Christian Léa Coelho da Costa Milioli

**Simulação de escoamentos gás-sólido reativos
em leitos fluidizados circulantes**

Tese apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Área de Concentração: Térmica e Fluidos
Orientador: Prof. Dr. Fernando Eduardo Milioli

São Carlos
2006

Para

Matheus, Fernando e João Baptista

Sumário

	Pág.
Lista de símbolos	i
Resumo	ii
Abstract	iii
1. Introdução	1
1.1. Descrição hidrodinâmica de leitos fluidizados	5
2. Estado da arte em simulações de dois fluidos de leitos fluidizados circulantes	7
2.1. Simulações em regime estatisticamente permanente	11
2.2. Simulações incluindo absorção de SO ₂ por calcário	13
3. Proposta de pesquisa, objetivos e meta	15
4. Metodologia	16
4.1. Modelo hidrodinâmico de dois fluidos	16
4.1.1. Pressão da fase sólido	20
4.1.2. Viscosidade da fase sólido	22
4.1.3. Função de arrasto na interface	24
4.2. Modelo reativo de dois fluidos	26
4.2.1. Cinética da absorção de SO ₂ por calcário	28
4.3. Modelo de dois fluidos no CFX5.7	29
4.4. Procedimento numérico no CFX5.7	30
4.5. Infra-estrutura computacional	32
5. Simulações	34
5.1. Definição de casos	34
5.2. Estratégia de simulação	36
5.3. Domínios físicos, malhas numéricas, condições iniciais e de contorno	37
5.4. Simulações de regime permanente	42
5.4.1. Simulações hidrodinâmicas	42
5.4.1.1. Análise de convergência	44
5.4.1.2. Análise hidrodinâmica	46
5.4.2. Simulações reativas: absorção de SO ₂ por calcário	51
5.4.2.1. Análise hidrodinâmica	52
5.4.2.2. Análise reativa	55
5.5. Simulações de regime transiente	59
5.5.1. Simulação hidrodinâmica - caso B(HT)	59
5.5.1.1. Comportamento transiente	59
5.5.1.2. Comportamento médio temporal	62
5.5.1.3. Comparação com resultados de simulações de outros autores	64
5.5.2. Simulação reativa: absorção de SO ₂ por calcário - caso B(RT)	68
5.5.2.1. Comportamento transiente	69
5.5.2.2. Comportamento médio temporal	69
5.6. Tempos de processamento computacional	73
6. Conclusões e sugestões para trabalhos futuros	75
6.1. Conclusões	75
6.2. Sugestões para trabalhos futuros	77
7. Referências bibliográficas	80

Apêndice A. Formulação do modelo de dois fluidos para escoamentos gás-sólido	88
A.1. Obtenção de equações locais instantâneas e condições de salto	88
A.2. Obtenção de equações médias	91
Apêndice B. Configurações numéricas	92
B.1. Malhas numéricas	92
B.2. Avanço de tempo distorcido (simulações de regime permanente)	93
B.3. Avanço de tempo real e número máximo de iterações (simulações transientes) ...	94
B.4. Critério de convergência (rms)	95
B.5. Esquema de interpolação na discretização de termos advectivos - dissipação numérica de clusters	95
B.6. Esquema de interpolação na discretização de termos transientes	97
Apêndice C. Desempenho do cluster de PCs	98
Apêndice D. Dificuldades	100
Apêndice E. Publicações desta tese	101

Lista de símbolos

C_D	coeficiente de arrasto, adimensional
d_p	diâmetro de partícula, m
D	coeficiente de difusão, kg/m s
$\vec{F}$	força de corpo externa por unidade de massa, m/s ²
$\vec{g}$	aceleração da gravidade, m/s ²
G	módulo de elasticidade partícula-partícula, N/m ²
G_s	fluxo mássico (ou taxa de circulação) de sólido, $G_s = \rho_s \alpha_s v_s$, kg/s/m ²
$\bar{I}$	tensor unitário
K	coeficiente de taxa de reação, m ³ /kmol s
P	pressão, N/m ²
r	taxa de reação molar, kmol/m ³ s
R	taxa de reação mássica, kg/m ³ s
R_u	constante dos gases ideais, kJ/kmol K
Re_p	número de Reynolds, adimensional
t	tempo, s
T	temperatura, K
$\vec{U}$	vetor velocidade média, m/s
u, v, w	componentes Cartesianas do vetor velocidade, m/s
v_t	velocidade terminal de partícula, m/s
W	peso molecular, kg/kmol
Y	Fração mássica, kg _{i,j} /kg _k

Símbolos gregos

α	fração volumétrica, m ³ /m ³
β	função de arrasto na interface gás-sólido, kg/m ³ s
λ	viscosidade volumétrica, N s/m ²
μ	viscosidade dinâmica, N s/m ²
ρ	Densidade, kg/m ³
$\bar{\tau}$	Tensor das tensões viscosas, N/m ²
φ	esfericidade de partícula, adimensional

Subscritos

g	fase gás
i, j	espécies químicas
k	fases gás ou sólido
s	fase sólido

Resumo

MILIOLI, C. C. **Simulação de escoamentos gás-sólido reativos em leitos fluidizados circulantes**. 2006. 101 f. Tese (Doutorado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2006.

Reatores de leito fluidizado circulante são intensamente utilizados em aplicações de larga escala como craqueamento catalítico de petróleo e combustão de carvão. Projeto e desenvolvimento nestas áreas são fortemente baseados em plantas de demonstração, a custos elevadíssimos. Nesse contexto, tratamentos utilizando mecânica dos fluidos computacional assumem considerável relevância. Os complexos padrões de escoamento gás-sólido que se desenvolvem nos reatores de leito fluidizado circulante determinam taxas de reação e exigem, portanto, descrições hidrodinâmicas rigorosas. Os modelos Eulerianos do contínuo ou de dois fluidos são correntemente considerados a escolha mais prática na busca destas descrições. Estas formulações são baseadas na aplicação da hipótese de meio contínuo tanto para fases macroscopicamente contínuas quanto dispersas. Neste trabalho, desenvolve-se simulações numéricas para descrever processos hidrodinâmicos e reativos em reatores de leito fluidizado circulante aplicando modelagem de dois fluidos. Considera-se situações típicas de combustão em leito fluidizado circulante de carvão mineral. Como processo reativo considera-se a absorção de dióxido de enxofre por calcário. Realiza-se análises hidrodinâmicas, e de efeitos hidrodinâmicos sobre a reação de interesse. Realiza-se simulações de regime permanente e de regime transiente. Mostra-se que as simulações de regime permanente permitem análises qualitativas do processo, e provêem condições iniciais para simulações transientes diretamente no regime de escoamento estatisticamente permanente. Em relação à hidrodinâmica, conclui-se que os modelos de dois fluidos correntes são ainda bastante crus. São claramente necessárias melhores descrições reológicas e relações constitutivas sub-grade mais acuradas. Em relação à reação química, conclui-se que predições reativas acuradas somente poderão ser obtidas se descrições hidrodinâmicas rigorosas forem combinadas com descrições reativas igualmente rigorosas.

Palavras-chave: modelo de dois fluidos, simulação de dois fluidos, leito fluidizado circulante, escoamento gás-sólido, dessulfuração.

Abstract

MILIOLI, C. C. **Simulation of reactive gas-solid flows in circulating fluidized beds**. 2006. 101 f. Thesis (Doctoral) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2006.

Circulating fluidized bed reactors are widely used in large scale applications such as catalytic cracking of petrol and coal combustion. Development and design in those areas are strongly based on demonstration plants, at extremely high costs. In this context, treatments applying computational fluid mechanics assume considerable relevance. The complex gas-solid flow patterns which develop inside the circulating fluidized bed reactors determine reaction rates, so that rigorous hydrodynamic descriptions are required. The continuum Eulerian or two-fluid models are currently considered the more practical choice for providing such descriptions. Those formulations are based on the application of the continuum hypothesis for both macroscopically continuous and dispersed phases. In this work numerical simulation is performed to describe both hydrodynamics and reactive processes in circulating fluidized beds applying two-fluid modeling. Typical situations of circulating fluidized bed coal combustion are considered. The reactive process considered is the absorption of sulfur dioxide by limestone. Analyses are performed of hydrodynamics, and regarding hydrodynamic effects over the concerning reaction. Both steady state and transient simulations are performed. It is shown that steady state simulations allow qualitative analyses, and do provide initial conditions for transient runs straightly inside the statistical steady state flow regime. Concerning hydrodynamics, it is concluded that the current two-fluid models are still very crude. Clearly, better rheological descriptions are required alongside with more accurate sub-grid constitutive relations. Regarding chemical reaction, it is concluded that accurate reactive predictions shall only be found if rigorous hydrodynamic descriptions are combined with equally rigorous reaction descriptions.

Keywords: two-fluid model; two-fluid simulation; circulating fluidized bed; gas-solid flow; desulfurization.

1. Introdução

Uma enorme quantidade de operações nas indústrias química, de geração de energia e do petróleo envolve escoamentos bifásicos gás-sólido, e uma fração significativa desses processos ocorre em reatores de leito fluidizado. Nessas áreas, os custos envolvidos no escalonamento e modificações de processo via empiricismo, através de plantas de demonstração, são elevadíssimos. Como exemplo, cita-se a planta de demonstração de combustão de carvão mineral em leito fluidizado circulante “Nucla ACFB Demonstration Project”, com capacidade de 100 MWe (NUCLA, 1999). Os custos de projeto, construção e partida da planta alcançaram 112,3 milhões de dólares norte americanos. Outros 54,7 milhões de dólares foram gastos na operação da planta no seu estágio de demonstração, entre setembro de 1988 e janeiro de 1991.

Os custos associados às plantas de demonstração tornam evidente a grande importância do desenvolvimento de ferramentas teóricas. Há, contudo, grandes dificuldades a transpor para o desenvolvimento de modelos acurados. Tais dificuldades relacionam-se, em grande parte, à complexidade hidrodinâmica dos processos.

Os escoamentos nos reatores de leito fluidizado promovem misturas altamente eficientes, propiciando elevadas taxas de transferência de calor e massa, intensificando processos reativos. Há diferentes regimes hidrodinâmicos, caracterizados por diferentes padrões de escoamento.

Ishii (1975) propôs uma série de diferentes classificações de escoamentos bifásicos. Em geral, foram subdivididos em gás-sólido, gás-líquido, sólido-líquido ou de dois líquidos imiscíveis. Em relação à topologia, os escoamentos foram classificados em separados, misturados e dispersos. Neste trabalho são de interesse os escoamentos dispersos. Estes podem ser de bolhas de gás ou vapor em líquido, de gotas em gás, de partículas sólidas em líquidos, ou de partículas sólidas em gás. Neste trabalho são de interesse os escoamentos de partículas sólidas em gás. Há vários possíveis regimes de escoamento de partículas sólidas em gás. Neste trabalho é de interesse o regime de fluidização circulante.

Considere-se um leito de partículas sólidas confinado na base de um duto vertical, através do qual flui uma descarga de gás, percolando através dos espaços intersticiais entre partículas. Em baixas vazões de gás o arrasto sobre as partículas não é suficiente para vencer o efeito gravitacional, e as partículas permanecem estáticas. Essa situação é denominada leito fixo. Aumentando-se progressivamente a vazão do gás há um momento em que o crescente efeito de arrasto iguala o efeito gravitacional. Nessa situação o particulado passa a mover-se com as características de um fluido, e o leito torna-se fluidizado num estado denominado de mínima fluidização.

Vazões crescentes do gás através do leito dão origem a diferentes configurações hidrodinâmicas. O gás tende a escoar de forma a minimizar perdas, i.e., atravessar a coluna particulada com o mínimo dispêndio de energia. Isso é da natureza dos escoamentos fluidos. Acréscimos de vazão de gás em relação ao estado de mínima fluidização causam pequena expansão do leito seguida do aparecimento de vazios ou bolhas de gás. Esse é o denominado regime de fluidização borbulhante. Aumentando-se ainda mais a vazão de gás as bolhas colapsam em vazios irregulares sem padrão definido, atingindo-se o denominado regime de fluidização turbulenta.

Em todas as situações anteriores, a velocidade vertical média do gás escoando em torno das partículas é inferior a sua velocidade terminal, e o particulado é retido no interior da coluna. Ao se praticar vazões de gás que imponham velocidades superiores à velocidade terminal das partículas, estas são arrastadas para fora da coluna. Esse regime de escoamento, freqüentemente caracterizado pelo surgimento de estruturas coerentes de particulado e pelo escoamento descendente de particulados nas paredes do container, é denominado de fluidização rápida. Como o particulado é expulso do container e, nas aplicações práticas, é continuamente devolvido na sua base, este regime de fluidização é também referido como de fluidização circulante. A Figura 1 ilustra a configuração de escoamento característica dos leitos fluidizados circulantes. A partir da condição de fluidização rápida, aumentos adicionais da vazão do gás conduzem aos regimes de transporte pneumático.

Os escoamentos gás-sólido em leitos fluidizados circulantes são de natureza instável e caracterizada por grande complexidade hidrodinâmica, influenciando profundamente os processos de transporte de massa e energia nos reatores. A distribuição espacial de sólido é altamente não uniforme, e há grandes velocidades de deslizamento entre gás e partículas.

Diferentes fluxos de gás e partículas geram diferentes gradientes de pressão e retenção de sólido na coluna. Há grande recirculação de particulado, notadamente em estruturas coerentes e em escoamento descendente nas paredes da coluna. Os padrões de estruturas coerentes mudam consideravelmente com a escala do processo, alterando completamente as condições de transporte, e conseqüentemente a performance dos reatores.

Figura 1. Diagrama esquemático de um leito fluidizado circulante.

A aplicação de leitos fluidizados a processos reativos gás-sólido requer a utilização de elevadas cargas de sólidos, elevada área de contato entre fases, mistura intensa de forma a maximizar transportes de massa e energia, e tempo de residência suficiente para que os processos reativos heterogêneos possam se desenvolver. As melhores condições de mistura,

satisfazendo simultaneamente as exigências de carga, área de contato e tempo de residência em colunas de proporções viáveis, são obtidas em leitos fluidizados circulantes. Em vista disso, os reatores de leito fluidizado circulante são intensamente aplicados em processos como craqueamento catalítico de petróleo, combustão de carvões e absorção de SO_2 por calcários.

Como ilustrado no diagrama da Figura 1, um reator de leito fluidizado circulante é composto basicamente de uma coluna ascendente (riser), de um ciclone separador no topo desta coluna, de uma coluna de retorno de sólido (standpipe), e de uma válvula de retorno ligando a coluna de retorno à coluna ascendente. Como as reações químicas de interesse ocorrem na coluna ascendente, a maior parte dos estudos dos reatores de leito circulante concentra-se nos processos que se desenvolvem nesta parte do reator.

De acordo com as condições operacionais, os leitos fluidizados circulantes podem ser agrupados em leitos de baixa densidade e de alta densidade de particulado (na coluna ascendente). Os leitos de baixa densidade são em geral aplicados a processos envolvendo reações químicas gás-sólido (e.g. combustão e absorção), enquanto os leitos de alta densidade são geralmente aplicados a processos catalíticos (e.g. craqueamento) (SUN, 1996).

Nos processos reativos gás-sólido, a cinética química relativamente lenta exige maiores tempos de residência do particulado sólido. Em consequência aplica-se menores velocidades do gás (tipicamente 5 a 9 m/s) e/ou particulados mais grosseiros (tipicamente 200 a 1000 μm). Por outro lado, os processos catalíticos, caracterizados por cinéticas mais rápidas, permitem tempos de residência inferiores. Em consequência aplica-se maiores velocidades do gás (tipicamente 6 a 28 m/s) e/ou particulados mais finos (tipicamente 40 a 100 μm).

Tendo em vista as velocidades do gás e os tamanhos de particulado praticados, obtém-se taxas de circulação de sólidos tipicamente entre 10 e 100 $\text{kg/m}^2\text{s}$ para leitos de baixa densidade de sólidos, e entre 400 e 1200 $\text{kg/m}^2\text{s}$ para leitos de alta densidade (SUN, 1996). As concentrações médias de sólidos nos leitos de baixa densidade são tipicamente inferiores a 3%, enquanto nos leitos de alta densidade podem ser tão altas quanto 20% (GRACE; BI, 1997). A quantidade de produto que se deseja obter (e.g. gasolina e outros derivados no craqueamento de petróleo, calor na combustão de carvão, remoção de SO_2 na absorção por calcário) pode ser estabelecida manipulando-se a seção transversal do reator. A altura da coluna está mais relacionada ao tempo de residência necessário.

1.1. Descrição hidrodinâmica de leitos fluidizados

Um grande desafio na busca de melhor compreensão dos processos em reatores de leito fluidizado tem sido melhorar a sua descrição hidrodinâmica. As dificuldades residem no caráter altamente heterogêneo e instável dos escoamentos, frequentemente caracterizados por intensas e contínuas formação, dissipação e composição de estruturas coerentes.

A abordagem mais simples para descrição hidrodinâmica de leitos fluidizados é a denominada fenomenológica ou mecanística, na qual padrões pré-estabelecidos de escoamento são assumidos com base em conhecimento empírico. Em leitos fluidizados borbulhantes é comum assumir-se duas fases, uma de bolhas de gás outra de emulsão gás-sólido; em leitos fluidizados circulantes pode-se definir fases com sólidos dispersos e em clusters, e/ou escoamentos do tipo core-anular (DAVIDSON, 1961). Os modelos fenomenológicos são simplistas e capazes de lidar apenas com aspectos globais dos processos.

Descrições hidrodinâmicas mais elaboradas têm sido desenvolvidas onde os padrões de escoamento são preditos em vez de pré-estabelecidos. Duas diferentes abordagens têm sido praticadas: a Euleriana e a Lagrangeana. Na abordagem Euleriana equações conservativas de meio contínuo são desenvolvidas tanto para fases macroscopicamente contínuas como para fases macroscopicamente dispersas ou misturas (JACKSON, 1963; MURRAY, 1965; PIGFORD; BARON, 1965; ANDERSON; JACKSON, 1967; SOO, 1967; DREW, 1971; GIDASPOW, 1994). Esses modelos têm sido genericamente denominados modelos de dois fluidos. As maiores dificuldades nestas formulações relacionam-se ao estabelecimento de propriedades de meio contínuo para fases dispersas, e à descrição de fenômenos de interface entre fases.

Na abordagem Lagrangeana apenas fases macroscopicamente contínuas são equacionadas como meios contínuos, enquanto fases dispersas são equacionadas pela aplicação da segunda lei de Newton individualmente para cada partícula do escoamento (CROWE et al., 1977; DUCKOWICZ, 1980; AGGARWAL et al., 1983). Como na abordagem Euleriana, também na Lagrangeana há grande dificuldade de descrição de fenômenos de interface. Contudo, a maior restrição à abordagem Lagrangeana é que não há, na atualidade, recursos computacionais com velocidade de processamento e capacidade de armazenamento de dados

suficientes que permitam simulações de leitos fluidizados reais, em vista do seu elevadíssimo número de partículas.

Sundaresan (2000) observa que os modelos Eulerianos do contínuo, ou de dois fluidos, representam a alternativa mais prática para a simulação de escoamentos gás-sólido em leitos fluidizados circulantes.

As instabilidades que caracterizam os escoamentos nos reatores de leito fluidizado impedem que regimes permanentes de operação sejam alcançados. Contudo, os denominados regimes pseudo-permanentes ou estatisticamente permanentes são estabelecidos. Nestes regimes os parâmetros relevantes, tais como velocidades e frações de fase, oscilam indefinidamente em torno de valores bem estabelecidos. Evidencia-se que as simulações dos escoamentos em leitos fluidizados devem ser transientes. Valores médios para parâmetros relevantes são determinados integrando-se no tempo, inclusive para comparação com dados experimentais.

A simulação hidrodinâmica de dois fluidos do escoamento gás-sólido em risers de leitos fluidizados circulantes pode ser vista como um desenvolvimento de duas etapas: um estágio inicial transiente seguido por um regime estatisticamente permanente. Visto que a partida em reatores reais é bastante complexa, as simulações usualmente partem de condições iniciais mais simples (e.g. colunas sustentando escoamentos gás-sólido homogêneos ou de gás apenas). Embora não se espere que as condições iniciais afetem os resultados no regime estatisticamente permanente, estas de fato definem os resultados ao longo do estágio inicial transiente. Naturalmente tais previsões transientes são irreais visto serem baseadas em condições iniciais não-realistas, e devem ser vistas tão somente como um caminho rumo ao desejado regime estatisticamente permanente. Não obstante, um considerável esforço computacional é necessário para transpor o estágio inicial transiente das simulações.

Neste trabalho desenvolve-se simulações numéricas da absorção de SO_2 por calcário em leito fluidizado incluindo a resolução do escoamento com modelo de dois fluidos. A seguir apresenta-se discussão de estado da arte pertinente.

2. Estado da arte em simulações de dois fluidos de leitos fluidizados circulantes

Há uma vasta literatura em modelagem e simulação numérica de escoamentos gás-sólido em leitos fluidizados circulantes aplicando modelos de dois fluidos. Revisões de estado da arte podem ser encontradas, entre outros, em Gidaspow (1994), Enwald et al. (1996), Sinclair (1997), Kuipers et al. (1997), Jackson (2000), Cabezas-Gómez (2003) e Georg (2005). Apresenta-se a seguir discussão de aspectos relevantes, e de interesse para o presente trabalho.

Nos modelos de dois fluidos aplica-se hipótese de meio contínuo para fases macroscopicamente contínuas e particuladas. Em todas as formulações a fase gás é tratada como meio contínuo, havendo diferenças quanto ao tratamento do particulado. Em algumas formulações a fase sólido é tratada como meio contínuo, enquanto noutras trata-se a mistura gás-sólido como meio contínuo. Esses dois procedimentos são denominados, respectivamente, modelos A e B (GIDASPOW, 1994). Agrawal et al. (2001) realizaram simulações com os modelos A e B, e não encontraram diferenças significativas nos resultados médios temporais. Isto é, obtiveram os mesmos resultados quer aplicando hipótese de meio contínuo à fase sólido, quer aplicando-a à mistura gás-sólido. Disso pode-se inferir que as hipóteses se equivalem, ou que os modelos de dois fluidos não são suficientemente refinados a ponto de acusar diferença ao se aplicar as diferentes hipóteses. Esta última possibilidade torna clara a necessidade de formulações mais refinadas.

Tem-se evidenciado na literatura que as configurações de escoamento em leitos fluidizados circulantes são definidas sobretudo por interações entre partículas em ambiente turbulento. Sinclair e Jackson (1989) estão entre os primeiros a identificar essa evidência. Observam que os vórtices turbulentos dispersam uniformemente as partículas mais finas que seguem o escoamento do gás, e dispersam de forma não uniforme as partículas mais grosseiras, cuja inércia torna-as capazes de irromper através destes vórtices. O efeito das partículas sobre a estrutura da turbulência não é conhecida. As flutuações de velocidade do gás induzidas por flutuações de velocidade das partículas, e vice-versa, são de fato desconhecidas. Além desses efeitos, um modelo realista para escoamento gás-sólido turbulento deve considerar o arrasto entre fases em virtude da diferença entre suas velocidades médias, e os efeitos das flutuações de velocidade em cada fase, sobre o seu próprio movimento médio, caracterizando tensões

aparentes. Sinclair e Jackson (1989) notam que pouco se conhece sobre o desenvolvimento de estruturas turbulentas em vista dos efeitos acima, fato que impõe considerável arbitrariedade aos modelos vigentes.

