Vanessa Burque Ricci

**Caracterização de regimes estatisticamente
permanentes em leitos fluidizados circulantes**

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

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

**São Carlos
2008**

Para

Deus, familiares e amigos.

Agradecimentos

A Deus, Jesus, Nossa Senhora e ao Espírito Santo, pela força e sabedoria concedidas.

À minha família, pelo apoio a todo o momento.

À meus amigos, pelo companheirismo nas horas difíceis.

Ao meu orientador Prof. Dr. Fernando Eduardo Milioli, pela confiança.

À Dr. Christian Lea Coelho da Costa Milioli, pelos conselhos, paciência e atenções.

Ao corpo técnico e professores do Núcleo de Engenharia Térmica e Fluidos da EESC-SP.

“Provai e vede como o Senhor é bom,
feliz o homem que Nele confia”.

Salmo 33,9

Resumo

Ricci, B. V. **Caracterização de regimes estatisticamente permanentes em leitos fluidizados circulantes**. São Carlos, 2008. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos - EESC, Universidade de São Paulo - USP, 2008.

Reatores de leito fluidizado circulante são caracterizados por escoamentos altamente heterogêneos e instáveis. Devido a isso, operam em regimes pseudo-estacionários ou estatisticamente permanentes, onde os parâmetros do escoamento oscilam em torno de valores médios bem definidos. Neste trabalho estuda-se o comportamento de uma solução numérica para um escoamento típico de reatores de leito fluidizado circulante na região estatisticamente permanente. A simulação numérica foi realizada com o modelo de dois fluidos. A partir dos dados de simulação são estabelecidas médias e auto-correlações para as várias variáveis de interesse, considerando-se diferentes tempos de simulação ou diferentes tempos de observação. A partir destes resultados discute-se a questão do tempo mínimo de simulação necessário para que os resultados temporais médios sejam representativos do processo. Embora os resultados sugiram que 10 segundos de fluidização sejam suficientes para a geração de resultados médios temporais representativos, uma demonstração mais rigorosa permanece por ser executada.

Palavras-chave: caracterização do escoamento pseudo-estacionário, regime de funcionamento em *risers*, escoamento gás-sólido em leito fluidizado circulante.

Abstract

Ricci, B. V. **Characterization of statistically permanent schemes in circulating fluidized bed combustion**. São Carlos, 2008. Dissertation (Masters) - Escola de Engenharia de São Carlos - EESC, Universidade de São Paulo - USP, 2008.

Circulating fluidized bed reactors are characterized by highly heterogenic and instable flow. Due to this flow, the reactors operate under either pseudo-stationary or statistically permanent patterns, where the flowing parameters vary among well defined average values. This paper aims to study the behavior of a numeric solution for a typical flow of circulating fluidized bed reactors in the statistically permanent region. The numeric simulation was performed with the two-fluid model. From the simulation data both average and self-correlations are established for several variables of interest, considering either different simulation time or different observation time. From these results, the minimum simulation time necessary is discussed, so that the average temporal results can be considered representative in the process. Although the results suggest 10 seconds of fluidization are enough to generate the average temporal results, a more rigorous demonstration is supposed to be executed.

Keywords: characterization of flow pseudo-state, scheme operating in risers, gas-solid flow in circulating fluidized bed.

Lista de figuras

Figura 1 - Valores gerados pela tecnologia de reatores multi-fásicos. Adaptado de Dudukovic, 1999.....	24
Figura 2 - Nucla ACFB <i>Demonstration Project</i> construída na cidade de Nucla Colorado-USA.....	25
Figura 3 - Diagrama esquemático de um leito fluidizado circulante.....	26
Figura 4 - Ilustração de resultado de simulação transiente de escoamento gás-sólido em <i>riser</i> com modelo de dois fluidos (Milioli, 2006).....	27
Figura 5 - Classificação de dados aleatórios (BENDAT & PIERSOL, 1971).....	34
Figura 6 - <i>Ensemble</i> de funções amostrais formando um processo aleatório (BENDAT & PIERSOL, 1971).....	34
Figura 7 - Volume de controle genérico sobre o qual se pode fazer o balanço de propriedades na dedução das equações locais instantâneas e condições de salto. Adaptado de Enwald at al, 1997	39
Figura 8 - Esquema do procedimento de obtenção do modelo de dois fluidos. Adaptado de Enwald at al, 1997.....	40
Figura 9 - Detalhes da geometria e da malha numérica utilizadas na simulação que gerou os sinais analisados. Adaptado de C. C. Milioli (2006).....	44
Figura 10 - Evolução temporal da velocidade axial do gás média na seção transversal 3,4 m acima da entrada, para simulação em transiente distorcido seguida de simulação em transiente real (Milioli, 2006).....	48
Figura 11 - Evolução temporal da velocidade axial do sólido média na seção transversal 3,4 m acima da entrada, para simulação em transiente distorcido seguida de simulação em transiente real (Milioli, 2006).....	48

