & GIDASPOW (2000) obtiveram o mesmo efeito aqui observado, usando a condição de simetria no centro da coluna. Segundo os autores este fenômeno deve-se ao fato do eixo de simetria atuar como um espelho, não permitindo o transporte de massa de uma parede para a outra do leito. Esse efeito indica a incorreção da consideração desse tipo de condição de contorno.

Na Figura 4.4 apresenta-se a variação temporal do fluxo mássico da fase sólida, G_s , (kg/m²s). O valor de G_s é obtido por integração sobre toda a área transversal do leito na altura de 5,3 metros acima da entrada, pela seguinte equação,

$$G_s = \frac{2\rho_s}{R_w^2} \int_0^{R_w} r v_s(r) dr \quad (4.3)$$

Figura 4.3. Variação temporal da fração volumétrica de sólidos no tubo ascendente (tons de cinza menos intensos indicam maiores valores da fração volumétrica de sólidos).

O gráfico mostra o comportamento macroscópico clássico de um LFC, incluindo oscilações de baixa frequência. TSUO (1989) reportou oscilações de baixa frequência de aproximadamente 0,2 Hertz. Os resultados da simulação apresentam boa concordância com o valor médio experimental de G_s obtido por LUO (1987). No intervalo de tempo considerado não se observa tendência ao estabelecimento de um regime estacionário bem definido.

Figura 4.4. Variação temporal do fluxo mássico da fase sólida, G_s , na altura de 5,3 metros. [O valor médio experimental de G_s é $24,9 \text{ kg/m}^2\text{s}$, (LUO, 1987)].

A Figura 4.5 mostra perfis radiais de velocidade axial para ambas as fases a 3,4 metros da entrada. Valores médios para diferentes intervalos de tempo são comparados com dados experimentais de LUO (1987). No caso da fase gasosa as predições apresentam desvios significativos dos dados experimentais. Para ambas as fases as curvas mostram um comportamento irreal próximo ao centro da coluna. Isso deve-se possivelmente a adoção de simetria radial, indicando a incorreção desta condição de contorno para escoamentos verticais gás-sólido em LFC. Observa-se que apesar dos perfis de velocidade simulados terem sido integrados para diferentes intervalos de tempo, as curvas mostram-se bastante próximas, sobre tudo na região que se estende desde a parede até aproximadamente dois terços do raio. Esse fato merece destaque pois o escoamento é caracterizado por grandes flutuações dos campos de velocidades e, de fato, nunca chega a atingir a condição de escoamento estacionário. No entanto, atinge-se o um regime estabelecido do ponto de vista estatístico. Para estabelecer este regime é recomendável que o intervalo de tempo de integração seja considerável. BENYAHIA *et al.* (2000) consideraram 15 segundos para o estabelecimento deste regime quase estacionário. Na Figura 4.5 percebe-se que para os intervalos de tempo de integração pequenos (10 a 15 segundos e 10 a 20

segundos) os resultados se desviam mais da tendência média ditada pela condição de simetria.

Figure 4.5. Perfis da velocidade axial média no tempo, para as fases gasosa e sólida, respectivamente, 3,4 metros acima da entrada. [• dados experimentais (LUO, 1987); simulações para diferentes intervalos de tempo de integração: x 10 a 15 segundos, v 10 a 20 segundos, $\diamond$ 10 a 25 segundos, $\triangle$ 10 a 30 segundos, $\square$ 10 a 35 segundos, $\circ$ 10 a 40 segundos].

4.3.2 – Simulação para vários valores de μ_s

São obtidos resultados de simulação para vários valores constantes da viscosidade do sólido μ_s ($\mu_s = 0,25$; $0,509$; $0,75$ e $1,00$ kg/(ms)) mantendo todas as demais condições iguais às definidas na Figura 4.1. Os valores de μ_s foram escolhidos em torno do valor médio experimental $\mu_s = 0,509$ kg/(ms) calculado por TSUO (1989) pela Eq. (2.16) para mostrar qualitativamente a influencia de μ_s .

Na Figura 4.6 apresenta-se a variação temporal do fluxo mássico da fase sólida G_s no tubo ascendente em função de μ_s a 5,3 metros acima da entrada. Não se observa um efeito diferenciado de variação de G_s com a viscosidade do sólido. Os resultados apresentam uma boa concordância com o valor médio experimental de LUO (1987) independentemente do valor de μ_s . De fato este comportamento era

esperado em virtude da imposição de continuidade. Observam-se oscilações de baixa frequência características de LFC. Não existe uma tendência ao estabelecimento de um regime estacionário bem definido a exemplo do que ocorre na prática devido à natureza instável do escoamento.

Figure 4.6. Variação temporal do fluxo mássico da fase sólida G_s no tubo ascendente a 5,3 metros acima da entrada para vários valores de μ_s . [O valor médio experimental de G_s é $24,9 \text{ kg/m}^2\text{s}$, (LUO, 1987)].

Apesar de não afetar significativamente o fluxo mássico da fase sólida, μ_s afeta consideravelmente os perfis de velocidade de ambas as fases. Na Figura 4.7 mostra-se perfis radiais de velocidade axial para várias viscosidades da fase sólida, comparados com dados experimentais de LUO (1987). Os perfis de velocidade são médios no tempo, no intervalo entre 10 e 48 segundos, com exceção do perfil correspondente a $\mu_s = 0,509 \text{ kg/(ms)}$, para o qual o intervalo de tempo considerado foi de 10 a 40 segundos (devido a problemas de convergência para $t > 42$ segundos). Observa-se grandes desvios (até aproximadamente 60 %) entre os vários perfis de velocidade para ambas as fases. Há uma tendência de aumento da velocidade no centro da coluna com o aumento da viscosidade do sólido. Essa tendência é fisicamente correta em escoamentos monofásicos uniformes laminares. Porém, não é

esperada em escoamentos gás-sólido em LFCs, que parecem assemelhar-se mais aos escoamentos monofásicos turbulentos, como visto na seção 4.4.1.1, página 80. No caso de $\mu_s = 0,509$ e $0,75$ kg/(ms) ocorre uma inversão de tendência. As possíveis causas desses comportamentos são a imposição da condição fisicamente incorreta de simetria, e uma possível difusão numérica diferenciada. Para baixos valores de viscosidade, $\mu_s = 0,25$ kg/(ms), os resultados são bastante insatisfatórios, possivelmente devido a uma maior influência da condição de simetria no centro da coluna.

Figure 4.7. Perfis radiais médios no tempo da velocidade axial local para ambas as fases 3,4 metros acima da entrada. [• dados experimentais (LUO, 1987); resultados de simulação para diferentes valores de μ_s].

Na Figura 4.8 mostra-se os perfis radiais médios no tempo da fração volumétrica de sólido em função do valor da viscosidade da fase sólida, comparados com dados experimentais de LUO (1987). Observa-se claramente o efeito da condição de contorno de simetria, que provoca um aumento irreal da concentração de sólido no centro da coluna. Essa acumulação de sólidos no centro da coluna, também evidenciada na Figura 4.3, contraria o regime característico na região superior de colunas de LFC, denominado "core-annulus flow" (escoamento pistonado-anular). Esse regime é caracterizado por um pistão ascendente de gás com sólido disperso no

centro da coluna e uma película anular descendente com alta concentração de sólidos nas paredes da coluna. A presença de "clusters" também é característica deste regime.

Figure 4.8. Perfis radiais médios no tempo da fração volumétrica de sólido local 3,4 metros acima da entrada. [• dados experimentais (LUO, 1987); resultados de simulação para diferentes valores de μ_s].

Os resultados apresentados nas Figura 4.7 e 4.8 mostram que a viscosidade da fase sólida afeta consideravelmente os resultados de simulação. Portanto, metodologias que permitam um cálculo mais rigoroso desta propriedade devem ser consideradas em trabalhos posteriores. Este é o caso da TCEG. Outro fato importante que se evidencia é a incorreção da condição de contorno de simetria em escoamentos gás-sólido em colunas de LFC. De fato, estes escoamentos são de natureza altamente não uniforme, e como tais são completamente assimétricos.

4.4 – Resultados de simulação com o código MICEFLOW

4.4.1 – Estudo da influencia de vários parâmetros sobre o escoamento gás-sólido no tubo ascendente de um LFC

Nesta seção analisa-se a influência de vários parâmetros sobre o escoamento gás-sólido no tubo ascendente de um LFC. Os parâmetros considerados são: a viscosidade dinâmica da fase sólida μ_s , a função de arrasto na interface β , e a pressão da fase sólida P_s determinada através das correlações para o módulo de elasticidade da fase sólida $G(\alpha_g)$. Além disso apresenta-se estudos iniciais sobre a influência do sistema de coordenadas, do tipo de modelo matemático e do refinamento de malha computacional. Nas simulações são assumidos vários parâmetros como conjunto base, sendo variado em cada caso apenas o parâmetro sob análise. Os parâmetros assumidos como base são: o valor de $\mu_s = 0,509 \text{ kg/(ms)}$ para a viscosidade dinâmica da fase sólida; o procedimento de GIDASPOW (1994) para a função de arrasto; a correlação de RIETEMA & MUTSERS apud JAYASWAL (1991) para a pressão da fase sólida; o modelo hidrodinâmico B do IIT; o sistema de coordenadas cartesianas; e a malha computacional mais grosseira (12x75). As condições de contorno não foram variadas, e este é um aspecto que deve ser considerado em futuros trabalhos devido a sua relevância e influência nos resultados de simulação.

Na análise do efeito da viscosidade da fase sólida usou-se os valores $\mu_s = 0,00; 0,25; 0,509; 0,75 \text{ e } 1,00 \text{ kg/(ms)}$, escolhidos em torno do valor experimental igual a $0,509 \text{ kg/(ms)}$ estimado por TSUO (1989). Nas análises dos efeitos da função de arrasto e da pressão da fase sólida considerou-se várias correlações da literatura. Na análise do tipo de modelo usou-se os modelos hidrodinâmicos A e B. Na análise do efeito do sistema de coordenadas considerou-se os sistemas cilíndrico e cartesiano, usando em ambos os casos os modelos hidrodinâmicos A e B. Na análise do efeito de refinamento de malha usou-se malhas (12x75) e (22x297).

4.4.1.1 – Viscosidade dinâmica do sólido

Na Figura 4.9 mostra-se a variação temporal do fluxo mássico da fase sólida no tubo ascendente 5,3 m acima da entrada, para vários valores da viscosidade da fase sólida. Nota-se que a viscosidade exerce um efeito considerável sobre as oscilações de G_s . Para valores relativamente pequenos da viscosidade observa-se uma boa concordância entre o valor médio temporal de G_s e o dado experimental de LUO (1987). Também observa-se as oscilações de baixa frequência características de LFC. No caso de valores altos da viscosidade da fase sólida obtém-se valores negativos instantâneos da velocidade mássica do sólido. Isso ocorre devido à acumulação de sólidos na região superior da coluna próximo à saída, formando grandes "clusters" que caem periodicamente. Nesses instantes G_s assume valores negativos.

Figura 4.9. Variação temporal do fluxo mássico da fase sólida, G_s , no tubo ascendente 5,3 m acima da entrada para diferentes valores da viscosidade do sólido. [O valor médio experimental de G_s é 24,9 kg/(m²s) (LUO, 1987)].

A evolução dos "clusters" pode ser observada nas Figuras 4.10 e 4.11, as quais mostram a variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna, no intervalo de tempo de 39,9 a 41,0 segundos, para dois valores da viscosidade do

sólido, $\mu_s = 0,509$ e $1,00$ kg/(ms), respectivamente (a fração volumétrica de sólidos é maior para tons de cinza mais intensos). Nas figuras observa-se claramente os agregados de sólido descendentes em toda a coluna. Para $\mu_s = 1,00$ kg/(ms) percebe-se a formação de grandes agregados de sólido na região superior da coluna, sendo um deles próximo à saída (5,3 metros de altura). No seu movimento descendente geram fluxo mássico de sólidos negativo. Para $\mu_s = 0,509$ kg/(ms) os grandes agregados de sólido descendentes são formados no meio da coluna no intervalo de tempo analisado. Percebe-se ainda que para $\mu_s = 1,00$ kg/(ms) forma-se agregados de sólido em maior quantidade ligeiramente maiores e mais compactos.

Figura 4.10. Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 39,9 a 41,0 segundos, para $\mu_s = 0,509$ kg/(ms).

Chama-se atenção para o fato de que o domínio mostrado nas Figuras 4.10 e 4.11 está distorcido. A razão aparente altura/diâmetro da coluna nas figuras é igual à 4, enquanto a razão real é aproximadamente igual à 73. Portanto os agregados de sólido detectados são na realidade lâminas verticais de sólido muito compridas, fato este confirmado na literatura experimental (DAVIDSON, 2000). Este autor observa que os "clusters" aparecem na forma de grupos de partículas com razão largura/altura pequena, sendo portanto lâminas verticais, as quais retêm a sua coerência durante uma distancia de queda considerável. Este último aspecto é claramente percebido nas Figuras 4.10 e 4.11. Outros estudos mostram que "clusters" também assumem outras formas geométricas (HARRIS *et al.*, 2002).

Figura 4.11. Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 39,9 a 41,0 segundos, para $\mu_s = 1,00 \text{ kg/(ms)}$.

Na Figura 4.9 mostra-se também resultados assumindo fase sólida invíscida. Observa-se que o fluxo mássico da fase sólida não apresenta oscilações devido a não formação de agregados como pode-se notar na Figura 4.12. Estes fatos são uma forte evidência de que modelos invíscidos (mesmo que sendo apenas para a fase sólida) não são adequados para predizer os fenômenos hidrodinâmicos que ocorrem em colunas ascendentes de LFC, em concordância com observações de GIDASPOW (1994).

Figura 4.12. Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 39,9 a 41,0 segundos, para $\mu_s = 0,00 \text{ kg/(ms)}$.

Na Figura 4.13 apresenta-se perfis radiais médios no tempo da velocidade axial para ambas as fases, em função da viscosidade da fase sólida, 3,4 m acima da

entrada, comparados aos dados experimentais de LUO (1987). Nota-se que para um valor nulo de μ_s os perfis da velocidade para ambas as fases são planos. Isso evidencia a ocorrência de escoamento praticamente unidimensional. Não existe variação radial significativa das variáveis analisadas, mas apenas variação com a altura da coluna. Esse fato é evidente na Figura 4.12, onde α_s muda de tonalidade (diminui) com a altura de forma uniforme em cada seção transversal, para cada instante de tempo.

Figura 4.13. Perfis radiais médios no tempo da velocidade axial para ambas as fases 3,4 metros acima da entrada. [• valor experimental (LUO, 1987); simulação para diferentes valores de μ_s].

Parece ser que a causa física deste comportamento é a não consideração da difusão de quantidade de movimento no sólido o que provoca uma distribuição uniforme do mesmo em cada seção transversal. Devido ao efeito da força de arrasto na interface, a fase sólida exerce um efeito de estabilização sobre a fase gasosa, forçando o seu perfil radial de velocidade (v_g) a ser plano, embora o escoamento de gás não seja invíscido. Na região central da coluna o perfil da velocidade axial do gás é puxado para abaixo, e na região da parede é puxado para acima, devido à uniformidade de α_s e v_s em cada seção transversal. Esse comportamento não

corresponde a real física do escoamento indicando que o modelo invíscido para a fase sólida não deve ser utilizado na predição da hidrodinâmica de LFCs.

A comparação na Figura 4.13 entre as velocidades para os diferentes valores de μ_s mostra desvios relativos de até 70 % (principalmente no centro da coluna) para ambas as fases. Os valores são mais próximos perto das paredes. Nota-se que com o incremento de μ_s (exceto para $\mu_s = 0,0 \text{ kg/(ms)}$) os perfis da velocidade tornam-se mais achatados. A tendência de aumento da velocidade no centro da coluna com o aumento de viscosidade, típica de escoamentos monofásicos uniformes laminares, parece não ocorrer para escoamentos gás-sólido em LFCs. De fato, os escoamentos em LFCs comportam-se mais como escoamentos monofásicos turbulentos, onde aumentos de viscosidade turbulenta geram perfis de velocidade axial mais achatados. Deve-se salientar que apesar do perfil de v_g para escoamento invíscido apresentar bons resultados em comparação com os resultados experimentais na região central, o mesmo não ocorre com v_s . Para a fase gasosa os valores maiores de μ_s simulam melhor os resultados de LUO (1987). Porém, para a fase sólida o valor de $\mu_s = 0,25 \text{ kg/(ms)}$ fornece as melhores predições.

Perfis radiais médios no tempo da fração volumétrica de sólidos, 3,4 metros acima da entrada, para diferentes valores de μ_s , são mostrados na Figura 4.14. Os resultados mostram a mesma tendência dos dados experimentais, exceto para a viscosidade nula, para a qual α_s apresenta um perfil plano na direção radial (comportamento homogêneo da mistura na seção). Porém, em termos quantitativos, a concordância com dados experimentais é pobre, principalmente no centro da coluna. Isto é consistente com os resultados de perfil radial de v_s mostrados na Figura 4.13. A fração volumétrica de sólido é superestimada pelo modelo.

Finalmente, na Figura 4.15 apresenta-se a variação temporal das oscilações de baixa frequência da componente axial da velocidade da fase sólida, 3,4 metros acima da entrada, no centro da coluna. A figura mostra que um LFC nunca atinge a condição normal de estado estacionário, mas exibe um comportamento oscilante. Depois dos 20 segundos de fluidização as oscilações começam a mostrar valor médio e frequência aproximadamente constantes. Como era de se esperar, a amplitude das oscilações decresce com o incremento da viscosidade da fase sólida, sendo que estas são nulas para $\mu_s = 0,00 \text{ kg/(ms)}$. Os valores oscilatórios da velocidade são

basicamente positivos, já que nesta posição, no centro da coluna, as partículas estão escoando em média para acima.

Figura 4.14. Perfis radiais médios no tempo da fração volumétrica de sólidos 3,4 metros acima da entrada. [● dados experimentais (LUO, 1987); simulação para diferentes valores de μ_s].

Figure 4.15. Variação temporal das oscilações da velocidade axial de baixa frequência da fase sólida calculadas 3,4 metros acima da entrada, no centro da coluna, para diferentes valores de μ_s .

4.4.1.2 – Função de arrasto na interface

Na Figura 4.16 mostra-se a variação temporal do fluxo mássico da fase sólida no tubo ascendente 5,3 m acima da entrada, para várias correlações da função de arrasto. No Apêndice II apresenta-se uma análise comparativa entre essas várias correlações. Nota-se que as correlações de GIDASPOW (1994) e GIBILARO *et al.* (1985) permitem obter as oscilações de baixa frequência características dos sistemas de LFC em concordância com os resultados de TSUO & GIDASPOW (1990), NERI & GIDASPOW (2000) e outros autores. Os resultados obtidos com as correlações de WEN & YU (1966) e DI FELICE (1994) apresentam comportamento similar aos obtidos para altos valores de μ_s . São obtidos valores negativos instantâneos do fluxo mássico da fase sólida médio na seção transversal. Como já visto isso se deve a acumulação de sólidos na região superior da coluna, como se percebe nas Figuras 4.17 e 4.18. Estas mostram a variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna, para diferentes intervalos de tempo, considerando as correlações de WEN & YU (1966) e DI FELICE (1994), respectivamente. Para ambas as correlações percebe-se a formação e movimentação de grandes agregados de sólido na região superior da coluna. Nos diferentes intervalos de tempo mostrados, e em todo o tempo de simulação considerado, a correlação de WEN & YU (1966) gerou mais "clusters" na região superior da coluna que a de DI FELICE (1994).

Considerando os resultados das Figuras 4.17 e 4.18, aqueles apresentados na Figura 4.10 para o procedimento de GIDASPOW (1994), e aqueles mostrados na Figura 4.19 para a correlação de GIBILARO *et al.* (1985), observa-se que todas as correlações captam a dinâmica de formação, dissipação e colapso dos "clusters" de forma qualitativamente correta. Há contudo algumas diferenças relativas à altura onde estes são formados inicialmente, à frequência com que descem e se dissipam e a sua concentração em diferentes zonas da coluna do leito.

A Figura 4.20 mostra os resultados obtidos para a correlação de ERGUN (1952), quando utilizada independentemente para toda a faixa de porosidade do leito ($0 \leq \alpha_s \leq \alpha_{s,max}$). Evidencia-se que o uso "generalizado" da correlação de Ergun não permite captar a dinâmica de formação, movimentação, dissipação e colapso dos "clusters". Percebe-se uma distribuição quase uniforme de α_s em cada seção

transversal ao longo da coluna. Esse comportamento pode ser explicado em vista da origem da correlação de Ergun. Esta originalmente foi desenvolvida através de medições da queda de pressão num leito fixo líquido-sólido e sua aplicação não parece adequada para escoamentos dispersos, como acontece num LFC.

Figure 4.16. Variação temporal do fluxo mássico da fase sólida G_s no tubo ascendente 5,3 metros acima da entrada, para várias correlações da função de arrasto. [$G_s = 24,9 \text{ kg/m}^2\text{s}$ é o valor médio experimental (LUO, 1987)].

No caso em que a correlação de Ergun se utiliza apenas para uma faixa de α_s o escoamento em LFCs é caracterizado corretamente (TSUO & GIDASPOW, 1990; SAMUELSBERG & HJERTAGER, 1996a,b; NIEUWLAND *et al.*, 1996 e SUN & GIDASPOW, 1999).

Além dos trabalhos em LFC, o procedimento que considera a correlação de ERGUN (1952) para $\alpha_s \geq 0,2$ e a correlação de WEN & YU (1966) para $\alpha_s < 0,2$, aqui denominado procedimento de GIDASPOW (1994), tem sido testado e comparado com outras correlações em aplicações de LFB, como em SANYAL & CESMEBASI (1994) e em van WACHEM *et al.* (2001). Segundo estes últimos autores, esta combinação de correlações pode causar oscilações da solução numérica devido ao salto em β para $\alpha_s = 0,2$, como mostrado no Apêndice II. Já Sanyal & Cesmebasi chegaram à conclusão de que a combinação das correlações é a que

melhor reproduz as observações experimentais reportadas em KUIPERS (1990) sobre a dinâmica de crescimento de bolhas em LFB. Segundo os autores a descontinuidade na função de arrasto pode ter um grande efeito perto da região do "freeboard", onde existe uma mudança brusca de α_s da condição de mínima fluidização para a condição de escoamento diluído. Num leito de jorro, a descontinuidade em β pode ser importante na vizinhança da bolha, onde α_g muda de um valor relativamente baixo ($\sim 0,6$) para um valor alto (correspondente ao valor na bolha). No presente trabalho não se percebem efeitos claros de descontinuidade nos resultados devido a combinação das correlações de Ergun e Wen & Yu.

Figura 4.17. Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 61,5 a 62,6 segundos, com função de arrasto determinada pela correlação de WEN & YU (1966).

Figura 4.18. Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 70,0 a 71,1 segundos, com função de arrasto determinada pela correlação de DI FELICE (1994).

Perfis radiais médios no tempo da velocidade axial local para ambas as fases 3,4 metros acima da entrada são mostrados na Figura 4.21, para várias correlações da função de arrasto. Os resultados obtidos mostram um comportamento similar aos obtidos para os vários valores de μ_s . Em comparação com os dados experimentais, os valores obtidos perto da parede mostram uma melhor tendência. No entanto, neste caso é difícil estabelecer uma comparação quantitativa que permita avaliar qual é a melhor correlação. Ocorre que os dados experimentais de LUO (1987) foram considerados simétricos, enquanto os perfis obtidos por simulação não o são.

Novamente, percebe-se o comportamento incorreto dos perfis da velocidade obtidos com a correlação de ERGUN (1952), quando considerada para toda a faixa de possíveis valores de α_s , no lado esquerdo da coluna. Deve-se notar que neste caso o efeito de homogeneização devido a força de arrasto prevalece sobre os efeitos difusivos de ambas as fases. Isso indica que a força de arrasto é significativa em comparação com os termos difusivos modelados pelo tensor das tensões viscosas.

Figura 4.19. Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 59,8 a 60,9 segundos, com função de arrasto determinada pela correlação de GIBILARO *et al.* (1985).

Figura 4.20. Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 39,9 a 41,0 segundos, considerando função de arrasto definida apenas pela correlação de ERGUN (1952) para toda a faixa da fração volumétrica de sólido.