Sundaresan (2000) e Agrawal et al. (2001) sugerem cautela ao se fazer analogias com escoamentos turbulentos monofásicos. Observam que em escoamentos gás-sólido diluídos, as pequenas estruturas aparecem pela formação de instabilidades locais e são modificadas pelo cisalhamento de macro escala. Observam que, enquanto em escoamentos turbulentos monofásicos a viscosidade de meso escala é proporcional à taxa de deformação de macro escala, nos escoamentos gás-sólido diluídos esta relação parece ser inversamente proporcional. Agrawal et al. (2001) demonstraram que a turbulência da fase gás tem pouco efeito no escoamento gás-sólido médio. Como viscosidade efetiva do gás consideraram a sua viscosidade molecular, a viscosidade determinada através do modelo de Smagorinsky, e um valor uma ordem superior a esta. Não observaram variações significativas de resultados ao substituir a viscosidade molecular pela de Smagorinsky e, ao assumir viscosidade uma ordem superior a de Smagorinsky, observaram apenas pequenas variações.

Ao contrário do particulado que pode deslizar ao longo das paredes de um riser, o gás não desliza. Com isso gera-se um perfil de velocidades do gás que, devido ao arrasto entre fases, induz um perfil de velocidades à fase sólida. Em consequência desse movimento cisalhante as partículas colidem entre si, gerando flutuações de velocidade na fase sólida. A energia cinética desse movimento aleatório é análoga à energia cinética do movimento aleatório das moléculas de um gás. Esta última define o conceito termodinâmico de temperatura, e a anterior define, em analogia, o conceito de “temperatura granular”. Também em analogia com conceitos termodinâmicos para gases, define-se uma pressão da fase sólida, e uma viscosidade da fase sólida que resiste ao seu cisalhamento. Seguindo a analogia, pressão e viscosidade da fase sólida podem ser relacionadas à “temperatura granular”. A “temperatura granular” pode ser determinada a partir de balanços conservativos de “energia granular” (ou energia pseudo-térmica, em analogia com energia térmica molecular). A consideração dos conceitos anteriores levou ao desenvolvimento da denominada teoria cinética dos escoamentos granulares (TCEG), formulada a partir de analogia com a teoria cinética dos gases densos. Uma descrição detalhada da teoria cinética dos escoamentos granulares pode ser encontrada em Gidaspow (1994). Uma fração significativa da pesquisa já realizada relacionada à TCEG envolve o desenvolvimento de relações de fechamento (LUN et al.,

1984; SINCLAIR; JACKSON, 1989; DING; GIDASPOW, 1990; GIDASPOW et al., 1992; SYAMLAL et al., 1993; NIEUWLAND et al., 1996; HRENYA; SINCLAIR, 1997 entre outros). Boemer et al. (1995) e van Wachem et al. (1999) conduziram estudos comparativos entre diversas relações de fechamento baseadas na TCEG, mostrando diferenças significativas de comportamento entre elas. Isso sugere a necessidade de continuidade das pesquisas teóricas e empíricas na busca de melhores relações de fechamento. Benyahia et al. (2000) enfatizam que a TCEG precisa ser estendida para levar em conta a distribuição granulométrica do particulado, introduzindo termos descritivos das interações entre partículas de diferentes granulometrias. Gidaspow et al. (1996) estenderam a TCEG para misturas binárias de sólidos. Com base neste trabalho, Kuipers et al. (2001) estenderam a TCEG para escoamentos com partículas de vários tamanhos, cada granulometria representando uma fase sólida diferente. Mathiesen et al. (2000) desenvolveram modelo semelhante.

Gidaspow (2001) observa que as equações de momentum acopladas para fases fluidas e particuladas dos modelos de dois fluidos parecem ser capazes de prever turbulência em escoamentos bifásicos. Pita e Sundaresan (1991) observam que modelos baseados na TCEG incluindo tratamento adicional para turbulência não são adequados por mostrarem uma indevida supersensibilidade a colisões inelásticas. Esta sensibilidade demasiada não pode ser minimizada sem que outros aspectos do escoamento sejam prejudicados. Hrenya e Sinclair (1997) mostram que a consideração de efeitos turbulentos na fase particulada em relações de fechamento resultantes da TCEG eliminam essa supersensibilidade, gerando resultados mais adequados. Observam, entretanto, que há ainda muito a fazer, pois as relações em uso para a descrição da turbulência da fase sólida são de natureza algo especulativas em vista da falta de informação a respeito desse efeito.

Sundaresan et al. (2001) atribuem a segregação lateral em risers de leitos fluidizados circulantes às flutuações associadas a meso estruturas (clusters e streamers). Estudaram a origem e a hierarquia das instabilidades que levam à formação de meso estruturas em escoamentos gás-sólido. Observaram que em leitos fluidizados densos perturbações unidimensionais (traveling waves) emergem do estado de fluidização uniforme quando efeitos inerciais superam as tensões da fase sólida. As perturbações unidimensionais dão origem a perturbações bidimensionais, consideradas reminiscências de bolhas. Glasser et al. (1998) mostraram que estas perturbações também existem em leitos diluídos, e podem ser continuamente monitoradas desde o estado de leito denso até o estado de leito diluído. De

acordo com Sundaresan et al. (2001), dois mecanismos dão origem as meso estruturas em escoamentos gás-sólido diluídos: um associado com colisões inelásticas entre partículas, e outro associado com o movimento relativo entre o gás e as partículas. Agrawal et al. (2001) observam que as estruturas coerentes surgem em consequência de instabilidades associadas ao movimento relativo entre as fases gás e sólido, e devido à dissipação da energia associada aos movimentos de flutuação das partículas causada por choques inelásticos e amortecimento viscoso. Aplicando condições de contorno periódicas, Agrawal et al. (2001) demonstram que efeitos de parede não são necessários para a formação de estruturas coerentes, e que malhas numéricas progressivamente mais refinadas permitem captar estruturas progressivamente mais finas.

Sundaresan (2000) classifica as estruturas coerentes (clusters, strands, streamers) que se desenvolvem nos escoamentos gás-sólido em leitos fluidizados circulantes, de acordo com suas dimensões, em macro (ordem cm-m), meso (ordem mm-cm) e micro estruturas (ordem μm -mm). Observa que, embora as macro estruturas determinem as condições de transporte nos processos, está demonstrado que macro estruturas evoluem a partir de meso estruturas, e estas, possivelmente, evoluem de micro estruturas. As micro estruturas estão associadas aos padrões de escoamento ao nível de partículas individuais, e isto não está resolvido nas análises de dois fluidos. Em geral, os procedimentos de médias preservam a possibilidade de detecção de macro estruturas, filtrando os efeitos de meso escala. Contudo, é possível que malhas suficientemente refinadas (cerca de uma ordem superiores ao tamanho de partícula) viabilizem observações na meso escala, permitindo avaliações quanto a evolução de micro estruturas (SUNDARESAN, 2000). As simulações com modelos de dois fluidos têm produzido descrições qualitativas corretas do escoamento através da detecção de macro e meso estruturas. Entretanto, modelos ou relações de fechamento que permitam simulações quantitativamente confiáveis ainda não são disponíveis. Não obstante, há evidente necessidade de formulações matemáticas bem-postas. Drew (1983) observa que, embora as instabilidades nos resultados possam ser fisicamente realistas, o sistema torna-se mal-posto quando o modelo não trata corretamente fenômenos de pequena escala.

Há clara necessidade da busca de modelos de fechamento que considerem os efeitos das menores estruturas dos escoamentos. Nesse sentido, um procedimento comum consiste em simular os processos aplicando malhas grosseiras, que permitem a captura de macro estruturas, e incorporar os efeitos de estruturas menores não capturadas através de relações de

fechamento. Estas são obtidas de análises adicionais em malhas refinadas. Agrawal et al. (2001) observam que meso estruturas são demasiado pequenas para serem capturadas em simulações de reatores de escala real (os grandes domínios inviabilizam a aplicação de malhas numéricas suficientemente refinadas). Demonstram que simulações em malhas computacionais grosseiras, que filtram estruturas sub-malha, superestimam efeitos de arrasto, e subestimam os efeitos das viscosidades efetivas das fases gás e sólido. Concluem que relações sub-malha são necessárias para recuperar efeitos de meso estruturas excluídos pela aplicação das usuais malhas numéricas grosseiras. A partir de resultados de simulação com modelo de dois fluidos em sub-malha, os autores propuseram uma primeira aproximação de modelo sub-malha para arrasto, que no entanto é reconhecida como específica, crua e apenas plausível. Andrews IV et al. (2005) realizaram simulação sub-malha semelhante à de Agrawal et al. (2001). A partir de seus resultados propuseram relações de fechamento sub-malha para arrasto, viscosidade e pressão de fase sólida. Como a proposição de Agrawal et al. (2001), as relações de Andrews IV et al. (2005) são também específicas, válidas apenas para o caso considerado. Andrews VI et al. (2005) aplicaram suas relações sub-malha em simulação de domínio real utilizando malha numérica grosseira. Os resultados foram tratados como primeira aproximação, inadequados para comparação com dados experimentais. A observação de Sundaresan (2000), de que relações adequadas originadas de modelos sub-malha permanecem por serem desenvolvidas, mantém-se atual.

2.1. Simulações em regime estatisticamente permanente

A literatura apresenta simulações de dois fluidos de escoamentos gás-sólido em risers onde também são apresentados dados relativos a estágios iniciais transientes. Agrawal et al. (2001) realizou simulações em domínios bi-dimensionais reduzidos (5 cm x 20 cm) aplicando malha computacional refinada (1 mm x 1 mm). Partindo de condição inicial de escoamento com sólido uniformemente distribuído, as simulações tipicamente atingiram regime estatisticamente permanente após percorrerem período transiente de cerca de 50 unidades de tempo adimensional (unidade definida como a velocidade terminal de uma partícula dividida pela aceleração da gravidade). Considerando outras 50 unidades de tempo adimensional tomadas dentro do regime estatisticamente permanente para gerar resultados médios temporais (julgados suficientes pelos autores), nota-se que a necessidade de solução para o

estágio inicial transiente duplica o tempo total de simulação. Andrews IV et al. (2005) simularam o mesmo caso de Agrawal et al (2001), porém em domínio menor (2 cm x 8 cm) aplicando malha computacional ainda mais refinada (0,625 x 0,625 mm). Encontraram que mais de 100 unidades de tempo adimensional foram necessárias para superar o estágio inicial transiente. Considerando novamente 50 unidades de tempo adimensional para gerar resultados médios temporais dentro da região estatisticamente permanente, observa-se que a solução do estágio inicial transiente triplica o tempo total de simulação.

Mathiesen et al. (2000) realizaram simulações de escoamentos gás-sólido em risers, em coluna de 2 m de altura e 0,2 m de diâmetro, aplicando malha bi-dimensional grosseira (5,4 mm x 19,8 mm). Suas simulações partiram de escoamentos com sólido uniformemente distribuído. Os autores encontraram que cerca de 10 segundos de fluidização real foram necessários para alcançar o regime estatisticamente permanente. Consideraram períodos entre 16 e 20 segundos de fluidização real dentro da região estatisticamente permanente para gerar resultados médios temporais. Portanto, neste caso, a necessidade de solução para o estágio inicial transiente implica em aumentar o tempo total de simulação em pelo menos um terço. Zhang e VanderHeyden (2001) simularam o escoamento gás-sólido em risers numa coluna de seção quadrada de 0,2 m x 0,2 m, e 2 m de altura. Aplicaram malhas grosseiras bi e tri-dimensionais (6,45 mm x 13,33 mm; e 6,45 mm x 6,45 mm x 13,33 mm). As simulações partiram de coluna sustentando mistura uniforme estática de gás e sólido. Na simulação tri-dimensional o regime estatisticamente permanente foi alcançado em cerca de 5 segundos de fluidização real. No caso bi-dimensional foram necessários 8 segundos para alcançar uma situação próxima ao regime estatisticamente permanente (de fato, rigorosamente este regime não foi estabelecido em 20 segundos de simulação). Aparentemente, em todos os casos, resultados médios temporais foram estabelecidos para períodos entre 10 e 15 segundos dentro do regime estatisticamente permanente. Assim, o estágio inicial transiente das simulações respondeu por algo entre 20 e 50 % do tempo total de simulação.

Tsuo e Gidaspow (1990) desenvolveram simulações do escoamento gás-sólido em diferentes risers. Num primeiro caso consideraram domínio bi-dimensional de 5,56 m de altura e 0,762 m de largura, e aplicaram malha computacional grosseira de 7,62 mm x 76,2 mm. Num segundo caso o domínio foi de 0,305 m x 11,2 m, e a malha computacional, ainda mais grosseira, foi de 10,167 mm x 304 mm. Em ambos os casos, cerca de 11 segundos de fluidização real foram necessários para a simulação atingir, na saída, o fluxo mássico de

sólido imposto na entrada. Cabezas-Gómez e Milioli (2003) realizaram a mesma simulação do primeiro caso de Tsuo e Gidaspow (1990), exceto que os cálculos foram executados até 100 segundos de fluidização real. Foi mostrado que o regime estatisticamente permanente foi atingido somente após 10 segundos de fluidização. Considerando outros 10 segundos dentro do regime estatisticamente permanente para geração de resultados médios temporais, uma simulação completa requereria 20 segundos de tempo real de fluidização. Nesse caso, o estágio inicial transiente seria responsável por metade do tempo total de simulação.

Sabe-se que simulações transientes do escoamento gás-sólido em risers, em computadores atuais, podem facilmente requerer meses de processamento computacional. Na verdade, meses podem ser necessários apenas para transpor o estágio inicial transiente das simulações. Nas simulações tri-dimensionais em malha grosseira de Zhang e VanderHeyden (2001), 101 dias de processamento computacional foram necessários para gerar 21 segundos de fluidização real. Cerca de um terço destes dias foi gasto apenas para transpor o estágio inicial transiente da simulação. Malhas computacionais mais refinadas aplicadas à simulação de Zhang e VanderHeyden (2001) poderiam facilmente levar o tempo de processamento computacional para anos. A propósito, esta é a razão para a realização de simulações bi-dimensionais para escoamentos que são claramente tri-dimensionais na sua natureza, como é o caso dos escoamentos gás-sólido em risers. Agrawal et al. (2001) observou que uma simulação tri-dimensional requer aproximadamente 100 vezes mais tempo de processamento computacional do que uma simulação bi-dimensional correspondente (e.g. malha bi-dimensional 1 mm x 1mm, e tri-dimensional 1 mm x 1 mm x 1mm).

2.2. Simulações incluindo absorção de SO₂ por calcário

Na queima de combustíveis contendo enxofre, tais como carvões minerais e óleos pesados, produz-se significativas emissões de SO₂, um dos gases causadores da chuva ácida. A exploração termoelétrica de combustíveis contendo enxofre é bastante intensa, e procedimentos de dessulfuração de gases da combustão são empregados para minimizar impactos ambientais. Nos combustores de leito fluidizado, inclusive circulantes, calcário é diretamente injetado no processo para absorção do SO₂ in loco, no mesmo ambiente em que a combustão se desenvolve.

Há uma significativa literatura experimental em absorção de SO_2 por calcário em reatores de leito fluidizado (ver por exemplo YATES, 1983; BASU; FRASER, 1991; BRERETON, 1997; DA SILVA, 1994; CAMARGO, 2001; CRNKOVIC, 2003; ÁVILA, 2005; TURESO, 2005). Há também considerável literatura em modelagem fenomenológica em leitos fluidizados incluindo processos reativos heterogêneos (ver por exemplo GRACE; LIM, 1997; WANG et al., 1994; OVERTURF; REKLAITIS, 1983; SOUZA-SANTOS, 1989; MILIOLI, 1991).

A literatura em modelagem da absorção de SO_2 por calcários em leitos fluidizados incluindo a simulação do escoamento com modelo de dois fluidos, por outro lado, é muito escassa. De fato, os únicos dados de que se tem conhecimento são devidos a Therdthianwong (1994). Este autor simulou a absorção de SO_2 por calcário calcinado (CaO) em um riser de proporções comerciais, com 3 m de diâmetro e 15 m de altura. Considerou particulado calcário de 210 μm de diâmetro, fluxo de sólido de cerca de 510 $\text{kg/m}^2\text{s}$ para velocidade de gás na alimentação de 5 m/s, e coeficiente de taxa de sulfatação de calcário constante de 2,018 $\text{m}^3/\text{kmol.s}$. Considerou domínio Cartesiano bi-dimensional de 3 m x 15 m, e aplicou malha computacional extremamente grosseira (300 mm x 536 mm). As predições mostram perfis temporais médios de concentração de SO_2 ao longo da altura da coluna coerentes com observações empíricas. Contudo, não foram feitas comparações com dados experimentais. O autor observou maiores remoções de SO_2 ao longo das paredes em relação ao centro da coluna. Isso deveu-se à maior concentração de sólidos e ao seu maior tempo de residência nestas regiões devido às menores velocidades do gás. Observou que a remoção de SO_2 ao longo da coluna aumenta para menor velocidade de gás na entrada, conseqüência do maior tempo de residência no reator.

3. Proposta de pesquisa, objetivos e meta

A proposta de pesquisa neste trabalho consiste no desenvolvimento de simulações numéricas de processos em reatores de leito fluidizado circulante aplicando modelagem de dois fluidos. Considera-se situações típicas de combustão em leito fluidizado circulante de carvão mineral. Como processo reativo considera-se a absorção de SO_2 por calcário. Realiza-se análises hidrodinâmicas e de efeitos hidrodinâmicos sobre o processo reativo em questão. Desenvolve-se simulações de regimes permanente e transiente. Soluções de regime permanente são obtidas para o estágio inicial transiente das simulações. Mostra-se que estas soluções, embora inexatas, permitem superar a etapa transiente das simulações. Permitem, portanto, iniciar corridas transientes diretamente na região de escoamento estatisticamente permanente. Mostra-se que tal procedimento significa grande ganho em termos de tempo de processamento computacional.

Os objetivos de pesquisa consistem principalmente na geração de conhecimento relacionado à aplicação de modelos de dois fluidos para as descrições hidrodinâmica e reativa de leitos fluidizados circulantes. Busca-se contribuir com a discussão acerca da formulação de melhores modelos físicos, visando obter resultados mais acurados.

Como meta de longo prazo busca-se contribuir para a construção de ferramentas acuradas para projeto e desenvolvimento de reatores, aplicando mecânica dos fluidos computacional. Tais ferramentas podem representar reduções altamente significativas nos custos extremamente elevados que caracterizam os desenvolvimentos em plantas de demonstração.

4. Metodologia

Nesse trabalho desenvolve-se simulações numéricas de dois fluidos utilizando o software CFX5.7. Descreve-se a seguir os fundamentos e as formulações hidrodinâmicas e reativas do modelo de dois fluidos utilizado, incluindo o processo reativo de interesse (absorção de dióxido de enxofre por calcário). Descreve-se também a metodologia e o procedimento numérico implementados no CFX5.7, e a infra-estrutura computacional utilizada.

4.1. Modelo hidrodinâmico de dois fluidos

Os modelos de dois fluidos para escoamentos multifásicos, incluindo escoamentos gás-sólido, baseiam-se em equações conservativas para as diferentes fases, que são tratadas como meios contínuos inter-penetrantes (ver por exemplo, ANDERSON; JACKSON, 1967; ISHII, 1975; DREW, 1983; GIDASPOW, 1994; ENWALD et al., 1996). Inicialmente, aplica-se balanços conservativos integrais sobre volumes de controle incluindo todas as fases. Os teoremas de Leibniz e Gauss são aplicados aos balanços integrais dando origem a equações conservativas locais instantâneas para as diferentes fases, e a condições de salto descrevendo interações de interface entre fases. Então, procedimentos de médias são aplicados para obtenção de equações médias. No Apêndice A apresenta-se uma descrição destes desenvolvimentos.

A obtenção de equações conservativas em fluidos baseia-se nas hipóteses fundamentais de meio contínuo e equilíbrio termodinâmico. Em vista da hipótese de meio contínuo, as equações conservativas não podem reconhecer diferentes fases, e não há como levar em conta descontinuidades de interface. Evidentemente, efeitos de interface podem ser considerados através de condições de contorno. No entanto, os contornos entre fases em escoamentos multifásicos dispersos como o gás-sólido são definidos em torno de elevadíssimos números de partículas, e são altamente dinâmicos e caóticos. Devido a isso, formulações eventuais locais instantâneas tornam-se inaplicáveis. Os procedimentos de médias são introduzidos para contornar esta dificuldade. Os efeitos de muitas interfaces entre fases contínuas são tratados em média, como um efeito de campo descrevendo a ação de uma fase sobre outras. Diferentes procedimentos de médias são aplicados: médias volumétricas, médias temporais e médias estatísticas (ensemble averaging). A rigor, todos os procedimentos deveriam ser aplicados

simultaneamente. Contudo, é freqüentemente assumida a equivalência dos três procedimentos de médias (hipótese da ergodicidade), e as equações médias finais independem do procedimento de médias aplicado. Seja qual for o procedimento ou procedimentos de médias aplicados, são geradas equações conservativas médias que são matematicamente similares às equações eventuais locais instantâneas, exceto pela presença de termos de campo levando em conta interações entre fases.

Quando as equações conservativas médias são resolvidas através de métodos numéricos, cuidado é necessário para não violar a hipótese de meio contínuo. Isso significa resolvê-las em volumes de controle finitos que possam conter número significativo de partículas no espaço, no tempo, e através de diferentes eventos. Evidentemente, equações diferenciais conservativas médias permitem obter soluções para volumes de controle tão pequenos quanto se queira ou se possa resolver com os recursos computacionais disponíveis, mesmo que estes violem a hipótese do contínuo. Contudo, tais soluções seriam fisicamente irreais posto que o modelo se tornaria inválido por violar a hipótese de meio contínuo.

Para completar os modelos de dois fluidos, leis de fechamento são necessárias para lidar com parâmetros e coeficientes presentes nas equações conservativas médias. Além disso deve-se especificar condições iniciais e de contorno. As leis de fechamento provêm correlações e dados para o tensor das tensões viscosas, viscosidades, pressões e termos de arrasto. Todas as fases são comumente tratadas como fluidos Newtonianos-Stokesianos. Viscosidades de fases sólidas são obtidas empiricamente ou de correlações semi-empíricas. A pressão de fases sólidas é geralmente determinada tendo em vista três diferentes efeitos: colisões entre partículas, transferência de momentum devido a flutuações de velocidade de partículas, e efeito da pressão do gás. O segundo efeito é geralmente desprezado, e o efeito de colisões entre partículas é modelado em termos de um módulo de elasticidade correlacionado empiricamente. Alternativamente, pressão e viscosidades de fases sólidas podem também ser obtidas em função de uma temperatura granular. Esta é determinada através da denominada teoria cinética dos escoamentos granulares (TCEG), desenvolvida por analogia com a teoria cinética dos gases densos (JENKINS; SAVAGE, 1983; LUN et al., 1984). Embora seja uma direção de pesquisa promissora, a teoria cinética dos escoamentos granulares deve ser aplicada com cuidado visto que escoamentos granulares não ocorrem em condições de equilíbrio termodinâmico (MAYOR et al., 2005). As transferências de momentum entre fases gasosas e sólidas são obtidas de correlações empíricas, através de forças de arrasto de

interface. Condições de contorno de parede para fases sólidas são geralmente especificadas como de deslizamento livre ou de deslizamento parcial. Agrawal et al. (2001) observam que condições de contorno de parede para velocidade axial, para simulações em malhas computacionais grosseiras, permanecem um desafio. Contudo, sustentam que as condições de deslizamento livre parecem adequadas, especialmente em colunas largas, onde os efeitos de parede contribuem minimamente para o escoamento.