Figura 12 - Evolução temporal do fluxo de sólido médio na seção transversal 3,4 m acima da entrada, para simulação em regime transiente distorcido seguida de simulação em regime transiente real (Milioli, 2006).....	49
Figura 13 - Evolução temporal da fração volumétrica de sólido média na seção transversal 3,4 m acima da entrada, para simulação em regime transiente distorcido seguida de simulação em regime de transiente real (Milioli, 2006).....	49
Figura 14 - Perfis médios temporais da velocidade do gás ao longo do diâmetro na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando diferentes intervalos de tempo (Milioli e Milioli, 2008).....	51
Figura 15 - Perfis médios temporais da velocidade do sólido ao longo do diâmetro na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando diferentes intervalos de tempo (Milioli e Milioli, 2008).....	51
Figura 16 - 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 (Milioli e Milioli, 2008).....	52
Figura 17 - Perfis médios temporais da taxa de circulação de sólido ao longo do diâmetro na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando diferentes intervalos de tempo (Milioli e Milioli, 2008).....	53
Figura 18 - Velocidade da fase gás, v_g	59
Figura 19 - Velocidade da fase sólido, v_s	60
Figura 20 - Fração volumétrica de sólido, α_s	60
Figura 21 - Fluxo de sólido, G_s	61
Figura 22 - $\mu < v_g >$ em função do intervalo de tempo de observação.....	63
Figura 23 - $R < v_g >$ em função do intervalo de tempo de observação.....	63

Figura 24 - $\mu < v_s >$ em função do intervalo de tempo de observação.....	64
Figura 25 - $R < v_s >$ em função do intervalo de tempo de observação.....	64
Figura 26 - $\mu < \alpha_s >$ em função do intervalo de tempo de observação.....	65
Figura 27 - $R < \alpha_s >$ em função do intervalo de tempo de observação.....	65
Figura 28 - $\mu < G_s >$ em função do intervalo de tempo de observação.....	66
Figura 29 - $R < G_s >$ em função do intervalo de tempo de observação.....	66
Figura 30 - Fluxograma do procedimento numérico do CFD CFX (Milioli, 2006).....	75

Lista de tabelas

Tabela 1 - Propriedades físicas das fases gás e sólido. Adaptado de Milioli, 2006.....	45
Tabela 2 - Condições iniciais e de contorno adotadas na simulação Adaptado de Milioli, 2006.....	46
Tabela 3 - Sinal discreto obtido por simulação numérica computacional.....	55
Tabela 4 - Valores de média em função do intervalo de tempo de observação.....	61
Tabela 5 - Valores de auto-correlação em função do intervalo de tempo de observação.....	62

Lista de símbolos

g	Fase gasosa
s	Fase sólida
t	Tempo, (s)
V_g	Velocidade do gás, (m/s)
V_s	Velocidade do sólido, (m/s)
α_s	Fração volumétrica, (m_s^3/m^3)
G_s	Fluxo de sólido, (Kg/m^2s)
τ	Passo no tempo, (s)
k	Fase g ou s
$\vec{U}$	Vetor velocidade média, m/s
v	Componente do vetor velocidade média na direção axial, m/s
α	Fração volumétrica, m_k^3/m^3
ρ	Densidade, kg/m^3
μ	Viscosidade dinâmica, Pa.s
W	Peso molecular, kg/kmol
T	Temperatura, K
β	Função de arrasto na interface, kg/m^3s
τ	Tensor das tensões viscosas, Pa
I	Tensor unitário, adm
C_D	Coefficiente de arrasto para uma partícula em meio infinito, adm
d_p	Diâmetro de partícula, m
$\vec{F}$	Força de corpo por unidade de massa, N/Kg
$\vec{g}$	Aceleração da gravidade, m/s^2
P_g	Pressão, Pa
G	Módulo de elasticidade, Pa
R_u	Constante universal dos gases, J/kg.K
Re_p	Número de Reynolds baseado no diâmetro de partícula, adm
φ	Esfericidade de partícula, adm
$\mu_x < t_1 >$	Valor médio do processo aleatório $\{X(t)\}$ para o instante t_1
$R_x < t_1, t_1 + \tau >$	Função de auto-correlação do processo aleatório $\{X(t)\}$ para t_1
$\mu_x < k >$	Valor médio da k th função amostral
$R_x < k, \tau >$	Função de auto-correlação da k th função amostral
$\mu < x >$	Valor médio de um sinal $X(t)$
$R < x >$	Função de auto-correlação de um sinal $X(t)$

Sumário

1. Introdução.....	23
2. Estado da Arte.....	29
2.1. Simulação com modelo de dois fluidos.....	29
2.2. Métodos estatísticos de análise de dados (Bendat & Piersol, 1971).....	32
2.2.1 - Processos aleatórios estacionários.....	33
2.2.2. Processos aleatórios não-estacionários.....	36
2.2.3 Estacionariedade de registros amostrais.....	37
3. Metodologia.....	39
3.1. Modelo matemático.....	39
3.2. Condições de simulação.....	43
3.3. Resultados.....	46
3.4. Análise convencional.....	50
3.5. Análise estatística.....	54
4. Análise de resultados.....	59
5. Conclusões e sugestões para trabalhos futuros.....	69
Referências bibliográficas.....	71
Apêndice A.....	75

1. Introdução

Nas áreas de desenvolvimento tecnológico em engenharia há uma crescente tendência de substituição de experimentos onerosos por simulações computacionais. Em muitos casos, contudo, os processos envolvidos são de extrema complexidade, e os tempos de processamento computacional são elevadíssimos.

Em muitos processos, tais como aqueles que se desenvolvem em reatores multi-fásicos de leito fluidizado, não há regimes estacionários de operação. As máquinas operam em regimes pseudo-estacionários, também denominados estatisticamente permanentes. Nestes casos as simulações computacionais provêm resultados transientes dentro destes regimes, e resultados médios temporais são obtidos em intervalos de tempo de simulação suficientemente elevados.