Na Figura 4.22, observa-se que o comportamento dos diferentes perfis radiais de α_s para as várias correlações de arrasto são bastante semelhantes aos obtidos para vários valores de μ_s . Em comparação com os dados experimentais o modelo superestima o valor de α_s principalmente no centro da coluna. Os melhores resultados de simulação são obtidos com a correlação de DI FELICE (1994) em todo o domínio computacional, exceto na parede. Nesta região o procedimento de GIDASPOW (1994) é o que fornece melhores resultados. Novamente, o uso da correlação de ERGUN (1952) em toda a faixa de α_s mostrou-se incorreto.

Figure 4.21. Perfis radiais médios no tempo da velocidade axial local para ambas as fases 3,4 metros acima da entrada. [● valores experimentais (LUO, 1987); simulação para várias correlações da função de arrasto].

Figure 4.22. Perfis radiais médios no tempo da fração volumétrica de sólido 3,4 metros acima da entrada. [● dados experimentais (LUO, 1987); simulação para várias correlações da função de arrasto].

A Figura 4.23 mostra a variação temporal das oscilações de baixa frequência da componente axial da velocidade da fase sólida no centro da coluna, 3,4 metros

acima da entrada. As oscilações de v_s são similares para todas as correlações, exceto para a de ERGUN (1952), para a qual não existem, ou não são captadas.

Figure 4.23. Variação temporal das oscilações de baixa frequência da velocidade axial da fase sólida no centro da coluna, 3,4 metros acima da entrada, para diferentes correlações de função de arrasto.

4.4.1.3 – Pressão do sólido

A seguir mostra-se uma análise paramétrica da influência da pressão do sólido sobre a física do escoamento. A pressão do sólido dentro do contexto do modelo tradicional é calculada em função do módulo de elasticidade da fase sólida. São consideradas seis correlações para o módulo de elasticidade do sólido, $G(\alpha_g)$. No Apêndice II apresenta-se uma análise comparativa entre essas correlações.

Na Figura 4.24 mostra-se a variação temporal do fluxo mássico da fase sólida no tubo ascendente 5,3 m acima da entrada, para as várias correlações do módulo de elasticidade do sólido. Nota-se duas tendências diferentes, mesmo que todos os resultados oscilem com a mesma baixa frequência média. Os resultados obtidos através das correlações de RIETEMA & MUTSERS (1973) apud JAYASWAL (1991), GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983) e JAYASWAL (1991) oscilam, em todo o intervalo de tempo analisado (dos 20 aos 100 segundos), em torno do valor

médio experimental. Os resultados correspondentes as correlações de ETTEHADIEH *et al.* (1984), SHIH *et al.* (1987) e GIDASPOW *et al.* (1989b) oscilam em torno do valor médio experimental no intervalo entre 20 e 55 segundos. No intervalo entre 55 e 100 também oscilam em torno do valor médio experimental, porém com amplitudes maiores, percebendo-se valores negativos do fluxo mássico que indicam a ocorrência de "clusters". A influência da pressão do sólido no escoamento pode ser observada através da comparação dos gráficos de variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna para as várias correlações da pressão do sólido.

Figura 4.24. Variação temporal do fluxo mássico da fase sólida G_s 5,3 metros acima da entrada para várias correlações do módulo de elasticidade. [$G_s = 24,9 \text{ kg/m}^2\text{s}$ é o valor médio experimental (LUO, 1987)].

Nas Figuras 4.25 a 4.30 mostra-se que a pressão do sólido exerce uma influência considerável sobre o comportamento transiente do escoamento. Todas as figuras são estabelecidas no mesmo intervalo de tempo (entre 61,6 e 63 segundos), para diferentes correlações do módulo de elasticidade da fase sólida. Nas três primeiras Figuras (4.25 a 4.27) os maiores "clusters" são formados principalmente na região superior do leito até a metade da coluna. Há uma maior quantidade de clusters em comparação com o observado nas Figuras 4.28 a 4.30. Nestas os "clusters" acontecem principalmente a partir da metade da coluna para abaixo. Comparando os

dois grupos de figuras percebe-se que existem diferenças no comportamento captado pelo modelo. Comparações dos perfis radiais médios no tempo da fração volumétrica de sólido na altura de 3,4 metros acima da entrada do leito, são mostrados na Figura 4.31. Percebe-se que os perfis são bastante semelhantes, apresentando as maiores diferenças quantitativas na região da parede. Em todos os casos o modelo capta o perfil radial correto. Há porém algumas diferenças significativas com respeito aos resultados experimentais, principalmente na região central do leito. O mesmo acontece com os perfis radiais médios no tempo da velocidade axial das duas fases, mostrados na Figura 4.32. Todas as correlações resultam em comportamento similar em toda a seção transversal do leito.

Figura 4.25. Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 61,6 a 63,0 segundos, para módulo de elasticidade determinado pela correlação de ETTEHADIEH *et al.* (1984).

Figura 4.26. Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 61,6 a 63,0 segundos, para módulo de elasticidade determinado pela correlação de SHIH *et al.* (1987).

Figura 4.27. Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 61,6 a 63,0 segundos, para módulo de elasticidade determinado pela correlação de GIDASPOW *et al.* (1989b).

Figura 4.28. Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 61,6 a 63,0 segundos, para módulo de elasticidade determinado pela correlação de RIETEMA & MUTSERS (1973) apud JAYASWAL (1991).

Figura 4.29. Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 61,0 a 63,0 segundos, para módulo de elasticidade determinado pela correlação de GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983).

Figura 4.30. Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 61,6 a 63,0 segundos, para módulo de elasticidade determinado pela correlação de JAYASWAL (1991) e SUN & GIDASPOW (1999).

Figura 4.31. Perfis radiais médios no tempo da fração volumétrica de sólido 3,4 metros acima da entrada. [• dados experimentais (LUO, 1987); simulação para diferentes correlações da pressão do sólido].

Embora POLACHENSKI & CHEN (1999) tenham observado o contrário, os resultados correntes de simulação indicam que a pressão do sólido exerce influência considerável no comportamento transitório do escoamento. Consequentemente influi sobre as estruturas mesoscópicas do escoamento, e portanto nos processos de

transporte que ocorrem no leito. Assim, critérios com base apenas em comportamentos médios do escoamento (normalmente médias temporais) são insuficientes como critérios únicos para projetar e quantificar o desempenho de LFCs. Efeitos com base em avaliação da estrutura instantânea do escoamento devem ser incorporados e considerados no estabelecimento de critérios para projeto e cálculo destas instalações.

Figura 4.32. Perfis radiais médios no tempo da velocidade axial para ambas as fases 3,4 metros acima da entrada. [• dados experimentais (LUO, 1987); simulação para diferentes correlações da pressão do sólido].

4.4.1.4 – Análise paramétrica sobre a influencia de outros aspectos. (Modelo hidrodinâmico, sistema de coordenadas e malha computacional)

As Figuras 4.33 e 4.34 mostram resultados obtidos para os modelos hidrodinâmicos A e B, e para os sistemas de coordenadas cartesiano e cilíndrico. As figuras mostram, respectivamente, perfis radiais médios no tempo das velocidades axiais do gás e do sólido, e perfis radiais médios no tempo da fração volumétrica de sólido, 3,4 m acima da entrada. Os resultados obtidos com o sistema de coordenadas cilíndrico são incorretos no centro da coluna, devido a aplicação de condição de contorno de simetria, conforme já discutido na seção 4.3.1.

Figura 4.33. Perfis radiais médios no tempo da velocidade axial do gás e do sólido 3,4 metros acima da entrada. [• dados experimentais (LUO, 1987); para os modelos hidrodinâmicos A e B e os sistemas de coordenadas cartesiano e cilíndrico].

No caso do sistema cilíndrico de coordenadas não há diferenças significativas entre os procedimentos A e B. Para o sistema cartesiano de coordenadas os resultados obtidos pelo modelo A apresentam um melhor comportamento, principalmente para a fração volumétrica de sólidos, exceto na região próxima à parede. O modelo B parece produzir melhores resultados para os perfis da velocidade considerando a "simetria" dos resultados experimentais. A Figura 4.35 mostra outros

resultados para ambos os modelos hidrodinâmicos, em coordenadas cartesianas, os quais apresentam alguma discordância pouco significativa. Em geral, os resultados de simulação obtidos através dos dois modelos apresentam comportamentos similares. Porém a investigação de outros efeitos, e uma comparação exaustiva com resultados experimentais mais detalhados devem ser desenvolvidos com o objetivo de esclarecer a qualidade preditiva de cada modelo. O estado da arte em simulação de escoamentos em LFCs ainda não inclui essas validações.

Figura 4.34. Perfis radiais médios no tempo da fração volumétrica de sólido 3,4 metros acima da entrada. [● dados experimentais (LUO, 1987); para os modelos hidrodinâmicos A e B e os sistemas de coordenadas cartesiano e cilíndrico].

Do ponto de vista deste autor, este é um aspecto muito importante. De fato, algumas comparações entre os dois modelos tem sido publicadas recentemente (AGRAWAL *et al.*, 2001). Entretanto, as questões fundamentais que levaram ao desenvolvimento do modelo B, estão sendo pouco exploradas. De acordo com GIDASPOW (1994) o modelo B derivou-se do A com a finalidade de obter um sistema hiperbólico com todas as direções características reais, e portanto, um modelo matemático bem posto. O modelo A, utilizado pela maioria dos pesquisadores e na maioria dos códigos numéricos, não é um sistema bem posto (STEWART & WENDROFF, 1984; GIDASPOW, 1994). Isto poderia influir nas

soluções obtidas, já que para diferentes condições iniciais o modelo produziria respostas diferentes. Vários autores tem estudado este comportamento. Recentemente KISELEV *et al.* (1999) escreveram um texto onde tratam esta questão de forma rigorosa, citando inúmeros trabalhos produzidos na Rússia. Segundo os autores, para que o sistema de EDP de um escoamento bifásico gás-sólido seja matematicamente bem posto, apenas num dado intervalo do número de Mach do gás, este deve incorporar um termo para a pressão do sólido usando a TCEG. Recomenda-se o estudo destes trabalhos para futuros desenvolvimentos.

Figura 4.35. Variação temporal do fluxo mássico da fase sólida G_s e oscilações de baixa frequência da velocidade axial do sólido no centro da coluna 5,3 e 3,4 metros acima da entrada, respectivamente, para os modelos A e B.

A seguir apresenta-se um estudo sucinto sobre a influência do tamanho de malha computacional sobre o comportamento do escoamento. São consideradas apenas duas malhas computacionais, 12x75 e 22x297, conforme indicado na Figura 4.2. As Figuras 4.36, 4.37 e 4.38 mostram que a malha computacional exerce uma influência considerável nos resultados de simulação. Apesar de captar qualitativamente o mesmo comportamento, as diferenças quantitativas são grandes. No caso dos perfis de velocidade as malhas produzem resultados bem diferentes tanto no centro da coluna quanto na parede. Os resultados próximos à parede

parecem qualitativamente superiores para a malha mais fina, pois o escoamento do tipo pistonado-anular é mais evidente e o perfil da velocidade do sólido mostra uma camada anular densa de velocidade negativa, concordando com evidências experimentais e teóricas relatadas na literatura (MILLER & GIDASPOW, 1992; GIDASPOW, 1994). No caso do perfil da fração volumétrica de sólido média no tempo observa-se um melhor comportamento dos resultados obtidos também com a malha mais fina em quase toda a seção transversal, exceto próximo da parede, onde a malha mais grossa se comporta melhor.

Figura 4.36. Variação temporal do fluxo mássico da fase sólida G_s 5,3 metros acima da entrada considerando duas malhas computacionais. [$G_s = 24,9 \text{ kg/m}^2 \text{ s}$ - valor médio experimental (LUO, 1987), malha 1 (12x75), malha 2 (22x297)].

As diferenças acima podem ser observadas claramente comparando os perfis de α_s na Figura 4.39 para a malha 2 com aqueles apresentados nas Figuras 4.10 e 4.28 para a malha 1. Como pode-se observar a malha fina também capta os "clusters" presentes nas simulações com a malha grossa. Porém, no intervalo de tempo analisado, observa-se que os "clusters" são maiores para a malha mais grossa, sendo bem mais diluídos e distribuídos ao longo da coluna na região próxima à parede para a malha fina. Na malha fina capta-se melhor o padrão de escoamento pistonado-anular, sendo este similar ao obtido por BENHAYIA *et al.* (2000).

Figura 4.37. Perfis radiais médios no tempo da velocidade axial das fases gasosa e sólida 3,4 metros acima da entrada, considerando duas malhas computacionais. [• dados experimentais (LUO, 1987), malha 1 (12x75), malha 2 (22x297)].

Figura 4.38. Perfis radiais médios no tempo da fração volumétrica de sólido 3,4 metros acima da entrada. [• dados experimentais (LUO, 1987); malha 1 (12x75), malha 2 (22x297)].

Evidencia-se a necessidade de estudos que avaliem o tamanho mínimo de malha no qual a fase sólida ainda possa ser considerada um meio contínuo. CELMIŇŠ (1988) estudou o efeito do tamanho do volume de controle no cálculo da fração volumétrica de sólido. Estabeleceu uma relação que permite quantificar o tamanho mínimo do volume de controle para o qual a fase sólida seja contínua. Esse volume de controle mínimo é basicamente função do diâmetro médio das partículas e da fração volumétrica de sólido, e deve ser considerado na determinação do tamanho mínimo da malha computacional.

Figura 4.39. Variação da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna no intervalo de tempo de 39,9 a 41,6 segundos para a malha 2 (22x297).

Em relação as possíveis causas das diferenças dos resultados obtidos para as duas malhas computacionais consideradas, pode-se afirmar que ainda não existe uma opinião conclusiva. Recentemente AGRAWAL *et al.* (2001) mostraram que uma solução independente do tamanho de malha é difícil de se obter. Isto ocorre porque as características do escoamento vão mudar em todas as escalas de comprimento e de tempo que sejam testadas devido as instabilidades do escoamento a nível das meso escalas. Segundo AGRAWAL *et al.*, nem sempre é claro se os resultados computados são uma consequência real do sistema de EDP que se tenta resolver. Eles afirmam que para simular os eventos que acontecem no nível das meso e macro escalas do escoamento de forma completa, uma integração numérica direta das equações governantes é a rota óbvia. Porém, uma simulação deste tipo, independente do tamanho de malha, ainda está por ser obtida.

Em vista do melhor desempenho da malha mais fina, esta será utilizada nas próximas seções, a fim de diversificar as análises já apresentadas. No caso dos resultados anteriores para a malha mais fina foram simulados apenas 50 segundos devido à limitações computacionais (foi utilizada uma estação de trabalho SUN Ultra 1 com 96 Mb de RAM). Os resultados de simulação apresentados nas seções seguintes foram obtidos considerando 100 segundos de tempo real de fluidização em computador PC Pentium 4 de 1,7 GHz com 512 Mb de RAM.

4.4.1.5 – Análises adicionais do efeito da função de arrasto para 100 segundos de simulação com a malha 2

Na Figura 4.40 apresenta-se perfis radiais médios no tempo da velocidade axial para as fases gasosa e sólida, comparados aos resultados experimentais de LUO (1987), para varias correlações da função de arrasto. Os resultados são qualitativamente similares aqueles da seção 4.4.1.2, gerados para a malha mais grosseira. Observou-se novamente resultados fisicamente incoerentes obtidos com a correlação de Ergun, confirmando que esta não deve ser considerada para toda a faixa de valores de α_s . Comparando os resultados com os apresentados para os mesmos perfis na Figura 4.37, nota-se que estes são bastantes semelhantes.

Figura 4.40. Perfis radiais médios no tempo da velocidade axial para ambas as fases 3,4 metros acima da entrada para várias correlações de β .

A Figura 4.41 apresenta o perfil radial de fração volumétrica de sólido média no tempo para as várias correlações de β . Como nos resultados para a malha mais grossa mostrados na seção 4.4.1.2, à exceção da correlação de ERGUN (1952), os resultados apresentam um comportamento muito semelhante, qualitativamente correto, observando-se uma boa concordância com os dados experimentais. Entretanto, ao contrario do resultado para a malha grosseira, as maiores diferenças quantitativas entre simulações e experimento são detectadas na região mais próxima à parede. Com o uso da malha mais fina, o modelo produziu um perfil de α_s melhor em comparação com os resultados apresentados na seção 4.4.1.2. Entretanto, os resultados apresentaram o mesmo comportamento qualitativo. No caso da correlação de ERGUN (1952) foram detectadas as mesmas anomalias, já discutidas.

A formação de "clusters" e o padrão de escoamento pistonado-anular são mostrados na Figura 4.42. Nesta figura são apresentados os perfis temporais da fração volumétrica de sólido ao longo da altura de toda a coluna, com função arrasto obtida pelo procedimento de GIDASPOW (1994). Percebe-se uma camada mais densa de sólido próximo as duas paredes, evidência do padrão de escoamento pistonado-anular.

Figura 4.41. Perfil radial da fração volumétrica de sólido média no tempo 3,4 metros acima da entrada para várias correlações da função de arrasto.

Figura 4.42. Perfis temporais da fração volumétrica de sólido ao longo da altura da coluna para o procedimento de GIDASPOW (1994).

Perfis similares da fração volumétrica de sólido, porém considerando as várias correlações da função de arrasto, são mostrados na Figura 4.43. Apresenta-se apenas os resultados para dois instantes de tempo, 39,9 e 40,0 segundos. De forma

semelhante ao que ocorre com a malha mais grosseira percebe-se que, quando a correlação de ERGUN (1952) é considerada em toda a faixa de α_s , ($0 \leq \alpha_s \leq \alpha_{s,max}$), o modelo não capta as oscilações de baixa frequência e a formação de "clusters". Porém, quando esta correlação é usada para $\alpha_s \geq 0,2$ junto com a de WEN & YU para $\alpha_s < 0,2$ (procedimento de Gidaspow) estas características do escoamento são bem captadas (Figure 4.43d). Isto também se observa para as outras duas correlações consideradas. Observa-se que as correlações de DI FELICE (1994), WEN & YU (1966) e o procedimento de GIDASPOW (1994) produzem resultados bastante semelhantes. Porém, observa-se algumas diferenças entre a região de entrada e a metade da altura da coluna, sendo que no caso de DI FELICE (1994) o escoamento é mais denso que nos outros dois casos. Os comportamentos observados para Wen & Yu e Gidaspow mostram-se bem similares, provavelmente porque o procedimento de Gidaspow considera a correlação de Wen & Yu na faixa dispersa do escoamento. Utilizando o procedimento de Gidaspow nota-se que existe um pistão de gás na entrada do leito que empurra todo o sólido para acima.

Figura 4.43. Perfis temporais da fração volumétrica de sólido ao longo da altura da coluna em dois instantes de tempo para as várias correlações de β : (a) ERGUN (1952), (b) WEN & YU (1966), (c) DI FELICE (1994), e (d) GIDASPOW (1994).

A Figura 4.43 mostra como o comportamento instantâneo do escoamento é diferente para cada uma das correlações da função de arrasto consideradas. Isto indica a importância de uma escolha correta da correlação e a necessidade de novos estudos nesta direção. A Figura 4.44 mostra os mesmos resultados da Figura 4.43, porém obtidos com a malha mais grosseira na workstation SUN. Comparando estas duas figuras percebe-se uma influência significativa do tamanho de malha sobre os resultados de simulação. Nota-se que a malha mais fina capta melhor o escoamento pistonado-anular, e que os "clusters" são maiores na malha mais grosseira. Entretanto, os resultados para ambas as malhas são qualitativamente corretos do ponto de vista das características macroscópicas do escoamento. Um estudo mais profundo da influência do tamanho de malha é evidentemente necessário.

Figura 4.44. Perfis temporais da fração volumétrica de sólido ao longo da altura da coluna em dois instantes de tempo para as várias correlações de β considerando a malha 1, obtidos na Workstation SUN: (a) ERGUN (1952), (b) WEN & YU (1966), (c) DI FELICE (1994) e (d) GIDASPOW (1994).

Na Figura 4.45 mostra-se uma comparação entre os perfis temporais da fração volumétrica de sólidos em toda a coluna obtidos na workstation SUN Ultra 1 e no PC Pentium 4. Considera-se o mesmo intervalo de tempo e a malha computacional mais fina em ambos os casos. Apesar dos resultados serem qualitativamente semelhantes, percebe-se diferenças quanto ao seu comportamento temporal. A zona mais afetada é

a inferior. Pistões de gás são observados na Figura 4.45a, e não são captados na Figura 4.45b.

a) PC Pentium 4

b) Workstation SUN Ultra 1

Figura 4.45. Perfis temporais da fração volumétrica de sólido em toda a coluna no intervalo de tempo de 39,9 a 41,6 segundos, para a malha 2 (22x297) (a) PC Pentium 4, (b) Workstation SUN Ultra 1.

A análise acima sugere atenção em relação a três fatores. O primeiro refere-se ao hardware. É recomendável executar todas as simulações num mesmo computador para evitar possíveis erros de avaliação decorrentes de erros de arredondamento inerentes à precisão de diferentes máquinas. FERZIGER (1998) (página 90) afirma que o erro de arredondamento deve ser proporcional a $\Delta t^{-0,5}$, mas é de natureza

estatística. Provavelmente um programa diferente ou o mesmo programa rodado em outro computador ou com outro compilador deverão dar resultados diferentes nos detalhes, porém com as mesmas tendências (FERZIGER, 1998).

O segundo fator relaciona-se à qualidade do código computacional. Um código deve ser programado de forma otimizada. Evitar o uso da exponenciação em ponto flutuante e programar modularmente são duas ações que levam a construção de códigos otimizados. Muitos outros aspectos devem ser considerados no desenvolvimento de programação otimizada (ROACHE, 1998). No presente trabalho o código numérico foi construído e modificado em termos do modelo matemático, não sendo otimizado do ponto de vista de programação.

O terceiro fator relaciona-se à adequação do modelo ao escoamento que se estuda. A simulação da região inferior de uma coluna de LFC é complexa, mesmo com modelos mais sofisticados como aqueles que consideram a TCEG (NERI & GIDASPOW, 2000). Esta região assemelha-se a um LFB (JOHNSSON *et al*, 2000), cujo comportamento é bem diferente daquele das regiões média e de saída. Isto exige um modelo capaz de considerar diferentes efeitos para cada uma das zonas. Na zona inferior os efeitos das colisões partícula-partícula devem ser considerados. No caso do modelo tradicional isto poderia ser tratado considerando uma relação de μ_s com a fração volumétrica do sólido, de difícil obtenção experimental. No caso da TCEG o problema consiste na necessidade de considerar relações dos coeficientes de restituição partícula-partícula e partícula-parede com α_s . Correlações experimentais gerais que contemplem estes aspectos ainda não foram desenvolvidas.

Os resultados obtidos com a malha fina para 100 segundos de fluidização no PC Pentium 4 são qualitativamente corretos, mostrando ser semelhantes aos obtidos na Workstation SUN Ultra 1. Deve-se esclarecer que não foi possível obter resultados de simulação com a malha computacional mais fina para a correlação de GIBILARO *et al*. (1985). Neste caso o código MICEFLOW não convergiu para o número de iterações fixadas, 5 iterações externas (em todo o domínio computacional) e 400 internas (em cada célula computacional). No caso da correlação de DI FELICE (1994) não foi possível simular até os 100 segundos de tempo real de fluidização. Os resultados apresentados foram obtidos até os 98,18 segundos de fluidização. Depois deste tempo o código não convergiu dentro do limite de iterações fixadas.

4.4.2 – Avaliação de resultados de simulação numérica do escoamento gás-sólido no tubo ascendente de um LFC através de metodologia de identificação e caracterização de estruturas coerentes

4.4.2.1 – Introdução

O escoamento em LFCs é caracterizado pela formação de "clusters", i.e. 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", "strands", "ribbons", "dense packets", "swarms", "sheets", e "clusters" tem sido utilizados para descrever agregados de partículas. Zethræus & 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 similar. 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). Do seu estudo observaram que os "clusters" são estruturas com forma de paraboloide na parte inferior, com uma esteira de gás na parte superior. DAVIDSON (2000) afirma que os "clusters" são grupos de partículas em forma de lâminas verticais com uma razão largura/altura pequena (<1), e que mantém a sua coerência durante uma distância de queda considerável. BÜSSING & 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 a 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. Isso 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 4.1, foi realizada através de observações experimentais num LFC bidimensional, e através de análises de resultados de literatura.

Tabela 4.1. 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. Varias formas geométricas descritas.
"Streamers/strands"	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.

Da Tabela 4.1 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), que consideraram apenas a região do riser próxima a parede, recomendaram o uso da palavra genérica "cluster" 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.