Seguindo o procedimento acima, duas formulações diferentes têm sido aplicadas pela maioria dos pesquisadores. Na primeira, equações conservativas são diretamente geradas para todas as fases, gasosas e particuladas. Na segunda formulação, equações conservativas são geradas para fases gasosas e para a mistura; a partir destas obtém-se equações conservativas para fases particuladas. Gidaspow (1994) denominou estas formulações de modelos A e B respectivamente. A diferença essencial entre as duas formulações é que no modelo A considera-se fases gasosas e particuladas como meios contínuos, enquanto no modelo B são considerados meios contínuos fases gasosas e misturas. Drew (1983) e Agrawal et al. (2001) observam que o modelo de dois fluidos onde todas as fases são tratadas como meios contínuos (modelo A) torna-se mal-posto quando invíscido.

Apresenta-se a seguir a formulação do modelo hidrodinâmico de dois fluidos que é usada neste trabalho (modelo hidrodinâmico A):

Continuidade da fase gás

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \alpha_g) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_g \alpha_g \vec{U}_g) = 0 \quad (1)$$

Continuidade da fase sólido

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s \alpha_s) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_s \alpha_s \vec{U}_s) = 0 \quad (2)$$

Momentum da fase gás

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \alpha_g \vec{U}_g) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_g \alpha_g \vec{U}_g \vec{U}_g) = -\vec{\nabla}(\alpha_g P_g) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_g \vec{\tau}_g) + \rho_g \alpha_g \vec{F}_g + \beta(\vec{U}_s - \vec{U}_g) \quad (3)$$

Momentum da fase sólido

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s \alpha_s \vec{U}_s) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_s \alpha_s \vec{U}_s \vec{U}_s) = -\vec{\nabla}(\alpha_s P_s) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_s \vec{\tau}_s) + \rho_s \alpha_s \vec{F}_s - \beta(\vec{U}_s - \vec{U}_g) \quad (4)$$

Tensor das tensões viscosas para a fase k

$$\vec{\tau}_k = \mu_k [\vec{\nabla} \vec{U}_k + (\vec{\nabla} \vec{U}_k)^T] + \lambda_k (\vec{\nabla} \cdot \vec{U}_k) \vec{I} \quad (5)$$

onde

$$\mu_k = \text{constante} \quad (6)$$

$$\lambda_k = -\frac{2}{3} \mu_k \quad (7)$$

Continuidade volumétrica

$$\alpha_g + \alpha_s = 1 \quad (8)$$

Pressão da fase sólido

$$\vec{\nabla}(\alpha_s P_s) = -G \vec{\nabla} \alpha_s + \vec{\nabla}(\alpha_s P_g) \quad (9)$$

onde

$$G = \exp[-20(\alpha_g - 0.62)] \quad (10)$$

(GIDASPOW; ETTEHADIEH, 1983)

Forças de corpo externas por unidade de massa

$$\vec{F}_g = \vec{g} \quad (11)$$

$$\vec{F}_s = \frac{\rho_s - \rho_g}{\rho_s} \vec{g} \quad (12)$$

Equações de estado

$$\rho_g = \text{constante} \quad (13)$$

$$\rho_s = \text{constante} \quad (14)$$

Função de arrasto na interface entre fases (procedimento de GIDASPOW, 1994)

$$\beta = 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g (d_p \varphi_s)^2} + 1.75 \frac{\rho_g \alpha_s |v_g - v_s|}{(d_p \varphi_s)} \quad \text{para } \alpha_s > 0.2 \quad (15)$$

(ERGUN, 1952)

$$\beta = \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{\rho_g \alpha_s \alpha_g |v_g - v_s|}{(d_p \varphi_s)} \alpha_g^{-2.65} \quad \text{para } \alpha_s \leq 0.2 \quad (16)$$

(WEN; YU, 1966)

onde

$$C_{Ds} = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 \cdot Re_p^{0.687}) & \text{for } Re_p < 1000 \\ 0.44 & \text{for } Re_p \geq 1000 \end{cases} \quad (17)$$

(ROWE, 1961)

$$Re_p = \frac{|v_g - v_s| d_p \rho_g \alpha_g}{\mu_g} \quad (18)$$

A pressão e a viscosidade de fase sólido, e a função de arrasto na interface entre fases, são parâmetros críticos nas formulações de dois fluidos. Estes conferem caráter realista ao modelo teórico conservativo pois descrevem o comportamento físico da fase particulada tratada como meio contínuo. Destaca-se a seguir os procedimentos para sua obtenção.

4.1.1. Pressão da fase sólido

A literatura descreve dois procedimentos diferentes para obtenção do gradiente de pressão da fase sólido que aparece na equação de conservação de momentum da fase sólido. O primeiro procedimento é teórico, e baseia-se na Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares. O segundo procedimento, denominado tradicional, é baseado em medições experimentais e resulta em formulações empíricas ou semi-empíricas.

Neste trabalho aplica-se o procedimento tradicional. O gradiente de pressão da fase sólido é considerado como sendo a soma de três efeitos: um efeito cinético, um efeito colisional entre

as partículas, e um efeito devido à influência da presença da fase gás sobre o particulado. Assim, formula-se

$$P_s = P_{s \text{ cinético}} + P_{s \text{ colisional}} + P_g \quad (19)$$

De forma que

$$\vec{\nabla}(\alpha_s P_s) = \vec{\nabla}(\alpha_s P_{s \text{ cinético}}) + \vec{\nabla}(\alpha_s P_{s \text{ colisional}}) + \vec{\nabla}(\alpha_s P_g) \quad (20)$$

Dependendo do seu sinal, o gradiente de pressão do gás pode representar um efeito de impulso ou amortecimento sobre o particulado, causando assim aumento ou diminuição do gradiente de pressão do sólido. O termo devido ao efeito cinético, que representa o transporte de momentum causado por flutuações de velocidade das partículas, é considerado de ordem inferior e é comumente desprezado. O termo colisional constitui-se no efeito mais importante na definição do gradiente de pressão da fase sólido, e resulta de duas formas distintas de interação partícula-partícula. A primeira é descrita como uma interação de contato de longa duração, como ocorre em leitos fixos, e é análoga à pressão hidrostática em fluidos. A segunda forma de contato é descrita como uma interação de curta duração, na forma de impactos colisionais, presentes apenas em estados fluidizados. Campbell e Wang (1991) apresentam uma discussão relativa à natureza do gradiente de pressão colisional do sólido, e descrevem técnicas experimentais para sua medição.

A literatura apresenta vários modelos para o gradiente de pressão colisional baseados na seguinte formulação (MASSOUDI et al., 1992)

$$\vec{\nabla}(\alpha_s P_{s \text{ colisional}}) = -G(\alpha_g) \vec{\nabla}(\alpha_g) \quad (21)$$

A função $G(\alpha_g)$ é conhecida como módulo de elasticidade da fase sólido. De acordo com Pritchett et al (1978), $G(\alpha_g)$ é definida como

$$G(\alpha_g) = \frac{d\sigma}{d\alpha_g} \quad (22)$$

onde σ é a tensão normal colisional das partículas. Orr Jr. (1966) estabeleceu experimentalmente que o logaritmo da pressão exercida pelo sólido consolidado (assentado em leito fixo, equivalente à pressão hidrostática num fluido) é linearmente proporcional ao volume ocupado pelas partículas. Com base neste fato, Bouillard et al. (1989) propuseram a seguinte correlação para $G(\alpha_g)$

$$\frac{G(\alpha_g)}{G_0} = \exp[-c(\alpha_g - \alpha_g^*)] \quad (23)$$

Nesta equação c é descrito como um módulo de compactação do sólido, e representa a inclinação da reta $\ln(G) \times \alpha_g$. α_g^* representa a fração volumétrica de gás no estado de máximo empacotamento. G_0 é um fator dimensional denominado módulo de elasticidade de referência, e é geralmente assumido igual a 1 Pa, por conveniência. De acordo com esta formulação, frações volumétricas de gás mais baixas e, conseqüentemente, frações volumétricas de sólido mais altas, geram $G(\alpha_s)$ maiores. Valores de $G(\alpha_s)$ suficientemente elevados impedem compactações irreais. Os valores de c e α_g^* são calibrados experimentalmente. Seguindo Bouillard et al (1989), no presente trabalho empregou-se c igual a 20 e α_g^* igual a 0,62, conforme estabelecido em Gidaspow e Ettehadieh (1983). Estes são valores adequados para leitos fluidizados de baixa densidade, como aqueles considerados neste trabalho.

4.1.2. Viscosidade da fase sólido

Sinclair (1997) observa que há três efeitos principais que definem as viscosidades das fases em escoamentos gás-sólido: efeito cinético, efeito de contato, e efeito de amortecimento. O efeito cinético age de maneira semelhante nas fases gás e partícula. Os movimentos médio e randômico das moléculas do gás, bem como, os movimentos médio e randômico do particulado, produzem transferência de momentum entre regiões próximas com diferentes velocidades. O efeito cinético é significativo no movimento microscópico de moléculas (forças eletromagnéticas), e é desprezível no movimento macroscópico de partículas. O efeito

de contato também ocorre de maneira semelhante nas duas fases. Moléculas próximas, ou partículas próximas, entram em contato direto (tangencial ou choques). Devido à grande distância média entre moléculas, para a fase gás este efeito é desprezível quando comparado ao efeito cinético. Por outro lado, para a fase partícula o efeito de contato é dominante na definição da viscosidade da fase. O efeito de amortecimento é relevante apenas para a fase sólido, e representa o mecanismo de amortecimento do movimento das partículas sólidas devido à presença do gás. Este efeito contabiliza a resistência imposta pela fase fluida ao movimento da fase particulada.

Há disponíveis na literatura inúmeros modelos para a viscosidade de misturas gás-sólido. A viscosidade da mistura é obtida por ponderação entre as viscosidades das fases gás e sólido. Assim, conhecido o valor da viscosidade do gás, a partir de um modelo para viscosidade da mistura pode-se obter um modelo para a viscosidade do sólido. Enwald (1996) apresenta algumas correlações encontradas na literatura para a viscosidade de misturas gás-sólido..

Um procedimento semi-empírico usado para determinação da viscosidade da fase sólido baseia-se na aplicação de balanços de momentum para a mistura na parede. No equacionamento despreza-se os efeitos viscosos e de campo para a fase gás, já que a viscosidade e a densidade desta fase são de ordem inferior em relação às respectivas propriedades da fase sólido. Tsuo (1989) e Miller (1991), entre outros, seguiram este procedimento gerando expressões para a determinação da viscosidade da fase sólido. Neste trabalho segue-se o desenvolvimento de Tsuo (1989), que obteve

$$\mu_s = \left(\frac{I}{\alpha_{s \text{ parede}} \left(-\frac{\partial v_s}{\partial r} \right)_{\text{parede}}} \right) \frac{D}{4} \left[\left(\frac{\Delta P}{L} \right) - g \alpha_s \rho_s - f_p \right] \quad (24)$$

onde f_p é um fator relacionado à força de fricção do sólido na parede. Tsuo utilizou os dados empíricos de Luo (1987) para determinar um valor médio efetivo de viscosidade de fase sólido para um caso específico (caso B hidrodinâmico descrito nas Tabelas 2 e 3 da seção 5.3). A Tabela 1 mostra os dados utilizados e o resultado obtido por Tsuo.

Tabela 1. Cálculo da viscosidade de sólido de Tsuo (1989) usando os dados empíricos de Luo (1987).

$\alpha_{s\text{ parede}}$ [m^3 / m^3]	$\Delta P/L$ [N/m^3]	$g\alpha_s\rho_s$ [N/m^3]	$(-\partial v_s/\partial r)_{\text{parede}}$ [s^{-1}]	f_p [N/m^3]	D [m]	μ_s [$Pa.s$]
0,0423	1018	410,8	52,2	15,63	0,0762	0,509

O valor de viscosidade de sólido obtido por Tsuo é utilizado para todas as fases e espécies sólidas consideradas no presente trabalho. Embora haja muitas correlações para a viscosidade de sólido na literatura, estas são válidas apenas para casos específicos (correlações empíricas e semi-empíricas), ou são correlações puramente teóricas obtidas da teoria cinética dos escoamentos granulares. Análises comparativas de tais correlações mostram grandes diferenças para um mesmo caso (ENWALD, 1996; CABEZAS-GÓMEZ, 2003). Assim, neste trabalho, optou-se pela aplicação de uma viscosidade de sólido efetiva constante, porém com base empírica.

4.1.3. Função de arrasto na interface

Neste trabalho utiliza-se o modelo de arrasto de Gidaspow (GIDASPOW; ETTEHADIEH, 1983; GIDASPOW, 1994). O modelo é obtido de um balanço de momentum na direção axial para a fase gás, para escoamento em regime permanente, no qual se despreza efeitos viscosos, gravitacionais e de aceleração. Sob estas condições obtém-se

$$\alpha_g \frac{\partial P}{\partial y} - \beta (v_g - v_s) = 0 \quad (25)$$

Introduzindo nesta expressão a equação de Ergun (ERGUN, 1952), obtém-se uma expressão para a função de arrasto. Note-se que a equação de Ergun estabelece a perda de pressão no escoamento de um gás através de leitos fixos e fluidizados densos, de forma que a função de arrasto obtida é válida para frações volumétricas de sólidos elevadas. A equação de Ergun, na forma apresentada em Kunii e Levenspiel(1991), estabelece

$$\frac{\Delta P}{\Delta y} = 150 \frac{\alpha_s^2}{\alpha_g^3} \frac{\mu_g U_0}{(\phi_s d_p)^2} + 1,75 \frac{\alpha_s \rho_g U_0^2}{\alpha_g^3 \phi_s d_p} \quad (26)$$

onde $U_0 = \alpha_g (v_g - v_s)$. Substituindo a Equação (26) na Equação (25) obtém-se

$$\beta = 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g (d_p \phi_s)^2} + 1,75 \frac{\rho_g \alpha_s |v_g - v_s|}{(d_p \phi_s)} \quad (27)$$

Gidaspow (1994) aplicou a Equação (27) para frações volumétricas de sólido superiores a 0,2. Para frações volumétricas de sólido inferiores a 0,2 Gidaspow utilizou a expressão desenvolvida por Wen e Yu (1966) para perda de pressão em escoamentos diluídos. Wen e Yu consideraram que a força de arrasto atuando sobre uma partícula num leito fluidizado é o resultado do produto de um coeficiente de arrasto pela força de arrasto sobre uma única partícula esférica isolada, ou seja

$$F_k = f(\alpha_g) F_{ks} \quad (28)$$

sendo a força de arrasto sobre uma única esfera dada por

$$F_{ks} = \frac{\pi d_p^2 \rho_f V^2}{g_c} (3 Re_p^{-1} + 0,45 Re_p^{-0,313}) \quad (29)$$

De acordo com Gidaspow e Ettehadieh (1983), das Equações (25) e (29) obtém-se uma função de arrasto baseada na correlação de Wen e Yu dada por

$$\beta = \frac{3}{4} C_D \frac{\alpha_g |v_g - v_s| \rho_g (1 - \alpha_g)}{d_p \phi_s} f(\alpha_g) \quad (30)$$

onde C_D é um coeficiente de arrasto, cujo valor é função do número de Reynolds baseado no diâmetro de partícula. Gidaspow (1994) determina C_D através das correlações de Rowe (1961),

$$C_D = \frac{24}{Re_p} (1 + 0,15 Re_p^{0,687}) \quad Re_p < 1000 \quad (31)$$

$$C_D = 0,44 \quad Re_p \geq 1000 \quad (32)$$

$$\text{com } Re_p = \frac{\alpha_g \rho_g |v_g - v_s| d_p}{\mu_g}.$$

A função $f(\alpha_g)$ é uma correção da lei de Stokes para levar em conta a presença de outras partículas no escoamento. Gidaspow e Ettehadieh (1983) assumiram

$$f(\alpha_g) = \alpha_g^{-2,65} \quad (33)$$

4.2. Modelo reativo de dois fluidos

O modelo reativo de dois fluidos utilizado neste trabalho inclui o modelo hidrodinâmico de dois fluidos descrito na seção anterior. Em adição, inclui equações de conservação de massa ou de continuidade de espécies químicas dentro de cada fase. Observe-se que devido à possibilidade de reações químicas heterogêneas, pode ocorrer troca de massa entre diferentes espécies de diferentes fases. Também devido às reações químicas, termos adicionais surgem nas equações de continuidade de fase e de momentum, levando em conta a produção ou consumo de diferentes espécies dentro de diferentes fases.

O processo reativo considerado neste trabalho é a absorção de dióxido de enxofre por calcário ($CaO + SO_2 + \frac{1}{2}O_2 \xrightarrow{K} CaSO_4$). Assume-se coeficiente de taxa de reação (K) constante. No modelo, a fase sólido compõe-se de calcário calcinado (CaO), sulfato de cálcio ($CaSO_4$) e sílica inerte (SiO_2). O SiO_2 simula a presença física do carvão e cinzas no processo de combustão em leito fluidizado. A fase gás é composta de ar (mistura de N_2 e O_2) e dióxido de enxofre (SO_2). A formulação do modelo reativo de dois fluidos usada neste trabalho é a seguinte:

Continuidade da fase gás

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \alpha_g) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_g \alpha_g \vec{U}_g) = \sum_i R_{i,g} \quad (34)$$

Continuidade da fase sólido

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s \alpha_s) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_s \alpha_s \vec{U}_s) = \sum_j R_{j,s} \quad (35)$$

Continuidade para espécies i da fase gás

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \alpha_g Y_{i,g}) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_g \alpha_g Y_{i,g} \vec{U}_g) = \vec{\nabla} \cdot (D_{i,g} \vec{\nabla} Y_{i,g}) + R_{i,g} \quad (36)$$

Continuidade para espécies j da fase sólido

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s \alpha_s Y_{j,s}) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_s \alpha_s Y_{j,s} \vec{U}_s) = \vec{\nabla} \cdot (D_{i,s} \vec{\nabla} Y_{j,s}) + R_{j,s} \quad (37)$$

Momentum da fase gás

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \alpha_g \vec{U}_g) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_g \alpha_g \vec{U}_g \vec{U}_g) = -\vec{\nabla}(\alpha_g P_g) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_g \vec{\tau}_g) + \rho_g \alpha_g \vec{F}_g + \beta(\vec{U}_s - \vec{U}_g) + \vec{U}_g \sum_i R_{i,g} \quad (38)$$

Momentum da fase sólido

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s \alpha_s \vec{U}_s) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_s \alpha_s \vec{U}_s \vec{U}_s) = -\vec{\nabla}(\alpha_s P_s) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_s \vec{\tau}_s) + \rho_s \alpha_s \vec{F}_s - \beta(\vec{U}_s - \vec{U}_g) + \vec{U}_s \sum_j R_{j,s} \quad (39)$$

Taxas de reação

$$R_{SO_2,g} = -rW_{SO_2} \quad (40)$$

$$R_{O_2,g} = -1/2 rW_{O_2} \quad (41)$$

$$R_{N_2,g} = 0 \quad (42)$$

$$R_{CaO,s} = -rW_{CaO} \quad (43)$$

$$R_{CaSO_4,s} = rW_{CaSO_4} \quad (44)$$

$$R_{SiO_2,s} = 0 \quad (45)$$

onde

$$r = K \left(\frac{\rho_g \alpha_g Y_{SO_2,g}}{W_{SO_2}} \right) \left(\frac{\rho_s \alpha_s Y_{CaO,s}}{W_{CaO}} \right) \quad (46)$$

$$K = \text{constante} \quad (47)$$

Complementam a formulação reativa as equações (5) a (18), que descrevem o tensor das tensões viscosas para a fases, a continuidade volumétrica, a pressão da fase sólido, as forças de corpo externas por unidade de massa, as equações de estado, e a função de arrasto na interface entre fases. Apresenta-se a seguir o desenvolvimento da formulação para a taxa da reação considerada.

4.2.1. Cinética da absorção de SO₂ por calcário

A captura de enxofre por calcário no reator é comumente descrita pela seguinte equação global (ver por exemplo YATES, 1983)

A lei cinético-química de ação mássica estabelece que numa reação química homogênea a taxa de desaparecimento de uma espécie é proporcional ao produto das concentrações dos reagentes elevadas aos respectivos coeficientes estequiométricos (KUO, 1986). Em analogia com esta lei, pode-se definir a taxa de sulfatação como

$$r \propto C_{CaO}^l C_{SO_2}^l C_{O_2}^{1/2} \quad (48)$$

Na prática, o O₂ não afeta significativamente a taxa de sulfatação, já que sua concentração nos gases da combustão é sempre de magnitude superior em relação à de SO₂. Assim, na prática, a sulfatação torna-se de ordem zero em relação à concentração de O₂, e tem-se que

$$r \propto C_{CaO}^l C_{SO_2}^l \quad (49)$$

Introduzindo-se um coeficiente de taxa de reação, K , tem-se

$$r = KC_{CaO}C_{SO_2} \quad (50)$$

Assim,

$$r = K \left(\frac{\rho_g \alpha_g Y_{SO_2,g}}{W_{SO_2}} \right) \left(\frac{\rho_s \alpha_s Y_{CaO,s}}{W_{CaO}} \right) \quad (51)$$

A literatura apresenta valores de K determinados empiricamente. Therdthianwong (1994) aplicou um valor de K obtido de Basu e Fraser (1991). Neste trabalho aplica-se este mesmo valor, i.e. $K = 2,018 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$.

4.3. Modelo de dois fluidos no CFX5.7

O software CFX5.7 inclui os modelos hidrodinâmico e reativo de dois fluidos descritos nas seções anteriores (CFX5.7, 2004a, b). Na sua versão mais genérica, os modelos do CFX5.7 são multifásicos e multiespécies. Qualquer número de diferentes espécies pode ser considerado dentro de qualquer número de diferentes fases. Transferência de massa pode ser considerada entre espécies dentro de uma fase, e entre espécies de diferentes fases, de forma que reações químicas dentro de cada fase e inter-fases podem ser tratadas. Diferentes modelos de turbulência podem ser aplicados para cada fase. Diferentes modelos de arrasto podem ser considerados, incluindo o procedimento de Gidaspow descrito nas equações (15) a (18). Além do arrasto, outras forças inter-fases podem ser consideradas, como sustentação e massa virtual (estas são geralmente desprezadas em escoamentos gás-sólido). A pressão da fase sólido pode ser considerada através de diferentes procedimentos para determinação do módulo de elasticidade partícula-partícula, incluindo a correlação de Gidaspow e Ettehadieh, dada pela equação (10). Equações conservativas adicionais de “energia granular” podem ser incluídas para determinação de “temperaturas granulares” para fases dispersas, de forma que correlações para pressão e viscosidade de fase sólido baseadas na teoria cinética dos

escoamentos granulares podem ser implementadas. Dentre os aspectos acima, apenas aqueles incluídos nas formulações descritas nas seções anteriores são considerados neste trabalho.