O estabelecimento dos tempos mínimos de simulação necessários para obtenção de resultados médios temporais representativos torna-se um fator crucial a determinar, face aos elevados tempos de processamento computacional envolvidos. Neste trabalho analisa-se o impacto do tempo de simulação sobre os resultados médios temporais de um escoamento gás-sólido típico de reatores de leito fluidizado circulante.

Os escoamentos multi-fásicos estão presentes em diferentes setores da indústria, envolvendo processos de engenharia de extrema importância.

Estima-se que mais da metade de tudo o que a moderna sociedade industrial produz, dependa, em alguma extensão, de processos envolvendo escoamentos multi-fásicos (Prosperetti & Tryggvason, 2007).

Somente nos Estados Unidos, a cada ano, processos envolvendo escoamentos multi-fásicos movem cerca de setecentos bilhões de dólares, conforme observado por Dudukovic (1999), cujos dados são reproduzidos na figura 1.

Figura 1: Valores gerados pela tecnologia de reatores multi-fásicos. Adaptado de Dudukovic, 1999.

A Figura 1 dá uma idéia da importância econômica das tecnologias envolvendo estes escoamentos, dentre as quais se encontram os escoamentos bi-fásicos gás-sólido.

Pesquisas a respeito dos escoamentos gás-sólido que se desenvolvem em reatores de leito fluidizado circulante, visando a otimização de seus projetos, são de extrema importância em vista de sua intensa utilização em diferentes aplicações industriais. Pode-se citar, por exemplo, as indústrias de geração termoelétrica de energia e do petróleo.

O estudo da hidrodinâmica que se desenvolve em reatores de leito fluidizado por meio de projetos experimentais requer grandes investimentos financeiros,

abrangendo a casa das centenas de milhões de dólares. Como exemplo cita-se a planta de demonstração de combustão de carvão mineral em leito fluidizado circulante “Nucla ACFB Demonstration Project”, com capacidade de 100MW, mostrada na Figura 1.2, (NUCLA, 1999), cuja construção levou dois anos e meio e atingiu o valor de 112,3 milhões de dólares, e outros 54,7 milhões foram necessários para sua operação na etapa de levantamento de dados, etapa esta que durou outros dois anos e meio.

Além dos elevados custos envolvidos, é preciso notar que foram necessários aproximadamente cinco anos para a obtenção do conjunto de dados necessários para análise, isso porque se dispunha desde o princípio dos recursos necessários para sua construção e operação.

Figura 2: Nucla ACFB *Demonstration Project* construída na cidade de Nucla Colorado-USA.

Os altos custos envolvidos no empiricismo aliados ao presente estado da tecnologia de instrumentação, ainda incapaz de captar detalhes locais instantâneos dos escoamentos gás-sólido (Sundaresan, 2000), tem dado impulso à simulação numérica destes escoamentos.

Desta forma, o desenvolvimento de simulação numérica, ou experimentação computacional, tem se tornado cada vez mais importante nesta área, tanto por envolver custos muito menores quanto por permitir estimar parâmetros mais refinados, importantíssimos no que diz respeito à otimização de projetos.

Pode-se levantar também a questão da maior simplicidade e flexibilidade inerentes à simulação quando comparada com a experimentação. Caso haja necessidade de uma alteração na geometria da planta experimental para que se efetue um estudo em particular, modificações no aparato experimental são geralmente caras, demoradas e muitas vezes difíceis de executar. No caso de um experimento computacional, uma modificação de geometria é facilmente implementada modificando-se o desenho básico no módulo de geometria do CFD que estiver sendo empregado.

Figura 3: Diagrama esquemático de um leito fluidizado circulante.

A Figura 3 mostra o desenho esquemático de um leito fluidizado circulante que é composto basicamente de quatro partes, uma coluna ascendente (*riser*), um ciclone separador, uma coluna de retorno de sólido (*standpipe*), e uma válvula de retorno.

Em geral, nos escoamentos gás-sólido em leitos fluidizados circulantes, a preocupação está voltada para a determinação de resultados temporais médios, uma vez que o regime de funcionamento é estatisticamente permanente ou pseudo-estacionário. Nestes regimes os parâmetros relevantes do processo, tais como velocidades e frações de fase oscilam em torno de valores médios bem estabelecidos.

A Figura 4 mostra os dois estágios típicos da simulação do escoamento gás-sólido em um *riser* de leito fluidizado circulante; o primeiro é um estágio em regime transiente, partindo de uma condição inicial arbitrária e que corresponde à partida do reator, e o segundo é o regime estatisticamente permanente, tipo de regime em que operam os reatores deste tipo.

Figura 4: Ilustração de resultado de simulação transiente de escoamento gás-sólido em *riser* com modelo de dois fluidos (C.C. Milioli, 2006).

Em simulação numérica busca-se análises de resultados na região estatisticamente permanente. Portanto, é preciso definir em que ponto da simulação se estabeleceu o regime em questão. Outra questão relevante em simulação numérica refere-se ao tempo de processamento computacional necessário para a obtenção de resultados médios temporais representativos.

Uma simulação transiente de escoamento gás-sólido em *riser* pode requerer meses de processamento computacional. Como exemplo, C.C. Milioli (2006), simulou 10 segundos de fluidização real em cerca de 240 dias de processamento num *cluster* de PCs utilizando 20 *cores* Intel Xeon 3.06 GHz, 10 Gb RAM. Em decorrência desse elevado tempo de processamento, torna-se relevante a determinação precisa do início do regime estatisticamente permanente.