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 detecta-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 recentemente em TUZLA *et al.* (1998) e SHARMA *et al.* (2000). Os autores propuseram o critério com base em técnica de medição usando uma sonda capacitiva intrusiva. Esta metodologia será 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. JOHNSON & JOHNSON (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 dos dois fluidos para definir o limite de existência de clusters na tentativa de eliminar esta influência (HARRIS *et al.*, 2002).

TSUO & GIDASPOW (1990) 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 têm sido desenvolvidos usando 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 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 influencia 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.

4.4.2.2 – Identificação e características 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 dos "clusters" maior que aquele obtido com o critério 2σ de Soong *et al.* Embora reconheçam que o critério 2σ seja arbitrário, os autores observam que o uso de um fator diferente para separar o ruído de fundo (e.g. 3σ) pode alterar quantitativamente os resultados, porém não deve alterar as características gerais da dinâmica dos "clusters". Comentários sobre a arbitrariedade deste critério serão apresentados na seção 4.4.3.3.

Figura 4.46. Variação temporal da fração volumétrica de sólido local típica resultante de simulação.

O procedimento proposto por Sharma *et al.*, adotado neste trabalho é ilustrado na Figura 4.46. A Figura 4.46a mostra um sinal temporal da fração volumétrica de sólido local típico resultante de simulação. São indicados a concentração de sólido média no tempo $\bar{\alpha}_s$ e o limiar $\bar{\alpha}_s + 2\sigma$. Na Figura 4.46b apresenta-se uma ampliação deste sinal entre 20 e 30 segundos, onde observa-se a existência de um "cluster" no intervalo entre 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, i.e. 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.*, 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

$$\tau_c = \frac{\sum_{i=1}^n \tau_i}{n} \quad (4.4)$$

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.

$$F_c = \frac{\sum_{i=1}^n \tau_i}{\tau} \quad (4.5)$$

- 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, i.e.

$$\alpha_{sc} = \frac{\sum_{i=1}^n \bar{\alpha}_{s,i}}{n} \quad (4.6)$$

Em adição, são determinados valores médios dos parâmetros acima na seção transversal do tubo ascendente, i.e.

$$\langle f \rangle = \frac{1}{2R_w} \int_0^{2R_w} f(x) dx \quad (4.7)$$

onde x é a coordenada na direção horizontal e $2R_w$ é o comprimento da seção transversal do tubo ascendente (duas vezes o raio do leito).

4.4.2.3 – Análise das características dos "clusters" a partir dos resultados de simulação numérica

Na Figura 4.47 mostra-se os perfis radiais da fração volumétrica de sólido média no tempo, em seis seções transversais do leito. Os perfis mostram um comportamento similar entre si e em comparação com os dados experimentais. O único perfil discrepante é o correspondente a 5,5 metros de altura próximo a saída da coluna. Neste caso observa-se um acúmulo de sólido no centro da coluna devido, possivelmente, à geometria da seção de saída (Figura 4.2). Essa região impõe um obstáculo ao escoamento propiciando a formação de "clusters". Exceto neste ultimo caso, em todos os outros percebe-se o padrão de escoamento pistonado-anular. Um comportamento similar ao mostrado na Figura 4.47, nota-se na Figura 4.48, em

relação aos perfis radiais da concentração média de sólido nos "clusters", α_{sc} . Este parâmetro também mostra uma concentração de sólido maior nas regiões próximas às paredes. A partir de 4,5 metros de altura os perfis de α_{sc} já acusam o efeito agregador da seção de saída, enquanto nos perfis de $\bar{\alpha}_s$ esse efeito só é detectado a 5,5 metros.

Figura 4.47. Perfis radiais da fração volumétrica de sólido média no tempo em várias seções transversais da coluna, em comparação com resultados experimentais de LUO (1987) obtidos a 3,4 metros acima da seção de entrada.

A Figura 4.49 mostra uma comparação de valores médios na seção transversal da coluna, entre a fração volumétrica de sólido média no tempo, $\bar{\alpha}_s$, e a concentração temporal média de sólido em "clusters", α_{sc} . Ambos parâmetros $\langle \bar{\alpha}_s \rangle$ e $\langle \alpha_{sc} \rangle$ apresentam um comportamento similar, com uma pequena diferença na altura de 5,5 metros onde se percebe um leve aumento de $\langle \alpha_{sc} \rangle$ enquanto $\langle \bar{\alpha}_s \rangle$ diminui. Mais uma vez, isto reflete o acúmulo de sólidos com formação de "clusters" na região de saída do leito. Trabalhos recentes têm mostrado que a região inferior de um LFC comporta-se de fato como um LFB (JOHNSON *et al.*, 2000). Os critérios de Sharma *et al.* detectam "clusters" também nessa região, sugerindo a existência de tais estruturas coerentes mesmo em LFB. Esse é um aspecto interessante que precisa

ser melhor investigado, pois de fato estes critérios indicarão “clusters” em qualquer escoamento gás-sólido.

Figura 4.48. Perfis radiais da concentração média de sólido nos "clusters", α_{sc} , em várias seções transversais da coluna.

Figura 4.49. Perfis médios na seção transversal da fração volumétrica de sólido média no tempo, $\langle \alpha_s \rangle$, da concentração média de sólido nos clusters, $\langle \alpha_{sc} \rangle$, e do tempo de duração dos clusters, $\langle \tau_c \rangle$, ao longo da coluna.

O tempo de duração dos "clusters", τ_c , é mostrado na Figura 4.50. Percebe-se alguma variação relativa entre os perfis radiais através do leito, com valores elevados de τ_c nas regiões próximas à parede direita da coluna. Isto não acontece na parede esquerda onde os perfis conservam um comportamento praticamente plano, mostrando um leve crescimento em alguns casos. Esse comportamento deve-se, possivelmente, à condição de contorno de saída, que provoca um direcionamento do escoamento para a parede direita causando uma concentração de sólidos maior nessa região. A causa física deste comportamento, porém, não está clara. Seria razoável esperar um tempo de duração maior também na parede esquerda em consequência da película anular de sólido mostrada nas Figuras 4.38 e 4.41.

Figura 4.50. Perfis radiais do tempo de duração dos "clusters", τ_c , em várias seções transversais do leito.

A comparação destes resultados aos de Sharma *et al.* deve ser feita com cuidado, visto estes autores terem assumido condição de simetria radial, além de condições operacionais e de contorno diferentes. Entretanto, os presentes resultados são muito diferentes daqueles apresentados por estes autores. Para Sharma *et al.* o maior valor de τ_c foi de 0,15 segundos a 4,5 metros de altura. No presente trabalho o maior valor de τ_c nessa mesma altura foi de 4,0 segundos. Esta diferença significativa pode ser devido à natureza turbulenta do escoamento, não considerada totalmente na

presente simulação direta devido à limitação do tamanho de malha considerado. Há também que se considerar as incertezas nas medições experimentais, e as diferenças nas condições operacionais experimentais comparadas às de simulação.

O valor médio de τ_c na seção transversal, $\langle \tau_c \rangle$, é mostrado na Figura 4.49 em função da altura da coluna. O tempo médio de duração dos "clusters" é inversamente proporcional às concentrações de sólido média no tempo e nos "clusters". Ou seja, quanto mais densos os "clusters" são, menor é o seu tempo de duração em termos dos valores médios na seção transversal. No caso dos valores locais destas variáveis observa-se o mesmo padrão de comportamento como visto nas Figuras 4.48 e 4.50 (com o aumento da altura α_{sc} cai enquanto τ_c cresce, exceto nos 5,5 metros onde τ_c tem o mesmo comportamento de α_{sc}). Porém, na direção radial observa-se, em média, um comportamento inverso, i.e. quanto maior a concentração, α_{sc} , maior o tempo de duração do "cluster", τ_c , como percebe-se nas Figuras 4.48 e 4.50.

Figura 4.51. Variação radial da fração de tempo de existência dos "clusters", F_c , e da frequência de ocorrência de clusters, N_c , em várias seções transversais do leito.

A Figura 4.51 mostra a fração de tempo de existência de "clusters" F_c , e a frequência de ocorrência dos "clusters", N_c , em função do raio em várias seções transversais do leito. Na Figura 4.51a pode-se observar uma diferença máxima de aproximadamente 4 vezes entre os valores de F_c obtidos (mínimo de 0,06 e máximo

de 0,25), sendo que a maioria dos pontos oscilam entre 0,12 e 0,20. Não se vislumbra qualquer padrão de variação funcional de F_c com o raio em função da altura. Da Figura 4.51b pode-se notar que a frequência maior de ocorrência dos "clusters", para a metade superior da coluna, acontece aos 5,5 metros de altura, sendo de quase 0,30 "clusters" por segundo. Este valor é muito baixo quando comparado aos dados de SHARMA *et al.* (2000), que obtiveram quase 12 "clusters" por segundo. Esta grande diferença em N_c , concorda com a detectada para τ_c . Como o tempo de existência do "cluster" num dado local é elevado a sua frequência de ocorrência é pequena.

Na Figura 4.52 mostra-se a fração de tempo de existência e frequência de ocorrência dos "clusters" médias na seção em função da altura da coluna. No caso de $\langle F_c \rangle$ os resultados oscilam numa faixa entre 0,13 e 0,20, em torno do valor médio de aproximadamente 0,17. Este valor médio de $\langle F_c \rangle$ também foi obtido por SHARMA *et al.* (2000). Segundo estes autores este valor mantém-se aproximadamente constante mesmo quando a velocidade superficial de entrada do gás e o diâmetro de partícula médio são variados consideravelmente. Os autores observam que essa constância é, até o momento, inexplicável.

Figura 4.52. Valores médios na seção da fração de tempo de existência dos clusters, $\langle F_c \rangle$, e da frequência de ocorrência de clusters, $\langle N_c \rangle$, em função da altura da coluna.

Ao longo da coluna observa-se uma variação mais intensa de $\langle N_c \rangle$ em comparação com $\langle F_c \rangle$. A maior frequência média de "clusters" foi observada na parte inferior do leito, oscilando entre 0,13 e 0,41 por segundo. Na metade e parte superior da coluna oscilou entre 0,07 e 0,15 por segundo. Nesta Figura 4.52, como na Figura 4.51a, nota-se valores muito baixos de N_c em comparação com os dados de SHARMA *et al.* (2000). Novamente, essa discrepância pode estar relacionada, conforme já mencionado, ao uso de simulação direta com limitação de malha (sobre tudo para a fase gasosa), a incertezas numéricas, incertezas nos resultados experimentais de Sharma *et al.*, e a diferenças entre as condições operacionais experimentais e de simulação. Na presente simulação direta, a frequência de ocorrência é baixíssima e o tempo de existência é elevado em comparação tanto com as medições experimentais de SHARMA *et al.* (2000), quanto com resultados de simulação de HELLAND *et al.* (2002). Os resultados de Helland *et al.* foram obtidos através de simulação de Euler-Lagrange numa região na parte superior da coluna do LFC estudado por Sharma *et al.*. Nesse caso valores de 6 a 9 clusters/s e de 120 a 150 ms foram obtidos para a frequência de ocorrência e o tempo de existência dos clusters, respectivamente.

4.4.3 – Efeito da função de arrasto na interface sobre a dinâmica de formação, dissipação e rompimento de estruturas coerentes

4.4.3.1 – Introdução

A similaridade entre a formação de "clusters" em sistemas líquido-sólido e gás-sólido foi estudada por CHEN *et al.* (1991). Estes autores assumiram que o arrasto é a única fonte que promove o movimento relativo entre as partículas. Então, consideraram que quaisquer dois sistemas podem ter a mesma tendência para a formação de "clusters" se o arrasto nestes é hidrodinamicamente similar.

O arrasto estacionário expresso através da função de arrasto, β , é a única força na interface considerada no modelo tradicional das duas fases separadas. Equações empíricas são utilizadas para a formulação desta força, através da qual modela-se a transferência de quantidade de movimento na interface. De acordo com

van WACHEM *et al.* (2001) e outros a força de arrasto na interface é a combinação, num único parâmetro empírico, dos arrastos de forma e por fricção.

A maior parte dos dados utilizados na formulação da força de arrasto, em muitos sistemas multi-partículas, tem sido obtida através de estudos de fluidização uniforme ou de sedimentação. Tipicamente, a função de arrasto é determinada através de medições experimentais da queda de pressão em leitos fixos, fluidizados ou sedimentados. Estas medições experimentais podem ser utilizadas para calcular β diretamente, $\beta = f(\Delta P)$, ou em função do coeficiente de arrasto de uma partícula numa suspensão C_{Ds} , o qual é determinado em função da queda de pressão, $\beta = f(C_{Ds}(\Delta P))$. Utilizando estas metodologias, várias correlações para β têm sido propostas na literatura. Por exemplo, ERGUN (1952) realizou medições num leito fixo líquido-sólido para determinar a queda de pressão ΔP e correlacioná-la empiricamente. Esta correlação foi posteriormente utilizada para calcular β diretamente, $\beta = f(\Delta P)$. WEN & YU (1966) realizaram experimentos de sedimentação de partículas sólidas num líquido numa ampla faixa de valores da fração volumétrica de sólido, e correlacionaram seus dados e de outros trabalhos para concentrações de sólido $0,01 \leq \alpha_s \leq 0,63$, estabelecendo uma correlação para o coeficiente de arrasto C_{Ds} . Esta correlação foi utilizada para o cálculo de β indiretamente, $\beta = f(C_{Ds}(\Delta P))$.

HELLAND *et al.* (2002) descrevem dois efeitos opostos da formação de “clusters” sobre o arrasto na interface, em função da concentração de sólidos. Em regiões com algumas partículas distribuídas não uniformemente, o movimento descendente de uma partícula pode criar um campo de velocidade através do fluido que tende a diminuir o arrasto de todas as outras partículas vizinhas, devido a um “bypass” do escoamento de retorno. Por outro lado, se as partículas estão distribuídas mais ou menos uniformemente no fluido, a restrição da área de escoamento entre as partículas em zonas densas resultará em maiores gradientes da velocidade da fase gasosa, criando-se um aumento das tensões de cisalhamento e por tanto um incremento da resistência ao escoamento do gás.

Nesta seção realiza-se um estudo da influência da função de arrasto na interface sobre a dinâmica de formação, dissipação e rompimento dos “clusters” usando a metodologia de identificação e caracterização de “clusters” de SHARMA *et*

al. (2000). São analisadas quatro correlações da função de arrasto com base nos trabalhos de ERGUN (1952), WEN & YU (1966), DI FELICE (1994) e GIDASPOW (1994) conforme já descrito em seções anteriores.

4.4.3.2 – Análise das características dos "clusters" a partir dos resultados de simulação numérica para as várias correlações de β

Na Figura 4.53 mostra-se os perfis radiais da concentração média de sólido nos "clusters", α_{sc} . Observa-se um comportamento similar ao mostrado na Figura 4.41 para $\bar{\alpha}_s$ para todas as correlações de β , exceto a de DI FELICE (1994), que resulta num comportamento bastante diferente. A correlação de WEN & YU (1966) e o procedimento de GIDASPOW (1994) apresentam resultados muito semelhantes. Observa-se uma concentração média de sólido nos "clusters" maior nas regiões próximas às paredes, sendo que a correlação de Ergun mantém o seu perfil plano (distribuição homogênea de α_{sc}), qualitativa e quantitativamente igual ao perfil de $\bar{\alpha}_s$. Este fato chama atenção, pois a concentração de sólido nos "clusters" deve ser, por definição, sempre maior que a concentração de sólido média no tempo, como percebe-se na Figura 4.53 para as outras correlações de β . Neste caso o critério médio de referência apresenta-se falho. Isso está em acordo com resultados de seções anteriores mostrando que "clusters" não são observados quando a função de arrasto de Ergun é utilizada. Este fato será discutido com maior profundidade na seção 4.4.3.3 e reflete a necessidade de melhorar ou formular novos critérios que permitam caracterizar e quantificar melhor as estruturas coerentes.

As Figuras 4.54a e b mostram os valores médios na seção transversal da coluna, da fração volumétrica de sólido média no tempo, $\bar{\alpha}_s$, e a concentração média de sólido nos "clusters", α_{sc} , respectivamente. Para a correlação de WEN & YU (1966) e o procedimento de GIDASPOW (1994), $\langle \alpha_{sc} \rangle$ e $\langle \bar{\alpha}_s \rangle$ apresentam comportamento similar, com uma pequena diferença na altura de 5,5 metros onde se percebe um leve aumento de $\langle \alpha_{sc} \rangle$ enquanto $\langle \bar{\alpha}_s \rangle$ diminui. Isto reflete o acúmulo de sólidos com formação de "clusters" na região de saída do leito. Para a correlação de DI FELICE (1994) o perfil axial de $\langle \alpha_{sc} \rangle$ apresenta algumas variações bruscas

em comparação com o perfil de $\langle \bar{\alpha}_s \rangle$, sendo claro um aumento brusco em torno de 3,5 metros de altura. Acima dessa altura $\langle \bar{\alpha}_s \rangle$ diminui, voltando a ter um leve aumento na saída do leito. Nota-se que o valor de $\langle \alpha_{sc} \rangle$, depois de 1,5 metros de altura, é maior que os valores correspondentes às outras correlações. Este fato reflete a formação de "clusters" mais densos no uso desta correlação, como percebe-se na Figura 4.53.

Figura 4.53. Perfis radiais da concentração média de sólido nos "clusters", α_{sc} , para várias correlações da função de arrasto.

Observa-se, novamente, que a correlação de ERGUN (1952) prevê uma distribuição homogênea da fração volumétrica de sólido média no tempo ao longo da altura da coluna. Mais uma vez, nota-se que os valores de $\langle \alpha_{sc} \rangle$ e $\langle \bar{\alpha}_s \rangle$ obtidos através desta correlação resultam iguais. Isso indica que a correlação de Ergun não capta as variações da fração volumétrica de sólido e as características dos "clusters", e portanto não detecta a formação destas estruturas. Na região inferior do leito a concentração de sólido resulta alta para todas as correlações, exceto a de ERGUN (1952). Nesta região mais densa, "clusters" também são detectados pelo critério médio de referência, porém podem não existir de fato. Esse aspecto deve ser pesquisado com mais profundidade. Há consideráveis diferenças nos perfis axiais de

$\langle \alpha_{sc} \rangle$ para as várias correlações de β consideradas, evidenciando a necessidade de verificação experimental.

Figura 4.54. Comparação dos perfis médios na seção transversal da concentração média de sólido nos "clusters", $\langle \alpha_{sc} \rangle$, e da fração volumétrica de sólido média no tempo, $\langle \bar{\alpha}_s \rangle$, ao longo da coluna, para as várias correlações da função de arrasto.

Os perfis, radial do tempo de duração dos "clusters", τ_c , e axial médio na seção do tempo de duração dos "clusters", $\langle \tau_c \rangle$, para as várias correlações de β são mostrados nas Figuras 4.55a e b, respectivamente. Para todas as funções de arrasto, percebe-se uma grande variação relativa entre os perfis radiais através do leito, observando-se valores elevados de τ_c nas regiões próximas à parede direita da coluna. Isto acontece em menor grau do centro até a parede esquerda, onde os perfis oscilam um pouco, mostrando um leve crescimento perto da parede em alguns casos. Esse comportamento deve-se, possivelmente, à condição de contorno de saída, que provoca um direcionamento do escoamento para a parede direita, causando uma concentração de sólidos maior nessa região. É interessante notar que no caso da correlação de ERGUN (1952), são captados "clusters" na faixa de τ_c de 1,0 a 1,75 segundos, aproximadamente. Isto contradiz as observações apresentadas em seções anteriores (Figuras 4.43 e 4.44) que indicam a inexistência de "clusters" neste caso.

Figura 4.55. Perfis radiais do tempo de duração dos "clusters", τ_c e perfis axiais do tempo de duração dos "clusters", médio na seção transversal, $\langle \tau_c \rangle$, para as várias correlações da função de arrasto.

As Figuras 4.56a e b mostram a fração de tempo de existência de "clusters" em cada posição radial, F_c , a 3,4 metros de altura, e fração de tempo de existência de "clusters" média na seção, $\langle F_c \rangle$, ao longo da altura da coluna. Pode-se observar uma diferença máxima de aproximadamente 4 vezes entre os valores de F_c obtidos (mínimo de 0,07 e máximo de 0,27), sendo que a maioria dos pontos oscilam entre 0,10 e 0,22. Não se vislumbra qualquer padrão de variação funcional de F_c com o raio. Na Figura 4.56b observa-se que o parâmetro $\langle F_c \rangle$ oscila numa faixa entre 0,07 e 0,22, em torno do valor médio de aproximadamente 0,17, desconsiderando a correlação de DI FELICE (1994). O valor médio de 0,17, achado experimentalmente por Sharma *et al.*, também poderia ser assumido no presente trabalho, para todas as correlações de β , excetuando DI FELICE (1994).

Figura 4.56. Fração de tempo de existência dos "clusters" em cada posição radial a 3,4 metros de altura, F_c , e fração de tempo de existência dos "clusters" média na seção, $\langle F_c \rangle$, em função da altura da coluna, para várias correlações de β .

Nas Figuras 4.57a e b apresenta-se a frequência de ocorrência dos "clusters", N_c , em função do raio a 3,4 metros de altura, e o valor médio na seção desta frequência de ocorrência, $\langle N_c \rangle$, em função da altura do leito, respectivamente. Nestes casos observa-se uma variação um pouco maior desta propriedade em comparação com a fração de tempo de existência dos "clusters", principalmente em relação à $\langle F_c \rangle$. A maior quantidade de "clusters" em função da altura foi observada na parte inferior do leito, oscilando de 0,05 até 0,20 entre metade e a parte superior da coluna. A correlação de DI FELICE (1994) foi a que resultou em menor quantidade de "clusters" ao longo da coluna. Na seção transversal, observou-se a maior quantidade de "clusters" no centro da coluna para todas as correlações, exceto a de DI FELICE (1994). Esta capta os menores valores de N_c nessa região, e em toda a seção transversal. Da Figura 4.57b pode-se notar que a frequência maior de ocorrência dos "clusters" para a metade superior da coluna acontece a 5,5 metros de altura, para todas as correlações de β consideradas, sendo de aproximadamente 0,15 "clusters" por segundo em média. Este valor é muito baixo quando comparado aos dados de SHARMA *et al.* (2000), que obtiveram quase 12 "clusters" por segundo.

Figura 4.57. Variação radial da frequência de ocorrência de "clusters", N_c , aos 3,4 metros de altura e da frequência de ocorrência de "clusters", média na seção transversal, $\langle N_c \rangle$, ao longo da coluna, para as várias correlações de β .

4.4.3.3 – Análise da validade do critério proposto por SHARMA *et al.* (2000)

Na Figura 4.58 mostra-se a variação temporal da fração volumétrica de sólido na altura de 3,4 metros acima da entrada, na célula computacional mais próxima à parede esquerda do leito, considerando a correlação de ERGUN (1952) em toda a faixa de α_s . Como se percebe desta figura, o critério 2σ capta vários "clusters". A diferença entre o valor médio de α_s e o limiar $\alpha_s + 2\sigma$ é da ordem de 10^{-7} . Esta diferença insignificante é muito menor que os erros envolvidos em medições experimentais e em quaisquer soluções numéricas em mecânica dos fluidos. De fato, a análise estatística na qual se baseia o critério médio de referência de SHARMA *et al.* (2000) capta "clusters" independentemente do comportamento do parâmetro α_s analisado, já que qualquer sinal que se analise terá necessariamente alguns picos fora do limite 2σ . Parece claro que novos critérios precisam ser formulados que levem em conta efeitos hidrodinâmicos do escoamento, não apenas dados estatísticos em α_s . Este problema foi abordado recentemente por HARRIS *et al.* (2002) e comentado na

seção introdutória 4.4.2.1. De acordo com eles o limite inferior de α_s influencia na definição e propriedades dos “clusters”.

Figura 4.58. Variação temporal da fração volumétrica de sólido local na coordenada, $r = -3,62$ cm, aos 3,4 metros de altura considerando a correlação de ERGUN (1952).

Outra questão a ser elucidada com respeito ao critério médio de referência ou qualquer outro, é a sua aplicação nas diferentes regiões do leito. Nos LFCs pode-se considerar que a região inferior comporta-se como um LFB (JOHNSON *et al.*, 2000), razão pela qual compromete-se a consideração de ocorrência de "clusters" nesta região.