4.4. Procedimento numérico no CFX5.7

O complexo sistema de equações dos modelos de dois fluidos, incluindo equações diferenciais parciais não-lineares acopladas, pode apenas ser resolvido através de procedimentos numéricos. O modelo físico, definido por equações diferenciais conservativas, é substituído por um modelo numérico, definido por equações discretas. A discretização é feita pela integração das equações diferenciais conservativas sobre volumes de controle adequados, de forma a manter o caráter conservativo da formulação. No CFX5.7 discretiza-se pelo método de volumes finitos baseados em elementos (CFX5.7, 2004c). Aplica-se malhas não-estruturadas em sistema Cartesiano de coordenadas. Podem ser definidos elementos de malha tetraédricos, hexaédricos, prismáticos ou piramidais. Os volumes de controle são definidos aplicando o método das medianas, ligando-se os centróides dos elementos aos pontos médios de suas arestas. Assim, volumes de controle são estabelecidos em torno de cada nó da malha, e as variáveis dependentes são co-localizadas sobre estes nós. Variáveis dependentes e suas derivadas devem ser avaliadas sobre as faces dos volumes de controle. Para tal, diferentes procedimentos interpolativos são implementados.

Na discretização de termos advectivos pode-se aplicar diferentes procedimentos interpolativos baseados na expressão

$$\phi_{ip} = \phi_{up} + \gamma \nabla \phi \cdot \Delta \vec{r} \quad (52)$$

Nesta equação ϕ_{ip} representa o valor de uma variável dependente nas faces de volume de controle, ϕ_{up} é seu valor no nó *upwind*, e $\Delta \vec{r}$ indica a posição relativa da superfície *ip* em relação ao nó *up*. Diferentes escolhas para γ caracterizam diferentes esquemas de interpolação. Assumindo $\gamma = 0$ implementa-se o esquema *upwind* de 1ª ordem (UDS). O esquema UDS é numericamente estável e exclui possibilidades de interpolações superestimadas ou subestimadas. Entretanto, é reconhecido como fortemente dissipativo

(difusão numérica). O esquema UDS apresenta precisão de 1ª ordem. Assumindo $\gamma = 1$ reduz-se os efeitos dissipativos do esquema UDS. O termo $\gamma \nabla \phi \cdot \Delta \vec{r}$ funciona como um fluxo anti-difusivo. Embora este procedimento implique em precisão de 2ª ordem, é menos estável que o UDS, e permite interpolações superestimadas ou subestimadas. Neste trabalho aplica-se o método de Barth e Jespersen (1989) para determinação de γ . O procedimento busca valores de γ tão próximos de 1 quanto possível, de forma a evitar interpolações super ou subestimadas. O método mantém a precisão de 2ª ordem exceto em regiões de baixos gradientes e próximo a descontinuidades (onde γ tende a zero e a precisão resulta de 1ª ordem). No CFX-5.7, esse procedimento interpolativo é denominado *high resolution scheme*.

Na discretização de todos os demais termos espaciais das equações conservativas (exceto os advectivos) aplica-se interpolações baseadas em funções de forma (fatores peso para cálculo de médias ponderadas pela distância). Esse procedimento é utilizado inclusive para termos difusivos, equivale ao esquema de interpolação de diferenças centrais, e garante precisão de 2ª ordem. As interpolações dos termos transientes no CFX-5.7 podem ser de 1ª ou de 2ª ordens. Neste trabalho aplica-se interpolação temporal de 1ª ordem visando reduzir tempos de processamento computacional.

As equações discretizadas são resolvidas implicitamente através de técnica direta de solução aplicando inversão de matrizes. Em consequência, acoplamentos como pressão x velocidade são prontamente resolvidos, e iterações do procedimento numérico são necessárias apenas para resolver não-linearidades (atualizar coeficientes). O procedimento de discretização provê um sistema linear de equações discretas que, arranjadas em forma matricial, são resolvidas pelo método iterativo ILU (*Incomplete Lower Upper*). Para melhorar a performance do método ILU aplica-se um procedimento multigrade algébrico. Neste procedimento, séries de malhas mais grosseiras que a original são utilizadas em etapas intermediárias do processo iterativo. As primeiras iterações são realizadas na malha original, e são seguidas por iterações realizadas em malhas progressivamente mais grosseiras. Os resultados das malhas mais grosseiras são então transportados de volta às malhas mais finas e finalmente à malha original, e o procedimento se repete até à convergência.

A Figura 2 mostra o procedimento geral de solução do CFX5.7 para problemas multifásicos multiespécies. Note-se que em simulações de regime transiente define-se avanços de tempo

real, e estipula-se um limite máximo de iterações a serem realizadas para solução de não-linearidades para cada avanço de tempo. Em simulações de regime permanente estipula-se um avanço de tempo, denominado avanço de tempo distorcido, realiza-se apenas uma única iteração para solução de não-linearidades, e avança-se no tempo. No caso das simulações de regime permanente seria mais correto referir-se a um avanço de “solução distorcida”, em vez de um avanço de “tempo distorcido”. Na verdade, o avanço de tempo é real, porém sem que haja convergência para solução de não-linearidades, de forma que apenas a solução final convergida será correta.

No Apêndice B discute-se algumas definições numéricas relevantes.

Figura 2. Procedimento geral de solução do CFX5.7 para problemas multifásicos multiespécies. (CFX5.7, 2004c).

4.5. Infra-estrutura computacional

Os seguintes recursos computacionais foram utilizados neste trabalho:

- Cluster de microcomputadores composto de 10 PCs duais, perfazendo 20 processadores Intel Xeon 3.06 MHz e 10 Gb RAM, sob sistema operacional Linux RedHat 9.
- Microcomputador PC, processador Pentium 4 3,4 GHz, 2 Gb RAM, sistema operacional Windows XP.
- Microcomputador PC, processador Pentium 4 1,7 GHz, 1 Gb RAM, sistema operacional Windows XP.
- Microcomputador PC, processador Athlon XP3000+ 2,2 GHz, 1,5 Gb RAM, sistema operacional Windows XP.

O três microcomputadores independentes foram utilizados em etapas de estudos de tutoriais, geração de malhas numéricas, definição e configuração de simulações a serem executadas no cluster de PCs, e tratamento de resultados. No Apêndice C apresenta-se testes de desempenho do cluster de PCs em simulações com o CFX5.7. No apêndice D relata-se dificuldades ocorridas.

5. Simulações

Simula-se a absorção de SO_2 por calcário em reator de leito fluidizado circulante, em condições típicas de combustão de carvão. Embora altamente desejável, a validação das predições apresenta-se impraticável pela inexistência de dados experimentais adequados. Os escassos dados disponíveis são incompletos e inexatos, tais como aqueles apresentados em Brereton (1997) e Basu e Fraser (1991). Além disso, são geralmente obtidos em instalações de larga escala, tipicamente com 0,5 a 2 m de diâmetro, e 20 a 90 m de altura (ANDREWS IV et al., 2005). Tais proporções inviabilizam simulações numéricas de dois fluidos ou, no mínimo, levam a soluções altamente imprecisas devido à necessidade de uso de malhas computacionais extremamente grosseiras.

Em vista do exposto, as simulações reativas realizadas neste trabalho visam principalmente análises qualitativas, onde os resultados são avaliados tendo em vista o comportamento fenomenológico observado em reatores reais.

Além das simulações reativas são também realizadas simulações puramente hidrodinâmicas. Nestas, além de análises qualitativas, apresenta-se também comparações de resultados com predições de outros autores, e com dados experimentais.

As simulações são realizadas utilizando o software CFX5.7.

5.1. Definição de casos

Neste trabalho considera-se as situações já simuladas e descritas por Tsuo (1989) e Therdthianwong (1994). Tsuo realizou simulações hidrodinâmicas de dois fluidos do escoamento gás-sólido em um leito fluidizado circulante de escala reduzida, com 7,62 cm de diâmetro e 5,56 m de altura. Aplicou particulado com diâmetro médio de 520 μm e fluxo de sólido (ou taxa de circulação de sólido) de 24,9 $\text{kg/m}^2\text{s}$, que são condições típicas de combustão de carvão em leito fluidizado circulante. Therdthianwong desenvolveu simulações com modelo de dois fluidos reativo, da absorção de SO_2 por calcário em um combustor de

leito fluidizado circulante de dimensões comerciais, com 3 m de diâmetro e 15.5 m de altura. Aplicou particulado com diâmetro médio de 210 μm , que é adequado para combustão de carvão em leito fluidizado circulante. Entretanto, Therdthianwong aplicou taxas de circulação de sólido em torno de 510 $\text{kg/m}^2\text{s}$, completamente fora da faixa usual para combustão de carvão em leito fluidizado circulante (tipicamente 10 a 100 $\text{kg/m}^2\text{s}$ (SUN, 1996)).

Nas simulações de Tsuo, o diâmetro reduzido da coluna impõe excessivo efeito de parede ao escoamento. A importância de tal efeito sobre a hidrodinâmica e processos reativos pode ser avaliado simulando diferentes escalas de reator. Como larga escala, seria interessante simular dimensões comerciais como aquela considerada por Therdthianwong. Contudo, as enormes dimensões envolvidas neste caso impõe malhas computacionais bastante grosseiras, em vista de limitações computacionais. Malhas computacionais excessivamente grosseiras não permitem captar efeitos hidrodinâmicos importantes tais como o escoamento descendente de sólido ao longo de paredes verticais. Diante disso, neste trabalho desenvolve-se simulações para a escala reduzida de Tsuo (diâmetro de 7,62 cm), e para uma escala com diâmetro maior por uma ordem de magnitude (diâmetro de 76,2 cm). Em ambos os casos são consideradas as condições reativas de Therdthianwong, ou seja, densidade do calcário calcinado de 1530 kg/m^3 , coeficiente de taxa de absorção de SO_2 por calcário de 2,018 $\text{m}^3/\text{kmol.s}$, e temperatura de processo de 1143 K. As condições hidrodinâmicas, incluindo o fluxo de sólido de 24.9 $\text{kg/m}^2\text{s}$, são tomadas de Tsuo. São considerados os diâmetros de particulado de ambos os autores, ou seja, 520 μm de Tsuo e 210 μm de Therdthianwong. Em ambas as escalas de reator são consideradas as mesmas velocidades de entrada de gás e sólido e a mesma altura de coluna (5,56 m). Quatro condições operacionais diferentes são simuladas considerando a combinação dos dois diâmetros de coluna e dois diâmetros de partículas. Um caso adicional é considerado estendendo-se a altura do reator para 15 m. Isso permitiu observar o efeito de uma maior altura de coluna sobre a hidrodinâmica, e o efeito de um tempo de residência maior sobre a absorção de SO_2 .

Para os cinco casos acima definidos, são desenvolvidas simulações puramente hidrodinâmicas, onde as fases são ar e sílica em condições ambiente, e simulações reativas. Em todos os casos reativos, considera-se ar como gás de fluidização (mistura de N_2 e O_2) em temperatura, pressão, vazão e contendo fração de SO_2 típicos da combustão de carvão. A fase sólida é composta de calcário calcinado (CaO) e sulfatado (CaSO_4), e de sílica inerte (SiO_2) simulando a presença física de carvão e cinzas.

5.2. Estratégia de simulação

A Figura 3 mostra uma ilustração do tipo de resultado obtido em simulações transientes do escoamento gás-sólido em risers, utilizando modelos de dois fluidos. Note-se que a partir de uma condição inicial, a simulação percorre um estágio inicial transiente e posteriormente alcança o regime estatisticamente permanente.

Como o interesse prático está voltado para a região de escoamento estatisticamente permanente, e considerando os elevados tempos de processamento computacional das simulações transientes, busca-se abreviar a simulação na região inicial transiente. Isso pode ser feito implementando simulação de transiente distorcido para a região inicial transiente. Esse é o procedimento das simulações de regime permanente.

Ao contrário das simulações transientes, em tempo real, uma simulação de regime permanente, em tempo distorcido, pode rapidamente superar o estágio inicial transiente. Em princípio, soluções de regime permanente não são possíveis e, em consequência, os procedimentos numéricos não convergem. Entretanto, resultados de regime permanente não-convergidados podem ser considerados predições temporais médias imprecisas. Apesar de não serem bons resultados quantitativos, observa-se que são qualitativamente corretos, e que permitem transpor o estágio inicial transiente das simulações. Desta forma, consegue-se

grande economia de tempo de processamento computacional pela substituição de avanços transientes reais extremamente lentos por avanços transientes distorcidos muito mais rápidos.

As previsões de regime permanente, aplicadas como condições iniciais em corridas transientes, permitem iniciá-las diretamente na região de escoamento estatisticamente permanente. Ainda, dado que as previsões de regime permanente mostram-se qualitativamente corretas, permitem também análises qualitativas do escoamento e do processo reativo de interesse.

Neste trabalho desenvolve-se simulações de regime permanente e de regime transiente. As simulações de regime permanente, por serem rápidas, são desenvolvidas para todos os casos hidrodinâmicos e reativos definidos na seção anterior. As simulações transientes, por serem extremamente lentas, são desenvolvidas apenas para um caso hidrodinâmico e seu equivalente reativo.

5.3. Domínios físicos, malhas numéricas, condições iniciais e de contorno

A Figura 4 mostra o domínio físico tri-dimensional considerado, detalhes das malhas numéricas utilizadas, e detalhes numéricos implementados nas simulações de regimes permanente e transiente. Considera-se colunas cilíndricas e malhas numéricas não-estruturadas tetraédricas. As malhas são tão refinadas quanto possível, considerando tempos de processamento computacional viáveis em vista dos recursos computacionais disponíveis (ver Apêndice B). Observe-se que, em vistas dos casos definidos, não é viável implementar malhas computacionais refinadas como aquelas aplicadas por Agrawal et al. (2001) e Andrews IV et al. (2005) em domínios computacionais reduzidos. De qualquer modo, Agrawal et al. (2001) observam que, seja qual for o refinamento de malha empregado, não há na literatura quaisquer resultados para os quais se tenha demonstrado independência do tamanho de malha. No Apêndice B descreve-se testes realizados para definição dos avanços de tempo distorcido e real, praticados nas simulações de regime permanente e transiente, respectivamente.

A Tabela 2 descreve as configurações básicas dos casos considerados (A, B, C, D, E), para simulações hidrodinâmicas (H) e reativas (R), de regimes permanente (P) e transiente (T). Note-se que a configuração básica dos casos é idêntica para as simulações hidrodinâmicas e reativas, permanentes e transientes.

As Tabelas 3 e 4 mostram propriedades e condições iniciais e de contorno aplicadas nas simulações hidrodinâmicas e reativas, respectivamente. As condições de contorno são tomadas de Tsuo (1989) e de Therdthianwong (1994). Em ambos os casos assume-se condição de contorno de deslizamento livre nas paredes para a fase sólido. A pressão na saída da coluna foi fixada em valores diferentes nas simulações hidrodinâmicas e reativas. Observa-se que as pressões na saída apenas fixam o nível de pressões, não afetando seus gradientes através da coluna nem as propriedades de fluidos, que são assumidas constantes. As condições reativas são tomadas de Therdthianwong (1994). Considera-se uma fração de SO_2 na fase gás de 2000 ppm (ou $0,00443 \text{ kg}_{\text{SO}_2}/\text{kg}_g$), típica do processo de combustão de carvão. A condição inicial considerando fração volumétrica de sólido uniforme em toda a coluna ($0,38 \text{ m}_s^3/\text{m}^3$) foi assumida de forma a reduzir o tempo necessário para superar o estágio inicial transiente das simulações.

Figura 4. Domínio físico, malhas e detalhes numéricos.

Tabela 2. Casos simulados.

Casos *	Colunas		Diâmetros de partícula (μm)	Malhas
	Diâmetro (cm)	Altura (m)		
A(HP), A(RP)	7,62	5,56	210	1
B(HP), B(RP), B(HT), B(RT)	7,62	5,56	520	1
C(HP), C(RP)	7,62	15,0	210	2
D(HP), D(RP)	76,2	5,56	210	3
E(HP), E(RP)	76,2	5,56	520	3
* A, B, C, D, E - configurações básicas; (H) - simulação hidrodinâmica; (R) - simulação reativa; (P) - simulação de regime permanente; (T) - simulação de regime transiente.				

Tabela 3. Propriedades e condições iniciais e de contorno para simulações hidrodinâmicas.

<u>Fases</u>	
g = ar a 300 K	
s = sílica a 300 K	
<u>Propriedades</u>	
$\rho_g = 1,1614 \text{ kg/m}^3$	$\rho_s = 2620 \text{ kg/m}^3$
$\mu_g = 1,82 \times 10^{-5} \text{ N/m}^2\text{s}$	$\mu_s = 0,509 \text{ N/m}^2\text{s}$
$W_g = 28,97 \text{ kg/kmol}$	$W_s = 60 \text{ kg/kmol}$
<u>Condições de contorno</u>	
<u>Entrada</u>	
$u_g = 0 \text{ m/s}$	$u_s = 0 \text{ m/s}$
$v_g = 4,979 \text{ m/s}$	$v_s = 0,386 \text{ m/s}$
$w_g = 0 \text{ m/s}$	$w_s = 0 \text{ m/s}$
$\alpha_g = 0,9754 \text{ m}^3/\text{m}^3$	$\alpha_s = 0,0246 \text{ m}^3/\text{m}^3$
<u>Saída</u>	<u>Paredes</u>
Localmente parabólico	g = não-deslizamento
$P_g = 15880 \text{ N/m}^2$	s = deslizamento livre
<u>Condições iniciais (simulações de regime permanente)</u>	
Como na entrada, exceto:	
$\alpha_g = 0,62 \text{ m}^3/\text{m}^3$	$\alpha_s = 0,38 \text{ m}^3/\text{m}^3$

Tabela 4. Propriedades e condições iniciais e de contorno para simulações reativas.

Fases	Espécies
g = gás a 1143 K	$i = N_2, O_2, SO_2$
s = sólido a 1143 K	$j = CaO, CaSO_4, SiO_2$
Propriedades	
$\rho_{N_2} = 0,2952 \text{ kg/m}^3$	$\rho_{SiO_2} = 2650 \text{ kg/m}^3$
$\mu_{N_2} = 4,294 \times 10^{-5} \text{ N/m}^2\text{s}$	$\mu_{SiO_2} = 0,509 \text{ N/m}^2\text{s}$
$W_{N_2} = 28 \text{ kg/kmol}$	$W_{SiO_2} = 60 \text{ kg/kmol}$
$\rho_{O_2} = 0,3372 \text{ kg/m}^3$	$\rho_{CaO} = 1530 \text{ kg/m}^3$
$\mu_{O_2} = 5,133 \times 10^{-5} \text{ N/m}^2\text{s}$	$\mu_{CaO} = 0,509 \text{ N/m}^2\text{s}$
$W_{O_2} = 32 \text{ kg/kmol}$	$W_{CaO} = 56 \text{ kg/kmol}$
$\rho_{SO_2} = 0,6828 \text{ kg/m}^3$	$\rho_{CaSO_4} = 2875 \text{ kg/m}^3$
$\mu_{SO_2} = 4,23 \times 10^{-5} \text{ N/m}^2\text{s}$	$\mu_{CaSO_4} = 0,509 \text{ N/m}^2\text{s}$
$W_{SO_2} = 64 \text{ kg/kmol}$	$W_{CaSO_4} = 136 \text{ kg/kmol}$
$D_{O_2} = 0,67 \times 10^{-4} \text{ kg/m s}$	$D_{CaO} = 0 \text{ kg/m s}$
$D_{SO_2} = 1,36 \times 10^{-4} \text{ kg/m s}$	$D_{CaSO_4} = 0 \text{ kg/m s}$
Condições de contorno	
<u>Entrada</u>	
$u_g = 0 \text{ m/s}$	$u_s = 0 \text{ m/s}$
$v_g = 4,979 \text{ m/s}$	$v_s = 0,408 \text{ m/s}$
$w_g = 0 \text{ m/s}$	$w_s = 0 \text{ m/s}$
$\alpha_g = 0,9754 \text{ m}_g^3/\text{m}^3$	$\alpha_s = 0,0246 \text{ m}_s^3/\text{m}^3$
$Y_{O_2,g} = 0,23243 \text{ kg}_{O_2}/\text{kg}_g$	$Y_{CaO,s} = 0,15 \text{ kg}_{CaO}/\text{kg}_s$
$Y_{SO_2,g} = 0,00443 \text{ kg}_{SO_2}/\text{kg}_g$	$Y_{CaSO_4,s} = 0 \text{ kg}_{CaSO_4}/\text{kg}_s$
<u>Saída</u>	<u>Paredes</u>
Localmente parabólico	g = não-deslizamento
$P_g = 64 \text{ N/m}^2$	s = deslizamento livre
Condições iniciais (simulações de regime permanente)	
Como na entrada, exceto: $\alpha_g = 0,62 \text{ m}_g^3/\text{m}^3$	$\alpha_s = 0,38 \text{ m}_s^3/\text{m}^3$
Reação química (THERDTHIANWONG, 1994)	
$CaO + SO_2 + \frac{1}{2} O_2 \xrightarrow{K} CaSO_4$	
$K = 2,018 \text{ m}^3/\text{kmol s}$	

5.4. Simulações de regime permanente

5.4.1. Simulações hidrodinâmicas

Devido às instabilidades nos escoamentos, espera-se que os resultados de simulações em risers sejam sempre oscilantes e irregulares. Os campos de escoamento devem sempre resultar altamente heterogêneos e repletos de estruturas coerentes. Como consequência, não é esperado que haja convergência em simulações de regime permanente. Nas presentes simulações, contudo, obteve-se inesperada convergência para os casos A(HP), C(HP) e D(HP), dentro do intervalo de 50000 iterações do procedimento numérico.

A Figura 5 mostra diagramas em tons de cinza da fração volumétrica de sólido ao longo de um setor de seção axial central da coluna, após 10000 iterações do procedimento numérico. Dentro de 10000 iterações somente o caso A(HP) convergiu (em 4949 iterações). Como é visto, o escoamento neste caso resultou homogêneo e livre de estruturas coerentes. Por outro lado, para os casos B(HP), C(HP), D(HP) e E(HP) o escoamento resultou heterogêneo com a presença de estruturas coerentes. Em relação aos casos C(HP) e D(HP), quando o procedimento iterativo prosseguiu além de 10000 iterações, as estruturas coerentes foram progressivamente dissipadas dando lugar a escoamentos homogêneos, e convergência foi obtida (em 10808 iterações para o caso C(HP), e em 49243 iterações para o caso D(HP)).

Os resultados anômalos para os casos A(HP), C(HP) e D(HP) são consistentes com os escoamentos diluídos a altas velocidades dos transportes pneumáticos. Nos casos presentes, contudo, a velocidade do gás (4,979 m/s na entrada) é muito inferior àquelas dos transportes pneumáticos diluídos (15 a 20 m/s de acordo com GRACE; BI, 1997), e um escoamento diluído homogêneo parece improvável. Para explicar os resultados anômalos dos casos A(HP), C(HP) e D(HP), poder-se-ia argumentar que a geração de estruturas coerentes seria um evento sub-malha, de forma que o nascimento de clusters estaria sendo filtrado por células numéricas excessivamente grosseiras. Embora este efeito seja certamente reconhecido como causa de significativa incorreção, não parece ser responsável pela homogeneidade obtida nos presentes casos anômalos. Tal possibilidade é rejeitada visto que todas as estruturas coerentes observadas nas presentes simulações foram formadas a partir do crescente empacotamento de sólido nas paredes, e não no escoamento livre.

Figura 5. Fração volumétrica de sólido ao longo de um setor de seção axial central da coluna, no caso A(HP) em 4949 iterações, nos demais casos em 10000 iterações do procedimento numérico (tons mais escuros indicam maiores frações de sólido).