Este trabalho ocupa-se do estabelecimento do tempo de simulação necessário dentro do regime estatisticamente permanente para obtenção de resultados médios adequados.

Para tal, utilizam-se os resultados de simulação numérica de 10 segundos de fluidização do escoamento gás-sólido em *riser* com modelo de dois fluidos, obtidos por Milioli, (2006), e que foram estendidos até 20 segundos de fluidização em Milioli & Milioli, (2008).

O objetivo é estabelecer, de forma rigorosa, por meio de ferramentas estatísticas, o tempo mínimo necessário para obtenção de resultados médios temporais representativos.

Note-se que os presentes resultados serão válidos apenas para as condições particulares da simulação considerada. Uma vez que se varie parâmetros físicos, químicos ou numéricos da simulação, o tempo necessário para se atingir o regime pseudo-estacionário poderá ser alterado.

2. Estado da Arte

Serão analisados resultados de simulação de escoamentos gás-sólido em *riser*, obtidos com o modelo de dois fluidos. Estes são considerados, atualmente, a única alternativa praticável para a simulação do escoamento em *risers* (Sundaresan, 2000). Assim, a discussão de literatura que segue, refere-se aos resultados de simulação obtidos com estes modelos, onde os diferentes regimes da simulação estejam claramente definidos.

Também se inclui neste capítulo discussão relativa a métodos estatísticos de análise de dados, com objetivo de fundamentar a escolha do método estatístico a ser aplicado no presente trabalho (definida na seção 3.5).

2.1. Simulação com modelo de dois fluidos

De acordo com Milioli 2006, 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 adimensionais 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.

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 uma 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.

Sabe-se que simulações transientes do escoamento gás-sólido em risers podem facilmente requerer meses de processamento computacional. Na verdade, meses podem ser necessários apenas para transpor o estagio 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) observaram 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).

Todos estes autores apresentam resultados médios temporais no regime de escoamento estatisticamente permanente, para variados tempos de simulação. Não houve até o momento, na literatura, preocupação em estabelecer se o tempo simulado seria suficiente para se obter resultados representativos. Este é o principal aspecto abordado no presente trabalho.

2.2. Métodos estatísticos de análise de dados (Bendat & Piersol, 1971)

Qualquer dado proveniente de um fenômeno físico pode ser classificado como determinístico ou não-determinístico (ou aleatório). Dados determinísticos são aqueles que podem ser descritos por uma relação matemática explícita. Dados não-determinísticos não podem ser descritos por relações matemáticas explícitas. Estes são de caráter aleatório e devem ser descritos em termos de declarações probabilísticas e por médias estatísticas.

A classificação dos diversos fenômenos físicos como sendo determinísticos ou aleatórios, em termos práticos, é determinada sobre o critério de capacidade de reproduzi-los por experimentos controláveis. Assim, se um experimento produz dados específicos e ao ser repetido por várias vezes gera resultados idênticos (dentro de um limite de erro experimental), os dados podem ser considerados determinísticos, caso contrário, são ditos de natureza aleatória.

Os dados, representando fenômenos determinísticos, podem ser categorizados como periódicos e não-periódicos. Os dados determinísticos periódicos podem ser classificados como senoidais ou complexos. Os dados periódicos complexos são definidos matematicamente por funções temporais periódicas; são frequentemente expressos em termos de séries de Fourier. Dados determinísticos não-periódicos são descritos por funções temporais representativas dos fenômenos que representam.

Os dados não-determinísticos ou aleatórios representam fenômenos físicos aleatórios, que não podem ser descritos por uma relação matemática explícita, pois cada observação do fenômeno será única, ou seja, qualquer observação registrada representará somente um dos possíveis resultados que poderá ter ocorrido.

Os processos aleatórios são classificados como estacionários ou não-estacionários, os quais se subdividem em outras duas categorias como ilustrado na Figura 5.

2.2.1 - Processos aleatórios estacionários

Quando um fenômeno é considerado aleatório, suas propriedades hipoteticamente são descritas em qualquer instante pelo cálculo de valores médios sobre a coleção

de funções amostrais (também chamada de *ensemble*). Apresenta-se na Figura 6 um exemplo de ensemble.

Figura 5: Classificação de dados aleatórios (BENDAT & PIERSON, 1971).

Figura 6: *Ensemble* de funções amostrais formando um processo aleatório (BENDAT & PIERSON, 1971).

Observa-se que o valor médio do processo aleatório em algum tempo t_1 pode ser computado somando-se os valores instantâneos de cada função amostral do

ensemble no tempo t_1 e dividindo esta soma pelo número de funções amostrais. De forma similar, para calcular a correlação entre os valores do processo aleatório em dois diferentes tempos (chamada de função de auto-correlação), basta fazer a média do produto dos valores instantâneos em dois tempos t_1 e $t_1 + \tau$. Isto é, para um processo aleatório $\{X(t)\}$, onde $\{ \}$ é usado para denotar um ensemble de funções amostrais, o valor médio $\mu_x < t_1 >$ e a função de auto-correlação $R_x < t_1, t_1 + \tau >$ são dados por:

$$\mu_x < t_1 > = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N x_k(t_1) \quad (1)$$

$$R_x < t_1, t_1 + \tau > = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N x_k(t_1) x_k(t_1 + \tau) \quad (2)$$

Para o caso geral onde $\mu_x < t_1 >$ e $R_x < t_1, t_1 + \tau >$ variam conforme varia t_1 , o processo $\{X(t)\}$ é considerado não-estacionário, caso contrário o processo é denominado fracamente estacionário ou estacionário no sentido amplo. Logo para processos fracamente estacionários tem-se $\mu_x < t_1 > = \mu_x$ e $R_x < t_1, t_1 + \tau > = R_x < \tau >$.