4.4.4 – Estudo numérico de turbulência no escoamento gás-sólido num LFC através de simulação direta

4.4.4.1 – Introdução

A modelagem da turbulência em escoamentos multifásicos, especificamente em escoamentos bifásicos gás-sólido, é de difícil execução, pois somado às dificuldades inerentes à formulação do fenômeno da turbulência em escoamentos monofásicos, deve-se considerar os efeitos de interação entre fases através da interface que as separa. Quando existe uma interface bem definida como em escoamentos estratificados gás-líquido a análise física, apesar de ser bastante complexa, pode ser desenvolvida com maior rigor. No caso de escoamentos gás-sólido ou de outros escoamentos bifásicos (por exemplo, gás-líquido não estratificados, líquido-líquido), onde a interface não está bem definida, a formulação da turbulência é bastante complicada.

Para modelar a turbulência em escoamentos multifásicos gás-sólido, dois aspectos básicos são muito importantes. O primeiro refere-se à formulação das equações de balanço considerando as flutuações turbulentas. Como é sabido, já no caso de um escoamento monofásico considerando fluido Newtoniano, existem inúmeros modelos e procedimentos de modelagem que se diferenciam no grau de dificuldade, complexidade das equações e capacidade preditiva. Para os escoamentos multifásicos as dificuldades de modelagem são mais acentuadas, pela própria natureza mais complexa do escoamento. Neste caso são amplamente utilizados os modelos desenvolvidos para escoamentos monofásicos com modificações que ajudem a captar apropriadamente a física do processo multifásico.

O outro aspecto básico do processo de modelagem relaciona-se à formulação de termos de interface nas equações de balanço. Esses termos devem considerar as interações entre as fases no escoamento turbulento, permitindo determinar a influência que uma fase tem na outra e vice-versa.

Muitos autores tratam a TCEG como uma teoria que modela a turbulência da fase sólida tal como o fazem modelos como $k-\varepsilon$ (PEIRANO & LECKNER, 1998, GIDASPOW, 1994, entre outros). Porém, isto ainda é questão não resolvida como se

infeere da revisão apresentada por SINCLAIR (1997). A autora nota que "temperatura granular" identifica-se com flutuações de velocidade associadas a partículas individuais. Entretanto, flutuações de velocidade de coleções de partículas, i.e. da fase sólida, identificam-se com a energia cinética turbulenta desta fase. Os conceitos são distintos e cuidado é necessário para não confundi-los. Não se pode determinar a temperatura termodinâmica de um gás a partir de soluções hidrodinâmicas macroscópicas de meio contínuo. Da mesma forma, não parece razoável determinar "temperatura granular" a partir de formulações hidrodinâmicas do contínuo. Para a determinação de "temperaturas granulares" deve-se conhecer velocidades locais instantâneas de partículas ou, alternativamente, aplicar balanços conservativos de "energia cinética granular".

Dos comentários anteriores percebe-se a complexidade que envolve a formulação e estudo da turbulência em escoamentos bifásicos, especificamente, gás-sólido. Tendo em conta estes fatores, o estudo da turbulência nesse trabalho é introdutório ao tema. Para tanto, quantidades turbulentas são calculadas a partir de resultados de simulação direta e comparadas qualitativamente com resultados da literatura. O calculo destes parâmetros (tensões de Reynolds) envolve a aplicação das suas definições, de forma semelhante à denominada metodologia de simulação numérica direta, DNS, usada no estudo de escoamentos monofásicos.

Porém, deve-se destacar que as escalas temporais e espaciais de discretização utilizadas são muito mais grosseiras que as necessárias, em virtude das limitações e dificuldades computacionais inerentes à simulação de escoamentos gás-sólido. De fato, há um tamanho mínimo de malha computacional que deve ser respeitado tendo em vista a validade das equações médias das formulações Eulerianas do contínuo para a fase sólida. Não é possível refinar a malha computacional além desse limite (cerca de uma ordem de grandeza superior ao tamanho de partícula da fase sólida) e manter a validade da formulação. Este limite é várias ordens superior àquele estabelecido para a fase gasosa, respeitadas as menores escalas características de Kolmogorov.

Apesar de todas as ressalvas anteriores, inclui-se nesse trabalho, juntamente com as análises de tensões de Reynolds, análises de "temperatura granular" obtidas a partir de soluções hidrodinâmicas do contínuo. Com isso segue-se tendência corrente

na literatura em virtude de comparações favoráveis com resultados experimentais (MATONIS *et al.*, 2002). A “temperatura granular” é assumida igual a dois terços da energia cinética turbulenta, como em PEIRANO & LECKNER (1998) e MATONIS *et al.* (2002).

4.4.4.2 – Cálculo de parâmetros turbulentos do escoamento

O cálculo dos parâmetros turbulentos desenvolve-se considerando as definições da literatura destas quantidades. Como parâmetros turbulentos consideram-se as tensões de Reynolds normais e cisalhantes. A “temperatura granular” é calculada em função da energia cinética turbulenta, k . A viscosidade dinâmica do sólido é calculada em função da “temperatura granular”, assim como de outras variáveis considerando o procedimento da TCEG.

As tensões de Reynolds estão associadas à média temporal do produto das flutuações da velocidade (TENNEKES & LUMLEY, 1977). Para ambas as fases, em duas dimensões, as tensões normais e cisalhantes de Reynolds podem ser calculadas pelas seguintes relações (MUDDE *et al.*, 1997; PAN *et al.*, 2000, MATONIS *et al.*, 2002)

$$\langle u'_k u'_k \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N u_k u_k - \bar{u}_k^2 \quad (4.7)$$

$$\langle v'_k v'_k \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N v_k v_k - \bar{v}_k^2 \quad (4.8)$$

$$\langle u'_k v'_k \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N [(u_k - \bar{u}_k)(v_k - \bar{v}_k)] \quad (4.9)$$

Nestas relações N representa o número de vetores considerados no cálculo da média temporal. O intervalo de tempo considerado nessa média temporal foi de 80 segundos (dos 20 aos 100 segundos - a partir dos 20 segundos tem-se regime quase-estacionário). Considerando o incremento de tempo aplicado de 0,01 segundo, N

resulta igual a 8000 vetores. A “temperatura granular” do sólido é calculada pela seguinte equação (PEIRANO & LECKNER, 1998, MATONIS *et al.*, 2002)

$$\theta_s = \frac{1}{3} (\langle u'_s u'_s \rangle + \langle v'_s v'_s \rangle) = \frac{2}{3} k \quad (4.10)$$

onde k é a energia cinética turbulenta por unidade de massa da fase sólida (m^2/s^2).

A viscosidade do sólido, μ_s , é determinada através da seguinte correlação (GIDASPOW, 1994)

$$\mu_s = \frac{5\rho_s d_p \sqrt{\pi\theta_s}}{48(1+e)g_0} \left[1 + \frac{4}{5}(1+e)g_0\alpha_s \right]^2 + \frac{4}{5}\alpha_s^2 \rho_s d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta_s}{\pi}} \quad (4.11)$$

onde g_0 é a função de distribuição radial associada à distancia entre partículas, e e representa o coeficiente de restituição partícula-partícula. g_0 é calculada através da correlação de BAGNOLD (1954), e e assume-se igual a 0,995 (GIDASPOW, 1994). As demais variáveis são definidas na lista de símbolos. No Apêndice V mostra-se um estudo comparativo de várias correlações para μ_s obtidas pela TCEG.

4.4.4.3 – Análise dos parâmetros turbulentos a partir de resultados de simulação direta para ambas as fases

Na Figuras 4.59 e 4.60 mostra-se perfis das tensões de Reynolds e da “temperatura granular” para a fase sólida, em várias seções transversais ao longo da altura do leito. As tensões normais apresentam um comportamento quase simétrico, enquanto as cisalhantes são claramente anti-simétricas em relação ao centro da coluna. Este comportamento está em concordância com observações para colunas de bolhas (MUDDE *et al.*, 1997; e PAN *et al.*, 2000). Nota-se que as tensões normais axiais $\langle v'v' \rangle$ são superiores em módulo as cisalhantes, $\langle u'v' \rangle$, e as normais radiais $\langle u'u' \rangle$, em duas e três ordens de grandeza respectivamente. Isto contraria os resultados para colunas de bolhas (gás-líquido) de MUDDE *et al.* e PAN *et al.*, e para colunas de bolhas trifásicas (gás-líquido-sólido) de MATONIS *et al.* (2002).

Nesses casos as tensões normais radiais e axiais são da mesma ordem de grandeza, e são uma ordem de grandeza superiores as tensões cisalhantes.

Figura 4.59. Perfis radiais das tensões de Reynolds normais, $\langle u_s' u_s' \rangle$, e cisalhantes $\langle u_s' v_s' \rangle$ em várias seções transversais do leito.

Figura 4.60. Perfis radiais das tensões Reynolds normais, $\langle v_s' v_s' \rangle$, e da temperatura granular em várias seções transversais do leito.

Apesar desta diferença na ordem de grandeza relativa entre as tensões de Reynolds, nota-se que o comportamento das tensões $\langle u_s' u_s' \rangle$ e $\langle u_s' v_s' \rangle$ é

qualitativamente semelhante ao apresentado nos estudos das colunas de bolhas acima. As tensões normais $\langle u_s' u_s' \rangle$ em colunas de bolhas tem o seu valor máximo na região central da coluna. Os autores alegam que isto acontece porque a velocidade radial atinge seu valor máximo no centro da coluna devido ao movimento giratório da corrente de bolhas central, enquanto nas regiões próximas as paredes isto não acontece. Supostamente, o escoamento ascendente ou descendente nestas regiões é bastante uniforme, e o seu movimento não contribui significativamente para flutuações de velocidade radiais (MUDDE *et al.*, 1997).

No caso do escoamento gás-sólido aqui analisado, parece ser que a segregação de sólido para as paredes, causada pela existência de um ponto de máximo de v_s perto do centro da coluna (Figura 4.37a, malha 2), e pelos perfis radiais assimétricos de u_s (Figura 4.61), provoca um aumento das tensões normais radiais nesta região central.

Figura 4.61. Perfis radiais médios no tempo (dos 20 aos 100 segundos) da velocidade radial, u , para ambas as fases 3,4 metros acima da entrada.

Quanto às tensões cisalhantes, nota-se comportamento qualitativamente semelhante ao apresentado na literatura. Além disto, as tensões cisalhantes tendem a zero nas regiões próximas as paredes, em concordância com os resultados de literatura.

As maiores diferenças qualitativas ocorrem no caso dos perfis de $\langle v_s'v_s' \rangle$ e estão relacionadas ao fato destas tensões apresentarem valor máximo no centro da coluna. Esse comportamento é próprio das tensões normais $\langle u_s'u_s' \rangle$ para as colunas de bolhas estudadas por Mudde *et al.*, Pan *et al.* e Matonis *et al.*. Nesses casos as tensões $\langle v_s'v_s' \rangle$ apresentam o seu valor máximo próximo às paredes.

Mudde *et al.* e Matonis *et al.* atribuem esse comportamento à ocorrência de vórtices de diâmetro próximo ao diâmetro da coluna. Pan *et al.* atribuem o comportamento ao fato de existir um escoamento descendente de líquido próximo às paredes. No caso do escoamento gás-sólido aqui analisado, apesar de existir uma camada anular descendente próximo as paredes e um pistão disperso ascendente no centro da coluna, as tensões normais não apresentam o mesmo comportamento observado em colunas de bolhas. A análise anterior deve ser considerada com precaução, já que as diferenças quantitativas e qualitativas observadas podem ser principalmente devidas a composição de efeitos de geometria e operacionais em vista das propriedades viscosas dos fluidos.

Embora haja discrepâncias em relação ao comportamento de colunas de bolhas, há evidências experimentais de que os presentes resultados para LFCs estão qualitativamente corretos. Na Tabela 4.2 apresenta-se dados experimentais de “temperatura granular” obtidos por GIDASPOW & HUILIN (1998). Nesta Tabela mostra-se que a componente experimental axial da “temperatura granular”, σ_z , chega a ser uma ordem de grandeza maior que a componente angular ou radial, σ_θ . Isto significa que as tensões normais $\langle v_s'v_s' \rangle$ contribuem em maior escala no valor da “temperatura granular”. Esse mesmo comportamento é observado nos resultados de simulação (Figura 4.60b), onde os perfis da “temperatura granular” são bastante semelhantes aos das tensões $\langle v_s'v_s' \rangle$. Portanto a diferença de ordem de grandeza mostrada nas Figuras 4.59 e 4.60 de $\langle v_s'v_s' \rangle$ com respeito a $\langle u_s'u_s' \rangle$ e $\langle u_s'v_s' \rangle$ é qualitativamente correta.

Na Figura 4.62 mostra-se uma comparação entre resultados de simulação do presente modelo e aqueles apresentados por GIDASPOW (2000). Compara-se perfis radiais de “temperatura granular” e da fração volumétrica de sólido média no tempo. Os dados tomados de GIDASPOW (2000) incluem apenas a metade da seção transversal. Em ambos os gráficos observa-se que a “temperatura granular” assume

um valor máximo no centro da coluna, onde a concentração de sólido é mínima. Na região central o escoamento é mais disperso e o caminho livre médio entre as partículas é maior, o que proporciona um aumento no módulo das flutuações da velocidade do particulado e, conseqüentemente, na “temperatura granular”. Esse comportamento é fisicamente coerente, reforçando a correção do comportamento das tensões $\langle v_s' v_s' \rangle$ que predominam na determinação da “temperatura granular”. Portanto pode-se afirmar que a simulação direta empregada capta de forma qualitativamente correta os perfis radiais das tensões de Reynolds e, conseqüentemente, da “temperatura granular”. Além disso, fica comprovado que o comportamento das tensões normais axiais no escoamento gás-sólido em LFC é bem diferente daquele nas colunas de bolhas. Na Figura 4.62 nota-se claramente o padrão de escoamento pistonado anular.

Tabela 4.2. Dados da temperatura granular para um escoamento no regime que assume o particulado como fluido ideal. (GIDASPOW & HUILIN, 1998).

No	U_g (m/s)	G_s (kg/m ² s)	α_s	U_{av} (cm/s)	σ_θ (cm/s)	σ_z (cm/s)	θ_s (m ² /s ²)
1	2,89	19,03	0,0284	-18,20	19,45	198,29	1,33
2	2,89	20,89	0,0383	-31,26	15,83	213,36	1,54
3	2,89	24,33	0,0521	-52,53	23,33	258,74	2,27
4	2,89	4,380	0,0042	274,04	6,773	61,750	0,13
5	2,35	29,35	0,0924	-69,35	16,19	311,89	3,26
6	2,35	9,704	0,0025	235,35	11,49	75,928	0,21
7	2,35	20,36	0,0470	-31,02	32,78	222,22	1,72
8	2,35	29,57	0,0855	-76,02	21,08	285,38	2,74

$\theta_s = (2/3)\sigma_\theta^2 + (1/3)\sigma_z^2$. Assume-se que $\sigma_\theta = \sigma_r$, pois o escoamento é primariamente na direção axial (direção z). U_g é a velocidade superficial do gás, U_{av} é o valor médio da velocidade das partículas sólidas.

Outra evidência da capacidade qualitativa de predição do tipo de simulação desenvolvida percebe-se na Figura 4.63. Esta mostra a variação da “temperatura granular” com o valor médio temporal da fração volumétrica de sólido nas seções transversais das partes central e superior do leito. Compara-se os resultados da presente simulação com os dados de simulação de NERI & GIDASPOW (2000). Note-se que na presente simulação obtém-se “temperatura granular” a partir dos resultados hidrodinâmicos, enquanto em Neri & Gidaspow resolve-se a equação de “energia granular” acoplada com as equações de quantidade de movimento. Apesar

dessas diferenças, os resultados de “temperatura granular” em ambas as simulações são qualitativamente semelhantes.

Figura 4.62. Perfis simulados radiais da “temperatura granular” e da fração volumétrica de sólido média no tempo obtidos neste trabalho (a) e por GIDASPOW (2000) (b).

Figura 4.63. Valores da “temperatura granular” calculados pela Eq. (4.10) (a), e obtidos por NERI & GIDASPOW (2000) através da solução da equação de “energia granular” (b), em função da fração volumétrica de sólido média no tempo.

Na Figura 4.64 mostra-se a mesma comparação anterior, porém considerando os resultados experimentais obtidos por GIDASPOW & HUILIN (1998). Percebe-se que a simulação produz um comportamento de θ_s qualitativamente similar ao experimental. Há defasagem quanto à ordem de grandeza, que pode ser devida a diferenças nas condições operacionais. De acordo com Gidaspow & Huilin a “temperatura granular” é proporcional à $\alpha_s^{2/3}$ para pequenos valores de α_s , e proporcional à $1/\alpha_s^2$ para valores maiores de α_s . Isso é razoável pois θ_s assume o valor zero quando não existem partículas, ou quando não existe movimento das partículas (leito empacotado ou fixo).

Figura 4.64. Valores da “temperatura granular” calculados pela Eq. (4.10) (a), e obtidos por GIDASPOW & HUILIN (1998) (b), em função da fração volumétrica de sólido média no tempo.

A Figura 4.65 compara valores de μ_s obtidos nesse trabalho com aqueles obtidos por NERI & GIDASPOW (2000) a partir da solução da equação de “energia granular”, em função do valor médio temporal da fração volumétrica de sólido. Nota-se que existe uma diferença significativa na ordem de grandeza entre os valores comparados. Entretanto, para alguns valores de μ_s observa-se um crescimento quase linear com α_s , semelhante ao observado no trabalho de NERI & GIDASPOW (2000).

O valor médio de μ_s obtido nesse trabalho, através da Eq. (4.11), igual a aproximadamente $7,5 \times 10^{-5}$ kg/(ms), difere em ordens de magnitude em relação ao valor constante utilizado na simulação, igual a 0,509 kg/(ms) (obtido experimentalmente por TSUO & GIDASPOW, 1990). Esta grande discrepância deve-se, possivelmente, ao fato de se ter usado um valor constante de μ_s em cada célula computacional, sendo que μ_s deve ser fortemente dependente de α_s , que varia consideravelmente no tempo e no espaço. Isto indica a necessidade de se utilizar uma boa correlação para a viscosidade em função da fração de sólido e da região do leito (coordenadas espaciais).

Figura 4.65. Valores da viscosidade do sólido calculados pela Eq. (4.11) (a), e obtidos por NERI & GIDASPOW (2000) (b), em função da fração volumétrica de sólido média no tempo.

CAPÍTULO 5. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Neste trabalho estudou-se dois aspectos básicos relacionados a escoamentos gás-sólido em LFC: a sua modelagem matemática com ênfase no desenvolvimento do modelo das duas fases separadas, e a sua simulação numérica utilizando várias metodologias de análise dos resultados de simulação. Neste capítulo apresenta-se, inicialmente, várias considerações gerais relevantes. Na sequência sumariza-se as conclusões e recomendações para futuros trabalhos.

5.1 – Considerações gerais

O modelo das duas fases separadas aqui utilizado para o estudo de escoamentos bifásicos gás-sólido em LFC é obtido considerando o procedimento médio de Euler, como mostrado em ENWALD *et al.* (1996), entre outros. Neste procedimento utiliza-se o operador médio estatístico de Euler (ensemble average ou médias de conjunto) para obter as equações médias para cada uma das fases, assim como na formulação das equações de fechamento, especificamente as equações de transferência. Apesar deste procedimento ter sido amplamente descrito e utilizado na literatura por vários autores, outros pesquisadores têm desenvolvido outros procedimentos. ANDERSON & JACKSON (1967), por exemplo, aplicam o procedimento de médias volumétricas. Aplicando operadores médios volumétricos as equações de movimento para uma partícula simples e as equações de Navier-Stokes para o fluido é obtido o modelo dos dois fluidos para um sistema de partículas fluidizadas. Este procedimento é muito utilizado.

Recentemente van WACHEM *et al.* (2001) apresentaram estudo comparativo de dois modelos matemáticos baseados, respectivamente, nos procedimentos aplicados por ENWALD *et al.* (1996) e por ANDERSON & JACKSON (1967).

Observaram que o procedimento de Anderson & Jackson simulou melhor o crescimento de um pistão de gás num LFB pistonado (Slugging fluidized bed). Atribuíram isso ao fato do modelo de Enwald *et al.* ser mais adequado para escoamentos dispersos gás-líquido, por ser derivado do procedimento de ISHII (1975), enquanto o modelo de Anderson & Jackson foi derivado especificamente para escoamentos gás-sólido. Entretanto, esta afirmação parece duvidosa, posto que o modelo desenvolvido por Ishii foi obtido usando médias temporais, enquanto o modelo de Enwald *et al.* baseia-se no procedimento de médias estatísticas.

As maiores diferenças entre os vários modelos empregados na literatura resultam do tipo de operador médio empregado na obtenção das equações médias. Apesar das equações resultantes serem similares, algumas diferenças conceituais e de procedimento podem ser detectadas. A grande vantagem dos procedimentos baseados em médias estatísticas, como o de Enwald *et al.*, reside no fato de ser válido para escoamentos não homogêneos e transientes. Ainda, este é um procedimento onde as equações de balanço são obtidas com maior facilidade. JACKSON (1997) afirma que o procedimento estatístico exige a hipótese de ergodicidade, de forma que as médias estatísticas possam ser expressas em função das medições experimentais médias no tempo ou no espaço. Para escoamentos bifásicos gás-sólido a validade da hipótese de ergodicidade parece questionável em vista do seu comportamento instável.

SOO (1989) apud FAN & ZHU (1998) sustenta que o procedimento correto para obtenção de modelos para escoamentos gás-sólido seria primeiramente construir o contínuo através de médias volumétricas para cada fase (ver SLATTERY, 1967a,b; WHITAKER, 1969). Posteriormente o procedimento de médias temporais deveria ser aplicado para considerar as flutuações de alta frequência. Argumentam que mesmo que o contínuo para cada fase possa ser construído (seja usando o operador médio volumétrico em termos da fração volumétrica, ou usando o operador médio temporal em termos do tempo de residência fracionário), as propriedades dinâmicas e termodinâmicas extensivas da mistura dependem da fração volumétrica e não do tempo de residência fracionário. Além disso, observam que uma aplicação a priori do operador médio temporal baseado no tempo de residência fracionário pode eliminar a identidade de possíveis diferentes fases dinâmicas.

Outra questão importante é relacionada a obtenção de equações de fechamento. Como ressaltado no texto, a obtenção das equações constitutivas para a fase sólida constitui uma intensa linha de pesquisa. Basicamente são adotados dois procedimentos para obtenção de constantes e correlações empíricas e teóricas: a partir de experimentos, e a partir da TCEG. Este último procedimento é muito utilizado na atualidade, embora ainda não se tenha estabelecido um modelo reológico completo para a fase sólida contínua, e diferentes hipóteses sejam adotadas.

Ambos os procedimentos, consideram reologia Newtoniana para a fase sólida, sendo a TCEG a forma mais geral e matematicamente rigorosa. Por exemplo, dentro do escopo da TCEG duas hipóteses gerais diferentes podem ser encontradas na literatura. A primeira assume escoamento granular seco, desconsiderando fluido intersticial entre partículas. A segunda hipótese considera o efeito do fluido intersticial entre as partículas.

As leis de transferência são modeladas com base em diversos efeitos que acontecem na interface, os quais provocam ou caracterizam o transporte de massa, quantidade de movimento e energia. No caso da transferência de quantidade de movimento, por exemplo, estes efeitos decorrem da ação de diferentes forças que agem na interface. A identificação e a modelagem dessas forças representam aspectos críticos nas formulações de modelos de dois fluidos. Existem diversas formulas e correlações para quantificar um mesmo tipo de força. Por exemplo, no caso do arrasto estacionário na interface, cinco correlações diferentes foram testadas no presente trabalho. Mesmo assim não foi possível especificar a correlação mais adequada. Isto não surpreende posto que a maioria destas correlações foi obtida a partir de experimentos em leitos fluidizados líquido-sólido sob fluidização homogênea, portanto em condições bem distintas daquelas da fluidização gás-sólido heterogênea.

Considerando a quantidade de efeitos diferentes que podem ocorrer na interface do escoamento, e a diversidade de procedimentos adotados no seu cálculo, evidencia-se a grande necessidade de pesquisas nesta direção. Uma descrição clara das leis de transferência pode ser encontrada nos livros de CROWE *et al.* (1998) e FAN & ZHU (1998).