Outra possível causa para a inesperada homogeneidade nos casos A(HP), C(HP) e D(HP) é o não alinhamento dos elementos de malha tetraédricos em relação ao escoamento. Este poderia estar intensificando a difusão numérica, tornando-a significativa o bastante para dissipar tanto o empacotamento nas paredes quanto os clusters. Esta possibilidade parece provável, e é uma questão para investigação adicional.

Embora a difusão numérica possa explicar a ausência de clusters nos casos A(HP), C(HP) e D(HP), é preciso não esquecer as várias possíveis fontes de incorreção características dos modelos de dois fluidos, que podem também conduzir a soluções irreais. Estas estão principalmente relacionadas à hipótese de meio contínuo e à formulação de correlações descrevendo propriedades do contínuo para fases particuladas, à hipótese de equilíbrio termodinâmico para fases particuladas, à hipótese de rheologia Newtoniana-Stokesiana, e à formulação de correlações descrevendo troca de momentum entre fases.

5.4.1.1. Análise de convergência

As Figuras 6, 7 e 8 mostram a evolução ao longo do procedimento iterativo de resultados médios (ponderados pela área) na seção transversal a 3,4 m acima da entrada, para todos os casos simulados. As figuras mostram perfis de velocidade axial de sólido, fluxo de sólido e fração volumétrica de sólido, respectivamente. Para os casos não-convergentes B(HP) e E(HP) todos os perfis mantiveram-se oscilantes. O mesmo ocorreu para os casos A(HP), C(HP) e D(HP) antes que a convergência fosse alcançada.

Embora as previsões para os casos A(HP), C(HP) e D(HP) sejam precisas por terem convergido dentro do rms especificado, são obviamente incorretas. Para os casos B(HP) e E(HP) as previsões são imprecisas e incorretas. Em termos qualitativos, a única diferença entre resultados convergentes e não-convergentes é o rms que é satisfeito. Não é incorreto afirmar que os resultados para todos os casos são de fato convergentes dentro de um determinado rms. Independente de precisão e correção, todos os gráficos mostram que os padrões oscilantes tornam-se eventualmente estabelecidos em torno de médias bem definidas para todos os parâmetros em todos os casos. Isso indica que o estágio transiente das simulações foi superado em todos os casos.

Torna-se claro que todas as previsões, convergentes ou não, respondem por escoamentos no regime estatisticamente permanente, embora com diferentes precisões e correções. O regime estatisticamente permanente foi alcançado em diferentes níveis iterativos para diferentes parâmetros e casos. Para o caso B(HP), por exemplo, os valores médios de velocidade axial de sólido, fluxo de sólido e fração volumétrica de sólido tornaram-se bem estabelecidos a partir de cerca de 5000, 20000 e 25000 iterações, respectivamente.

Os três casos convergentes dentro de 50000 iterações incluem todos os diâmetros e alturas de reator, e todas as diferentes malhas numéricas consideradas, e são todos para diâmetro de partícula de 210 μm . Nos dois casos para diâmetro de partícula de 520 μm não se obteve convergência. Permitiu-se que um desses casos, o B(HP), prosseguisse alcançando 75000 iterações, sem que houvesse convergência. É possível que nos casos não-convergentes os clusters venham a se dissipar eventualmente, e que seja alcançada convergência. De qualquer modo, observa-se que há um claro efeito do diâmetro de partícula sobre o número de ciclos

iterativos necessários para dissipação de clusters. No presente modelo de dois fluidos, o diâmetro de partícula aparece apenas na função de arrasto. Note-se que em todos os casos simulados a velocidade do gás na entrada é a mesma, e assim gera-se efeitos de arrasto mais intensos para os casos com maiores partículas. Talvez estes efeitos de arrasto mais intensos sejam de tal forma superiores em relação à difusão numérica, que essa perca significância e não consiga dissipar os clusters.

A procura de convergência para casos não-convergidados está além dos objetivos das simulações de regime permanente realizadas neste trabalho, através das quais se visou principalmente superar o estágio transiente das simulações.

Figura 6. Evolução ao longo do procedimento iterativo da velocidade axial de sólido média, na seção transversal a 3,4 m acima da entrada, para os vários casos.

Figura 7. Evolução ao longo do procedimento iterativo do fluxo de sólido médio, na seção transversal a 3,4 m acima da entrada, para os vários casos.

Figura 8. Evolução ao longo do procedimento iterativo da fração volumétrica de sólido média, na seção transversal a 3,4 m acima da entrada, para os vários casos.

5.4.1.2. Análise hidrodinâmica

As Figuras 9 a 13 mostram resultados ao longo do diâmetro, na seção transversal da coluna 3,4 m acima da entrada, para os vários casos, considerando 10000 iterações do procedimento numérico. Estes são perfis das velocidades axiais do gás e do sólido, e da fração volumétrica de sólido. Note-se que em 10000 iterações obteve-se convergência apenas para o caso A(HP). Para o este caso, como visto na Figura 9, a fração volumétrica de sólido resultou uniforme na seção transversal da coluna. Isso mostra que o sólido distribui-se uniformemente na seção transversal da coluna, não se observando empacotamento de sólido nas paredes nem estruturas coerentes no escoamento. Os perfis de velocidade resultaram simétricos devido à homogeneidade do escoamento, e achatados, mostrando que o arrasto uniforme supera os efeitos viscosos.

Para os casos não-convergidados B(HP), C(HP), D(HP) e E(HP), perfis muito assimétricos e não-uniformes foram encontrados tanto para velocidades quanto para fração volumétrica de sólido. Em todos estes casos, como mostrado nas Figuras 10 a 13, foram encontradas velocidades negativas próximo às paredes, mostrando o esperado regime de fluxo descendente de sólido e o escoamento descendente de clusters típicos dos risers. Para o reator de maior seção transversal (casos D(HP) e E(HP)), o típico regime de escoamento “core annular” foi observado visto que os perfis de fração volumétrica de sólido resultaram maiores nas proximidades das paredes e achatados longe destas, como visto nas Figuras 12 e 13. Para o reator de menor seção transversal (casos B(HP) e C(HP)), o padrão “core annular” não é observado, como visto nas Figuras 10 e 11. Aparentemente, efeitos viscosos impostos pelas paredes combinados com o desenvolvimento de clusters impedem que tal padrão seja obtido. Os resultados acima, para os casos B(HP), C(HP), D(HP) e E(HP), embora não-convergidados, são qualitativamente coerentes com o conhecimento empírico.

A Figura 14 mostram perfis em cascata da fração volumétrica de sólido e das velocidades axiais do sólido e do gás, através da seção transversal da coluna 3,4 m acima da entrada, considerando 10000 iterações do procedimento numérico, para o caso E(HP). Observa-se claramente o padrão “core anular” do escoamento, como já evidenciado na Figura 13.

Figura 9. Perfis das velocidades axiais do gás e do sólido, e da fração volumétrica de sólido, ao longo do diâmetro, na seção transversal 3,4 m acima da entrada - caso A(HP).

Figura 10. Perfis das velocidades axiais do gás e do sólido, e da fração volumétrica de sólido, ao longo do diâmetro, na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando 10000 iterações do procedimento numérico - caso B(HP).

Figura 11. Perfis das velocidades axiais do gás e do sólido, e da fração volumétrica de sólido, ao longo do diâmetro, na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando 10000 iterações do procedimento numérico - caso C(HP).

Figura 12. Perfis das velocidades axiais do gás e do sólido, e da fração volumétrica de sólido, ao longo do diâmetro, na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando 10000 iterações do procedimento numérico - caso D(HP).

Figura 13. Perfis das velocidades axiais do gás e do sólido, e da fração volumétrica de sólido, ao longo do diâmetro, na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando 10000 iterações do procedimento numérico - caso E(HP).

Figura 14. Perfis em cascata da fração volumétrica de sólido e das velocidades axiais do sólido e do gás, através da seção transversal da coluna 3,4 m acima da entrada, considerando 10000 iterações do procedimento numérico - caso E(HP).

As Figuras 15 a 17 mostram perfis axiais de resultados médios em seções transversais, para fração volumétrica de sólido, velocidade axial de sólido, e fluxo de sólido, respectivamente. Para o caso convergido A(HP) observa-se perfis constantes devido à homogeneidade do escoamento. Para os demais casos, não-convergidados, observa-se perfis oscilantes e irregulares devido à ocorrência de clusters. A Figura 15 mostra que as frações de sólido, em todos os casos, resulta maior na base da coluna, e ainda maior para partículas maiores. A maior parte dos resultados de fração volumétrica de sólido está dentro do esperado (abaixo de 3%, de acordo com SUN, 1996). Os resultados para os casos não-convergidados estão de acordo com o conhecimento empírico do processo.

A Figura 16 mostra que a velocidade axial de sólido resulta menor para partículas maiores. Isso é esperado, visto que partículas maiores apresentam maiores velocidades terminais e são menos afetadas pelo arrasto. Observa-se que a velocidade axial do sólido resulta inferior para o caso B(HP) em comparação com o caso E(HP). Estes dois casos são idênticos, exceto que no primeiro a coluna é mais estreita. Esse resultado sugere que a presença de clusters é mais intensa no caso B(HP) que no caso E(HP). Em todas as simulações realizadas todos os clusters detectados tiveram origem nas paredes, e foram dissipados no escoamento livre, na medida que se afastaram destas. Claramente, para o reator mais estreito há menor extensão de seção transversal de escoamento livre para dissipação de clusters, e sua presença resulta relativamente mais intensa. Deve-se observar, entretanto, que este resultado pode ser falso visto que dissipação excessiva de clusters pode estar ocorrendo devido à difusão numérica, e

que as malhas numéricas excessivamente grosseiras consideradas não permitem captar formação de clusters no escoamento livre. A Figura 17 mostra que, exceto para o caso convergido A(HP), o fluxo de sólido resulta muito distante do esperado $24,9 \text{ kg/m}^2\text{s}$ (que é imposto na entrada da coluna para todos os casos). Isso indica que conservação de massa não é obtida nos casos não-convergidados, corroborando o fato dos resultados serem altamente imprecisos. Contudo, em vista da discussão acima, observa-se que tais resultados são qualitativamente corretos.

Ainda na Figura 16, observa-se que a velocidade axial de sólido resulta menor para o caso C(HP) em comparação com o caso A(HP). Note-se que o primeiro caso é idêntico ao segundo exceto pela coluna mais longa, e que apenas no primeiro caso os clusters são detectados. Claramente, os clusters que são detectados no caso C(HP) tornam o escoamento médio do sólido mais lento. As Figuras 18 e 19 mostram a variação ao longo da altura da coluna, da pressão relativa do gás e de seu gradiente axial (valores médios na seção transversal ponderados pela área), respectivamente, para os casos A(HP) e C(HP). Como resultado da maior carga de particulado sustentado, a pressão do gás na base resulta bem maior para a coluna longa do caso C(HP). Ao contrário do observado para a coluna curta do caso A(HP), o perfil de gradiente axial da pressão do gás para a coluna longa resulta bastante irregular e oscilante, consequência da detecção das instabilidades do escoamento que levam à formação de clusters.

Figura 15. Perfis axiais da fração volumétrica de sólido média em seções transversais, considerando 10000 iterações do procedimento numérico, para todos os casos.

Figura 16. Perfis axiais da velocidade axial do sólido média em seções transversais, considerando 10000 iterações do procedimento numérico, para todos os casos.

Figura 17. Perfis axiais do fluxo de sólido médio em seções transversais, considerando 10000 iterações do procedimento numérico, para todos os casos.

Figura 18. Pressão relativa do gás (relativa ao valor no topo da coluna, média na seção transversal, ao longo da coluna, para os casos A(HP) e C(HP).

Figura 19. Gradiente axial da pressão do gás média na seção transversal, ao longo da coluna, para os casos A(HP) e C(HP).

5.4.2. Simulações reativas: absorção de SO₂ por calcário

As simulações reativas foram realizadas em condições o mais similares possíveis em relação às simulações hidrodinâmicas. Aplicou-se os mesmos geometria e dimensões de reatores, tamanhos de partícula, condições iniciais e de contorno para as fases, malhas computacionais e configurações numéricas. Há, no entanto, algumas diferenças. Nas simulações hidrodinâmicas foi assumida temperatura de 300 K, enquanto nas reativas assumiu-se 1143 K, típica da combustão de carvão e adequada para absorção de SO₂ por calcário. Nas simulações hidrodinâmicas a fase gás foi o ar, enquanto nas reativas incluiu-se SO₂ misturado ao ar. Nas simulações hidrodinâmicas todo o particulado foi composto de SiO₂, enquanto nas reativas cerca de 85 % (em massa) do particulado foi SiO₂, sendo o restante composto de CaO e CaSO₄. Uma última diferença refere-se ao nível de pressão, fixado na saída do reator em valores diferentes para as simulações hidrodinâmicas e reativas. As diferenças acima naturalmente implicam em propriedades físicas e termodinâmicas modificadas. Implicam também em condições hidrodinâmicas alteradas, embora estas alterações sejam discretas. A presença de SO₂ no ar, dada sua baixa concentração, causa efeitos incipientes. A presença de cerca de 15 % de sólidos com propriedades físicas diferentes daquelas do SiO₂ certamente causa algum efeito. A fixação de níveis de pressão, por outro lado, não causa efeitos nas equações de momentum, por estas envolverem apenas seus gradientes. Com os fatos acima em mente, desenvolve-se a seguir as análises hidrodinâmica e reativa das simulações reativas.

Em 10000 iterações do procedimento numérico obteve-se convergência apenas para o caso reativo A(RP), que é similar ao caso hidrodinâmico A(HP), para o qual também houve convergência. No caso reativo a convergência foi alcançada em 3862 iterações, contra as 4949 iterações do caso hidrodinâmico equivalente. Aparentemente, as diferenças entre as configurações dos casos e/ou os efeitos numéricos pela inclusão do equacionamento reativo, exercem significativo efeito dissipativo sobre o escoamento. Em todos os demais casos reativos, B(RP), C(RP), D(RP e E(RP), à exemplo dos casos hidrodinâmicos equivalentes, não houve convergência dentro de 10000 iterações do procedimento numérico.

A Figura 20 mostra diagramas em tons de cinza da fração volumétrica de sólido ao longo de um setor de seção axial central da coluna, após 10000 iterações do procedimento numérico. Como é visto, o escoamento no caso convergido A(RP) resultou homogêneo e livre de

estruturas coerentes. Por outro lado, para os casos B(RP), C(RP), D(RP) e E(RP), o escoamento resultou heterogêneo com a presença de estruturas coerentes. Note-se a semelhança qualitativa dos resultados das simulações reativas quando comparados aos resultados das simulações hidrodinâmicas equivalentes, mostrados na Figura 5.

5.4.2.1. Análise hidrodinâmica

As Figuras 21 a 30 mostram resultados hidrodinâmicos para as simulações reativas, similares àqueles mostrados para as simulações hidrodinâmicas.

Figura 20. Fração volumétrica de sólido ao longo de um setor de seção axial central da coluna, no caso A(RP) em 3862 iterações, nos demais casos em 10000 iterações do procedimento numérico (tons mais escuros indicam maiores frações de sólido).

Observa-se, na maioria dos casos, comportamentos hidrodinâmicos semelhantes entre as simulações hidrodinâmicas e reativas. Há, contudo, algumas diferenças significativas de comportamento. Por exemplo, comparando os resultados para o caso B(HP) e seu equivalente B(RP), mostrados nas Figuras 10 e 22, respectivamente, observa-se grande diferença de comportamento entre os perfis de fração volumétrica de sólido. Assim, embora na maioria dos casos as diferenças de configuração pouco afetem os resultados, há situações em que grandes diferenças são observadas. Convém lembrar que os escoamentos gás-sólido estudados são

altamente instáveis, e resultam sempre altamente irregulares em qualquer seção transversal ao longo da coluna. Então, embora haja poucas diferenças de configuração entre as simulações hidrodinâmicas e reativas, mesmo pequenas alterações em qualquer condição operacional pode implicar em grandes diferenças de resultados. Em adição, deve-se lembrar que os resultados apresentados em todas as simulações de regime permanente são imprecisos, de forma que consideráveis diferenças quantitativas podem ser esperadas.

Figura 21. Perfis das velocidades axiais do gás e do sólido, e da fração volumétrica de sólido, ao longo do diâmetro, na seção transversal 3,4 m acima da entrada - caso A(RP).

Figura 22. Perfis das velocidades axiais do gás e do sólido, e da fração volumétrica de sólido, ao longo do diâmetro, na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando 10000 iterações do procedimento numérico - caso B(RP).

Figura 23. Perfis das velocidades axiais do gás e do sólido, e da fração volumétrica de sólido, ao longo do diâmetro, na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando 10000 iterações do procedimento numérico - caso C(RP).

Figura 24. Perfis das velocidades axiais do gás e do sólido, e da fração volumétrica de sólido, ao longo do diâmetro, na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando 10000 iterações do procedimento numérico - caso D(RP).

Figura 25. Perfis das velocidades axiais do gás e do sólido, e da fração volumétrica de sólido, ao longo do diâmetro, na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando 10000 iterações do procedimento numérico - caso E(RP).

Figura 26. Perfis axiais da fração volumétrica de sólido média em seções transversais, considerando 10000 iterações do procedimento numérico, para todos os casos.

Figura 27. Perfis axiais da velocidade axial do sólido média em seções transversais, considerando 10000 iterações do procedimento numérico, para todos os casos.

Figura 28. Perfis axiais do fluxo de sólido médio em seções transversais, considerando 10000 iterações do procedimento numérico, para todos os casos.

Figura 29. Pressão relativa do gás (relativa ao valor no topo da coluna, média na seção transversal, ao longo da coluna, para os casos A(RP) e C(RP).

Figura 30. Gradiente axial da pressão do gás média na seção transversal, ao longo da coluna, para os casos A(RP) e C(RP).

5.4.2.2. Análise reativa

As Figuras 31 a 36 mostram perfis da fração mássica de SO_2 na fase gás ao longo do diâmetro, na seção transversal da coluna 3,4 m acima da entrada, para os vários casos reativos, considerando 10000 iterações do procedimento numérico. As Figura 31 e 32, para os casos A(RP) e B(RP), respectivamente, mostram que a fração mássica de SO_2 resulta uniforme para em consequência da fração volumétrica de sólido uniforme na seção. As Figuras 33 a 35, para os casos C(RP), D(RP) e E(RP), respectivamente, mostram perfis da fração mássica de SO_2 não-uniformes em consequência de frações de sólido não-uniformes. Como esperado, a fração mássica de SO_2 resulta menor onde a fração volumétrica de sólido é mais elevada. A Figura 36 mostra perfis em cascata de parâmetros através da seção transversal da coluna 3,4 m acima da entrada, considerando 10000 iterações do procedimento numérico, para o caso E(RP). Novamente, observa-se claramente que a absorção de SO_2 é maior em regiões de maior fração volumétrica de sólido. Os resultados acima são qualitativamente coerentes com o comportamento empírico esperado, mesmo para os casos não-convergidados.

Figura 31. Perfis de fração mássica de SO₂ no gás e da fração volumétrica de sólido, ao longo do diâmetro, na seção transversal 3,4 m acima da entrada - caso A(RP).

Figura 32. Perfis de fração mássica de SO₂ no gás e da fração volumétrica de sólido, ao longo do diâmetro, na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando 10000 iterações do procedimento numérico - caso B(RP).

Figura 33. Perfis de fração mássica de SO₂ no gás e da fração volumétrica de sólido, ao longo do diâmetro, na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando 10000 iterações do procedimento numérico - caso C(RP).

Figura 34. Perfis de fração mássica de SO₂ no gás e da fração volumétrica de sólido, ao longo do diâmetro, na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando 10000 iterações do procedimento numérico - caso D(RP).

Figura 35. Perfis de fração mássica de SO₂ no gás e da fração volumétrica de sólido, ao longo do diâmetro, na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando 10000 iterações do procedimento numérico - caso E(RP).

Figura 36. Perfis em cascata da fração volumétrica de sólido, da fração mássica de SO_2 no gás, e das velocidades axiais do sólido e do gás, através da seção transversal da coluna 3,4 m acima da entrada, considerando 10000 iterações do procedimento numérico - caso E(RP).

A Figura 37 mostra perfis axiais da fração mássica de SO_2 no gás, média em seções transversais, ao longo da coluna, para os vários casos reativos. Observa-se que partículas maiores causam maior redução da fração mássica de SO_2 ao longo da coluna. Os resultados para os casos B(RP) e E(RP) (partículas maiores) comparados com aqueles para os casos A(RP), C(RP) e D(RP) (partículas menores), mostram esse fato. Este comportamento é de fato esperado, visto que o único efeito do tamanho de partícula considerado no presente modelo de dois fluidos ocorre no termo de arrasto. Partículas maiores possuem velocidades terminais maiores e, portanto, maiores tempos de residência, promovendo em consequência maiores remoções de SO_2 . No que se refere ao tamanho de partícula, em colunas de absorção reais a remoção de SO_2 depende do balanço dos efeitos opostos de tempo de residência e taxa de reação. Partículas maiores significam maiores tempos de residência, contribuindo para aumento de absorção; e implicam em taxas de reação menores, contribuindo para redução da absorção. Observa-se que este balanço não pode ser avaliado através das presentes simulações, pois o modelo aplicado não inclui dependência do coeficiente de taxa de reação em relação ao tamanho de partícula.

A Figura 37 também mostra que quanto mais larga a coluna, maior a redução da fração mássica de SO_2 . Por exemplo, os resultados para o caso E(RP) (coluna larga) comparados com aqueles do caso B(RP) (coluna estreita) mostram esse fato. Na coluna larga o tempo de residência resulta inferior devido às maiores velocidades de sólido, como visto na Figura 27; por outro lado, a fração volumétrica de sólido resulta superior, como visto na Figura 26. O fato de se obter maior absorção de SO_2 na coluna larga indica que o segundo efeito supera o primeiro.

Figura 37. Perfis axiais da fração mássica de SO_2 no gás média em seções transversais, considerando 10000 iterações do procedimento numérico, para todos os casos.

Um outro aspecto mostrado na Figura 37 refere-se ao efeito da altura da coluna sobre a absorção de SO_2 . Comparando as predições das colunas mais alta do caso C(RP) e mais baixa do caso A(RP), observa-se que, na mesma altura, a coluna mais alta promove maior absorção. Este resultado é uma clara consequência do maior tempo de residência causado pelos clusters, que são captados na coluna mais alta e não são captados na coluna mais baixa. No que se refere aos clusters, em colunas de absorção reais a remoção de SO_2 depende do balanço dos efeitos opostos de tempo de residência e contato gás-sólido. Clusters propiciam maiores tempos de residência, contribuindo para aumento de absorção. Por outro lado, clusters impõem maiores resistências ao transporte de massa de gás através do particulado, contribuindo para redução da absorção. Observa-se que este balanço não pode ser avaliado através das presentes simulações, pois o modelo aplicado não inclui dependência do coeficiente de taxa de reação em relação à fração volumétrica de sólido.

5.5. Simulações de regime transiente

Devido às limitações impostas pelo excessivo tempo de processamento computacional (ver seção 5.6), foram realizadas simulações de regime transiente para dois casos apenas. Foram simulados os casos equivalentes B(HT) e B(RT), respectivamente, hidrodinâmico e reativo. Escolheu-se o caso B devido à disponibilidade de dados experimentais hidrodinâmicos de Luo (1987) para este caso, e devido à disponibilidade na literatura de predições hidrodinâmicas realizadas por outros autores.