Para uma infinita coleção (de grande ordem) de funções amostrais do processo $\{X(t)\}$, onde todos os possíveis momentos são invariantes no tempo, o processo é denominado fortemente estacionário ou estacionário no sentido estrito do termo.

Anteriormente verificou-se que propriedades de um processo aleatório podem ser mensuradas por meio de médias do *ensemble*. Porém, em alguns casos, as propriedades de um processo aleatório estacionário podem ser determinadas calculando-se as médias no tempo sobre funções amostrais específicas do

ensemble. Para tal, considera-se a k th função amostral de um *ensemble*; o valor médio e a função de auto-correlação da k th função amostral são:

$$\mu_x < k > = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T x_k(t) dt \quad (3)$$

$$R_x < \tau, k > = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T x_k(t) x_k(t + \tau) dt \quad (4)$$

Quando o processo aleatório é estacionário, e as propriedades definidas nas equações (3) e (4), não se diferenciam quando computadas sobre funções amostrais diferentes, o processo é chamado de *ergodic*. Para processos aleatórios *ergodic*, o valor médio e a auto-correlação (bem como todas as outras propriedades medidas no tempo) são iguais para os correspondentes valores medidos do ensemble, ou seja, $\mu_x < k > = \mu_x$ e $R_x < \tau, k > = R_x$.

2.2.2. Processos aleatórios não-estacionários

Processos aleatórios não-estacionários são todos os que não cumprem as exigências de estacionariedade citadas anteriormente. Exceto que se imponham restrições sob as propriedades do processo não-estacionário, tais processos são funções variando no tempo, os quais podem ser determinados apenas pelo desempenho médio instantâneo sobre o *ensemble* de funções amostrais do processo. Na prática, nem sempre é viável obter um número suficiente de registros

amostrais que permita a mensuração precisa de propriedades por meio de médias sobre o *ensemble*.

Em muitos casos, os dados aleatórios não-estacionários produzidos por um fenômeno físico real são classificados dentro de uma categoria especial de não-estacionariedade que simplifica problemas de medições e análises do fenômeno.

Por exemplo, considere um processo aleatório $\{Y(t)\}$, onde cada função amostral é dada por $Y(t)=A(t)X(t)$. Neste caso $X(t)$ é uma função amostral de um processo aleatório estacionário $\{X(t)\}$ e $A(t)$ é o fator de multiplicação determinístico.

Se os dados aleatórios não-estacionários correspondem a um modelo conforme o exemplo acima, a média do *ensemble* nem sempre é precisa para descrever os dados. As diversas propriedades desejadas algumas vezes podem ser estimadas a partir de um único registro amostral.

2.2.3 Estacionariedade de registros amostrais

O conceito de estacionariedade discutido anteriormente relata propriedades para um *ensemble* de processos aleatórios. Contudo, dados na forma de registros individuais no tempo também são classificados como sendo estacionários ou não-estacionários, porém com diferenciada interpretação.

Para tal, considera-se um único registro amostral x_k , obtido pela k th função amostral do processo aleatório $\{x(t)\}$. Define-se um valor médio e função de auto-correlação sobre um curto intervalo de tempo T de início t_1 como:

$$\mu_x < t_1, k > = \frac{1}{T} \int_{t_1}^{t_1+T} x_k(t) dt \quad . \quad (5)$$

$$R_x < t_1, t_1 + \tau, k > = \frac{1}{T} \int_{t_1}^{t_1+T} x_k(t) x_k(t + \tau) dt \quad (6)$$

Para o caso onde as propriedades definidas nas equações (5) e (6) variam significativamente quando o tempo t_1 varia, o registro histórico temporal é classificado como não-estacionário. Já quando as propriedades não variam significativamente quando o tempo t_1 varia, o registro é estacionário.

Considera-se neste caso a palavra “significativamente” com o sentido de que as variações observadas são maiores do que seria esperado devido a variações normais da amostra estatística.

3. Metodologia

A metodologia em questão aplica-se a quaisquer conjuntos de dados, sejam experimentais ou obtidos de simulação computacional. Como os dados experimentais são freqüentemente referidos como “sinais”, esta denominação será também usada para os dados correntes de simulação.

3.1. Modelo matemático

Como já mencionado, a simulação foi realizada utilizando o modelo de dois fluidos, considerado o modelo mais prático para simular escoamentos bi-fásicos gás-sólido (Sundaresan, 2000).

O modelo de dois fluidos convencional descreve o comportamento hidrodinâmico de escoamentos multi-fásicos (Ishii, 1975). O modelo é obtido a partir de um balanço integral de propriedades num volume de controle genérico, como aquele mostrado na Figura 7. O procedimento é descrito na Figura 8.

Figura 7: Volume de controle genérico sobre o qual se pode fazer o balanço de propriedades na dedução das equações locais instantâneas e condições de salto. Adaptado de Enwald et al, 1997.