Outro aspecto importante a salientar refere-se à formulação de turbulência em modelos de duas fases. Segundo ENWALD *et al.* (1996), em LFB onde a diferença de densidade entre as fases e a concentração de sólidos são altas, a inércia do particulado amortece a turbulência da fase gasosa. Assim é razoável ignorar a modelagem de turbulência do gás nas regiões densas do leito. No entanto, nas regiões mais diluídas a turbulência deve ser levada em consideração. Para LFC, onde existem grandes regiões de baixa concentração de sólidos, o fenômeno da turbulência deve tornar-se bastante significativo. A consideração e modelagem da turbulência em escoamentos gás-sólido é muito complexa. Além dos problemas relacionados ao uso de modelos desenvolvidos para escoamentos monofásicos, tais como o k- ϵ , ainda existe o problema da modulação da turbulência.

Modular turbulência em escoamento gás-sólido significa considerar a influência da presença das partículas sobre a turbulência da fase gasosa e vice-versa (CROWE, 2000). Em trabalho recente, ZHANG & REESE (2001) modularam a turbulência num escoamento gás-sólido plenamente desenvolvido. Utilizaram a TCEG considerando o fluido intersticial, e o modelo k- ϵ para a fase gasosa considerando a influência das partículas na sua turbulência. Os resultados de simulação foram comparados com os dados experimentais de TSUJI *et al.* (1984) mostrando-se quantitativamente razoáveis. Além disso, mostrou-se que a influência da turbulência da fase gasosa não deve ser ignorada para escoamentos relativamente dispersos, especialmente com partículas pequenas.

Os métodos utilizados na literatura para modular a turbulência da fase gasosa baseiam-se em análises de escalas de tempo características e números adimensionais. O escoamento gás-sólido é classificado de acordo com determinados critérios e posteriormente a turbulência é modulada em dependência dessa classificação. PEIRANO & LECKNER (1998) apresentam três tipos de classificação usadas na literatura. A proposta de ELGOBASHI (1991) baseia-se em algumas escalas de tempo características e também na distância relativa entre as partículas. A proposta de KOCH (1990), é limitada apenas para escoamentos dispersos com número de Reynolds para as partículas $\ll 1$, e baseia-se na ordem de grandeza do número de Stokes para as partículas. Há outro procedimento baseado apenas na análise das escalas de tempo características.

No modelo de dois fluidos, comumente utiliza-se apenas um valor do diâmetro médio de partícula calculado em função da distribuição do tamanho de partícula que caracteriza a fase sólida. Porém, se a função distribuição do tamanho de partícula é bimodal, dois diâmetros médios devem ser considerados, ou seja, existem duas fases sólidas. PEIRANO & LECKNER (2000) apresentam uma metodologia de cálculo que permite considerar apenas uma fase sólida caracterizada por um diâmetro médio de partícula. Neste caso o valor de d_p varia em função do número de Reynolds da fase sólida. Entretanto, na bibliografia consultada, não se encontrou nenhum trabalho que considere a variação do diâmetro médio da partícula com o tempo. Esta variação deve-se basicamente as colisões partícula-partícula e partícula-parede que provocam desgaste por atrito gerando finos. Depois de um determinado tempo de operação a função distribuição do tamanho de partícula varia e deve ser caracterizada por um novo valor de d_p . Esta dependência temporal do diâmetro médio de partícula influencia grandemente no funcionamento de uma instalação. Esse aspecto relevante deve ser considerado em futuros trabalhos de simulação.

Um outro aspecto muito importante é a formulação das condições de contorno para a fase sólida nas paredes, e para ambas as fases na entrada da coluna. Nas paredes a condição de contorno da fase gasosa é de não deslizamento, entretanto a fase sólida assume uma condição de deslizamento parcial. Esta é modelada por equações que vêm da teoria cinética dos gases, e envolvem parâmetros de difícil cálculo e comprovação experimental. Várias teorias existem, e no caso de consideração da TCEG, mais dificuldades aparecem. Neste caso a determinação do coeficiente de restituição partícula-parede é particularmente problemática.

Neste trabalho foi considerada condição de deslizamento parcial das partículas sólidas na parede, inclusive quando a fase sólida é considerada invíscida. Embora nesse caso fosse mais correto aplicar a condição de deslizamento livre nas paredes, a condição de contorno considerada possibilitou captar o comportamento irreal do escoamento para um valor nulo da viscosidade do sólido. Testes com a condição de contorno de não deslizamento para escoamento invíscido e considerando simulações tridimensionais deverão ser desenvolvidos para comprovação adicional dos resultados aqui apresentados.

Na entrada do leito foi considerado escoamento pistonado unidimensional, mas na realidade as condições de contorno de entrada dependem da geometria da placa distribuidora de gás. Trabalhos como o de PEIRANO *et al.* (2002) tratam desta problemática.

Hipóteses de simetria e as dimensões usadas introduzem desvios nos resultados de simulação dos escoamentos gás-sólido em LFC. Estes se devem a alimentação assimétrica dos sólidos, geometria assimétrica na saída do tubo ascendente, e a presença de ciclone separador de sólidos. Além disso, a continuada formação e dissipação de "clusters" de forma aleatória em todo o domínio impõe escoamentos assimétricos. Portanto o uso de coordenadas 3D e a exclusão de hipóteses de simetria são recomendáveis.

Dos comentários acima percebe-se que a busca de um modelo genérico que descreva a física dos escoamentos bifásicos, gás-sólido em particular, ainda é um objetivo básico de pesquisa.

Uma questão muito importante está relacionada as técnicas numéricas de solução. No presente trabalho aplicou-se uma técnica derivada do procedimento IMF (Implicit Multifield) desenvolvido por HARLOW & AMSDEN (1975). Porém, na atualidade existem diversos códigos computacionais com base em técnicas numéricas diferentes. Embora nesse trabalho esse tema não tenha sido aprofundado, dois aspectos em particular chamam a atenção. Estes são: o grande tempo computacional requerido para convergência do processo iterativo e a impossibilidade de obter soluções independentes do tamanho de malha.

O primeiro problema está associado a necessidade de resolver um grande número de EDPs não lineares acopladas. Soluções tridimensionais em geometrias de tamanho real, mesmo em malhas grosseiras são proibitivas. No caso de dimensões menores (instalações em escala) soluções têm sido fornecidas, entretanto para tempos reais de escoamento reduzidos (até 50 segundos). No presente trabalho simulações do escoamento até 300 segundos de fluidização foram desenvolvidas. Comprovou-se que o escoamento apresenta um comportamento transiente, que poderia ser considerado como regime estabelecido estatisticamente, embora critérios estatísticos devam ser aplicados para confirmação. Notou-se que a fração volumétrica do gás média na seção transversal varia com o tempo em todo o intervalo analisado,

formando-se agregados de particulado ao longo de toda a coluna. Outras variáveis não foram analisadas pela falta de espaço para armazenamento de dados. De fato, este é um problema a ser confrontado em simulações deste porte, notadamente envolvendo análises transientes.

A impossibilidade de obter soluções independentes do tamanho de malha parece ser um problema mais complexo que o anterior. AGRAWAL *et al.* (2001) afirmam que instabilidades a nível de escalas mesoscópicas existem independente do tamanho de malha. Isto sugere a solução do sistema de equações governantes usando métodos de simulação direta análogos aos aplicados no estudo de escoamentos monofásicos turbulentos. Com a capacidade computacional atual esta tarefa ainda é difícil, embora existam soluções diretas para escoamentos gás-sólido dispersos como mostra-se recentemente em PAN *et al.* (2001). Os autores consideram um procedimento Euler/Lagrange.

Além da capacidade computacional, um fator de natureza física afeta a obtenção de soluções independentes do tamanho de malha, mesmo usando simulação direta. Este fator está associado com o tamanho mínimo do volume de controle ou da célula computacional usada nas simulações numéricas para fase sólida. Esse limite no tamanho do volume de controle deve-se a necessidade de ter um número de partículas suficiente para que a fase sólida possa ser considerada como meio contínuo. Recentemente FAN & ZHU (1998), usando os resultados publicados por CELMIŃŠ (1988), mostraram qual o tamanho mínimo do volume de controle para que as médias volumétrica tenham significado estatístico. Assumindo partículas esféricas uniformemente distribuídas num arranjo tridimensional hexagonal, que representa o empacotamento máximo de esferas monodispersas, obteve-se a seguinte relação

$$\frac{R_{\min}}{d_p} = \frac{\alpha_p^{-\frac{1}{3}}}{\sqrt{2}\delta} (1 - \alpha_p) \quad (5.1)$$

onde $R_{\min}$ e δ representam o raio mínimo do volume de controle, e o desvio relativo da fração volumétrica de sólidos calculada em %. Igualando $R_{\min}$ ao volume do domínio de solução, o tamanho mínimo de uma aresta deste volume, ΔL , é dado por

$$\Delta L = \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{\frac{1}{3}} R_{\min} = 1,6 R_{\min} \quad (5.2)$$

Aplicando estas duas relações e considerando dados do presente trabalho ($d_p = 520 \mu\text{m}$ e $\delta = 1 \%$) obtém-se os gráficos mostrados na Figura 5.1. Nota-se que quando a fração volumétrica de sólido é baixa ($\alpha_s < 0,05$), como no caso do presente trabalho, o tamanho mínimo do volume computacional está no intervalo de 15 a 27 mm. Entretanto nas regiões de maior concentração de sólido o tamanho do volume de controle diminui. Assim fica evidente a conveniência do uso de uma malha de tamanho variável no espaço e no tempo para considerar as variações da fração volumétrica, e não violar a hipótese do contínuo para a fase sólida. Fica também evidente que pode-se aplicar simulação numérica direta para a fase sólida, enquanto para a fase gasosa deve-se considerar algum procedimento que leve em conta as flutuações turbulentas.

Figura 5.1. Raio e comprimento de aresta mínimos em função da fração volumétrica de sólido calculados pelas Eqs. (5.1) e (5.2). ($d_p = 520 \mu\text{m}$ e $\delta = 1 \%$).

AGRAWAL *et al.* (2001) propuseram usar a TCEG e modelar a turbulência usando um método similar ao LES (Large Eddy Simulation) utilizado em simulações

turbulentas de escoamentos monofásicos em grandes escalas. Entretanto, apontaram que a técnica LES, mesmo sendo menos exigente em termos de capacidade computacional que a DNS, ainda exige malha bem refinada e portanto capacidade de cômputo elevada. Observaram que a simulação de instalações industriais ainda seria proibitiva com este procedimento. Além desse problema de malha, também existe o problema de modelagem dos termos de transporte turbulentos na interface. Apesar de vários trabalhos e propostas neste sentido, muitos relacionados com modulação da turbulência, esta questão está em aberto.

Uma solução proposta por Agrawal *et al.*, comentada na seção 1.5.2, consiste na determinação de correlações para μ_s e λ_s numa simulação em malha bem refinada em função de α_s e da taxa de deformação. Posteriormente essas correlações seriam usadas num modelo macroscópico laminar como o do presente trabalho. Uma desvantagem deste procedimento está na dependência das correlações em relação ao tamanho de malha. Caso a malha macroscópica seja não uniforme, correlações devem ser obtidas para cada volume de controle macroscópico diferente. Isto limita muito o procedimento. De acordo com Agrawal *et al.*, o ideal seria implementar uma formulação LES totalmente factível para escoamentos gás-sólido e aplicável em geometrias de porte industrial. Um trabalho recente que considera o método LES, embora considerando simulação Euler/Lagrange, é apresentado em YAMAMOTO *et al.* (2001).

Outro aspecto relacionado ao uso de técnicas numéricas é a avaliação dos erros envolvidos no processo de obtenção das soluções numéricas. Entre os erros envolvidos pode-se enumerar os erros de truncamento, de arredondamento, de modelagem, de discretização e iterativos (FERZIGER & PERIĆ, 1999). Métodos de avaliação desses erros que permitam obter soluções com alto grau de exatidão devem ser aplicados rigorosamente. Entretanto técnicas de quantificação e avaliação clara, que mostrem os erros de forma padrão e uniforme ainda não foram estabelecidas (FREITAS, 1995). No caso de escoamentos bifásicos, esta tarefa torna-se mais difícil de ser executada considerando a falta de testes experimentais de alta confiabilidade e de soluções analíticas.

Sumariza-se a seguir as várias hipóteses simplificativas adotadas neste trabalho. Utilizou-se o modelo das duas fases separadas com viscosidade constante.

Considerou-se escoamento isotérmico e compressível para ambas as fases sem transferência de massa na interface. Na formulação das leis constitutivas ambas as fases foram consideradas fluidos Newtonianos, sendo a viscosidade da fase sólida calculada por correlação obtida experimentalmente através de balanço de quantidade de movimento da mistura. O termo da pressão do sólido foi modelado através de correlações empíricas. A transferência de quantidade de movimento na interface foi modelada levando em conta apenas o arrasto estacionário na interface.

Finalmente deve-se enfatizar que os códigos computacionais usados foram construídos a partir de listagens obtidas das referências citadas. Além da possível ocorrência de erros de programação, há ainda a possibilidade de incorreção no material fonte. Não obstante, os resultados obtidos são similares aos apresentados na literatura.

A seguir são sumarizadas as conclusões do trabalho. Posteriormente apresenta-se recomendações para futuros trabalhos.

5.2 – Conclusões

Considerando os desenvolvimentos mostrados ao longo do presente trabalho pode-se formular as seguintes conclusões:

- A hidrodinâmica do escoamento bifásico gás-sólido numa coluna de LFC é bastante complexa, caracterizando-se por grandes variações radiais e axiais da concentração de sólidos, e pela formação, transporte e dissociação de "clusters" que escoam de forma ascendente e descendente.
- Comprovou-se o carácter instável do escoamento, através das variações significativas dos perfis de concentração de sólidos em função do tempo. Essas variações persistiram ao longo do tempo de simulação considerado.
- A influência da viscosidade da fase sólida no comportamento do escoamento foi considerável, sendo recomendado o estudo e posterior uso da TCEG em novas simulações. Valores relativamente baixos deste parâmetro parecem descrever melhor os dados experimentais considerados.
- Mostrou-se que o modelo invíscido para a fase sólida é inadequado para prever o comportamento de escoamentos em LFC.

- Com base nas diferenças de resultado obtidas para as várias correlações da função de arrasto, mostrou-se a importância e a dificuldade da seleção de uma correlação apropriada. Novos estudos são necessários nessa linha.
- Considerando os resultados de simulação insatisfatórios, não se recomenda o uso da correlação de ERGUN (1952) para toda a faixa de α_s , e do sistema bidimensional de coordenadas cilíndricas assumindo simetria no centro da coluna.
- Os resultados de simulação obtidos com os modelos hidrodinâmicos A e B mostraram-se similares. A literatura dos modelos Eulerianos do contínuo para escoamentos gás-sólido em LFCs ainda não apresenta uma formulação claramente superior as demais. Há necessidade de mais pesquisa nessa direção.
- Comprovou-se que o uso de metodologia de identificação e caracterização de estruturas coerentes, "clusters", permite análises qualitativas e quantitativas dos escoamentos. Isto inclui, por exemplo, a possibilidade de comparar o desempenho das várias correlações da função de arrasto utilizadas na literatura, caso dados experimentais sobre "clusters" estejam disponíveis.
- Mostrou-se que o tipo de simulação direta desenvolvido com o presente modelo capta uma quantidade de "clusters" muito menor, caracterizados por um tempo de duração muito maior, em comparação com dados experimentais da literatura. As discrepâncias podem estar relacionadas a incertezas experimentais, erros numéricos e a diferenças de condições operacionais entre experimento e simulação. Entretanto a não consideração na presente simulação direta da turbulência do escoamento na sua totalidade (i.e. a não consideração de todas as frequências) devido a limitações de malha também pode ter causado tais diferenças. Duas alternativas corretivas são: o uso de modelos de turbulência, ou o desenvolvimento de simulações de grandes escalas com malha bem refinada, modelos submalhas e TCEG para o cálculo da viscosidade da fase sólida.
- Mostrou-se que o critério médio de referência de identificação e caracterização de "clusters" de SHARMA *et al.* (2000) considerado precisa ser modificado. Como formulado, o critério indica a presença de "clusters" em qualquer escoamento, com qualquer fração de sólidos. Além disso, mostrou-se incoerente na análise dos resultados obtidos para a correlação de ERGUN (1952).

- Comprovou-se que o modelo tradicional das duas fases separadas, considerando simulação numérica direta, capta adequadamente o comportamento macroscópico temporal médio do escoamento. Isso inclui oscilações de baixa frequência, padrão de escoamento pistonado-anular e ocorrência de "clusters". Quantidades turbulentas foram calculadas utilizando as suas definições. Apesar das diferenças na ordem de grandeza, os resultados indicam que o modelo e o tipo de simulação empregados permitem simular de forma qualitativamente correta o comportamento dos parâmetros turbulentos característicos de escoamentos gás-sólido em LFC, em concordância com dados experimentais e de simulação da literatura. Porém, simulações em malha mais refinada são necessárias.
- O comportamento das tensões normais de Reynolds $\langle v'v' \rangle$ diferiu daquele observado em escoamentos gás-líquido e gás-líquido-sólido. Há uma região onde o escoamento passa de uma camada descendente mais densa, nas paredes, para um pistão ascendente mais disperso. Apesar disso, o máximo das tensões $\langle v'v' \rangle$ ocorre no centro da coluna, onde o valor da “temperatura granular” é maior. Nesta região central o movimento é muito mais intenso na direção axial, e portanto as tensões $\langle v'v' \rangle$ são uma ou duas ordens de grandeza maiores em comparação a $\langle u'u' \rangle$, em contraposição aos resultados para as colunas de bolhas.
- Por fim, embora nesse trabalho se tenha obtido “temperatura granular” a partir de resultados hidrodinâmicos para fins de análise, o autor adverte que tal procedimento pode ser inadequado e inconsistente. Recomenda-se fortemente a solução da equação de “energia granular”.

5.3 – Recomendações para futuros trabalhos

1. Realizar medições experimentais locais e instantâneas detalhadas dos campos de velocidade, fração volumétrica de ambas as fases, e pressão do gás para posterior validação de resultados de modelagem matemática e simulação numérica.
2. Desenvolver sondas ou dispositivos especiais experimentais que permitam medir a pressão do sólido e sua viscosidade com o intuito de validar resultados da TCEG.

3. Desenvolver trabalhos visando esclarecer alguns mecanismos físicos fundamentais, tais como aqueles relacionados a parâmetros turbulentos (tensões de Reynolds, temperatura granular), modelos reológicos da fase sólida (tensor das tensões, viscosidade dinâmica da fase sólida). Isto pode ser feito através de técnicas experimentais, ou através de experimentação computacional utilizando a TCEG ou simulações do tipo Euler-Lagrange.
4. Desenvolver simulação considerando a TCEG e malhas computacionais finas, com o intuito de estudar os detalhes do escoamento no nível das escalas mesoscópicas, e desenvolver um modelo reológico Newtoniano incluindo viscosidade aparente a ser utilizado a nível macroscópico.
5. Estudar detalhadamente o procedimento numérico com a finalidade de avaliar erros de origem numérica e testar novos esquemas de interpolação. Isto pode permitir o aprimoramento das atuais técnicas numéricas, assim como o desenvolvimento de um código computacional próprio.
6. Efetuar estudos teóricos mais profundos dos modelos matemáticos existentes considerando a inclusão de modelos de turbulência ou de submalha. A TCEG é um dos caminhos a serem considerados nesses desenvolvimentos. Isto possibilitaria a obtenção de novos modelos matemáticos ou o aperfeiçoamento dos já existentes. Um estudo profundo das características dos sistemas de EDP utilizados também deveria ser desenvolvido.
7. Realizar comparações quantitativas de resultados de simulação obtidos com vários modelos matemáticos da literatura, ou novos, na tentativa de estabelecer a linha de modelagem que melhor reproduz os fenômenos físicos que acontecem nos escoamentos de interesse. Neste sentido, resultados experimentais mais detalhados são cruciais para estabelecer comparações válidas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AGRAGAL, K.; LOEZOS, P.N.; SYAMLAL, M.; SUNDARESAN, S. (2001). The role of meso-scale structures in rapid gas-solid flows. *Journal of Fluid Mechanics*, v.445, p.151-185.
- ALDER, B.J.; WAINWRIGHT, T.E. (1960). Studies in molecular dynamics – Behaviour of a small number of elastic spheres. *Journal of Chemical Physics*, v. 33, n.5, p.1439-1451.
- ANDERSON, T.B.; JACKSON, R. (1967). A fluid mechanical description of fluidized beds. *Ind. Eng. Chem. Fund.*, v.6, n.4, p.527-539.
- ARIS, R. (1962). *Vector, tensors, and the basic equations of fluid mechanics*. Dover Publications Inc., New York.
- ARNOLD, G.S.; DREW, D.; LAHEY, R.T. (1990). An assessment of multiphase flow models using the second law of thermodynamics. *Int. Journal of Multiphase Flow*, v.16, n.3, p.481-494.
- BAGNOL, R.A. (1954). Experiments on a Gravity-Free Dispersion of Large Solid Spheres in a Newtonian Fluid under Shear. *Proceedings of Royal Society*, v.A225, p.49-63.
- BALTZER, G. (2000). Gas-solid flow modelling on the kinetic theory of granular media: validation, applications and limitations. *Powder Technology*, v. 113, p.299-309.
- BALZER, G.; BOELLE, A.; SIMONIN, O. (1995). 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.
- BATCHELOR, G.K. (1988). A new theory of the instability of a uniform fluidized bed. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 193, p.75-110.

- BENYAHIA, S.; ARASTOPOUR, H.; KNOWLTON, T. (1998). Prediction of solid and gas flow behavior in a riser using a computational multiphase flow approach. In: FAN, L.S.; KNOWLTON, T. eds. *Fluidization IX*. Engineering Foundation, New York, p. 493-500.
- BENYAHIA, S.; ARASTOPOUR, H.; KNOWLTON, T.M.; MASSAH, H. (2000). Simulation of particles and gas flow behavior in the riser section of a circulating fluidized bed using the kinetic theory approach for the particulate phase. *Powder Technology*, v. 112, p.24-33.
- BERRUTI, F.; CHAOUKI, J.; GODFROY, L.; PUGSLEY, T.S.; PATIENCE, G.S. (1995). Hydrodynamics of circulating fluidized bed risers: A review. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, v.73, n.5, p.579-602.
- BOEMER, A.; QI, H.; RENZ, U.; VASQUEZ, S.; BOYSAN, F. (1995). Eulerian computation of fluidized hydrodynamics-a comparison of physical models. In: *Proc.13th Int. Conf. on Fluidized Bed Combustion*, v.2, p.775-787.
- BOUILLARD, J.X. (1986). *Hydrodynamics of sedimentation, fluidization, and erosion*. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology, Chicago.
- BOUILLARD, J.X.; LYCZKOWSKI, R.W.; GIDASPOW, D. (1989). Porosity distributions in a fluidized bed with an immersed obstacle. *AIChE Journal*, 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, L. (1999). *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.
- CABEZAS-GÓMEZ, L.; MILIOLI, F.E. (2001). 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, N°2, p. 179-200.
- CABEZAS-GÓMEZ, L.; MILIOLI, F.E. (2002). 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. Article in revision for publication in *Powder Technology*.
- CAMPBELL, C.S.; WANG, D.G. (1991). Particle pressures in gas-fluidized beds. *Journal of Fluid Mechanics*, v.227, p.495-508.
- CARNAHAN, STARLING, (1969). Equations of state for non-attracting rigid spheres. *Journal of Chemical Physics*, v.51, p.635-636.
- CELMINŠ, A. (1988). Representation of two-phase flows by volume averaging. *Int. Journal of Multiphase Flow*, v.14, n.1, p.81-90.
- CHAPMAN, S.; COWLING, T.G. (1961). *The mathematical theory of non-uniform gases*. 2nd Ed. Cambridge University Press, Cambridge, U.K.
- CHEN, Y.M.; JANG, C.S.; CAI, P.; FAN, L.S. (1991) on the formation and disintegration of particle clusters in a liquid solid transport bed. *Chemical Engineering Science*, v.46, n.9, p.2253-2268.
- COOK, T.L.; DEMUTH, R.B.; HARLOW, F.H. (1981). PIC calculations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics*, v.41, n.1, p.51-67.
- CROWE, C.; SOMMERFELD, M.; TSUJI, Y. (1998). *Multiphase flows with droplets and particles*. CRC Press LLC, Boca Raton, Florida.
- CROWE, C.T. (2000). On models for turbulence modulation in fluid-particle flows. *Int. Journal of Multiphase Flow*, v. 26, p.719-727.
- DASGUPTA, S.; JACKSON, R.; SUNDARESAN, S. (1994), "Turbulent gas-particle flow in vertical risers", *AIChE Journal*, Vol 40, p.215-228.
- DASGUPTA, S.; JACKSON, R.; SUNDARESAN, S. (1998), "Gas-particle flow in vertical pipes with high mass loading of particles", *Powder Technology*, Vol 96, p.6-23.
- DAVIDSON, J.F. (2000). Circulating fluidised bed hydrodynamics. *Powder Technology*, v.113, n.3, p.249-260.
- DELHAYE, J.M. ed. (1981). *Thermohydraulics of two-phase systems for industrial design and nuclear engineering*. ed. J. M. Delhaye.
- DELHAYE, J.M.; ACHARD, J.L. (1976). On the averaging operators introduced in two-phase flow modeling. *Specialists' Meeting on Transient Two-Phase Flow*, Agosto 3-4, Toronto.