Apresenta-se resultados mostrando os comportamentos transiente e médio temporal. Observa-se que em muitos avanços de tempo do procedimento numérico não se obteve convergência, e o número máximo de iterações estipulado foi alcançado. Estes resultados não convergidos foram descartados (isso implicou em intervalos de tempo não uniformes para os resultados convergidos, impondo cálculo de médias temporais ponderado pelo avanço de tempo).

5.5.1. Simulação hidrodinâmica - caso B(HT)

5.5.1.1. Comportamento transiente

A Figura 38 apresenta diagramas da evolução temporal da fração volumétrica de sólido ao longo de um setor de seção axial central da coluna. O intervalo de tempo entre os quadros sucessivos é de 0,1 segundos. O primeiro quadro à esquerda refere-se à condição inicial obtida da corrida permanente. Observa-se na figura o esperado escoamento altamente heterogêneo com formação e dissipação de clusters. Observa-se também a maior concentração de sólido na base da coluna, característica dos leitos fluidizados circulantes.

Como já observado nos resultados de simulação de regime permanente, também nesta simulação transiente os clusters detectados tiveram origem nas paredes, e foram dissipados no

escoamento livre, na medida que se afastaram destas. Esse efeito é claramente observado na Figura 38.

Figura 38. Fração volumétrica de sólido ao longo de um setor de seção axial central da coluna, para o caso B(HT). O intervalo de tempo entre os quadros sucessivos é de 0,1 s. O primeiro quadro à esquerda refere-se à condição inicial obtida da corrida permanente.

Os resultados de simulação de regime permanente apresentados nas Figuras 6, 7 e 8 são inexatos e imprecisos. Contudo, representam condições iniciais adequadas para simulações transientes e, mais significativamente, permitem iniciar estas simulações diretamente dentro da região estatisticamente permanente. Este fato é demonstrado nas Figuras 39 a 42, onde apresenta-se resultados de simulação transiente para o caso B(HT). A condição inicial considerada foi tomada de um nível iterativo da simulação permanente acima de 45000, de forma que todas as médias estavam já muito bem definidas para todos os parâmetros relevantes.

Nas Figuras 39 a 42 mostra-se a evolução ao longo do tempo, de resultados médios na seção transversal 3,4 m acima da entrada. Os gráficos mostram perfis das velocidades axiais do gás e do sólido, fluxo de sólido e fração volumétrica de sólido, respectivamente. Os primeiros

45,454 segundos correspondem ao intervalo de tempo distorcido desenvolvido ao longo da simulação de regime permanente. Estes são seguidos de 10 segundos de tempo real de simulação transiente. Em todas as figuras observa-se que as previsões para a corrida transiente oscilam em torno de médias temporais bem estabelecidas, desde o início, mostrando que a simulação transiente ocorre inteiramente dentro do regime de escoamento estatisticamente permanente. A Figura 41 mostra que o fluxo de sólido médio temporal oscila em torno do valor esperado de $24,9 \text{ kg/m}^2\text{s}$, que foi imposto na entrada da coluna.

Figura 39. Evolução temporal da velocidade axial do gás média na seção transversal 3,4 m acima da entrada, para o caso B, para simulação de regime permanente seguida de simulação de regime transiente.

Figura 40. Evolução temporal da velocidade axial do sólido média na seção transversal 3,4 m acima da entrada, para o caso B, para simulação de regime permanente seguida de simulação de regime transiente.

Figura 41. Evolução temporal do fluxo de sólido médio na seção transversal 3,4 m acima da entrada, para o caso B, para simulação de regime permanente seguida de simulação de regime transiente.

Figura 42. Evolução temporal da fração volumétrica de sólido média na seção transversal 3,4 m acima da entrada, para o caso B, para simulação de regime permanente seguida de simulação de regime transiente.

5.5.1.2. Comportamento médio temporal

Resultados médios temporais das predições transientes do caso B(HT) foram obtidos para três diferentes intervalos de tempo de simulação: 0 a 5 s, 5 a 10 s, e 0 a 10 s. Através da comparação destes resultados busca-se estabelecer o intervalo de tempo necessário para obtenção de resultados médios representativos.

As Figuras 43 a 46 mostram os resultados obtidos considerando os diferentes intervalos de tempo. Os gráficos apresentam perfis médios temporais ao longo do diâmetro, na seção transversal 3,4 m acima da entrada, para as velocidades axiais de ambas as fases, fração volumétrica de sólido e fluxo mássico de sólido, respectivamente. Nota-se, para todos os parâmetros, que os diferentes intervalos afetam significativamente as predições. Há, inclusive, grandes diferenças no comportamento qualitativo dos resultados. Este fato é particularmente claro nos perfis de fluxo mássico de sólido mostrados na Figura 46. Observa-se em todas as figuras que os perfis para 10 segundos de simulação apresentam-se mais simétricos e, portanto, mais representativos do escoamento real. Entretanto, fica evidente a necessidade de tempo adicional de simulação para que se possa demonstrar a independência dos resultados médios do intervalo de tempo considerado. Devido às limitações impostas pelos excessivos tempos de processamento computacional (ver seção 5.6), as presentes análises foram realizadas para 10 s de simulação no caso hidrodinâmico, e para 5 s de simulação no caso reativo.

Figura 43. Perfis médios temporais da velocidade axial do gás ao longo do diâmetro na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando diferentes intervalos de tempo, para o caso B(HT).

Figura 44. Perfis médios temporais da velocidade axial do sólido ao longo do diâmetro na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando diferentes intervalos de tempo, para o caso B(HT).

Figura 45. Perfis médios temporais da fração volumétrica de sólido ao longo do diâmetro na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando diferentes intervalos de tempo, para o caso B(HT).

Figura 46. Perfis médios temporais do fluxo mássico de sólido ao longo do diâmetro na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando diferentes intervalos de tempo, para o caso B(HT).

A Figura 47 mostra perfis axiais da fração volumétrica de sólido média temporal e na seção transversal, ao longo da altura da coluna, considerando os diferentes intervalos de tempo. Todos os perfis mostram o comportamento esperado, com concentração de sólido e seu gradiente elevados na base da coluna, e decaindo significativamente com a altura. Note-se também a elevação da concentração de sólido na saída da coluna, causada pela formação de clusters mais intensa nesta região. Novamente, observa-se diferenças significativas nas predições para os diferentes intervalos de tempo, indicando que não se alcançou independência deste fator.

Figura 47. Perfis axiais ao longo da altura da coluna da fração volumétrica de sólido média temporal e na seção transversal, considerando diferentes intervalos de tempo, para o caso B(HT).

5.5.1.3. Comparação com resultados de simulações de outros autores

Nesta seção compara-se as previsões médias temporais do presente trabalho com dados experimentais, e com outros resultados de simulação disponíveis na literatura utilizando modelagem de dois fluidos. Considera-se o intervalo de tempo total simulado para o caso B(HT) de 10 segundos. Considera-se os dados experimentais de Luo (1987), e os resultados de simulação de Tsuo e Gidaspow (1990), Cabezas-Gómez e Milioli (2003), e Georg (2005).

É amplamente reconhecido que os dados experimentais de Luo (1987) são de fato bastante imprecisos, principalmente em regiões de baixa concentração de sólidos longe das paredes (TSUO; GIDASPOW, 1990; GIDASPOW, 1994). Contudo, permitem ao menos uma razoável comparação quantitativa em regiões próximas às paredes, e avaliações qualitativas longe destas.

Antes de qualquer análise comparativa convém ter em mente, além da imprecisão dos dados empíricos disponíveis, que as atuais simulações com modelos de dois fluidos em domínios reais são ainda bastante grosseiras. Isso decorre da carência de correlações sub-malha que recuperem as características do escoamento filtradas pelas atuais malhas grosseiras, que são impostas pelo estado da arte dos recursos computacionais. Note-se também que não está estabelecido que a reologia Newtoniana-Stokesiana, usualmente assumida, seja válida para escoamentos gás-sólido. Uma demonstração nesse sentido requereria a geração de resultados de simulação acurados em relação a dados experimentais, e o atual estado da arte ainda não foi capaz de produzir tais resultados. Por outro lado, a literatura provê um argumento que parece sugerir a não validade da reologia Newtoniana-Stokesiana para escoamentos gás-sólido: o comportamento de meso escala de escoamentos gás-sólido resulta inverso em relação ao comportamento de escoamentos monofásicos turbulentos. Não parece razoável que escoamentos com o mesmo comportamento de micro escala produzam comportamentos de meso escala inversos. Os aspectos acima recomendam abordagens conservadoras em quaisquer análises comparativas.

Tsuo e Gidaspow (1990) e Cabezas-Gómez e Milioli (2003) realizaram simulações em malhas bidimensionais extremamente grosseiras, utilizando o modelo B, e o código numérico

MFIX em versões anteriores. Em Georg (2005) e no presente trabalho foram usadas malhas tridimensionais mais refinadas, porém ainda bastante grosseiras, o modelo A, e o código numérico CFX. A Tabela 5 mostra as principais diferenças implementadas nas diferentes simulações, i.e., fases tratadas como meio contínuo, condição de contorno para a fase sólido na parede, domínio e malha numérica, procedimento de interpolação para termos advectivos, e intervalo de tempo para cálculo de médias temporais. Além destas, há outras diferenças relacionadas a condições iniciais, condições de contorno de saída, metodologia numérica (tratamento do acoplamento pressão x velocidade, técnica de solução, tipo de malha numérica, avanço de tempo, e critério de convergência), e computadores utilizados.

Tabela 5. Principais diferenças implementadas em diferentes simulações do caso B(HT).

	Tsuo e Gidaspow (1990)	Cabezas-Gómez e Milioli (2003)	Georg (2005)	Presente trabalho
Hipótese de meio contínuo	Fase gás e mistura (modelo B)	Fase gás e mistura (modelo B)	Fases gás e sólido (modelo A)	Fases gás e sólido (modelo A)
Condição de contorno na parede para fase sólido	Deslizamento parcial	Deslizamento parcial	Não deslizamento	Deslizamento livre
Domínio e malha numérica	Bidimensional, malha retangular uniforme 7,62 x 76,2 mm	Bidimensional, malha retangular uniforme 7,62 x 76,2 mm	Tridimensional, malha hexaédrica uniforme 5,1 x 5,1 x 9,3 mm	Tridimensional, malha tetraédrica não uniforme aresta média 9,4 mm
Interpolação de termos advectivos	Upwind de 1a. ordem	Upwind de 1a. ordem	Alta resolução de 2a. ordem	Alta resolução de 2a. ordem
Intervalo de tempo das médias temporais	De 10 a 15 s de simulação	De 20 a 100 s de simulação	De 2,84 a 12,84 s de simulação	10 s em região estatisticamente permanente

Dentre os aspectos considerados na Tabela 5, estima-se que o caráter bi ou tridimensional e o refinamento da malha numérica, e o procedimento interpolativo para termos advectivos, sejam os fatores mais críticos. Espera-se que a condição de contorno na parede para a fase sólido exerça um efeito significativo nos perfis hidrodinâmicos próximos à parede. Note-se também que o intervalo de tempo sobre o qual as médias temporais são calculadas também apresenta-se como fator crítico caso as médias não sejam determinadas em intervalo de tempo dentro do regime estatisticamente permanente. As variações na aplicação da hipótese de meio contínuo são incluídas na Tabela 5 apenas para enfatizar tais diferenças, já que este fator não afeta significativamente as previsões (AGRAWAL et al., 2001).

As Figuras 48 a 51 mostram resultados médios temporais do presente trabalho em comparação com dados experimentais e resultados de outras simulações. As figuras mostram perfis de velocidades axiais do gás e do sólido, da fração volumétrica de sólido, e do fluxo mássico de sólido, respectivamente, na seção transversal 3,4 m acima da entrada. Observa-se grandes discrepâncias em relação aos dados empíricos em todas as previsões, exceto a de Tsuo e Gidaspow (1990). Isso não era esperado já que esses autores aplicaram malhas bidimensionais grosseiras, e procedimento interpolativo de 1a. ordem para termos advectivos, em contraposição às malhas tridimensionais mais finas e ao procedimento interpolativo de 2a. ordem aplicados por Georg (2005) e no presente trabalho. Essa contradição é evidência da crueza dos atuais modelos de dois fluidos, e da conseqüente necessidade de melhores modelos reológicos e correlações sub-malha.

Figura 48. Perfis temporais médios da velocidades axial do gás na seção transversal 3,4 m acima da entrada, caso B(HT).

Figura 49. Perfis temporais médios da velocidades axial do sólido na seção transversal 3,4 m acima da entrada, caso B(HT).

Figura 50. Perfis temporais médios da fração volumétrica de sólido na seção transversal 3,4 m acima da entrada, caso B(HT).

Figura 51. Perfis temporais médios do fluxo mássico de sólido na seção transversal 3,4 m acima da entrada, caso B(HT).

Nas Figuras 48 e 49 observa-se que, em relação às demais simulações, a presente simulação prediz valores mais elevados de velocidades axiais de ambas as fases nas paredes. A Figura 50 mostra que as frações volumétricas de sólido da presente simulação são mais elevadas que aquelas previstas em todas as demais simulações, principalmente nas paredes. Esses fatos devem-se, possivelmente, à aplicação de deslizamento livre para a fase sólido nas paredes, enquanto nas outras simulações foi aplicado deslizamento parcial ou não deslizamento.

Em consequência das elevadas frações volumétricas de sólido nas paredes, a presente simulação prediz fluxos mássicos de sólido descendentes bastante elevados nestas regiões, como visto na Figura 51. O fluxo médio de sólido resultou negativo nas paredes, como esperado. Contudo, a Figura 49 mostra que a velocidade axial média do sólido resultou positiva nestas regiões. Esse fato deve-se a que as velocidades negativas ocorrem acompanhadas de grandes concentrações de sólido, enquanto as velocidades positivas ocorrem quando as concentrações de sólido são baixas.

Na Figura 51 nota-se com clareza que os resultados de Cabezas-Gómez e Milioli (2003), Georg (2005) e da presente simulação se equivalem e defasam significativamente dos dados empíricos de Luo (1987), enquanto o resultado de Tsuo e Gidaspow (1990) reproduz fielmente os dados experimentais.

Integrando-se as curvas da Figura 51 no diâmetro da coluna obtém-se fluxos mássicos de sólido médios no tempo e na seção transversal, para as várias simulações e empírico. A Tabela 6 mostra esses valores. O fluxo mássico de sólido é imposto na entrada da coluna em $24,9 \text{ kg/m}^2\text{s}$. No regime estatisticamente permanente, esse deve ser o valor médio temporal e na seção transversal para qualquer seção da coluna, tanto no caso empírico quanto em qualquer das simulações.

Tabela 6. Valores médios temporais e na seção transversal a 3,4 m, do fluxo mássico de sólido ($\text{kg/m}^2\text{s}$), previstos pelas várias simulações e empírico. (Em todos os casos o valor correto do fluxo de sólidos é de $24,9 \text{ kg/m}^2\text{s}$, conforme imposto na entrada da coluna).

Presente trabalho	Georg (2005)	Cabezas-Gómez e Milioli (2003)	Tsuo e Gidaspow (1990) *	Luo (1987) (empírico) *
43,4	41,6	46,5	24,5	27,2

* assumindo comportamento simétrico.

Note-se que os dados empíricos de Luo (1987) conduzem ao fluxo mássico de sólido correto com boa aproximação. Assim, evidencia-se que os perfis empíricos de Luo (1987), embora considerados imprecisos, conduzem a valores médios corretos. Dentre as várias simulações, todas apresentam grande discrepância em relação ao fluxo mássico de sólido correto, exceto a predição de Tsuo e Gidaspow (1990). De fato, o fluxo mássico de sólido predito por estes autores está muito próximo do valor correto. Não há explicação plausível para a surpreendente qualidade superior dos resultados de Tsuo e Gidaspow (1990) em relação às demais simulações. Essa conclusão é principalmente suportada pelo fato das simulações de Tsuo e Gidaspow (1990) serem idênticas às de Cabezas-Gómez e Milioli (2003), sendo a única diferença o intervalo de tempo considerado para o cálculo das médias temporais (respectivamente, dos 10 aos 15 s, e dos 20 aos 100 s). De fato, esperava-se que os resultados de Cabezas-Gómez e Milioli (2003) fossem melhores em virtude do intervalo de tempo mais significativo.

No presente trabalho esperava-se obter um fluxo mássico de sólidos mais próximo do correto do que os valores obtidos em todas as demais simulações. Na comparação com Cabezas-Gómez e Milioli (2005), esperava-se melhores resultados devido ao uso de malha numérica tridimensional mais refinada e interpolação de 2a. ordem para os termos advectivos. Cabezas-Gómez e Milioli aplicaram malha bidimensional grosseira e esquema upwind de primeira ordem. Na comparação com Georg (2005), esperava-se melhores resultados devido ao fato das médias temporais do presente trabalho terem sido calculadas exclusivamente na região estatisticamente permanente. Georg (2005) considerou no seu cálculo de médias temporais ao menos parte dos dados fora da região estatisticamente permanente.

5.5.2. Simulação reativa: absorção de SO₂ por calcário - caso B(RT)

As Figuras 52 e 53 mostram resultados da simulação de regime permanente usados como condição inicial na corrida transiente. Os gráficos mostram a evolução ao longo do procedimento iterativo de parâmetros médios na seção transversal da coluna 3,4 m acima da entrada. A Figura 52 mostra as velocidades axiais de ambas as fases. A Figura 53 mostra a fração volumétrica de sólido e a fração mássica de SO₂ na fase gás. Na medida em que as

iterações progridem observa-se, para todos os parâmetros, que estes passam a oscilar em torno de valores médios bem estabelecidos, indicando que o estágio inicial transiente da simulação foi superado. Obtém-se aqui o mesmo padrão já observado para os vários casos hidrodinâmicos, conforme descrito na Seção 5.4.1.1.

Figura 52. Evolução ao longo do procedimento iterativo das velocidades axiais médias de ambas as fases, na seção transversal a 3,4 m acima da entrada, para o caso B(RT).

Figura 53. Evolução ao longo do procedimento iterativo da fração volumétrica de sólido e da fração mássica de SO₂ na fase gás médias, na seção transversal a 3,4 m acima da entrada, para o caso B(RT).

5.5.2.1. Comportamento transiente

Na Figura 54 apresenta-se diagramas de tons de cinza mostrando a evolução temporal da fração volumétrica de sólido e da fração mássica de SO₂ no gás, ao longo de um setor de seção axial central da coluna. Os primeiros quadros à esquerda em cada sequência representam a predição de regime permanente usada como condição inicial da corrida transiente. Observa-se claramente na figura a presença e desenvolvimento de clusters, bem como o seu efeito sobre a fração mássica de SO₂. Como visto, em regiões onde a fração volumétrica de sólido é elevada, a fração mássica de SO₂ resulta menor.

5.5.2.2. Comportamento médio temporal

Resultados médios temporais da simulação transiente foram obtidos considerando o tempo total de simulação de 5 segundos. As Figuras 55 e 56 mostram resultados médios temporais ao longo do diâmetro, na seção transversal da coluna 3,4 m acima da entrada. A Figura 55

mostra perfis das velocidades axiais de ambas as fases, e do fluxo mássico de sólido. A Figura 56 apresenta perfis da fração volumétrica de sólido e da fração mássica de SO_2 no gás. Observa-se na Figura 56 que a absorção de SO_2 resulta maior próximo às paredes onde a fração volumétrica de sólido é maior. Observa-se que na parede esquerda a concentração de sólido resulta menor que na direita. Com isso, esperava-se que a fração mássica de SO_2 na parede esquerda resultasse maior que na direita. Contudo, isso não ocorreu. Observa-se que a velocidade axial de sólido e o fluxo mássico de sólido resultam maiores na parede direita que na esquerda. Isso implica em menor tempo de residência do sólido na região da parede direita, causando queda na absorção de SO_2 .

Figura 54. Fração volumétrica de sólido e fração mássica de SO_2 no gás, ao longo de um setor de seção axial central da coluna, para o caso B(RT).

Figura 55. Perfis médios temporais das velocidades axiais de ambas as fases, e do fluxo mássico de sólido, na seção transversal 3,4 m acima da entrada, para o caso B(RT).

Figura 56. Perfis médios temporais da fração volumétrica de sólido e da fração mássica de SO₂ no gás, na seção transversal 3,4 m acima da entrada, para o caso B(RT).

As Figuras 57 e 58 mostram perfis axiais ao longo da altura da coluna, de parâmetros médios temporais e na seção transversal. A Figura 57 mostra perfis das velocidades axiais de ambas as fases, e do fluxo mássico de sólido. A Figura 58 apresenta perfis da fração volumétrica de sólido e da fração mássica de SO₂ no gás.

Como visto na Figura 58, o gradiente axial da fração mássica de SO₂ no gás resulta bastante elevado na base da coluna, onde a concentração de sólido é maior. Ao longo da metade superior da coluna as concentrações de sólido e de SO₂ são reduzidas. Em consequência, a taxa de sulfatação decai a tal ponto que a fração mássica de SO₂ no gás tende ao patamar aproximadamente constante observado. Note-se que de fato a concentração de SO₂ cresce levemente acima de 3,5 m de altura, consequência evidente de recirculação promovida pelos clusters.

Na Figura 57 observa-se que as velocidades axiais médias de ambas as fases pouco variam com a altura da coluna. Em consequência o fluxo mássico de sólido, também mostrado na Figura 57, apresenta o mesmo comportamento da fração volumétrica de sólido mostrada na Figura 58 (já que $G_s = \rho_s \alpha_s v_s$).

Figura 57. Perfis axiais ao longo da altura da coluna, das velocidades axiais de ambas as fases e do fluxo mássico de sólido médios temporais e na seção transversal, para o caso B(RT).

Figura 58. Perfis axiais ao longo da altura da coluna da fração volumétrica de sólido e da fração mássica de SO₂ no gás médios temporais e na seção transversal, para o caso B(RT).

Em combustores de leito fluidizado circulante usualmente atinge-se remoções de SO₂ superiores a 90%, aplicando relações molares cálcio/enxofre (Ca/S) na alimentação entre 3 e 6 mol_{Ca} / mol_S (BASU; FRASER, 1991; BRERETON, 1997). Na presente simulação, contudo, a despeito de se ter aplicado condições típicas de combustores de leito fluidizado circulante, a remoção de SO₂ esperada não foi sequer aproximada. A Figura 58 mostra que a remoção de SO₂ obtida resultou apenas cerca de 30%. Em princípio, esse resultado ruim poderia ser consequência da aplicação de uma relação Ca/S na alimentação insuficiente, ou consequência de tempo de residência insuficiente devido à coluna ser demasiado curta. A primeira possibilidade é descartada já que foi considerada uma relação cálcio/enxofre na alimentação altamente superestimada ($Ca / S = 647,2 \text{ mol}_{Ca} / \text{mol}_S$)[†] em relação aos patamares empíricos usuais. Quanto à segunda possibilidade, a Figura 58 mostra que a fração mássica de SO₂ no gás torna-se aproximadamente constante a partir de cerca de 3 m de altura, indicando que colunas mais longas não proveriam reduções adicionais significativas na concentração de SO₂.

[†] $Ca / S = \left(\rho_s v_s \alpha_s A \frac{Y_{CaO,s}}{W_{CaO}} \right) \left(\rho_g v_g \alpha_g A \frac{Y_{SO_2,g}}{W_{SO_2}} \right)^{-1}$

O resultado não realista obtido para a remoção de SO₂ na coluna fortemente sugere que o coeficiente de taxa de reação de Therdthianwong (1994), assumido na presente simulação, não é realista.