Considera-se que as duas fases estão presentes no volume de controle, separadas por uma interface móvel que representa o contorno entre fases. À equação de balanço obtida aplica-se os teoremas de Leibnitz e de Gauss, donde se obtém a equação local instantânea e a equação que fornece a condição de salto. A essas equações, procedimentos de média são aplicados e equações médias são obtidas. Deste procedimento de médias, a condição de salto que representa as condições de contorno entre as duas fases ao longo de todo o domínio fluido, sendo variável ao longo de todo o domínio, no tempo e no espaço, é convertida num termo médio representativo da troca de *momentum* entre as fases, que é o termo de arrasto. O termo de arrasto, portanto, provém da aplicação do procedimento de médias ao equacionamento, e é um termo que deve ser modelado de forma a descrever a troca de *momentum* entre as fases. Existem diversas correlações de arrasto na literatura, nesta simulação foi utilizado o modelo de Gidaspow, (1994).

Figura 8: Esquema do procedimento de obtenção do modelo de dois fluidos. Adaptado de Enwald et al, 1997.

A dedução do modelo até a obtenção das equações locais instantâneas e condição de salto pode ser encontrada, por exemplo, em Enwald, (1997)A. Os procedimentos de médias que conduzem às equações médias, e o fechamento do sistema de equações podem ser encontrados, em detalhes, em Ishii e Takashi (2006).

As equações a seguir constituem o modelo de dois fluidos e o fechamento das equações aplicados à presente simulação:

Continuidade da fase gás:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \alpha_g) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_g \alpha_g \vec{U}_g) = 0 \quad (7)$$

Continuidade da fase sólido:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s \alpha_s) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_s \alpha_s \vec{U}_s) = 0 \quad (8)$$

Conservação de *momentum* para a fase gás:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \alpha_g \vec{U}_g) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_g \alpha_g \vec{U}_g \vec{U}_g) = -\vec{\nabla}(\alpha_g P_g) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_g \bar{\bar{\tau}}_g) + \rho_g \alpha_g \vec{F}_g + \beta(\vec{U}_s - \vec{U}_g) \quad (9)$$

Conservação de *momentum* para a fase sólido:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s \alpha_s \vec{U}_s) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_s \alpha_s \vec{U}_s \vec{U}_s) = -\vec{\nabla}(\alpha_s P_s) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_s \bar{\bar{\tau}}_s) + \rho_s \alpha_s \vec{F}_s - \beta(\vec{U}_s - \vec{U}_g) \quad (10)$$

Tensor das tensões viscosas para a fase k:

$$\bar{\bar{\tau}}_k = \mu_k [\vec{\nabla} \vec{U}_k + (\vec{\nabla} \vec{U}_k)^T] + \lambda_k (\vec{\nabla} \cdot \vec{U}_k) \bar{\bar{I}} \quad (11)$$

onde:

$$\mu_k = \text{constante} \quad (12)$$

$$\lambda_k = -\frac{2}{3} \mu_k \quad (13)$$

Continuidade volumétrica:

$$\alpha_g + \alpha_s = 1 \quad (14)$$

Pressão da fase sólido:

$$\vec{\nabla}(\alpha_s P_s) = -G \vec{\nabla} \alpha_s + \vec{\nabla}(\alpha_s P_g) \quad (15)$$

onde:

$$G = \exp[-20(\alpha_g - 0.62)] \quad (16)$$

(GIDASPOW; ETTEHADIEH, 1983)

Forças de corpo externas por unidade de massa:

$$\vec{F}_g = \vec{g} \quad (17)$$

$$\vec{F}_s = \frac{\rho_s - \rho_g}{\rho_s} \vec{g} \quad (18)$$

Equações de estado:

$$\rho_g = \text{constante} \quad (19)$$

$$\rho_s = \text{constante} \quad (20)$$

Função de arrasto na interface entre as fases (procedimento de Gidaspow, 1994):

$$\beta = 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g (d_p \varphi_s)^2} + 1.75 \frac{\rho_g \alpha_s |v_g - v_s|}{(d_p \varphi_s)} \quad \alpha_s > 0,2 \quad (21)$$

(ERGUN, 1952)

$$\beta = \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{\rho_g \alpha_s \alpha_g |v_g - v_s|}{(d_p \varphi_s)} \alpha_g^{-2.65} \quad \alpha_s \leq 0,2 \quad (22)$$

(WEN; YU, 1966)

onde;

$$C_{Ds} = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 \cdot Re_p^{0.687}) & \text{for } Re_p < 1000 \\ 0.44 & \text{for } Re_p \geq 1000 \end{cases} \quad (23)$$

(ROWE, 1961)

$$Re_p = \frac{|v_g - v_s| d_p \rho_g \alpha_g}{\mu_g} \quad (24)$$

3.2. Condições de simulação

Os sinais analisados são provenientes de simulação numérica computacional tridimensional de grandes escalas do escoamento gás-sólido em *riser* de leito fluidizado circulante.

A simulação foi realizada com modelo de dois fluidos no *software* CFX-5.7 e corresponde a 20 segundos de tempo real de fluidização dentro do regime estatisticamente permanente.

O reator simulado pertence ao IIT, Instituto de Tecnologia de Illinois, e consiste de um duto de seção circular de 76,2 mm de diâmetro com uma altura de 5,56 m. Luo (1987) apresenta resultados experimentais obtidos nesse reator, e a literatura

apresenta outros resultados de simulação do mesmo reator em Tsuo (1989), Cabezas-Gomes (2003) e Georg (2005).

A geometria e a malha numérica foram geradas no módulo CAD-MESH ANSYS. A malha numérica é não estruturada constituída de elementos tetraédricos. Ao todo possui 206 229 volumes com aresta média aproximada de 9,4 mm e 42 029 nós.

A Figura 9 a seguir apresenta detalhes da geometria e da malha numérica em questão.