- DELHAYE, J.M.; ACHARD, J.L. (1977). On the use of averaging operators in two-phase flow modeling. *Thermal and hidraulic aspects of nuclear reactor safety, 1: Light water reactors*. ASME winter meeting.
- DI FELICE, R. (1994). The voidage function for fluid-particle interaction systems. *Int. Journal of Multiphase Flow*, v.20, n.1, p.153-159.
- DING, J. (1990). *A fluidization model using kinetic theory of granular flow*. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology, Chicago.
- DING, J.; GIDASPOW, D. (1990). A bubbling model using kinetic theory of granular flow. *AIChE Journal*, v.36, n.4, p.523-538.
- DREW, D.A. (1983). Mathematical modeling of two-phase flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v.15, p.261-291.
- ELGOBASHI, S. (1991). Particle-laden turbulent flows: direct simulation and closure models. *Applied Scientific Research*, v.48, p.301-314.
- ENWALD, H.; PEIRANO, E. (1997). *GEMINI: A cartesian multiblock finite difference code for simulation of gas-particle flows*. Publication No. 97/4, Department of Thermo and Fluid Dynamics, Chalmers University of Technology, Sweden.
- ENWALD, H.; PEIRANO, E; ALMSTEDT, A.-E. (1996). Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. *Int. Journal of Multiphase Flow*, v.22, p.21-66, Supplement.
- ERGUN, S. (1952). Fluid flow through packed columns. *Chemical Engineering Progress*, v.48, n.2, p.89-94.
- ETTEHADIEH, B. (1982). *Hydrodynamic analysis of gas-solids fluidized beds*. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology, Chicago.
- ETTEHADIEH, B.; GIDASPOW, D.; LYCZKOWSKI, R.W. (1984). Hydrodynamics of fluidization in a semicircular bed with a jet. *AIChE Journal*, v.30, n.4, p.529-536.
- FAN, L.S.; ZHU, C. (1998). *Principles of gas-solid flows*. Cambrige University Press, United Kingdom.
- FERZIGER, J.H. (1998). *Numerical methods for engineering applications*. 2nd Ed., John Wiley & Sons, Inc., Canada.

- FERZIGER, J.H.; PERIĆ, M. (1999) *Computational methods for fluid dynamics*. 2nd Ed., Springer, Hamburg.
- FREITAS, C.J. (1995) The end of justification, the beginning of implementation. *Journal of Fluids Engineering*, v.117, p.9.
- GAMWO, I.K. (1992). *Multi-dimensional hydrodynamic and erosion modeling of fluidized beds*. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology, Chicago.
- GAMWO, I.K.; SOONG, Y; LYCZKOWSKI, R.W. (1999). Numerical simulation and experimental validation of solids flows in a bubbling fluidized bed. *Powder Technology*, v.103, n.2, p.117-129.
- GIBILARO, L.G.; DI FELICE, R.I.; WALDRAM, S.P. (1985). Generalized friction factor and drag coefficient correlations for fluid-particle interactions. *Chemical Engineering Science*, v.40, n.10, p.1817-1823.
- GIDASPOW, D. (1986). Hydrodynamics of fluidization and heat transfer: Supercomputing modeling. *Applied Mechanical Reviews*, v.39, n.1, p.1-23.
- GIDASPOW, D. (1994). *Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions*. Academic Press Inc., Bostom.
- GIDASPOW, D. (2000). Computation and measurement of structure and turbulence in risers and bubbling beds. *Multiphase Fluid Dynamics Research Consortium*, Semi-Annual Meeting and Review, Apr. 12-14, Albuquerque, New Mexico.
- GIDASPOW, D.; BEZBURUAH, R.; DING, J., (1992). Hydrodynamics of Circulating Fluidized Beds: Kinetic Theory Approach. In: POTTER, O.E.; NICKILN, D.J., eds. *Fluidization VII*. Engineering Foundation, p.75-82.
- GIDASPOW, D.; DING, J.; JAYASWAL, U.K. (1990). Multiphase Navier-Stokes Equation Solver. In *Numerical Methods for Multiphase Flows, FED*, New-York: ASME, v.91, p.47-56.
- GIDASPOW, D.; ETTEHADIEH, B. (1983). Fluidization in two-dimensional beds with a jet 2. Hydrodynamics modeling. *Ind. Eng. Chem. Fund.*, v.22, p.193-201.
- GIDASPOW, D.; HUILIN, H.L. (1996). Collisional viscosity of FCC particles in a CFB. *AIChE Journal*, v.42, n.9, p.2503-2510.
- GIDASPOW, D.; HUILIN, H.L. (1998). Equatio of state and radial distribution functions of FCC particles in a CFB. *AIChE Journal*, v.44, n.2, p.279-293.

- GIDASPOW, D.; JAYASWAL, U.K.; DING, J. (1991). Navier-Stokes equation model for liquid-solid flows using kinetic theory. In *Liquid Solid Flows, FED*, New-York: ASME, v.118, p.165-178.
- GIDASPOW, D.; SHI, Y.-T.; BOUILLARD, J.; WASAN, D. (1989b). Hydrodynamics of a lamella electrosettler. *AIChE Journal*, v.35, n.5, p.715-724.
- GIDASPOW, D.; TSUO, Y.P.; LUO, K.M., (1989a). Computed and Experimental Cluster Formation and Velocity Profiles in Circulating Fluidized Beds. In: GRACE, J.R.; SHERMILL; BERGOUGNOU, Eds. *Fluidization VI*. Engineering Foundation, New York.
- GRACE, J.R.; LIM, K.S. (1997). Reactor modeling for high-velocity fluidized beds. In: GRACE, J.R. *et al.* eds. *Circulating Fluidized Beds*. Chapman & Hall. Cap. 15, p.504-524.
- HARLOW, F.H.; AMSDEN, A.A. (1971). A numerical fluid dynamics calculation method for all flow speeds. *Journal of Computational Physics*, v.8, p.197-213.
- HARLOW, F.H.; AMSDEN, A.A. (1975). Numerical calculations of multiphase fluid flow. *Journal of Computational Physics*, 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.
- HARTGE, E.-U.; LI, Y.; WERTHER, J. (1986) Analysis of the local structure of the two phase flow in a fast fluidized bed. In: BASU, P. ed. *Circulating Fluidized Bed Technology*. 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, B.; DOU, S.; TUZLA, K.; CHEN, J.C. (1992). Solid mass fluxes in circulating fluidized beds. *Powder Technology*, v.70, n.3, p.197-205.
- HOFFMANN, K.A.; CHIANG, S.T. (1993). *Computational fluid dynamics for engineers - volume I*. Engineering Education System, Wichita, USA.

- HOOMANS, B.P.B.; KUIPERS, J.A.M.; BRIELS, W.J.; VAN SWAAIJ, W.P.M. (1996). Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidised bed: a hard-sphere approach. *Chemical Engineering Science*, v.51, n.1, p.99-118.
- 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, M. (1997). Hydrodynamics. In: GRACE, J.R. et al. *Circulating Fluidized Beds*. Chapman & Hall. Cap. 5, p.21-85.
- HORIO, M.; CLIFT, R. (1992). A note on terminology - clusters and agglomerates. *Powder Technology*, 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, C.M.; SINCLAIR, J.L. (1997). Effects of particle-phase turbulence in gas-solid flows. *AIChE Journal*, v.43, n.4, p.853-869.
- HUILIN, L.; GIDASPOW, D.; MANGER, E. (2001). Kinetic theory of fluidized binary granular mixtures. *Physical Review E*, v.64, n.061301, p.1-8.
- IBSEN, C.H.; SOLBERG, T.; HJERTAGER, B.H. (2001). Evaluation of a three-dimensional numerical model of a scaled circulating fluidized bed. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.40, p.5081-5086.
- ISHII, M. (1975). *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow*. Eyrolles. Paris.
- ISHII, M.; MISHIMA, K. (1984). Two-fluid model and hydrodynamic constitutive relations. *Nuclear Engineering and Design*, v.82, p.107-126.
- ISHII, M.; ZUBER, N. (1979). Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particle flows. *AIChE Journal*, v.25, n.5, p.843-855.
- JACKSON, R. (1997). Locally averaged equations of motion for a mixture of identical particles and a Newtonian fluid. *Chemical Engineering Science*, v.52, n.15, p.2457-2469.
- JAYASWAL, U. (1991). *Hydrodynamics of multiphase flows: separation, dissemination and fluidization*. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology, Chicago.

- JAYASWAL, U.K.; GIDASPOW, D.; WASAN, D. (1990). Continuous separation of particles in nonaqueous media in a lamella electrosettler. *Separations Technology*, v.1, p.3-17.
- JENKINS, J.T. (1992). Boundary conditions for rapid granular flow: flat, frictional walls. *Journal of Applied Mechanics*, Transaction of the ASME, v.59, p.120-127.
- JENKINS, J.T.; LOUGE, M.Y. (1997). On the flux of fluctuation energy in a collisional grain flow at a flat frictional wall. *Physics of Fluids*, v.9, n.10, p.2835-2840.
- JENKINS, J.T.; MANCINI, F. (1987). Balance laws and constitutive relations for plane flows of a dense, binary mixture of smooth, nearly elastic, circular disks. *Journal of Applied Mechanics*, v.54, p.27-34.
- JENKINS, J.T.; RICHMAN, M.W. (1985). Grad's 13 moment system for a dense gas of inelastic spheres. *Arch of Rational Mechanics Anal*, v.87, p.355-377.
- JENKINS, J.T.; SAVAGE, S.B., (1983). A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles, *Journal of Fluid Mechanics*, v.130, p.187-102.
- 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.
- JONES, P.A.; SYNGLE, D.V.; SINN, B.T.; WU, S. (1995). Case history of the scrubgrass circulating fluidized bed projet. *Proc.13th Int. Conf. on Fluidized Bed Combustion*, v.2, p.713-719.
- KIM, H.S.; ARASTOOPOUR, H. (1995). Simulation of FCC particles flow behavior in a CFB using modified kinetic theory. *Canadain Journal of Chemical Engineers*, v.73, p.603-611.
- KIM, H.S.; ARASTOOPOUR, H. (2002). Extension of kinetic theory to cohesive particle flow. *Powder Technology*, v.122, n.1, p.83-94.

- KISELEV, S.P.; VOROZHTSOV, E.V.; FOMIN, V.M. (1999). Foundations of fluid mechanics with applications. Problem solving using Mathematica. Birkhäuser, Boston.
- KOCH, D.L. (1990). Kinetic theory for a monodisperse gas-solid suspension. *Physics of Fluids A*, v.2, n.10, p.1711-1723.
- KUIPERS, J.A.M. (1990). *A two-fluid micro balance model of fluidized beds*. Tese (doutorado), Twente University of Technology, Enschede, The Netherlands.
- KUIPERS, J.A.M.; HOOMANS, B.P.B.; van SWAAIJ, W.P.M. (1998). Hydrodynamic models of gas-fluidized beds and their role for desing and operation of fluidized bed chemical reactor. In: FAN, L.-S.; KNOWLTON, T.M., eds. *Fluidization IX*. Engineering Foundation, New York, p. 15-30.
- KUIPERS, J.A.M.; VAN DUIN, K.J.; VAN BECKUM, F.P.H.; VAN SWAAIJ, W.P.M. (1992). A numerical model of gas fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, v.47, n.8, p.1913-1924.
- KUIPERS, J.A.M.; VAN DUIN, K.J.; VAN BECKUM, F.P.H.; VAN SWAAIJ, W.P.M. (1993). Computer simulation of the hydrodynamics of a two-dimensional gas-fluidized bed. *Computers Chemical Engineering*, v.17, n.8, p.839-858.
- KUIPERS, J.A.M.; VAN SWAAIJ, W.P.M. (1997). Application of computational fluid dynamics to chemical reaction engineering. *Reviews in Chemical Engineering*, v.13, n.3.
- KUNNI, D.; LEVENSPIEL, O. (1990). Entrainment of solids from fluidized beds. I Holdup of solids in the freeboard. II Operation of fast fluidized beds. *Powder Technology*, v.61, p.193.
- KUNNI, 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.
- LUN, C.K.K.; SAVAGE, S.B. (1986). The effects of an impact velocity dependent coefficient of restitution on stresses developed by sheared antigranulocytes-materials. *Acta Mechanica*, v.63, n.(1-4), p.15-44.

- LUN, C.K.K.; SAVAGE, S.B.; JEFFREY, D.J.; CHEPURNIY, N. (1984). 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.
- LUO, K. M. (1987) *Dilute, Dense-Phase and Maximum Solids-Gas Transport*. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology, Chicago.
- MA, D.; AHMADI, G. (1986). An equation of state for dense rigid sphere gases. *Journal of Chemical Physics*, v.84, n.6, p.3449-3450.
- MA, D.; AHMADI, G. (1988). A kinetic-model for rapid granular flows of nearly elastic particles including interstitial fluid effects. *Powder Technology*, v.56, n.3, p.191-207.
- MA, D.; AHMADI, G. (1990). A thermodynamic formulation for dispersed multiphase turbulent flows. 1 Basic theory. *Int. Journal of Multiphase Flow*, v.16, n.2, p.323-340.
- MASSOUDI, M.; RAJAGOPAL, K.R.; EKMANN, J.M.; MATHUR, M.P. (1992). Remarks on the modeling of fluidized systems. *AIChE Journal*, v.38, n.3, p.471-472.
- MATHIESEN, V.; SOLBERG, T.; ARASTOPOUR, H.; HJERTAGER, B.H. (1999). Experimental and computational study of multiphase gas/particle flow in a CFB riser. *AIChE Journal*, v.45, n.12, p.2503-2518.
- MATHIESEN, V.; SOLBERG, T.; HJERTAGER, B.H. (1998). A computational study of multiphase flow behavior in a circulating fluidized bed with realistic particle size distribution. In: *Third International Conference on Multiphase Flow*, Lyon, France.
- MATHIESEN, V.; SOLBERG, T.; HJERTAGER, B.H. (2000a). 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.
- MATHIESEN, V.; SOLBERG, T.; HJERTAGER, B.H. (2000b). 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.
- MATONIS, D.; GIDASPOW, D. (2001). CFD simulation of flow and turbulence in a slurry bubble column. . In: *Four International Conference on Multiphase Flow*, New Orleans, Louisiana, USA.

- MILLER, A.; GIDASPOW, D. (1992). Dense, vertical gas-solid flow in a pipe. *AIChE Journal*, v.38, n.11, p.1801-1815.
- MUDDE RF, LEE DJ, REESE J, FAN LS. (1997). Role of coherent structures on Reynolds stresses in a 2-D bubble column. *AIChE Journal*, v.43, n.4, p.913-926.
- NERI, A.; GIDASPOW, D. (2000). Riser hydrodynamic: simulation using kinetic theory. *AIChE Journal*, v.46, n.1, p.52-67.
- NIEUWLAND, J.J.; VAN SINT ANNALAND, M.; KUIPERS, J.A.M.; VAN SWAAIJ, J.P.M. (1996). Hydrodynamics modeling of gas/particle flows in riser reactors. *AIChE Journal*, v.42, n.6, p.1569-1582.
- OGAWA, S.; UMEMURA, A.; OSHIMA, N. (1980). On the equations of fully fluidized granular materials. *Journal of Applied Mathematical Physics*, v.31, n.4, p.483-493.
- 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.
- PAN, Y.; DUDUKOVIC, M.P.; CHANG, M. (2000). Numerical investigation of gas-driven flow in 2-D bubble columns. *AIChE Journal*, v.46, n.3, p.434-449.
- PAN, Y.; TANAKA, T.; TSUJI, Y. (2001). Direct numerical simulation of particle-laden rotating turbulent channel flow. *Physics of Fluids*, v.13, n.8, p.2320-2337.
- PEIRANO, E. (1996). *The Eulerian/Eulerian formulation applied to gas-solid flows*. Report A96-218, Department of Energy Conversion, Chalmers University of Technology, Sweden.
- PEIRANO, E. (1997). *Extension of GEMINI-2D to turbulent gas-solid flows*. Report A97-220, ISSN 0281-0034, Department of Energy Conversion, Chalmers University of Technology, Sweden.
- PEIRANO, E. (1998). *Modelling and simulation of turbulent gas-solid flows applied to fluidization*. Tese (doutorado), Department of Energy Conversion, Chalmers University of Technology, Sweden.
- PEIRANO, E.; DELLOUME, V.; JOHNSON, F.; LECKNER, B.; SIMONIN, O. (2002). Numerical simulation of the fluid dynamics of a freely bubbling fluidized bed: influence of the air supply system. *Powder Technology*, v.122, p.69-82.

- PEIRANO, E.; LECKNER, B. (2000). A mean diameter for numerical computations of polydispersed gas-solid suspensions in fluidization. *Chemical Engineering Science*, v.55, p.1189-1192.
- PEIRANO, E.; LECKNER, B. (1998). Fundamentals of turbulent gas-solid flows applied to circulating fluidized bed combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, v.24, n.4, p.259-296.
- POLACHENSKI, W.; CHEN, J.C. (1999). Measurement of particle phase stresses in fast fluidized beds. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.38, p.705-713.
- POZRIKIDIS, C. (1997). *Introduction to theoretical and computational fluid dynamics*. Oxford University Press, New York.
- PRITCHETT, J. W.; BLAKE, T.R.; GARG, S.K. (1978). A numerical model of gas fluidized beds. *AIChE Symposium Series*, v.74, n.176, p.134-148.
- PUGSLEY, T. S.; BERRUTI, F. (1996). A predictive model for circulating fluidized bed risers. *Powder Technology*, v.89, p.57-69.
- RHODES, M.J.; GELDART, D. (1987). A model for the circulating fluidized bed. *Powder Technology*, v.53, n.3, p.155-162.
- RHODES, M.J.; WANG, X.S.; CHENG, H; HIRAMA, T.; GIBBS, B.M. (1992). Similar profiles of solids flux in circulating fluidized bed risers. *Chemical Engineering Science*, v.47, n.7, p.1635-1643.
- RICHARDSON, J.F.; ZAKI, W.N. (1954). Sedimentation and fluidisation: Part I. *Transactions of the Institut of Chemicals Engineers*, v.32, p.35-53.
- RICHARDSON, S. (1973). No-slip boundary-condition. *Journal of Fluid Mechanics*. v.59, p.707-719.
- RICHARDSON, S. (1973). On the no-slip boundary condition. *Journal of Fluid Mechanics*, v.59, p.107-119.
- ROACHE, P. (1998). *Fundamentals of computational fluid dynamics*. 2nd ed. Hermosa publishers, New Mexico.
- ROWE, P.N. (1961) Drag forces in a hydraulic model of a fluidised bed – part II, *Transactions of the Institut of Chemical Engineers*, v.39, p.175-180.
- SAMUELSBERG, A.; HJERTAGER, B.H. (1996a). An experimental and numerical study of flow patterns in a circulating fluidized bed reactor. *Int. Journal of Multiphase Flow*, v.22, n.3, p.575-591.

- SAMUELSBERG, A.; HJERTAGER, B.H. (1996b). Computational modelling of gas/particle flow in a riser. *AIChE Journal*, v.42, n.6, p.1536-1546.
- SANYAL, J.; CESMABASI, E. (1994). On the effect of various momentum transfer coefficient models on bubble dynamics in a rectangular gas fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, v.49, n.23, p.3955-3966.
- SAVAGE, S.B. (1983). Granular Flows at High Shear Rates. In: MEYER, R.E., ed. *Theory of Dispersed Multiphase Flow*. New York, Academic Press, p.339-358.
- SAVAGE, S.V.; JEFFREY, D.J. (1981). The stress tensor in a granular flow at high shear rates. *Journal of Fluid Mechanics*, v.110, p.255-272.
- 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. (1982). *Computer modeling of mixing and agglomeration in coal conversion reactors*. vols.I & II, DOE/ET/10329-1211, JAYCOR.
- SCHNEYER, G.P.E.; PETERSON, W.; CHEN, P.J.; BROWNELL, D.H.; BLAKE, T.R. (1981). *Computer modeling of coal gasification reactors*. Final Report for June 1975-1980 DOE/ET/10247, Systems, Science and Software.
- SHARMA, A.K.; TUZLA, K.; MATSEN, J.; CHEN, J.C. (2000). 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.
- SHIH, Y.T.; GIDASPOW, D.; WASAN, D.T. (1987). Hydrodynamics of electro-fluidization: separation of pyrites from coal. *AIChE Journal*, v.33, p.1322-1333.
- SINCLAIR, J.L. (1997). Hydrodynamic Modeling. In: GRACE, J.R. et al. *Circulating Fluidized Beds*. Chapman & Hall. Cap. 5, p.149-180.
- SINCLAIR, J.L.; JACKSON, R. (1989). Gas-solid flows in a vertical pipe with particle-particle interactions. *AIChE Journal*, v.35, n.9, p.1473-1486.
- SLATTERY, J.C. (1967a). General balance equation for a phase interface. *Ind. Eng. Chem. Fund.*, v.6, n.1, p.108-&.
- SLATTERY, J.C. (1967b). Flow of viscoelastic fluid through porous media. *AIChE Journal*, v.13, n.6, p.1066-&.
- SOO, S.L. (1967). *Fluid Dynamics of Multiphase System*. Blaisdell Inc., Massachusetts.

- SOO, S.L. (1990). *Multiphase fluid dynamics*. Beijing: Science Press; Brookfield, USA: Gower Technical.
- STEWART, H.B.; WENDROFF, B. (1984). Two-phase flow - models and methods. *Journal of Computational Physics*, v.56, n.3, p.363-409.
- SUN, B.; GIDASPOW, D. (1999). Computation of circulating fluidized bed riser flow for the fluidization VIII benchmark test. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 38, p.787-792.
- SYAMLAL, M. (1985). *Multiphase hydrodynamics of gas-solids flow*. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology, Chicago.
- SYAMLAL, M. (1998). *MFLX documentation numerical technique*. Technical note, DOE/MC31346-5824, NTIS/DE98002029, National technical information service, Springfield, VA.
- SYAMLAL, M.; GIDASPOW, D. (1985). Hydrodynamics of fluidization: prediction of wall to bed heat transfer coefficients. *AIChE Journal*, v.31, n.1, p.127-135.
- SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T.J. (1988). Simulation of granular layer inversion in liquid fluidized beds. *Int. Journal of Multiphase Flow*, v.14, n.4, p.473-481.
- SYAMLAL, M.; ROGERS, W.; O'BRIEN, T.J. (1993). *MFLX documentation theory guide*. Technical note, DOE/METC-94/1004, NTIS/DE94000087, National technical information service, Springfield, VA.
- TENNEKES, H.; LUMLEY, J.L. (1977). *A first course in turbulence*. MIT Press, Cambridge, MA.
- THEOLOGOS, K.N.; MARKATOS, N.C. (1992). Modelling of flow and heat transfer in fluidized catalytic cracking riser-type reactors. *Transactions of the Institut of Chemicals Engineers*, v.70, (Part A), p.239-245.
- THERDTHIANWONG, A. (1994). *Hydrodynamic and SO₂ sorption in a circulating fluidized bed*. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology, Chicago.
- TRUESEDEL, C.; TOUPIN, R. (1960). Classical field theories. In: *Handbuch der Physik*. Springer, Berlin.
- TSUJI, Y., TANAKA, T., YONEMURA, S., (1998). Cluster patterns in circulating fluidized beds by numerical simulation (discrete particle model versus two-fluid model). *Powder Technology*, v.95, p.254-264.