5.6. Tempos de processamento computacional

A Tabela 7 mostra tempos de processamento computacional (tempos de CPU) das simulações para os casos B, hidrodinâmico e reativo, de regime permanente e de regime transiente. Nos casos de regime permanente, apresenta-se tempos de CPU para 1000 iterações do procedimento numérico, equivalentes a 1 segundo de tempo distorcido. Nos casos de regime transiente apresenta-se tempos de CPU para obtenção de 1 segundo de fluidização real. Os dados são apresentados para corridas com processamento paralelo, utilizando 2 e 20 processadores. Os dados da Tabela 7 para corridas transientes são extrapolados e apenas ilustrativos, já que os tempos de processamento variam com o número de iterações internas necessárias para convergência.

Tabela 7. Tempos de CPU para as simulações dos casos B (permanente e transiente, hidrodinâmico e reativo, i.e. casos B(HP), B(RP), B(HT) e B(RT)).

Simulações / Casos		Tempos de CPU (*)	
		2 processadores	20 processadores
Permanente (1 segundo distorcido: 1000 iterações)	Hidrodinâmico	13,2 horas	2,0 horas
	Reativo	19,9 horas	3,1 horas
Transiente (1 segundo real)	Hidrodinâmico	3,5 meses	23,9 dias
	Reativo	4,3 meses	32,4 dias

(*) valores médios ilustrativos (para 2 processadores, obtidos por extrapolação).

Os dados da Tabela 7 mostram que:

- a) Elevando de 2 para 20 processadores, reduz-se o tempo de CPU em mais de 6 vezes para corridas permanentes, e em mais de 4 vezes para corridas transientes.
- b) A inclusão de reação química aumenta o tempo de CPU em 35 % no caso permanente, e em 26 % no caso transiente (para 20 processadores).
- c) A simulação de 1 segundo real requer 23,9 dias de CPU, enquanto 1 segundo distorcido requer apenas 2 horas (casos hidrodinâmicos com 20 processadores).

Em vista do item (c), evidencia-se que a realização de corridas permanentes para o estágio inicial transiente das simulações, em substituição a corridas transientes, permite substituir muitos meses por dias de processamento computacional. Como visto nas Figuras 6, 7 e 8, para o caso B(HP), cerca de 25000 iterações do procedimento numérico foram suficientes para superar o estágio inicial transiente da simulação, e alcançar o regime estatisticamente permanente. Estas iterações foram realizadas em cerca de 2 dias de CPU utilizando 20 processadores. Considere-se, por outro lado, que sejam necessários 10 segundos de simulação transiente real para superar o estágio inicial transiente da simulação (seguindo CABEZAS-GÓMEZ; MILIOLI, 2003). Isso significa cerca de 8 meses de CPU utilizando 20 processadores.

Como ilustrado, esta estratégia permite virtualmente eliminar o tempo necessário para simulação do estágio inicial transiente (substituindo 8 meses por 2 dias de processamento). Assim, permite reduzir à metade o tempo total de qualquer simulação transiente de dois fluidos de leitos fluidizados circulantes. Isso é altamente significativo em vista dos elevados tempos de processamento destas simulações, tipicamente na escala de muitos meses.

6. Conclusões e sugestões para trabalhos futuros

6.1. Conclusões

Foram realizadas simulações de regimes permanente e transiente, do escoamento gás-sólido em leitos fluidizados circulantes, usando modelo de dois fluidos. Foram realizados estudos puramente hidrodinâmicos, e reativos de dessulfuração por calcário. As principais conclusões foram as seguintes:

- A etapa inicial transiente das simulações pode ser rapidamente superada aplicando-se simulação de regime permanente. Soluções não-convergadas geradas em simulações de regime permanente, consideradas como condição inicial para corridas transientes, permitem iniciá-las diretamente dentro da região de escoamento estatisticamente permanente.
- A estratégia acima permitiu grandes reduções de tempo de processamento computacional, fato altamente significativo em vista dos excessivos tempos de processamento requeridos pelas simulações transientes. Mostrou-se que a economia de tempo de processamento é da ordem de meses.
- Soluções não-convergadas de simulações de regime permanente, embora imprecisas, mostram-se qualitativamente corretas. Tais predições permitem detectar o comportamento esperado do escoamento, caracterizado por padrões core-anulares, desenvolvimento do clusters, grande recirculação, e maior concentração de sólido na base da coluna.
- Nas simulações em geral observou-se a formação dos esperados padrão core-anular e desenvolvimento de clusters. No entanto, em alguns casos, tanto o empacotamento de sólido na parede quanto os clusters foram progressivamente dissipados ao longo do procedimento iterativo. Esse comportamento foi atribuído à difusão numérica.
- Todas as simulações realizadas neste trabalho captaram estruturas coerentes geradas nas paredes da coluna apenas, e que foram dissipadas no escoamento livre. Não se conhece o

peso da difusão numérica nesse processo dissipativo. Com as malhas grosseiras aplicadas, não foram captadas estruturas coerentes com origem no escoamento livre.

- Nas simulações transientes, resultados médios temporais foram determinados considerando diferentes intervalos de tempo de simulação. Foram considerados o intervalo total simulado de 10 segundos, e intervalos parciais de 5 segundos. Embora os resultados médios para 10 segundos de simulação aparentassem mais representativos do escoamento médio, não foi possível estabelecer a independência dos resultados em relação ao intervalo de tempo de mediação.
- Grandes diferenças quantitativas foram observadas entre resultados hidrodinâmicos médios temporais de diferentes simulações de dois fluidos, e destas em relação a dados experimentais. As presentes simulações não se mostraram inferiores a outras disponíveis na literatura. Observou-se contradições entre predições, no sentido de que simulações mais grosseiras produziram melhores resultados. Esse fato evidencia a crueza dos atuais modelos de dois fluidos. Evidencia-se a necessidade de melhores correlações sub-malha, assim como a necessidade de verificação da reologia Newtoniana-Stokesiana.
- As simulações reativas indicaram maior remoção de SO_2 em regiões de maior concentração de sólido, e que o tempo de residência foi o fator chave definindo a extensão da absorção. As simulações permanentes mostraram que partículas maiores e a formação de clusters intensificam a absorção de SO_2 por aumentarem o tempo de residência na coluna. Os resultados médios temporais obtidos da simulação transiente mostraram que a remoção de SO_2 ao longo da altura da coluna foi altamente subestimada em relação aos padrões típicos esperados. Essa discrepância foi atribuída à aplicação de um coeficiente de taxa de reação não realista. Neste trabalho não se considerou resistências à reação devido ao transporte de massa entre partículas, e não se considerou decaimento da taxa de reação por efeitos intra-partícula. Os presentes resultados sustentam o fato de que predições reativas acuradas somente poderão ser obtidas se descrições hidrodinâmicas rigorosas forem combinadas com descrições reativas igualmente rigorosas.

6.2. Sugestões para trabalhos futuros

- **Estudos sub-malha**

Até o presente não há na literatura simulações em malha grosseira onde se tenha captado clusters com origem que não na parede. O conhecimento empírico mostra que os clusters formam-se ao longo de todo o escoamento, independente da presença de paredes. Agrawal et al. (2001) demonstraram que os modelos de dois fluidos são capazes de captar estes clusters, desde que malhas suficientemente refinadas sejam aplicadas (ordem de 1mm). Infelizmente, os atuais recursos computacionais não permitem trabalhar domínios reais com tal refinamento de malha. O fato de não se captar clusters no escoamento livre com malha grosseira pode se dever ao “filtro sub-malha”, que dissipa quaisquer estruturas menores que o tamanho de malha (meso estruturas), as quais dão origem as estruturas maiores (macro estruturas). Há necessidade da geração de correlações sub-malha que recuperem as informações médias dos escoamentos “filtradas” pelas malhas grosseiras. A literatura apresenta algumas tentativas nesse sentido, porém as correlações geradas são aplicáveis apenas aos casos que lhes deram origem. Há evidente necessidade da geração de correlações sub-malha generalizadas, notadamente para parâmetros de fase sólida (viscosidade, pressão, arrasto).

- **Estudos de difusão numérica**

Outra possibilidade para a não captação de clusters no escoamento livre é o possível efeito dissipativo devido à difusão numérica. A ocorrência de difusão numérica está associada à correção e precisão dos esquemas numéricos de interpolação para termos advectivos, e sabe-se que é agravada com o desalinhamento da malha computacional em relação à direção do escoamento. Para a investigação de efeitos dissipativos de difusão numérica, estudos poderiam ser realizados considerando malhas computacionais com diferentes orientações em relação ao escoamento, e aplicando diferentes esquemas interpolativos. Ainda, sabe-se que a aplicação de esquemas interpolativos de segunda ordem e superiores permite obter resultados mais precisos. Porém, no caso dos escoamentos gás-sólido, isso ocorre a um custo computacional elevadíssimo. Por outro lado, esquemas de primeira ordem, como o upwind,

que permitem processamento mais rápido, podem tornar os resultados altamente distorcidos. É clara a necessidade de esquemas interpolativos que garantam a correção e a precisão dos resultados, e propiciem tempos de processamento computacional aceitáveis.

- **Rheologia de escoamentos gás-sólido**

Simulações com modelos de dois fluidos em malhas refinadas têm mostrado que a viscosidade de meso escala da fase sólido é inversamente proporcional à taxa de deformação, ao contrário do que se observa em escoamentos monofásicos turbulentos (AGRAWAL et al., 2001). Isso invalida a aplicação de correlações sub-malha desenvolvidas para escoamentos monofásicos turbulentos aos escoamentos gás-sólido. Não há evidência de que a reologia destes escoamentos seja de fato Newtoniana, e há clara necessidade da verificação de tratamentos alternativos tanto para a mistura gás-sólido quanto para a fase sólido.

- **Busca de meso-estruturas em domínio de dimensões intermediárias**

Acredita-se ser possível estabelecer, através de simulação de regime permanente para caso com domínio de dimensões intermediárias (e.g. diâmetro 76,2 cm, altura 5,56 m), um máximo tamanho de malha computacional que permita captar clusters no escoamento livre. Tendo identificado tal malha, poder-se-ia iniciar simulação de regime transiente de longo prazo (possivelmente anos de processamento), de forma a se estabelecer um referencial para simulações com modelos de dois fluidos. Um tal referencial torna-se importante visto que comparações quantitativas com dados experimentais permanecem inviáveis.

- **Caracterização de regimes estatisticamente permanentes**

Os regimes estatisticamente permanentes são comumente avaliados de modo informal. Em termos mais rigorosos, o regime estatisticamente permanente é alcançado quando os momentos estatísticos de todas as variáveis do escoamento se tornam constantes no tempo. Através de estudos de soluções em região estatisticamente permanente pode-se estabelecer de

forma rigorosa o tempo de simulação necessário para que os resultados médios temporais sejam de fato representativos do regime estatisticamente permanente.

- **Efeito do escoamento sobre a taxa absorção de SO_2 por calcário**

Além de resistências cinético-químicas, os coeficientes de taxa de reação na absorção de SO_2 por calcário são altamente dependentes de resistências ao transporte de massa intra-partícula (através da estrutura de poros) e externos (através do meio). São também altamente dependentes do tamanho das partículas e das áreas superficiais de poros já que as reações são superficiais, e do tempo de reação devido ao mecanismo de bloqueio de poros. Seria altamente desejável implementar, nos modelos de dois fluidos reativos, coeficientes de taxa de reação incluindo tais relações de dependência. Infelizmente, não há dados empíricos ou semi-empíricos desta natureza disponíveis na literatura de absorção de SO_2 por calcário. Contudo, a partir do conhecimento fenomenológico disponível, é possível implementar primeiras aproximações ou correlações teóricas visando estudos qualitativos.

7. Referências bibliográficas

AGGARWAL, S. K.; FIX, G. J.; LEE, D. N.; SIRIGNANO, W. A. Numerical optimization studies of axisymmetric unsteady sprays. **J. of Computational Physics**, v. 50, 1983, p. 101-105.

AGRAWAL, K.; LOEZOS, P. N.; SYAMLAL, M.; SUNDARESAN, S. The role of meso-scale structures in rapid gas-solid flows. **J. Fluid Mech.**, v. 445, 2001, p. 151-185.

ANDERSON, T. B.; JACKSON, R. Fluid mechanical description of fluidized beds. Equations of motion. **Indust. Engng. Chem. Fundam.**, v. 6, 1967, p. 527-539.

ANDREWS IV, A. T.; LOEZOS, P. N.; SUNDARESAN, S. Coarse-grid simulation of gas-particle flows in vertical risers. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 44, n. 16, 2005, p. 6022-6037.

ÁVILA, I. **Estudo termogravimétrico da absorção de dióxido de enxofre por calcário**. 2005. 97 f. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2005.

BASU, P.; FRASER, S. A. **Circulating fluidized bed boilers: design and operations**. USA: Butterworth-Heinemann, 1991, 350 p.

BARTH, T. J.; JESPERSON, D. C. The design and application of upwind schemes on unstructured meshes. In: **27th. AIAA Aerospace Sciences Meeting**, USA, 1989.

BENYAHIA, S.; ARASTOOPOUR, H.; KNOWLTON, T. M.; MASSAH, H. 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, 2000, p. 24-33.

BOEMER, A.; QI, H.; RENZ, U.; VASQUEZ, S.; BOYSAN, F. Eulerian computation of fluidized hydrodynamics - a comparison of physical models. In: **13th International Conference on Fluidized Bed Combustion**, USA, 1995, Anais... v. 2, p. 775-787.

BOUILLARD, J. X.; LYCZKOWSKI, R. W.; GIDASPOW, D. Porosity distributions in a fluidized bed with an immersed obstacle. **AIChE J.**, v. 35, n. 6, 1989, p. 908-922.

BRERETON, C. **Combustion performance**. In: GRACE, J. R.; AVIDAN, A. A.; KNOLTON, T. M. Circulating fluidized beds. UK: Chapman & Hall, 1997, Cap. 10, p. 369-416.

CABEZAS-GÓMEZ, L.; MILIOLI, F. E., Numerical study on the influence of various physical parameters over the gas-solid two-phase flow in the 2D riser of a circulating fluidized bed. **Powder Technology**, v. 132, 2003, p. 216-225.

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

CAMARGO, F. L. **Qualificação de calcários Brasileiros quanto à absorção de SO₂ em leito fluidizado para condições típicas de combustão de carvão**. 2001. 131 f.. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2001.

CAMPBELL, C. S.; WANG, D. G. Particle pressure in gas-fluidized beds. **J. Fluid Mech.**, v. 227, 1991, p. 495-508.

CFX5.7. **Multiphase flow theory**. In: Solver theory manual. Canada: Ansys Canada Ltda, 2004a, p. 105-160.

CFX5.7. **Multiphase Flow modelling**. In: Solver modelling manual. Canada: Ansys Canada Ltda, 2004b, p. 147-206.

CFX5.7. **Discretization and solution theory**. In: Solver theory manual. Canada: Ansys Canada Ltda, 2004c, p. 227-250.

CRNKOVIC, P. M. **Análise termogravimétrica para a determinação de fatores que afetam a eficiência de sorção de SO₂ por calcários na combustão de carvões.** 2003. 127 f. Tese (Doutorado) - Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2003.

CROWE, C. T.; SHARMA, M. P.; STOCK, D. E., The particle-source-in-cell (PSI-Cell) model for gas-droplet flows. **ASME J. Fluid Engng.**, v. 99, 1977, p. 325-332.

DA SILVA, M. G. C. **Desenvolvimento de unidade experimental de leito fluidizado circulante para estudo do processo de remoção de SO₂ na combustão de carvão mineral com adição de calcário.** 1994. 213 f. Tese (Doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1994.

DAVIDSON, J. F. Symposium on fluidization - discussion. **Trans. Inst. Chem. Eng.**, v. 39, 1961, p. 230-232.

DING, J.; GIDASPOW, D. A bubbling model using kinetic theory of granular flow. **AIChE Journal**, v. 36, n. 4, 1990, p. 523-538.

DREW, D. A. Mathematical modeling of two-phase flow. **Ann. Rev. Fluid Mech.**, v. 15, 1983, p. 261-291.

DREW, D. A. Averaged field equations for two-phase media. **Studies in Applied Mathematics**, v. 50, 1971, p. 133-166.

DUCKOWICZ, J. K., A particle-fluid numerical model for liquid spray. **J. of Comput. Physics**, v. 35, 1980, p. 229-253.

ENWALD, H.; PEIRANO, E.; ALMSTEDT, A. -E. Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. **Int. J. of Multiphase Flow**, v. 22, 1996, p.21-66.

ERGUN, S. Fluid flow through packed columns. **Chem. Engng. Prog.**, v. 48, n. 2, 1952, p. 89-94.

GEORG, I. C., **Modelagem e simulação numérica tridimensional transiente do escoamento gás-sólido em um reator de craqueamento catalítico em leito fluidizado**. 2005. 292 f. Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2005.

GIDASPOW, D. **Current research in hydrodynamics of fluidization by Professor D. Gidaspow at IIT**. Disponível em: <www.chee.iit.edu/faculty/gidaspow.htm>. Acesso em: 13 de fevereiro de 2001.

GIDASPOW, D.; ETTEHADIEH, B. Fluidization in two-dimensional beds with a jet - Part II: hydrodynamic modeling. **Indust. Engng. Chem. Fundam.**, v. 22, 1983, p. 193-201.

GIDASPOW, D. **Multiphase flow and fluidization**. USA: Academic Press, 1994, 407 p.

GIDASPOW, D.; BEZBURUAH, R.; DING, J. **Hydrodynamics of circulating fluidized beds: kinetic theory approach**. In: POTTER, O. E.; NICKLIN, D. J. Fluidization VII. Potter e D.J. Nicklin, USA: Engineering Foundation, 1992, p. 75-82.

GIDASPOW, D.; HUILIN, L.; MANGER, E. Kinetic theory of multiphase flow and fluidization: validation and extension to binary mixtures. In: **19th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics**, Kyoto, 1996, Anais ... p. 25-31.

GLASSER, B. J.; SUNDARESAN, S.; KEVREKIDIS, I. G. From bubbles to clusters in fluidized beds. **Physical Review Letters**, v. 81, n. 9, 1998, p. 1849-1852.

GRACE, J. R.; BI, H. **Introduction to circulating fluidized beds**. In: GRACE, J. R.; AVIDAN, A. A.; KNOLTON, T. M. Circulating fluidized beds. UK: Chapman & Hall, 1997, Cap. 1, p. 1-20.

GRACE, J. R.; LIM, K. S. **Reactor modeling for high-velocity fluidized beds**. In: GRACE, J. R.; AVIDAN, A. A.; KNOLTON, T. M. Circulating fluidized beds. UK: Chapman & Hall, 1997, Cap. 15, p. 504-524.

HRENYA, C. M.; SINCLAIR, J. L. Effects of particle-phase turbulence in gas-solid flows. **AIChE Journal**, v. 43, n. 4, 1997, p. 853-869.

HUILIN, L.; GIDASPOW, D. Hydrodynamic simulations of gas-solid flow in a riser, **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 42, 2003, p. 2390-2398.

ISHII, M. **Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow**. Paris: Eyrolles, 1975, 248p.

JACKSON, R. The mechanics of fluidized beds. **Trans. Inst. Chem. Eng.**, v. 41, 1963, p. 13-28.

JACKSON, R. **The dynamics of fluidized particles**. In: Cambridge monographs on mechanics. USA: Cambridge University Press, 2000, 339 p.

JENKINS, J. T.; SAVAGE, S. B., A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic spherical particles. **J. Fluid. Mech.**, v. 130, 1983, p. 187-202.

KUIPERS, J. A. M.; VAN SWAAIJ, W. P. M.; GOLDSCHMIDT, M. J. V. **Current research in hydrodynamic of gas fluidized beds at Twente University**. Disponível em: <pkfap.ct.utwente.nl/research.html>. Acesso em: 14 de fevereiro de 2001.

KUIPERS, J. A. M.; VAN SWAAIJ, W. P. M. Application of computational fluid dynamics to chemical reaction engineering. **Reviews in Chemical Engineering**, v. 13, n. 3, 1997, p. 1-118.

KUNII, D. L.; LEVENSPIEL, O. **Fluidization engineering**. USA: John Wiley & Sons, 1969.

KUO, K. K. **Principles of combustion**. USA: John Wiley & Sons, 1986, 810 p.

LUN, C. K. K.; SAVAGE, S. B.; JEFFREY, D. J.; CHEPURNIY, N. Kinetic theories for granular flows: inelastic particles in couette flow and singly inelastic particles in a general flow field. **J. Fluid. Mech.**, v. 140, 1984, p.223-256.

LUO, K. M. **Experimental gas-solid vertical transport**. 1987. 214 f. Tese (Doutorado) - Illinois Institute of Technology, USA, 1987.

MASSOUDI, M.; RAJAGOPAL, K. R.; EKMANN, J. M.; MATHUR, M. P. Remarks on the modeling of fluidized systems. **AIChE J.**, v. 38, n. 3, 1992, p. 471-472.

MATHIESEN, V.; SOLBERG, T.; HJERTAGER, B. H. Predictions of gas/particle flow with an Eulerian model including a realistic particle size distribution. **Powder Technology**, v. 112, 2000, pp. 34-45.

MAYOR, P.; D'ANNA, G.; BARRAT, A.; LORETO, V. Observing brownian motion and measuring temperatures in vibration-fluidized granular matter. **New J. of Physics**, v. 7, n. 28, 2005, 16 p. Disponível em: <<http://www.njp.org/>>. Acesso em: 1 de março de 2006.

MILIOLI, F. E. A Model for particle size distribution and elutriation in fluidized beds. 1991. 230 f. Tese (Doutorado) - University of Sheffield, UK, 1991.

MILLER, A. L. **Dense, vertical gas-solid flow in a pipe**. 1991. 171 f. Tese (Doutorado) - Illinois Institute of Technology, USA, 1991.

MURRAY, J. D. On the mathematics of fluidization - part I: fundamental equations and wave propagation. **J. Fluid Mech.**, v. 22, 1965, p. 57-80.

NIEUWLAND, J. J.; VAN SINT ANNALAND, M.; KUIPERS, J. A. M.; VAN SWAAIJ, J. P. M. Hydrodynamics modeling of gas/particle flows in riser reactors. **AIChE Journal**, v. 42, n. 6, 1996, p. 1569-1582.

NUCLA. **Nucla ACFB demonstration project**. In: Project performance summary. Clean coal technology demonstration program, report DOE/FE-0392, USA: U. S. Department of Energy, 1999, 12p.

OVERTURF, B. W.; REKLAITIS, G. V. Fluidized-bed reactor model with generalized particle balances: parts I and II. **AIChE Journal**, v. 29, n. 5, 1983, p. 813-829.

ORR JR., C. **Particulate technology**. USA: Macmillan, 1966, p. 421.

PIGFORD, R. L.; BARRON, T. Hydrodynamic stability of fluidized beds. **Indust. Engng. Chem. Fundam.**, v. 4, 1965, p. 81-87.

PITA, J. A.; SUNDARESAN, S. Gas-solid flow in vertical tubes. **AIChE Journal**, v. 37, n. 7, 1991, p. 1009-1018.

PRICHETT, J. W.; BLAKE, T. R.; GARG, S. K. A numerical model of gas fluidized beds. **AIChE Symp. Ser.**, v. 74, n. 176, 1978, p. 134-148.