Figura 9: Detalhes da geometria e da malha numérica utilizadas na simulação que gerou os sinais analisados. Adaptado de Milioli (2006).

Na simulação considera-se duas fases, gás e sólido, ambas tratadas como meios contínuos. A fase gás consiste de ar e a fase sólido, de areia de sílica (SiO_2) ambas na temperatura ambiente, 27°C .

Embora o sólido não seja um fluido o modelo de dois fluidos o considera como tal e torna-se necessário atribuir-lhe propriedades de fluido: viscosidade e pressão. Para a viscosidade é adotado um valor empírico constante obtido da literatura (Tsuo, 1989), e a pressão é calculada utilizando-se o modelo semi-empírico de Gidaspow, definido nas equações 15 e 16.

A Tabela 1 trás valores de propriedades físicas de ambas as fases. A Tabela 2 fornece as condições iniciais e de contorno aplicadas na simulação.

Na simulação foram adotados um critério de convergência tipo RMS de 1×10^{-5} , e um avanço de tempo real para as iterações transientes de $1 \times 10^{-4} \text{ s}$.

Tabela 1: Propriedades físicas das fases gás e sólido.
Adaptado de Milioli (2006).

Fases	
$g = \text{ar a } 300 \text{ K}$	
$s = \text{sílica a } 300 \text{ K}$	
Propriedades	
$\rho_g = 1,1614 \text{ kg/m}^3$	$\rho_s = 2620 \text{ kg/m}^3$
$\mu_g = 1,82 \times 10^{-5} \text{ N/m}^2\text{s}$	$\mu_s = 0,509 \text{ N/m}^2\text{s}$
$W_g = 28,97 \text{ kg/kmol}$	$W_s = 60 \text{ kg/kmol}$

Tabela 2: Condições iniciais e de contorno adotadas na simulação.
Adaptado de Milioli (2006).

Parâmetros Numéricos	
<u>Entrada</u>	
$u_g = 0 \text{ m/s}$	$u_s = 0 \text{ m/s}$
$v_g = 4,979 \text{ m/s}$	$v_s = 0,386 \text{ m/s}$
$w_g = 0 \text{ m/s}$	$w_s = 0 \text{ m/s}$
$\alpha_g = 0,9754 \text{ m}_g^3/\text{m}^3$	$\alpha_s = 0,0246 \text{ m}_s^3/\text{m}^3$
<u>Saída</u>	<u>Paredes</u>
Localmente parabólico	$g = \text{não-deslizamento}$
$P_g = 15880 \text{ N/m}^2$	$s = \text{deslizamento livre}$
Condições iniciais (simulações de regime permanente)	
Como na entrada, exceto:	
$\alpha_g = 0,62 \text{ m}_g^3/\text{m}^3$	$\alpha_s = 0,38 \text{ m}_s^3/\text{m}^3$

3.3. Resultados

Como já observado, *risers* de leitos fluidizados circulantes operam no chamado regime pseudo-estacionário ou estatisticamente permanente caracterizado pela oscilação dos valores de qualquer dos parâmetros do escoamento em torno de valores médios bem definidos.

Medições experimentais nesses reatores apresentam esse comportamento. Uma vez que as variáveis da simulação passem a apresentar resultados que se comportem desta forma, terá se estabelecido o regime dentro do qual é válida a análise de resultados.

Portanto, ao se realizar simulações de tais máquinas, só se pode proceder à análise de resultados quando todos os parâmetros do escoamento tenham alcançado o regime estatisticamente permanente. Resultados na região transiente (ver Figura 4) devem ser descartados. Então, antes do processo de análise há uma etapa para definir em que estágio os resultados estão. Simulações de escoamentos gás-sólido tridimensionais utilizando o modelo de dois fluidos podem exigir muitos meses para gerar poucos segundos de funcionamento virtual da máquina, e portanto o descarte de resultados válidos é um erro a ser evitado.

A presente simulação foi iniciada aplicando-se avanço iterativo em transiente distorcido. Apesar de reatores de leito fluidizado nunca entrarem em regime permanente, observa-se que a simulação transiente distorcida, apesar de gerar resultados não convergidos, consegue introduzir os parâmetros no regime pseudo-estacionário muito mais rapidamente que uma simulação em transiente real. Portanto, simulou-se em transiente distorcido até certo ponto, quando o comportamento oscilatório em torno de um valor médio bem estabelecido foi alcançado, e estes resultados serviram de ponto de partida para a simulação transiente real, poupando considerável esforço computacional. No apêndice A apresenta-se um esquema do procedimento numérico para solução de escoamentos multi-fásicos no CFX.

As Figuras 10, 11, 12 e 13 mostram resultados não convergidos em tempo distorcido, num primeiro estágio, seguidos de resultados convergidos em tempo real, para o regime estatisticamente permanente da simulação. São resultados médios espaciais tomados na seção a 3,4 metros acima da entrada do reator para as velocidades axiais do gás e do sólido, bem como para a fração volumétrica de sólido e taxa de circulação de sólido.

Os resultados de simulação foram tomados em tal ponto do reator por haver resultados experimentais deste caso, na literatura, tomados nesta região.

Nas figuras, os resultados apresentados até 45,454 segundos de simulação correspondem a resultados tomados em tempo distorcido. A partir de então, os resultados de simulação apresentados se referem a simulação em regime transiente real.

Figura 10: Evolução temporal da velocidade axial do gás média na seção transversal 3,4 m acima da entrada, para simulação em transiente distorcido seguida de simulação em transiente real (Milioli, 2006).