- TSUJI, Y.; KAWAGUCHI, T.; TANAKA, T. (1993). Discrete particle simulation of two dimensional fluidized bed. *Powder Technology*, v.77, p.79-87.
- TSUJI, Y.; MORIKAWA, Y.; SHIOMI, H. (1984). LDV measurements of na air-solid two-phase flow in a vertical pipe. *Journal of Fluid Mechanics*, v.139, p.417-434.
- 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, Y.P. (1989). *Computation of flow regimes in circulating fluidized beds*. Tese (doutorado), Illinois Institute of Technology, Chicago.
- TSUO, Y.P.; GIDASPOW, D. (1990). Computation of flow patterns in circulating fluidized beds. *AIChE Journal*, v.36, n.6, p.885-896.
- 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 WACHEM, B.G.M.; SCHOUTEN, J.C.; KRISHNA, R.; VAN DEN BLEEK, C.M. (1999). 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.
- van WACHEM, B.G.M.; SCHOUTEN, J.C.; van DEN BLEEK, C.M.; KRISHNA, R.; SINCLAIR, J.L. (2001). CFD modeling of Gas-Fluidized Beds with a Bimodal Particle Mixture. *AIChE Journal*, v.47, n.6, p.1292-1302.
- VON MISES, R. (1958). *Mathematical theory of compressible fluid flow*. Academic Press, New York.
- WAN, W.; LI, Y. (2001). Hydrodynamic simulation of fluidization by using a modified kinetic theory. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.40, p.5066-5073.
- WEN, C.Y.; YU, Y.H. (1966). Mechanics of fluidization. *Chemical Engineering Progress Symposium Series*, v.62, n.62, p.100-111.
- WHITAKER, S. (1969). Advances in theory of fluid motion in porous media. *Ind. Eng. Chem.*, v.61, n.12, p.14-&.
- WHITE, F.M. (1991). *Viscous fluid flow*. 2nd ed. McGraw-Hill Inc.

- XU, B.H.; YU, A.B. (1997). Numerical simulation of the gas-solid flow in a fluidized bed by combining discrete particle method with computational fluid dynamics. *Chemical Engineering Science*, v.52, n.16, p.2785-2809.
- YAMAMOTO, Y.; POTTHOFF, M.; TANAKA, T.; KAJISHIMA, T.; TSUJI, Y. (2001). Direct numerical simulation of particle-laden rotating turbulent channel flow. *Journal of Fluid Mechanics*, v.442, p.303-334.
- YANG, W.C. (1992) The hydrodynamics of circulating fluidized beds. In: CHEREMISINOFF, N.P. eds. *The supplements of the Encyclopedia of Fluid Mechanics*. Gulf Publishing, Houston.
- ZHANG, Y.; REESE, J.M. (2001). Particle-gas turbulence interactions in a kinetic theory approach to granular flows. *Int. Journal of Multiphase Flow*, v.27, p.1945-1964.

APÊNDICE I

A1. Teoremas integrais

Teorema de Leibniz

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

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)

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

Função vetorial (tensor de primeira ordem)

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

Função tensorial (tensor de segunda ordem)

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

A2. 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 momentum para os modelos hidrodinâmicos A e B desprezando os efeitos de aceleração e o tensor das tensões podem-se escrever como

Fases fluida: (modelo A)

$$0 = -\alpha_f \vec{\nabla} P - \beta_A (\vec{v}_f - \vec{v}_s) + \rho_f \alpha_f \vec{g} \quad (\text{A2.1a})$$

Fase sólida: (modelo A)

$$0 = -\alpha_s \vec{\nabla} P + \beta_A (\vec{v}_f - \vec{v}_s) + \rho_s \alpha_s \vec{g} \quad (\text{A2.1b})$$

Fase fluida: (modelo B)

$$0 = -\vec{\nabla} P - \beta_B (\vec{v}_f - \vec{v}_s) + \varpi_f \vec{g} \quad (\text{A2.2a})$$

Fase sólida: (modelo B)

$$0 = \beta_B (\vec{v}_f - \vec{v}_s) + \varpi_s \vec{g} \quad (\text{A2.2b})$$

onde ϖ_f e ϖ_s podem-se denominar como massas aparentes a serem determinadas posteriormente. A soma das Eqs. (A2.1a,b) e também das Eqs. (A2.2a,b)

separadamente resulta na equação da quantidade de movimento, denominada de formula manométrica

$$\vec{\nabla}P = (\alpha_f \rho_f + \alpha_s \rho_s) \vec{g} = (\varpi_f + \varpi_s) \vec{g} \quad (A2.3)$$

Desta maneira a massa total suportada pelos modelos A e B é a mesma.

$$(\alpha_f \rho_f + \alpha_s \rho_s) = (\varpi_f + \varpi_s) \quad (A2.4)$$

Obtenção da Lei de Darcy para a fase fluida

Em ausência da força gravitacional, rescrevendo as equações de momentum 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

$$\vec{\nabla}P = \frac{\beta_A}{\alpha_f} (\vec{v}_s - \vec{v}_f) = \beta_B (\vec{v}_s - \vec{v}_f) \quad (A2.5)$$

Eliminando o gradiente da pressão e rearranjando os termos, obtém-se

$$\left(\frac{\beta_A}{\alpha_f} - \beta_B \right) (\vec{v}_s - \vec{v}_f) = 0 \quad (A2.6)$$

Já que as velocidades do fluido e da fase sólida são arbitrárias, a relação anterior é satisfeita identicamente apenas se

$$\beta_B = \frac{\beta_A}{\alpha_f} \quad (A2.7)$$

Se o termo gravitacional é importante, substituindo as relações para o arrasto na interface acima derivadas com as equações de momentum 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

$$\varpi_f = \rho_f \quad (\text{A2.8})$$

Formulação do princípio do empuxo de Arquimedes

Eliminando o gradiente de pressão da Eq. (A2.1b) da fase sólida para o modelo A e reorganizando, obtém-se

$$\beta_A (\vec{v}_f - \vec{v}_s) = \alpha_s (\alpha_s \rho_s + \alpha_f \rho_f - \rho_s) \vec{g} \quad (\text{A2.9})$$

As Eqs. (A2.2b) e (A2.9) 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

$$\varpi_s = A \alpha_s (\rho_s - \alpha_f \rho_f - \alpha_s \rho_s) \quad (\text{A2.10})$$

e

$$\beta_B = -A \beta_A \quad (\text{A2.11})$$

onde A é uma constante arbitrária de proporcionalidade.

Combinando as equações (A2.4), (A2.8) e (A2.10), e para valores arbitrários das densidades do fluido da fase sólida, obtém-se, ($A = -1/\alpha_f$). Portanto a massa aparente para a fase sólida no modelo hidrodinâmico B define-se por

$$\varpi_s = -\frac{\alpha_s}{\alpha_f} (\rho_s - \alpha_f \rho_f - \alpha_s \rho_s) \quad (\text{A2.12})$$

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

$$\alpha_s(\rho_s - \rho_f)\vec{g} = \beta_B(\vec{v}_f - \vec{v}_s) \quad (\text{A2.13})$$

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.

APÊNDICE II

Neste apêndice inicialmente apresenta-se um resumo e uma discussão física das correlações utilizadas na formulação das leis de fechamento de vários modelos hidrodinâmicos apresentados na literatura, com ênfases nas correlações que descrevem as leis constitutivas e de transferência. Apenas são considerados os modelos que utilizam a formulação tradicional de Euler/Euler.

B1. – Breve análise comparativa das correlações usadas na formulação das leis constitutivas para o modelo tradicional com ênfase na pressão do sólido

As leis constitutivas descrevem as propriedades físicas das fases analisadas, especificando a relação entre as propriedades físicas das fases, mas sem descrever os parâmetros de transporte entre as fases na interface.

O termo da pressão do sólido P_s aparece na formulação no tensor das tensões para a fase sólida e portanto precisa ser modelado. Como explanado anteriormente a pressão do sólido é um conceito físico de difícil definição, representando a força exercida sobre a fase sólida devido fundamentalmente às interações que acontecem entre elas. GAMWO *et al.* (1999) afirmam que a pressão da fase sólida resulta das interações partícula-partícula, sendo que para uma formulação geral deste termo é necessário considerar os efeitos da porosidade, pressão do gás, e os tensores de deformação provocados pela velocidade do gás, do sólido e a velocidade relativa entre as fases. Segundo estes autores esta formulação ainda não está disponível na literatura considerando as constantes apropriadas de cada material.

No âmbito do procedimento tradicional a pressão do sólido P_s é formulada através da Eq. (2.19), usando para isto o modulo de elasticidade da fase sólida G o qual é uma função da fração de vazio α_g . Na literatura existem muitas correlações

para calcular este termo $G(\alpha_g)$. A maioria dos modelos empíricos de $G(\alpha_g)$ podem ser representados por dois tipos diferentes de correlações

$$G(\alpha_g) = 10^{B_1 \alpha_g + B_2} \quad (B1.1)$$

e

$$G(\alpha_g) = G_0 e^{-c(\alpha_g - \alpha_g^*)} \quad (B1.2)$$

Os valores empíricos para as constantes nas Eqs. (B1.1 e B1.2) obtidos por diferentes pesquisadores são listados na Tabela B1.1. Uma explanação do sentido físico destas constantes apresenta-se em BOUILLARD *et al.* (1989) e GAMWO *et al.* (1999). GIDASPOW (1986), GIDASPOW (1994), MASSOUDI *et al.* (1992) e ENWALD *et al.* (1996) apresentam boas revisões sobre o tema.

Nas Figuras B1.1 e B1.2 mostra-se o comportamento das várias correlações para G da Tabela B1.1. Nestas figuras pode-se apreciar que apesar das correlações diferirem entre si no seu comportamento, o módulo de elasticidade do sólido G , têm significado numérico para baixas frações de vazio, quando $\alpha_s \rightarrow \alpha_{s, \max}$. Portanto a sua influencia nas regiões de pequena concentração de sólidos ($\alpha_g > 0,55$ ou $\alpha_s < 0,45$ aproximadamente) é muito pequena ou nula. ETTEHADIEH *et al.* (1984) realizaram a simulação de um LFB circular. Um dos aspectos pesquisados por eles foi a sensibilidade do leito à pressão do sólido devido às colisões. Eles compararam o comportamento de duas correlações para G apresentadas na Tabela B1.1, Eqs. 2.20 e B1.5, para um valor da fração volumétrica de sólidos à velocidade de mínima fluidização $\alpha_{g, mf} = 0,407$. Os resultados numéricos mostraram-se insensíveis ao valor do módulo de elasticidade do sólido acima da condição de mínima fluidização (ETTEHADIEH *et al.*, 1984, pág 535).

PEIRANO & LEKCNER (1998) comentam que o padrão de escoamento de um LFCC é caracterizado por uma distribuição vertical da concentração média de sólidos dividida em três zonas de interação. 1) a zona inferior com uma concentração de sólidos constante (α_s oscila entre $0,2 \div 0,4$ aproximadamente). 2) a zona central (splash zone) caracterizada por uma variação exponencial da concentração de sólidos com a altura ($\alpha_s < 0,2$). 3) a zona de transporte, também com uma variação

exponencial da concentração de sólidos (onde α_s oscila aproximadamente entre 0,05 ÷ 0,02), porem mais suave com respeito à zona 2).

Tabela B1.1. Varias correlações da literatura para o modulo de elasticidade $G(\alpha_g)$

Autores	Forma de $G(\alpha_g)$
RIETEMA & MUTSER (1973) apud JAYASWAL (1991)	$G(\alpha_g) = 10^{-8,76\alpha_g+7,577}$ (B1.3)
GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983)	$G(\alpha_g) = 10^{-8,76\alpha_g+5,43}$ (2.20)
GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983) apud BOUILLARD <i>et al.</i> (1989)	$G(\alpha_g) = G_o e^{-c(\alpha_g - \alpha_g^*)}$ $c = 20, \alpha_g^* = 0.62, e G_o = 1,0\text{Pa}$ (B1.4)
ETTEHADIEH <i>et al.</i> (1984)	$G(\alpha_g) = 10^{-10,46\alpha_g+6,577}$ (B1.5)
SHIH <i>et al.</i> (1987)	$G(\alpha_g) = 10^{-9,76\alpha_g+7,8}$ $G(k) = \alpha_k G(\alpha_g)$ para $k = 2, \dots, n$ (B1.6)
GIDASPOW & SYAMLAL (1985) apud BOUILLARD <i>et al.</i> (1989)	$G(\alpha_g) = G_o e^{-c(\alpha_g - \alpha_g^*)}$ $c = 500, \alpha_g^* = 0.422, e G_o = 1,0\text{Pa}$ (B1.7)
SYAMLAL & O'BRIEN (1988)	$G(\alpha_g) = 1,5 \times 10^{-3} e^{500(0,4 - \alpha_g)}$ $\vec{\nabla}(\alpha_s P_s) = \alpha_k G(\alpha_g) \vec{\nabla} \alpha_g$ (B1.8)
GIDASPOW <i>et al.</i> (1989)	$G(\alpha_g) = 10^{-10,5\alpha_g+9,0}$ (B1.9)
BOUILLARD <i>et al.</i> (1989)	$G(\alpha_g) = G_o e^{-c(\alpha_g - \alpha_g^*)}$ $c = 600, \alpha_g^* = 0.376, e G_o = 1,0\text{Pa}$ (B1.10)
JAYASWAL (1991) SUN & GIDASPOW (1999)	$G(\alpha_g) = 10^{-8,686\alpha_g+5,385}$ (B1.11)**

** Esta correlação apresenta um comportamento semelhante à correlação calculada pela Eq. (2.20).

Considerando esta variação da concentração média de sólidos numa coluna de leite circulante, a qual mostra que num LFC a fração volumétrica de sólidos é muito menor que num LFB, e considerando as Figuras B1.1 e B1.2 e a conclusão de ETTEHADIEH *et al.* (1984), pode-se concluir que a pressão do sólido devido às colisões têm uma influencia pouco significativa no escoamento gás-sólido no tubo

ascendente de um LFC. No entanto, estima-se conveniente realizar um estudo paramétrico da influencia das correlações para $G(\alpha_g)$ no escoamento, sobre tudo na região inferior do leito, a qual é semelhante à um LFB. Esta questão é abordada no Capítulo 4 do presente trabalho, onde apresenta-se uma comparação de resultados de simulação numérica para seis correlações diferentes de G , Eqs. (2.20, B1.3, B1.5, B1.6, B1.9 e B1.11).

Figura B1.1. Módulo de elasticidade da fase sólida segundo as correlações do tipo da Eq. (B1.1) (Eqs. 2.20, B1.5, B1.6, B1.9 da Tabela B1.1).

Figura B1.2. Módulo de elasticidade da fase sólida segundo as correlações do tipo da Eq. (B1.2) (Eqs. B1.4, B1.7, B1.8, B1.10 da Tabela B1.1).

B2. – Análise comparativa das correlações usadas na formulação das leis de transferência no modelo tradicional das duas fases separadas

As leis de transferência modelam a transferência de massa, quantidade de movimento e energia entre as fases na interface. Para isto são formuladas equações empíricas que descrevem as diferentes interações de interface entre as fases. No presente trabalho considera-se apenas a transferência de quantidade de movimento na interface, assumindo que não existe transferência de massa (fases não reagentes). A transferência de energia não é considerada no presente modelo, pois trata-se de um modelo isotérmico para ambas as fases.

A transferência de quantidade de movimento na interface entre as fases modela-se através da força de arrasto generalizada por unidade de volume na interface representada por M_{kl}^d (ver seção 2.2.1.3.2). Na presente análise considera-se apenas a força devido ao arrasto estacionário na interface, F_{arrasto} . Esta força modela-se através da função de arrasto β , a qual pode-se calcular segundo dois procedimentos fundamentais mostrados na seção 2.2.1.3.2. Na Tabela B2.1 apresenta-se varias das correlações utilizadas na literatura para o calculo de β segundo ENWALD *et al.* (1996) e BOEMER *et al.* (1995). Uma discussão destas correlações pode mostrar alguns fatos interessantes da dificuldade de modelagem da transferência de quantidade de movimento em escoamentos gás-sólido.

As Figuras B2.1, B2.2, B2.3, B2.4 e B2.5 mostram uma comparação das funções de arrasto na interface freqüentemente usadas na literatura e apresentadas na Tabela B2.1. Nestas figuras a função de arrasto β , é calculada em função da fração de vazio para uma velocidade relativa de 1,0 m/s, uma esfericidade de 1,0, uma concentração máxima de particulado igual à 0,62, um diâmetro de particulado médio de 0,52 mm, uma densidade de particulado de 2620 kg/m³ e uma temperatura de 293 K (as propriedades do gás, ar, são calculadas para esta temperatura).

Tabela B2.1. Modelos de arrasto na interface.

Autores	Expressão para a função de arrasto β	Considerações
<p>GIDASPOW & ETTEHADIEH (1983) GIDASPOW (1986) DING & GIDASPOW (1990) GIDASPOW (1994) (MODELO A)</p>	$\beta = \begin{cases} 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g (d_p \phi_s)^2} + 1,75 \frac{\alpha_s \rho_g \vec{v}_g - \vec{v}_s }{(d_p \phi_s)} & \alpha_g < 0,8 \\ \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{\alpha_g \alpha_s \rho_g \vec{v}_g - \vec{v}_s }{d_p} \alpha_g^{-2,65} & \alpha_g \geq 0,8 \end{cases} \quad \begin{matrix} (2.36) \text{ e} \\ (2.37) \end{matrix}$	$\vec{v} = \vec{v}_0 = \alpha_g (\vec{v}_g - \vec{v}_s)$ $C_{Ds} = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} [1 + 0,15(Re_p)^{0,687}] & Re_p < 1000 \\ 0,44 & Re_p \geq 1000 \end{cases}$ $f(\alpha_g) = \alpha_g^{-4,65}$
<p>ISHII & ZUBER (1979)</p>	$\beta = \frac{3}{4d_p} C_{Ds} \alpha_s \rho_g \vec{v}_s - \vec{v}_g \quad (B2.1)$	$\vec{v} = \vec{v}_r = (\vec{v}_s - \vec{v}_g)$ $C_{Ds} = \frac{24}{Re_{pm}} [1 + 0,1(Re_{pm})^{0,75}]$ $Re_{pm} = \frac{\rho_g \vec{v}_s - \vec{v}_g d_p}{\mu_{mis}}$ $\mu_{mis} = \mu_g (1 - \alpha_s / \alpha_{s,max})^{-2,5 \alpha_{s,max} (\mu_s + 0,4 \mu_g) / (\mu_s + \mu_g)}$
<p>DI FELICE (1994)</p>	$\beta = \frac{3}{4d_p} C_{Ds} \alpha_s \alpha_g^2 \rho_g \vec{v}_g - \vec{v}_s \alpha_g^{-\eta} \quad (B2.2)$	$\vec{v} = \vec{v}_0 = \alpha_g (\vec{v}_g - \vec{v}_s)$ $C_{Ds} = \left(0,63 + 4,8 \sqrt{\frac{1}{Re_p}} \right)^2$ $\eta = 3,7 - 0,65 \exp \left(- \frac{[1,5 - \log(Re_p)]^2}{2} \right)$ $g(\alpha_g) = C_D / C_{Ds} = \alpha_g f(\alpha_g) = \alpha_g^{-\eta}$

Tabela B2.1.1. Modelos de arrasto na interface. Continuação.

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

Tabela B2.1. Modelos de arrasto na interface. Continuação.

Autores	Expressão para a função de arrasto β	Considerações
ERGUN (1952)	$\beta = 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g (d_p \phi_s)^2} + 1,75 \frac{\alpha_s \rho_g \vec{v}_g - \vec{v}_s }{(d_p \phi_s)} \quad (2.36)$	$\vec{v} = \vec{v}_0 = \alpha_g (\vec{v}_g - \vec{v}_s)$
ROWE (1961) WEN & YU (1966)	$\beta = \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{\alpha_g \alpha_s \rho_g \vec{v}_g - \vec{v}_s }{d_p} \alpha_g^{-2,65} \quad (2.37)$	$\vec{v} = \vec{v}_0 = \alpha_g (\vec{v}_g - \vec{v}_s)$ $C_{Ds} = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} [1 + 0,15(Re_p)^{0,687}] & Re_p < 1000 \\ 0,44 & Re_p \geq 1000 \end{cases}$ $f(\alpha_g) = \alpha_g^{-4,65}$
MA & AHMADI (1990)	$\beta = \frac{18\mu_g}{d_p^2} \frac{\alpha_s}{\left(1 - \frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}}\right)^{2,5\alpha_{s,max}}} (1 + 0,1 Re_{ps}^{0,75}) \quad (B2.6)$	

Observação: O número de Reynolds do particulado Re_p calcula-se através da Eq. (2.39) da Tabela 2.1.

Figura B2.1. Comparação das funções de arrasto baseadas no coeficiente de arrasto C_D .

Figura B2.2. Comparação das funções de arrasto baseadas no gradiente de pressão.

A Figura B2.1 mostra uma comparação de diferentes correlações para β baseadas no coeficiente de arrasto C_D . Observa-se uma boa concordância entre as diferentes correlações com exceção das correlações de ISHII & ZUBER (1979) e MA & AHMADI (1990) na região densa. No caso da correlação de ISHII & ZUBER (1979) isto é consequência da tendência da viscosidade da mistura ao infinito na região mais densa. Esta correlação deve ser usada com cuidado pois a função de arrasto tende ao infinito para valores de α_s no limite de $\alpha_{s,max}$ (ENWALD *et al.*, 1996). Já a correlação de MA & AHMADI (1990) mostra essa tendência para concentrações de sólidos ainda menores até o valor de $\alpha_{s,max}$. Todas as correlações mostram um aumento de β com o aumento de α_s , já que a área de contato global aumenta (BOEMER *et al.*, 1995).

Na Figura B2.2 mostra-se uma comparação das duas correlações para β baseadas no gradiente de pressão $\Delta P/L$ em função da fração de vazio. Ambas as correlações coincidem nos limites mínimo e máximo da fração de vazio. A correlação de ERGUN (1952) mostra uma boa concordância com as correlações desenvolvidas em função do coeficiente de arrasto C_D , mesmo sendo desenvolvida originalmente para leitos fixos ou escoamentos em meios porosos. A correlação de GIBILARO *et al.* (1985) mostra os valores mais baixos de todas as funções de arrasto usadas na comparação segundo as condições fixadas exceto para os valores próximos da concentração de sólidos máxima onde a correlação de SYAMLAL & O'BRIEN (1989) tem os valores menores. Deve-se notar que a correlação de ERGUN (1952) é a única que considera a esfericidade das partículas (ENWALD *et al.*, 1996). Estas observações podem ser vistas na Figura B2.3 onde mostra-se uma comparação de todas as correlações para β usadas na presente análise. Nesta figura destaca-se o procedimento de GIDASPOW (1994) o qual coincide com a correlação de WEN & YU (1966) para valores altos da fração de vazio (escoamento disperso) e com a correlação de ERGUN (1952) para valores mais baixos da fração de vazio.

Uma comparação mais exhaustiva deste procedimento de GIDASPOW (1994) com as correlações de ERGUN (1952) e de WEN & YU (1966) mostra-se na Figura B2.4. Como pode-se notar para $\alpha_g = 0,8$ existe uma discontinuidade na função de arrasto o que pode causar instabilidades numéricas (BOEMER *et al.*, 1995). Segundo

van WACHEM *et al.* (1999) a razão para este tratamento híbrido da função de arrasto não está clara. No entanto SANYAL & CESMABASI (1994) usando o caso teste publicado por KUIPERS *et al.* (1993) fizeram um estudo numérico comparativo e recomendaram o uso do procedimento proposto por GIDASPOW (1994). Finalmente na Figura B2.5 mostra-se esta mesma comparação da função de arrasto calculada para uma velocidade relativa de uma ordem de grandeza maior (10,0 m/s). Observa-se que a descontinuidade é maior devido ao aumento da velocidade relativa entre as fases. No entanto resultados de simulação com esta correlação mostraram-se satisfatórios em comparação com os dados experimentais disponíveis.

A análise física apresentada nesta seção considera o modelo hidrodinâmico A. Porém os resultados aqui apresentados também são válidos para o modelo hidrodinâmico B, já que as funções de arrasto, β_A e β_B , estão relacionadas através de uma função linear de α_s , Eq. (2.40). Um estudo paramétrico da influencia física das diferentes correlações de β no escoamento, assim como uma comparação entre os modelos hidrodinâmicos A e B apresenta-se no Capítulo 4 de resultados.

Figura B2.3. Comparação das funções de arrasto baseadas no coeficiente de arrasto C_D e no gradiente de pressão $\Delta P/L$.

Figura B2.4. Comparação das funções de arrasto de ERGUN (1952), WEN & YU (1966) e GIDASPOW (1994), para uma velocidade relativa de 1,0 m/s.

Figura B2.5. Comparação das funções de arrasto de ERGUN (1952), WEN & YU (1966) e de GIDASPOW (1994), para uma velocidade relativa de 10,0 m/s.