ROWE, P. N., Drag forces in a hydraulic model of a fluidized bed: part II. **Trans. IChemE**, v. 39, 1961, p. 175-180.

SINCLAIR, J. L.; JACKSON, R. Gas-particle flow in a vertical pipe with particle-particle interactions. **AIChE Journal**, v. 35, n. 9, 1989, p. 1473-1486.

SINCLAIR, J. L. **Hydrodynamic modeling**. In: GRACE, J. R.; AVIDAN, A. A.; KNOLTON, T. M. Circulating fluidized beds. UK: Chapman & Hall, 1997, Cap. 5, p. 149-180.

SOO, S. L. **Fluid dynamics of multiphase system**. Waltham: Blaisdell Publ., 1967.

SOUZA-SANTOS, M. L. A Comprehensive modelling and simulation of fluidized bed boilers and gasifiers. **Fuel**, v. 68, 1989, p. 1507-1521.

SUN, B. **Simulation of gas-liquid and gas-solid two phase flows**. 1987. 231 f. Tese (Doutorado) - Illinois Institute of Technology, USA, 1996.

SUNDARESAN, S.; AGRAWAL, K.; LOEZOS, P. **Current research at the Multiphase Flow Group of Princeton University**. Disponível em: <www.princeton.edu/~sundar/group.html>. Acesso em: 24 de janeiro de 2001.

SUNDARESAN, S. Hydrodynamics of multiphase flow reactors: current status and challenges. **AIChE Journal**, v. 46, n. 6, 2000, p. 1102-1105.

SYAMLAL, M.; ROGERS, W.; O'BRIEN, T. J. **MFIX theory guide**. In: MFIX documentation, technical note: DOE/METEC-94/1004, USA: U. S. Department of Energy, 1993, 49 p.

THERDTHIANWONG, A. **Hydrodynamics and SO₂ sorption in a circulating fluidized bed**. 1994. 219 f. Tese (Doutorado) - Illinois Institute of Technology, USA, 1994.

TSUO, Y. P.; GIDASPOW, D. Computation of flow patterns in circulating fluidized beds. **AIChE J.**, v. 36, n. 6, 1990, p. 885-896.

TSUO, Y. P. **Computation of flow regimes in circulating fluidized beds**. 1989. 208 f. Tese (Doutorado) - Illinois Institute of Technology, USA, 1989.

TURESO, J. P. **Estudo de uma planta piloto para combustão em leito fluidizado borbulhante de carvões minerais brasileiros com altos teores de cinzas e enxofre**. 2005. 172 f.. Tese (Doutorado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2005.

VAN WACHEM, B. G. M.; SCHOUTEN, J. C.; KRISHNA, R.; VAN DEN BLEEK, C. M. CFD modeling for gas-solid flows: qualitative and quantitative analysis of the various treatments. In: **3rd ASME/JSME Joint Fluids Engineering Conference**, USA, 1999.

WANG, X. S.; GIGGS, B. M.; RHODES, M. J. Modelling of circulating fluidized bed combustion of coal. **Fuel**, v. 73, n. 7, 1994, p. 1120-1127.

WEN, C. Y.; YU, Y. U. Mechanics of fluidization. **Chem. Engng. Prog. Symp. Series**, v. 62, 1966, p. 100-111.

YATES, J. G. **Fundamentals of fluidized-bed chemical processes**. In: Butterworths monographs in chemical engineering. UK: Butterworths, 1983, 222 p.

ZHANG, D. Z.; VAN DER HEYDEN, W. B. High-resolution three-dimensional numerical simulation of a circulating fluidized bed. **Powder Technology**, v. 116, 2001, p. 133-141.

Apêndice A.

Formulação do modelo de dois fluidos para escoamentos gás-sólido

A.1. Obtenção de equações locais instantâneas e condições de salto

Uma equação conservativa genérica pode ser obtida de um balanço integral num volume de controle fixo em relação a um sistema de coordenadas, cuja interface entre fases pode se mover, conforme ilustrado na Figura A.1.

Figura A.1. Volume de controle fixo contendo duas fases, com interface móvel.

Do balanço integral obtém-se

$$\frac{d}{dt} \int_{V_k(t)} \rho_k \psi_k dV = \int_{A_I(t)} \phi_I dA + \left(- \int_{A_k(t)} \rho_k \psi_k \vec{U}_k \cdot \vec{n} dA + \int_{V_k(t)} \rho_k \phi_k dV + \int_{A_k(t)} J_k \cdot \vec{n} dA \right) \quad (A1)$$

onde A_I é a área da superfície que separa as duas fases, A_k é a superfície do volume de controle que separa a fase k do meio externo, V_k é o sub-volume do volume de controle ocupado pela fase k , e $\vec{n}$ é o vetor normal às superfícies de controle.

A integral no termo do lado esquerdo da Equação A1 representa a variação total no tempo do parâmetro ψ_k no interior do sub-volume ocupado pela fase k . No lado direito da equação, a primeira integral representa o termo fonte de ψ_k na interface; a segunda integral representa o fluxo convectivo de ψ_k através da superfície que separa a fase k do meio; a terceira integral representa o termo fonte de ψ_k no interior do sub-volume ocupado pela fase k ; e a quarta integral representa o fluxo difusivo de ψ_k através da superfície que separa a fase k do meio.

A partir da Equação A1 pode-se obter uma equação conservativa local instantânea e uma condição de salto descritiva de interações de interface. Para tal aplica-se o teorema de Leibniz ao termo do lado direito da equação, e o teorema de Gauss aos termos de fluxo convectivo e difusivo do lado esquerdo. O teorema de Leibniz é dado por

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_k(t)} f dV = \int_{V_k(t)} \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{A_k(t)} f \vec{u} \cdot \vec{n}_k dA \quad (A2)$$

Assumindo $f = \rho_k \psi_k$, o termo do lado direito da equação de Leibniz torna-se idêntico ao termo do lado direito do balanço integral. Assim, obtém-se

$$\frac{d}{dt} \int_{V_k(t)} \rho_k \psi_k dV = \int_{V_k(t)} \frac{\partial(\rho_k \psi_k)}{\partial t} dV + \int_{A(t)} \rho_k \psi_k \vec{u} \cdot \vec{n} dA \quad (A3)$$

Como a fase k é delimitada pelas superfícies A_I e A_k , tem-se

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_k(t)} \rho_k \psi_k dV = \int_{V_k(t)} \frac{\partial(\rho_k \psi_k)}{\partial t} dV + \int_{A_k(t)} \rho_k \psi_k \vec{u}_k \cdot \vec{n} dA + \int_{A_I(t)} \rho_k \psi_k \vec{u}_I \cdot \vec{n} dA \quad (A4)$$

No balanço integral assume-se volume de controle fixo no espaço. Portanto, a velocidade $\vec{u}_k$ da superfície externa do volume de controle na região da fase k é nula, e obtém-se

$$\frac{d}{dt} \int_{V_k(t)} \rho_k \psi_k dV = \int_{V_k(t)} \frac{\partial(\rho_k \psi_k)}{\partial t} dV + \int_{A_I(t)} \rho_k \psi_k \vec{u}_I \cdot \vec{n} dA \quad (A5)$$

A seguir, aplica-se o teorema de Gauss aos fluxos convectivo e difusivo do balanço integral. O teorema de Gauss aplicado a funções vetoriais é dado pela seguinte equação

$$\int_V \nabla \cdot \vec{f} dV = \int_A \vec{f} \cdot \vec{n} dA \quad (\text{A6})$$

Considerando as duas superfícies A_k e A_I que delimitam o volume V_k da fase k , e substituindo o vetor genérico $\vec{f}$ pelo produto $\rho_k \psi_k \vec{U}_k$, e por $\vec{J}_k$, obtém-se, respectivamente,

$$\int_{A_k} \rho_k \psi_k \vec{U}_k \cdot \vec{n} dA = \int_{V_k} \nabla \cdot \rho_k \psi_k \vec{U}_k dV - \int_{A_I} \rho_k \psi_k \vec{U}_k \cdot \vec{n} dA \quad (\text{A7})$$

$$\int_{A_k} \vec{J}_k \cdot \vec{n} dA = \int_{V_k} \nabla \cdot \vec{J}_k dV - \int_{A_I} \vec{J}_k \cdot \vec{n} dA \quad (\text{A8})$$

Substituindo as Equações A5, A7 e A8 no balanço integral da Equação A1, e definindo $\dot{m}_k = \rho_k \vec{u}_I \cdot \vec{n}$, obtém-se

$$\int_{V_k(t)} \left[\frac{\partial(\rho_k \psi_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \psi_k \vec{U}_k) - \nabla \cdot \vec{J}_k - \rho_k \phi_k \right] dV + \int_{A_I(t)} [\psi_k \dot{m}_k + \vec{J}_k \cdot \vec{n} - \phi_I] dA = 0 \quad (\text{A9})$$

A Equação A9 exhibe a soma de dois termos igualados a zero. Isto pode ocorrer se ambos os termos forem idênticos e de sinais opostos, o que não é o caso, ou se ambos os termos individualmente igualam-se a zero. Assim, da Equação A9 obtém-se

$$\frac{\partial(\rho_k \psi_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \psi_k \vec{U}_k) - \nabla \cdot \vec{J}_k - \rho_k \phi_k = 0 \quad (\text{A10})$$

$$\psi_k \dot{m}_k + \vec{J}_k \cdot \vec{n} - \phi_I = 0 \quad (\text{A11})$$

Estas são, respectivamente, a equação conservativa local instantânea e a condição de salto para escoamentos bifásicos.

A.2. Obtenção das equações médias

Aplicando-se um procedimento de médias à equação local instantânea, e considerando a condição de salto, obtêm-se as equações conservativas médias dos modelos de dois fluidos. São comumente aplicadas médias volumétricas, temporais ou estatísticas. O operador de médias volumétricas é definido como

$$\langle \dots \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V (\dots) dx dy dz \quad (\text{A12})$$

O operador de médias temporais é definido como

$$\langle \dots \rangle_t = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} (\dots) dt \quad (\text{A13})$$

As médias estatísticas são definidas por

$$\langle \dots \rangle_\varepsilon = \int_\varepsilon (\dots) dP(\mu) \quad (\text{A14})$$

onde $P(\mu)$ representa a probabilidade do evento μ ocorrer, e ε representa todas as possibilidades possíveis.

Aplicando-se quaisquer procedimentos de médias, obtêm-se as equações conservativas dos modelos de dois fluidos para escoamentos gás-sólido, conforme apresentadas no Capítulo 4 (Equações 1 a 4 e 19 a 24). Note-se que, em virtude da aplicação dos procedimentos de médias, a condição de salto incorpora-se à equação conservativa média. Assim a condição de salto, que na formulação local instantânea representa uma condição de contorno entre fases, transforma-se em um efeito de campo na equação conservativa média.

Apêndice B.

Configurações numéricas

B.1. Malhas numéricas

Neste trabalho foram utilizadas as malhas numéricas 1, 2 e 3, com 206229, 556588 e 206236 elementos tetraédricos, respectivamente, conforme descrito na Figura 4 do Capítulo 5. Estas foram as malhas numéricas possíveis tendo em vista tempos de processamento computacional aceitáveis, e que simultaneamente permitiram captar importantes detalhes topológicos do escoamento como formação de clusters e o padrão core-anular.

Malhas mais grosseiras, com cerca de 100000 elementos tetraédricos, foram testadas. Estas, porém, não permitiram captar os desejados detalhes do escoamento.

Na tentativa de captar o escoamento com mais precisão, malhas muito mais refinadas que aquelas utilizadas também foram testadas. Além de maior número de elementos, estas malhas também contavam com refinamento nas paredes na forma de camadas infladas de elementos prismáticos. Numa das malhas testadas considerou-se 8 camadas infladas de prismas junto às paredes, primeira camada de prismas com espessura de 1 mm, e fator de expansão de 1,2. Fora da camada inflada foram considerados elementos tetraédricos, de forma que entre prismas e tetraedros, obteve-se uma malha de 932705 elementos. Esta malha apresentou dois impedimentos: tempo de processamento computacional inviável, e insuficiência de memória RAM no cluster de PCs utilizado.

Foram testadas diversas malhas com diferentes espaçamentos e diferentes números de elementos. Algumas incluíam inflagem nas paredes, outras continham apenas elementos tetraédricos. As malhas 1, 2 e 3 utilizadas neste trabalho são o resultado final desta busca.

B.2. Avanço de tempo distorcido (simulações de regime permanente)

Um teste foi realizado para verificar o efeito, sobre a convergência, do avanço de tempo distorcido aplicado nas simulações de regime permanente. Em todas as simulações realizadas assumiu-se avanço de tempo distorcido de 1×10^{-3} s. Para o caso B(HP) aplicou-se também avanço de tempo distorcido de 5×10^{-4} s. A Figura B.1. mostra o efeito do avanço de tempo distorcido sobre a evolução através do procedimento iterativo, da velocidade axial do sólido média na seção transversal 3,4 m acima da entrada.

Observa-se que em ambos os casos, após superar um estágio inicial transiente, obteve-se o mesmo padrão oscilante do perfil, aproximadamente em torno do mesmo valor médio. Isso mostra que o avanço de tempo distorcido de 1×10^{-3} s é adequado.

Figura B.1. Efeito do avanço de tempo distorcido sobre a evolução através do procedimento iterativo, da velocidade axial do sólido média na seção transversal 3,4 m acima da entrada, para o caso B(HP).

B.3. Avanço de tempo real e número máximo de iterações (simulações transientes)

Nas simulações transientes existe um compromisso entre o avanço de tempo e o número de iterações para convergência, ou seja, avanços de tempo mais grosseiros requerem maior número de iterações para a convergência. No procedimento numérico (ver Figura 2 do Capítulo 4) fixa-se o número máximo de iterações a serem realizadas para cada avanço de tempo. Assim, num dado *time step* pode-se obter convergência, ou simplesmente avançar para um novo patamar de tempo sem que tenha havido convergência. Evidentemente apenas resultados convergidos devem ser considerados válidos.

Para um dado avanço de tempo, deve-se procurar um número máximo de iterações que permita obter número razoável de *steps* convergidos. Deve-se também procurar um avanço de tempo para que o número de iterações para convergência não seja excessivo. Neste trabalho, testes foram realizados na busca do melhor par de parâmetros que permitisse convergência, e não redundasse em excessivo tempo de processamento. Para o caso da simulação hidrodinâmica transiente B(HT), aplicou-se avanços de tempo de 10^{-1} , 10^{-2} , 10^{-3} , 10^{-4} , 10^{-5} e 10^{-6} segundos. Para avanços de tempo de 10^{-1} , 10^{-2} e 10^{-3} segundos não se obteve convergência em 2000 iterações do procedimento numérico. Para avanços de tempo de 10^{-4} , 10^{-5} e 10^{-6} segundos obteve-se convergência em número decrescente de iterações. Frequentemente, apenas uma única iteração foi necessária para convergência nos avanços de tempo de 10^{-5} e 10^{-6} segundos. Para o avanço de tempo de 10^{-4} segundos obteve-se convergência com grande frequência, em 4 ou 5 iterações. Nesse caso, observou-se que quando o número de iterações excedeu a 10, dificilmente obteve-se convergência (mesmo em 2000 iterações).

Observou-se que os avanços de tempo refinados (10^{-5} e 10^{-6} segundos) implicavam em excessivos tempos de processamento, embora se obtivesse resultados convergidos em cada *time step*. Por outro lado, observou-se que avanços de tempo grosseiros (10^{-1} , 10^{-2} e 10^{-3} segundos) implicavam em não-convergência ou em número excessivo de *time steps* não convergidos. O avanço de tempo de 10^{-4} segundos mostrou-se ideal, permitindo convergência em número significativo de *time steps*, e em tempo de processamento aceitável. Assim, estabeleceu-se o avanço de tempo em 10^{-4} segundos e o número máximo de 10 iterações em cada avanço, aplicados neste trabalho.

B.4. Critério de convergência (rms)

Neste trabalho foi aplicado um critério de convergência rms (*root mean square*) de 10^{-5} seguindo recomendações dos manuais do CFX5.7 (CFX5.7, 2004b).

Segundo os manuais, resultados obtidos com rms maior ou igual a 10^{-4} são grosseiros, provendo apenas uma idéia qualitativa dos fenômenos físicos envolvidos. Para aplicações em pesquisa o valor 10^{-5} é o mínimo aceitável, garantindo confiabilidade de resultados e permitindo convergência em tempos de processamento computacional não proibitivos.

B.5. Esquema de interpolação na discretização de termos advectivos - dissipação numérica de clusters

A Figura B.2. apresenta o resultado de uma tentativa para redução de tempo de processamento computacional em corrida transiente. A tentativa consistiu em, a partir de um dado instante, na corrida transiente, aplicar interpolação upwind de 1a. ordem para os termos advectivos, em substituição ao esquema de 2a. ordem. O caso considerado foi o B(HT). Os resultados são da distribuição da fração volumétrica de sólido ao longo de um plano axial no centro da coluna.

A figura superior mostra a seqüência normal dos resultados para esquema de interpolação de 2a. ordem. A figura inferior mostra a seqüência de resultados após inclusão do esquema upwind de 1a. ordem. O intervalo entre diagramas sucessivos é de 0,1 s, e cada seqüência total corresponde a 4,1 s de simulação. O tom vermelho indica altas frações de sólidos. O tom azul indica baixas frações de sólidos.

Observa-se na figura inferior que aplicando interpolação upwind de 1a. ordem as estruturas coerentes foram totalmente dissipadas, e não houve re-formação. Aparentemente, esse efeito resulta de forte difusão numérica imposta pelo esquema upwind de 1ª. ordem.

Figura B.2. Fração de sólido ao longo de um plano axial no centro da coluna, para o caso B(HT). A figura superior mostra a sequência de resultados para esquema de interpolação de 2a. ordem. A figura inferior mostra a sequência após inclusão do esquema upwind de 1a. ordem. O intervalo entre diagramas sucessivos é de 0,1 s; o tom vermelho indica altas frações de sólidos, o azul indica baixas frações.

B.6. Esquema de interpolação na discretização de termos transientes

A ordem do esquema interpolativo aplicado na discretização de termos transientes afeta a precisão dos resultados transientes, embora não se saiba o quanto em escoamentos gás-sólido. Assim, foram testados esquemas de interpolação de primeira e de segunda ordem (*backward Euler* de primeira e segunda ordem).

Num teste com o caso B(HT), realizou-se 294 iterações aplicando ambos os esquemas interpolativos. Os resultados obtidos foram bastante semelhantes. Contudo, o tempo de processamento computacional resultou inferior para interpolação de 1a. ordem (17,5 horas versus 20,6 horas para interpolação de 2a. ordem). Como os resultados foram semelhantes e a diferença no tempo de processamento computacional não foi desprezível, optou-se por interpolação de 1a. ordem para os termos transientes.

Apêndice C.

Desempenho do cluster de PCs

O desempenho do cluster de PCs foi avaliado através de simulações com o CFX5.7, para o caso B(HP). A Tabela C.1 mostra os tempos de processamento computacional em simulações com diferentes números de processadores, estabelecendo o desempenho do cluster de PCs em corridas paralelas.

Tabela C.1. Tempos de processamento computacional em função do número de processadores utilizados do cluster de PCs (10 máquinas com 2 processadores Intel Zeon 3.06 MHz e 1 Gb de memória RAM), para o caso B(HP).

Número de PCs	Número de processadores	Tempo de processamento para 100 iterações no CFX5.7 (minutos)
1	2	81,7
2	4	43,1
3	6	30,9
4	8	24,0
5	10	19,4
6	12	16,8
7	14	15,0
8	16	13,6
9	18	13,1
10	20	12,4

A Figura C.1. mostra curva do tempo de processamento computacional em função do número de processadores utilizados. Nota-se a esperada redução progressiva do ganho em tempo de processamento com o aumento do número de processadores. Quanto maior o número de processadores, menor o ganho pela inclusão de processadores adicionais. Reduz-se o tempo de processamento de 47 % passando de 2 para 4 processadores, e de apenas 4 % passando de 18 para 20 processadores.

Consegue-se reduções de tempo de processamento altamente significativas para simulações com até 6 processadores. A inclusão de processadores adicionais causa reduções de tempo de processamento cada vez menos significativas. Assim, definidos casos a serem simulados, configura-se mais conveniente rodá-los simultaneamente em menos processadores, em vez de rodá-los seqüencialmente, utilizando-se todos os 20 processadores em cada caso.

Figura C.1. Tempo de processamento computacional em função do número de processadores, para o caso B(HP).

Apêndice D.

Dificuldades

Durante as simulações com o CFX5.7 aplicando processamento computacional paralelo, os seguintes problemas ocorreram:

- A aplicação do CFX5.7 para simulação de dois fluidos não é convencional, exigindo conhecimento detalhado tanto de modelagem de dois fluidos quanto do procedimento numérico de solução. Escolhas de modelos parciais, tais como de arrasto e de pressão de sólido, exigiram conhecimento específico. Inúmeros testes foram necessários para estabelecimento de configurações numéricas adequadas. Cerca de dois anos de estudos físicos e numéricos foram necessários antes que resultados coerentes pudessem ser obtidos (capturando configurações de escoamento corretas, mostrando as esperadas estruturas coerentes).
- Interrupção da simulação com retorno de “Código 1”. Este erro ocorreu com grande frequência, implicando muitas vezes em perdas consideráveis de resultados. Embora os manuais do CFX não esclareçam sobre o erro, aparentemente este deve-se a dificuldades de comunicação entre as diferentes máquinas do cluster. Suspeita-se que a arquitetura dos PCs e/ou a qualidade de seus componentes e/ou o protocolo de comunicação entre máquinas, estejam por trás das dificuldades, já que não se tem notícia deste erro ocorrendo em clusters de estações de trabalho de alto desempenho.
- Travamentos do sistema operacional por saturação do HD do máster (implicando em grande limitação de salvamento de resultados transientes).
- Travamentos do sistema operacional por outros motivos (desconhecidos).

Apêndice E.

Planejamento de publicações

Realizadas

- Resultados hidrodinâmicos de regime permanente (XVIII COBEM, 2005).
- Resultados reativos de regime permanente (XVIII COBEM, 2005).
- Resultados do estágio inicial transiente (Ansys Latin American Users Conference, 2005).

Submetidas

- Resultados do estágio inicial transiente e do regime estatisticamente permanente (Powder Technology).
- Resultados hidrodinâmicos de regime permanente (J. of the Brazilian Society of Mechanical Sciences).
- Resultados reativos de regime permanente (J. of the Brazilian Society of Mechanical Sciences).
- Resultados reativos de regime transiente (XVI COBEQ, 2006).

Em preparação

- Resultados hidrodinâmicos de regime transiente (Brazilian J. of Chemical Engineering).
- Resultados reativos de regime transiente (Brazilian J. of Chemical Engineering).
- Resultados de regime estatisticamente permanente (XXVII CILAMCE, 2006).
- Resultados hidrodinâmicos de regime transiente (XXI ENCIT, 2006).

Previstas

- Resultados hidrodinâmicos e reativos transientes (XXX ENEMP, 2006).

Planejadas (resultados a serem complementados)

- Resultados em malhas hexaédricas / difusão numérica (Powder Technology).
- Resultados permanentes em malhas refinadas / origem de clusters (International J. of Multiphase Flow).
- Resultados estendidos a 20 s de simulação / intervalo de tempo de mediação (Powder Technology).