APÊNDICE III

C1. - Direções caraterísticas para ambas as fases no tubo ascendente

A continuação na Figura C1.1 apresentam-se as direções caraterísticas para ambas as fases no tubo ascendente obtidas pelo análise de um escoamento gás-sólido unidimensional e invíscido segundo TSUO & GIDASPOW (1990).

Na saída do tubo ascendente quando existem aglomerados de partículas sólidas descendentes as direções caraterísticas apontam no domínio computacional.

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

Portanto a informação transmite-se para o interior do leito na velocidade $\lambda'_{3,4}$.

Na entrada do tubo ascendente a informação transmite-se para o interior do domínio computacional com a velocidade λ_2 para a fase gasosa e com as velocidades $\lambda_{3,4}$ para a fase sólida. Portanto precisa-se de três condições de contorno na entrada do tubo ascendente.

Figura C1.1. Direções caraterísticas para ambas as fases no tubo ascendente.

Na saída do tubo ascendente mostram-se apenas as direções características da fase sólida. Quando existem agregados de partículas descendentes as direções do sólido apontam no domínio computacional, razão pela qual opta-se por mudar a geometria na saída do tubo ascendente como mostra-se na Figura 2.5b. Neste caso aplica-se a condição de contorno de continuidade formulada pela Eq. (2.57).

APÊNDICE IV

D1. – Cálculo aproximado do coeficiente η_i^j

O coeficiente η_{ij} calculado aproximadamente pela fórmula (3.22) representa as derivadas do resíduo $D_{i,j}$ com respeito a pressão é obtido analiticamente a partir das equações de conservação da quantidade de movimento (3.4-3.7).

Substituindo na Eq. (3.22) a Eq. (3.21) usada para calcular o resíduo de gás em cada célula computacional obtém-se o seguinte resultado

$$\frac{1}{\eta_i^j} = \left(\frac{\partial D_i^j}{\partial P_i^j} \right) = \frac{\partial \left[{}^{n+1}(\rho_g \alpha_g)_i^j - {}^n(\rho_g \alpha_g)_i^j \right]}{\partial P_i^j} + \frac{\delta t}{r_i \delta r} \left[\frac{\partial {}^{n+1} \langle (\rho_g \alpha_g r) u_g \rangle_i^j}{\partial P_i^j} \right] + \frac{\delta t}{\delta z} \left[\frac{\partial {}^{n+1} \langle (\rho_g \alpha_g) v_g \rangle_i^j}{\partial P_i^j} \right] \quad (D1.1)$$

Considerando a derivada do primeiro termo da direita nula para o valor no tempo n e aplicando uma diferenciação central nos dois restantes termos da direita obtém-se

$$\frac{1}{\eta_{i,j}} = \frac{\alpha_g}{(C_{i,j})^2} + \frac{\delta t}{r_{i+\frac{1}{2}}} \left[\frac{\partial (\rho_g \alpha_g u_g)_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}}{\partial P_{i,j}} - r_{i-\frac{1}{2}} \frac{\partial (\rho_g \alpha_g u_g)_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1}}{\partial P_{i,j}} \right] + \frac{\delta t}{\delta z} \left[\frac{\partial (\rho_g \alpha_g v_g)_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1}}{\partial P_{i,j}} - \frac{\partial (\rho_g \alpha_g v_g)_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1}}{\partial P_{i,j}} \right] \quad (D1.2)$$

onde $C_{i,j}$ é a velocidade do som calculada como

$$(C_{i,j})^2 = \frac{\partial P_{i,j}}{\partial \rho_g} \quad (D1.3)$$

Seguidamente substituem-se as Eq. (3.4-3.7) de conservação da quantidade de movimento na Eq. (D1.2). Como exemplo apresenta-se essa substituição no primeiro termo da direita da Eq. (D1.2)

$$r_{i+\frac{1}{2}} \frac{\partial (\rho_g \alpha_g u_g)_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}}{\partial P_{i,j}} = r_{i+\frac{1}{2}} \left\{ \frac{\partial (\overline{\rho_g \alpha_g u_g})_{i,j}^n}{\partial P_{i,j}} + \frac{\delta t}{\delta r} (\alpha_g)_{i+\frac{1}{2},j} \frac{\partial (P_{i,j}^{n+1} - P_{i+1,j}^{n+1})}{\partial P_{i,j}} - \right. \\ \left. \delta t \beta_{i+\frac{1}{2},j}^n \frac{\partial (u_g - u_s)_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}}{\partial P_{i,j}} \right\} \approx r_{i+\frac{1}{2}} \frac{\delta t}{\delta r} (\alpha_g)_{i+\frac{1}{2},j} \quad (D1.4)$$

Na obtenção da Eq. (D1.4) foram desprezados o termo que contem a derivada parcial da velocidade relativa com respeito à pressão e o termo da derivada parcial das variáveis no tempo de cálculo n com respeito à pressão. Considerando as simplificações adotadas na obtenção da Eq. (D1.4) e realizando o mesmo procedimento para os demais termos da Eq. (D1.2) deriva-se a Eq. (3.22) utilizada para o cálculo do coeficiente η_i^j

$$\frac{1}{\eta_{i,j}} = \frac{\partial D_{i,j}}{\partial P_{i,j}} = \frac{\alpha_g}{C_{i,j}^2} + \frac{\delta t^2}{r_i \delta r^2} \left(r_{i+\frac{1}{2}} (\alpha_g)_{i+\frac{1}{2},j} + r_{i-\frac{1}{2}} (\alpha_g)_{i-\frac{1}{2},j} \right) + \frac{\delta t^2}{\delta Z^2} \left((\alpha_g)_{i,j+\frac{1}{2}} + (\alpha_g)_{i,j-\frac{1}{2}} \right) \quad (D1.5)$$

A Eq. (D1.5) utilizada para o cálculo de $\eta_{i,j}$ é aproximada. A derivação completa da equação para $\eta_{i,j}$, incluindo os termos acima desprezados mostra-se em HARLOW & AMSDEN (1975) e ENWALD & PEIRANO (1997). Quando utiliza-se a equação simplificada, Eqs. (D1.5) ou (3.22), realiza-se apenas uma iteração na pressão com ela em cada célula. Depois a pressão é iterada usando o método da secante e das duas secantes constringidas, ver seção 3.2.2. Esta metodologia é

própria dos códigos utilizados no IIT. Outros trabalhos baseados na mesma técnica de Harlow & Amsden (KUIPERS *et al.*, 1993 e ENWALD & PEIRANO, 1997), usam a equação completa para η_{ij} na iteração da pressão. Neste caso não é necessário usar métodos iterativos adicionais.

APÊNDICE V

E1. – Apresentação e discussão física de leis constitutivas da TCEG

Na Tabela E1.1 mostra-se um resumo das correlações utilizadas no cálculo da viscosidade dinâmica e volumétrica, μ_s e λ_s , pressão, p_s , função radial de distribuição, g_0 , dissipação de energia devido as colisões, γ_s , e condutividade "granular", k_s , da fase sólida segundo modelos da literatura que utilizam a TCEG.

Como pode-se notar da Tabela E1.1 existe uma ampla gama de correlações obtidas através da TCEG para a formulação das leis constitutivas necessárias para o fechamento das equações de balanço. Devido a este fato uma discussão física do comportamento destas correlações torna-se interessante. BOEMER *et al.* (1995) e van WACHEM *et al.* (1999) fizeram estudos comparativos de varias das correlações aqui apresentadas e mostraram diferenças significativas entre elas. Uma extensão desta análise mostra-se a seguir.

Tabela E1.1. Resumo de correlações da literatura para formulação das leis constitutivas pela TCEG.

Viscosidade dinâmica do sólido	Referências
$\mu_s = \frac{4}{5} \alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + \frac{10}{48} \sqrt{\pi \theta} \frac{\rho_p d_p}{(1+e)(3-e)g_0} + \frac{1}{12} \sqrt{\pi \theta} \frac{\rho_p d_p \alpha_s (3e+1)}{(3-e)} + \frac{1}{15} \sqrt{\pi \theta} \frac{\rho_p d_p g_0 (1+e)(3e-1) \alpha_s^2}{(3-e)}$	(E1.1) LUN <i>et al.</i> (1984); SINCLAIR & JACKSON (1989)
$\mu_s = \frac{4}{5} \alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}}$	(E1.2) DING & GIDASPOW (1990)
$\mu_s = \frac{4}{5} \alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + \frac{10}{96} \sqrt{\pi \theta} \frac{\rho_p d_p}{(1+e)g_0} + \frac{1}{6} \sqrt{\pi \theta} \rho_p d_p \alpha_s + \frac{1}{15} \sqrt{\pi \theta} \rho_p d_p g_0 (1+e) \alpha_s^2$	(E1.3) GIDASPOW <i>et al.</i> (1992); GIDASPOW (1994)
$\mu_s = \frac{4}{5} \alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + \frac{\sqrt{\pi \theta} \rho_p d_p \alpha_s}{6(3-e)} + \frac{1}{15} \sqrt{\pi \theta} \frac{\rho_p d_p g_0 (1+e)(3e-1) \alpha_s^2}{(3-e)}$	(E1.4) SYAMLAL <i>et al.</i> (1993)
$\mu_s = \frac{4}{5} \alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + 1,016 \left[\frac{5}{96} \sqrt{\pi \theta} \frac{\rho_p d_p}{g_0} + \frac{1}{24} \sqrt{\pi \theta} \rho_p d_p (1+e) \alpha_s + \frac{1}{15} \sqrt{\pi \theta} \rho_p d_p g_0 (1+e) \alpha_s^2 \right]$	(E1.5) NIEUWLAND <i>et al.</i> (1996)
$\mu_s = \frac{4}{5} \alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + \frac{10}{48} \frac{\sqrt{\pi \theta} \rho_p d_p}{(1+e)(3-e)(1+\frac{\lambda}{R})g_0} + \frac{1}{12} \sqrt{\pi \theta} \frac{\rho_p d_p \alpha_s [2(1+\frac{\lambda}{R})+3e+1]}{(3-e)(1+\frac{\lambda}{R})} + \frac{1}{15} \sqrt{\pi \theta} \frac{\rho_p d_p g_0 (1+e)(3e-1) \alpha_s^2}{(3-e)}$	(E1.6) HRENYA & SINCLAIR (1997)
Viscosidade volumétrica do sólido	Referências
$\xi_s = \frac{4}{3} \alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \left(\frac{\theta}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}}$	(E1.7) Todas as referências citadas.
Pressão do sólido	Referências
$P_s = \alpha_s \rho_s \theta [1 + 2(1+e)g_0 \alpha_s]$	(E1.8) Todas as referências citadas

Tabela E1.1. Resumo de correlações da literatura para formulação das leis constitutivas segundo a TCEG. (Continuação).

Função radial de distribuição	Referências
$g_0 = \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,\max}} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^{-1}$	(E1.9) BAGNOLD (1954); OGAWA <i>et al.</i> (1980); SINCALIR & JACKSON (1989)
$g_0 = \frac{1}{1 - \alpha_s} + \frac{3\alpha_s}{2(1 - \alpha_s)^2} + \frac{\alpha_s^2}{2(1 - \alpha_s)^3} = \frac{(2 - \alpha_s)}{2(1 - \alpha_s)^3}$	(E1.10) CARNAHAN & STARLING (1969)
$g_0 = \left[1 - \frac{\alpha_s}{\alpha_{s,\max}} \right]^{-2,5\alpha_{s,\max}}$	(E1.11) LUN & SAVAGE (1986)
$g_0 = \frac{[1 + 2,5\alpha_s + 4,5904\alpha_s^2 + 4,515439\alpha_s^3]}{[1 - (\alpha_s/\alpha_{s,\max})^3]^{0,678021}}$	(E1.12) MA & AHMADI (1986)
$g_0 = \frac{3}{5} \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,\max}} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^{-1}$	(E1.13) DING & GIDASPOW (1990); GIDASPOW (1994)
$g_0 = \frac{1}{1 - \alpha_s} + \frac{3\alpha_s}{2(1 - \alpha_s)^2}$	(E1.14) SYAMLAL <i>et al.</i> (1993)
$g_0 = \frac{1}{1 - \alpha_s/\alpha_{s,\max}} + \frac{3}{2} \frac{\alpha_s/\alpha_{s,\max}}{(1 - \alpha_s/\alpha_{s,\max})^2} + \frac{1}{2} \frac{(\alpha_s/\alpha_{s,\max})^2}{(1 - \alpha_s/\alpha_{s,\max})^3}$	(E1.15) BALZER & SIMONIN (1993)
Dissipação da energia devido as colisões	Referências
$\gamma = 3(1 - e^2)\alpha_s^2\rho_s g_0 \theta \left(\frac{4}{d_p} \left(\frac{\theta}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \right)$	(E1.16) LUN <i>et al.</i> (1984) SINCLAIR & JACKSON (1989) SYAMLAL <i>et al.</i> (1993); e outros.
$\gamma = 3(1 - e^2)\alpha_s^2\rho_s g_0 \theta \left(\frac{4}{d_p} \left(\frac{\theta}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} - \nabla \cdot \vec{v}_s \right)$	(E1.17) DING & GIDASPOW (1990); GIDASPOW <i>et al.</i> (1992); GIDASPOW (1994); NIEUWLAND <i>et al.</i> (1996).

Tabela E1.1. Resumo de correlações da literatura para formulação das leis constitutivas segundo a TCEG. (Continuação).

Conductividade "granular" do sólido	Referências
$k_s = 2\alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + \frac{75}{12} \sqrt{\pi\theta} \frac{\rho_p d_p}{(49-33e)(1+e)g_0}$ $+ \frac{15}{4} \sqrt{\pi\theta} \frac{\rho_p d_p \alpha_s [2 + (1+e)(2e-1)]}{(49-33e)}$ $+ \frac{9}{2} \sqrt{\pi\theta} \frac{\rho_p d_p g_0 (1+e)^2 (2e-1) \alpha_s^2}{(49-33e)}$	(E1.18) *LUN <i>et al.</i> (1984) & SINCLAIR & JACKSON (1989)
$k_s = 2\alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}}$	(E1.19) DING & GIDASPOW (1990) & DING <i>et al.</i> (1991)
$k_s = 2\alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + \frac{75}{192} \sqrt{\pi\theta} \frac{\rho_p d_p}{(1+e)g_0}$ $+ \frac{15}{16} \sqrt{\pi\theta} \rho_p d_p \alpha_s + \frac{9}{16} \sqrt{\pi\theta} \rho_p d_p g_0 (1+e) \alpha_s^2$	(E1.20) GIDASPOW <i>et al.</i> (1992) & GIDASPOW (1994)
$k_s = 2\alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}}$ $+ \frac{15}{2} \sqrt{\pi\theta} \frac{\rho_p d_p \alpha_s}{(49-33e)} + \frac{9}{2} \sqrt{\pi\theta} \frac{\rho_p d_p g_0 (1+e)^2 (2e-1) \alpha_s^2}{(49-33e)}$	(E1.21) SYAMLAL <i>et al.</i> (1993)
$k_s = 2\alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + 1,02513 \left[\frac{75}{384} \sqrt{\pi\theta} \frac{\rho_p d_p}{g_0} \right.$ $\left. + \frac{15}{64} \sqrt{\pi\theta} \rho_p d_p (3+e) \alpha_s + \frac{9}{16} \sqrt{\pi\theta} \rho_p d_p (1+e) g_0 \alpha_s^2 \right]$	(E1.22) NIEUWLAND <i>et al.</i> (1996)
$k_s = 2\alpha_s^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + \frac{75}{12} \sqrt{\pi\theta} \frac{\rho_p d_p}{(1+\frac{\lambda}{R})(49-33e)(1+e)g_0}$ $+ \frac{15}{4} \sqrt{\pi\theta} \frac{\rho_p d_p \alpha_s [2(1+\frac{\lambda}{R}) + (1+e)(2e-1)]}{(1+\frac{\lambda}{R})(49-33e)g_0}$ $+ \frac{9}{2} \sqrt{\pi\theta} \frac{\rho_p d_p g_0 (1+e)^2 (2e-1) \alpha_s^2}{(49-33e)}$	(E1.23) HRENYA & SINCLAIR (1997)

* A expressão apresentada para o cálculo da condutividade do sólido segundo os LUN *et al.* (1984) e SINCLAIR & JACKSON (1989) considera apenas a contribuição ao fluxo pseudotérmico devido ao gradiente da temperatura granular. Estes autores consideraram outra contribuição devido ao gradiente da fração volumétrica de sólidos que não está sendo apresentada, ver LUN *et al.* (1984).

E11. – 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 através da TCEG a viscosidade do sólido pode ser derivada (BOEMER *et al.*, 1995). Como descrito em GIDASPOW (1994) o tensor das tensões compõe-se de duas parcelas, a que representa a contribuição devido as 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 E11.1, E11.2, E11.3 e E11.4 representam uma comparação quantitativa da viscosidade do sólido segundo as diferentes correlações usualmente usadas na literatura e mostradas na Tabela E1.1. Nestas figuras a viscosidade μ_s , é calculada em função da fração volumétrica de sólidos assumindo partículas esféricas, uma concentração máxima de particulado igual à 0,64356, um diâmetro médio de particulado de 0,52 mm, uma densidade de particulado de 2620 kg/m³. Na Figura E11.1 mostra-se uma comparação do comportamento das várias correlações para μ_s considerando 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 igual à 0,90 e a temperatura granular igual à 0,1 (m²/s²). Da Figura E11.1 percebe-se que as correlações de LUN *et al.* (1984), SINCLAIR & JACKSON (1989), GIDASPOW *et al.* (1992), NIEUWLAND *et al.* (1996), e de HNERYA & SINCLAIR (1997) tem 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.* (1989) isto deve-se a que esta correlação foi derivada a partir da correlação de LUN *et al.* (1984) desprezando 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 as outras correlação nas regiões mais densas, caracterizadas por uma fração volumétrica de sólidos maior.

Figura E11.1. 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)

Na Figura E11.2 mostra-se o comportamento de todas as correlações acima analisadas na região dispersa. Como pode-se notar todas elas apresentam um comportamento diferente 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 deve-se novamente ao fato de não terem 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 (1999) no tratamento original de LUN *et al.* (1984) considera-se que as partículas interagem num meio infinito. Consequentemente assim que a fração volumétrica de sólidos 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 através de uma dimensão característica do sistema físico que se analisa, obtendo portanto o valor correto de $\mu_s = 0$ para $\alpha_s = 0$. Ao igual que 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 a contribuição cinética sem limitar o caminho livre das partículas.

Figura E11.2. 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 E.5).

É interessante notar que a diferença observada entre as correlações de LUN *et al.* (1989) e SINCLAIR & JACKSON (1989), as duas calculadas através da Eq. (E1.1) deve-se ao uso por estes autores de diferentes correlações para a função radial de distribuição g_0 segundo as Eqs. (E1.10) e (E1.9) 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. (E1.13) e (E1.12) respectivamente, tem-se a

influencia do valor do coeficiente de restituição e . De fato fazendo uma análise das correlações para μ_s apresentadas na Tabela E1.1, 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) apresentem 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 que as anteriores, mas com uma pequena diferença para valores baixos e médios de α_s . A causa dessa discordância deve-se ao fator multiplicativo igual à 1,016 utilizado na Eq. (E1.5) que modifica ligeiramente a contribuição dos termos cinéticos da equação. Este fator calcula-se por CHAPMAN & COWLING (1961) e é desprezado na análise desenvolvida por GIDASPOW (1994). As observações acima explanadas mostram-se na Figura E.3.

Figura E11.3. 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 E11.4 mostra-se a influencia do coeficiente de restituição e no valor da viscosidade do sólido μ_s , considerando o valor da temperatura granular igual à $\theta = 0,1 \text{ (m/s)}^2$ e utilizando a correlação de OWAGA *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 influencia do coeficiente de restituição e para ambas as correlações de μ_s analisadas em toda a faixa de valores da fração volumétrica de sólidos. Isso demonstra a necessidade de utilizar, nas simulações com a TCEG, um valor de e razoável, que corresponda às propriedades físicas do material particulado usado no sistema estudado. De fato 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 de este dado empírico para obter resultados de simulação, o que é uma das desvantagem 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 a possível solução é formular uma relação entre o coeficiente de restituição e velocidade do sólido na coluna. Outra das vias de solução de esta questão é o uso das simulações Euleriana-Lagrangiana. Este tipo de simulação permite o estudo mais detalhado das interações das partículas entre si e pode possibilitar 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 E11.4a) e b). Ilustração da influência do coeficiente de restituição e sobre a viscosidade dinâmica do sólido μ_s . (g_0 calculada segundo OWAGA *et al.* (1980)).

E22. – 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 nota-se nas Figuras E22.5 e E22.6. Nelas mostra-se o comportamento de várias correlações para g_0 apresentadas na Tabela E1.1. 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.

Figura E22.5. Comparação de várias correlações da literatura para a função radial de distribuição, g_0 .

Figura E22.6. Comparação de várias correlações da literatura para a função radial de distribuição, g_0 . Visualização para o valor limite da concentração de sólidos $\alpha_s \rightarrow 0$.

Na Figura E22.5 observa-se que as correlações de Owaga *et al.*, Ding & Gidaspow, Lun & Savage, Balzer & Simonin e Ma & Ahmadi tendem ao infinito para $\alpha_s \rightarrow \alpha_{s, \max}$. Já as de Carnahan & Starling e Syamlal *et al.* não tendem ao limite correto quando $\alpha_s \rightarrow \alpha_{s, \max}$. Esta correlação de Carnahan & Starling prediz variações suaves não reais até a concentração maior possível, i.e. para $\alpha_s = \alpha_{s, \max}$ (MA & AHMADI, 1986). Syamlal *et al.* 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, a qual não tende para o limite correto, sendo $g_0 = 0,6$ para $\alpha_s = 0$. Isto observa-se claramente na Figura E22.6 e deve-se a que estes autores multiplicaram a correlação de Owaga *et al.* pelo fator de 3/5. A razão deste ajuste foi a tentativa de correlacionar de uma melhor forma os dados de ALDER & WAINWRIGHT (1960). Estes autores obtiveram resultados de simulação da equação de estado através 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 . Dita comparação mostra-se na Figura E22.7 a seguir apresentada.

Figura E22.7. Comparação de várias correlações da literatura para a função radial de distribuição, g_0 com os dados de simulação de ALDER & WAINWRIGHT (1960).

Na Figura E22.7 são apresentadas as correlações de Owaga *et al.*, Ding & Gidaspow, Lun & Savage, Carnahan & Starling e Ma & Ahmadi. Segundo BOEMER *et al.* (1995) as três primeiras correlações dependem fortemente do valor de $\alpha_{s, \max}$, sendo possível minimizar a diferença entre estas correlações e os dados de Alder & Wainwright através do ajuste desse valor. Destas três correlações a de DING & GIDASPOW (1990) é a que melhor coincide com os dados de comparação em todo o range 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 OWAGA et al. (1980) para valores de α_s perto do limite máximo de empacotamento. A correlação de CARNAHAN & STARLING (1960) 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 E22.7 percebe-se que a correlação que melhor comportamento mostra em comparação aos dados de ALDER & WAINWRIGHT (1960) para toda a faixa de valores de α_s e a correlação desenvolvida por MA & AHMADI (1986). Este fato deve ser considerado na aplicações destas correlações em simulações com a TCEG.

Finalmente, de forma análoga à análise desenvolvida por van WACHEM (1999), na Figura E22.8 mostra-se 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. Assume-se os seguintes valores do coeficiente de restituição e da temperatura granular, $e = 0,9$ e $\theta = 1,0 \text{ (m}^2/\text{s}^2\text{)}$.

Como pode-se observar, exceto para a correlação de CARNAHAN & STARLING (1960), no máximo existe uma diferença de duas ordens de grandeza nos valores de μ_s das correlações analisadas em função das correlações de g_0 consideradas. Isto pode representar uma grande diferença, com ênfases nas regiões densas do leito, do valor da viscosidade dinâmica do sólido, μ_s , e influenciar de maneira significativa nos 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.

Figura E22.8a) e b). Ilustração da influencia da função radial de distribuição g_0 sobre a viscosidade dinâmica do sólido μ_s .

Das análises acima mostradas das correlações para o cálculo da viscosidade dinâmica do sólido e da função radial de distribuição, pode-se concluir que em função da escolha destas correlações 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 influencia nas regiões mais densas do escoamento e os termos devidos à contribuição cinética tem maior influencia nas regiões mais dispersas do escoamento.