Figura 11: Evolução temporal da velocidade axial do sólido média na seção transversal 3,4 m acima da entrada, para simulação em transiente distorcido seguida de simulação em transiente real (Milioli, 2006).

Figura 12: Evolução temporal do fluxo de sólido médio na seção transversal 3,4 m acima da entrada, para simulação em regime transiente distorcido seguida de simulação em regime transiente real (Milioli, 2006).

Figura 13: Evolução temporal da fração volumétrica de sólido média na seção transversal 3,4 m acima da entrada, para simulação em regime transiente distorcido seguida de simulação em regime de transiente real. (Milioli, 2006).

Pode-se verificar para todos os parâmetros o comportamento oscilante na região transiente real, mas rigorosamente não se pode dizer que o regime estatisticamente permanente foi estabelecido. Só em caso de se estar no regime de funcionamento

do reator real é que a análise de resultados será válida. Apresenta-se a seguir a forma convencional de análise de resultados. Na seção 4 apresenta-se a análise estatística mais rigorosa.

3.4. Análise convencional

A literatura convencional verifica a condição de regime estatisticamente permanente comparando perfis dos parâmetros médios tomados ao longo de diferentes intervalos de tempo. Só quando estes perfis se aproximam é que a independência do tempo é atingida e os resultados se encontram no regime estatisticamente permanente.

Para a presente simulação, resultados médios no tempo foram gerados considerando intervalos de 0-5 segundos, 0-10 segundos, 0-15 segundos e 0-20 segundos. As Figuras 14, 15, 16 e 17 mostram estes resultados para os perfis de velocidade axiais das fases, para fração volumétrica de sólido e para a taxa de circulação de sólido. Esses perfis médios temporais foram tomados ao longo do diâmetro do reator na seção localizada 3,4 metros acima da entrada. Caso as curvas apresentem uma tendência a se sobrepor, a independência do intervalo de tempo de medição terá sido alcançada e o regime estatisticamente permanente terá sido atingido.

Figura 14: Perfis médios temporais da velocidade do gás ao longo do diâmetro na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando diferentes intervalos de tempo (Milioli e Milioli, 2008).

Figura 15. Perfis médios temporais da velocidade do sólido ao longo do diâmetro na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando diferentes intervalos de tempo (Milioli e Milioli, 2008).

As Figuras 14 e 15 que apresentam respectivamente perfis de velocidade do gás e do sólido mostram que as curvas tomadas no intervalo de tempo de 0-5 segundos de simulação acompanham a forma das demais curvas. Porém seus resultados são quantitativamente mais distanciados das demais. Já as curvas tomadas de 0-10

segundos, de 0-15 segundos e de 0-20 segundos não só apresentam um comportamento qualitativo semelhante, como vão se aproximando, mostrando uma tendência à sobreposição.

Outro parâmetro importante nestes escoamentos é a concentração de sólido, mostrada na Figura 16.

Figura 16: 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 (Milioli e Milioli, 2008).

Esta figura confirma o que as duas figuras anteriores mostram. No intervalo de tempo de 0-5 segundos tem-se um comportamento qualitativo parecido com os resultados tomados nos demais intervalos. Mas para os intervalos de tempo de 0-10 segundos, de 0-15 segundos e de 0-20 segundos, observa-se à clara tendência à superposição das curvas, especialmente na região central do reator, na medida em que o intervalo de medição é aumentado.

Figura 17: Perfis médios temporais da taxa de circulação de sólido ao longo do diâmetro na seção transversal 3,4 m acima da entrada, considerando diferentes intervalos de tempo (Milioli e Milioli, 2008).

A Figura 17, que apresenta resultados para o parâmetro taxa de circulação de sólido confirma a tendência à superposição observada para os parâmetros anteriores.

Mais uma vez para o intervalo de tempo inicial, 0-5 segundos, têm-se um comportamento diferente, neste caso também qualitativamente diferente. Nos demais intervalos de tempo, os perfis passam a apresentar concordância qualitativa e também quantitativa em certos trechos.

De acordo com a literatura internacional, o comportamento mostrado nas Figuras 14, 15, 16 e 17, de grande proximidade a mesma sobreposição de resultados para diferentes intervalos de tempo, demonstram que o regime estatisticamente permanente foi atingido, e assim, a partir do momento que as curvas passam a concordar a análise de resultados se torna válida.

Contudo, na tentativa de verificar de forma mais rigorosa o estabelecimento do regime desejado, uma análise estatística do sinal se faz necessária.

É preciso salientar que na literatura internacional de modelagem e simulação de escoamentos em reatores de leito fluidizado não se encontrou registros de análises estatísticas formais.

3.5. Análise estatística

A estacionariedade de um sinal (obtido numericamente ou medido empiricamente) pode ser verificada através de ferramentas estatísticas. Sejam as definições de média e auto-correlação de um sinal $x(t)$ dados, respectivamente, por:

$$\mu < x > = \frac{1}{T} \int_{t_1}^{t_1+T} x(t) dt \quad (25)$$

$$R < x > = \frac{1}{T} \int_{t_1}^{t_1+T} x(t) x(t + \tau) dt \quad (26)$$

Nestas equações t_1 representa um tempo inicial, T representa um intervalo de tempo de observação, e τ representa um avanço de tempo dentro deste intervalo. Um sinal é considerado estacionário no intervalo de tempo de observação T se μ e R não variarem significativamente quando o tempo inicial t_1 for variado (Bendat e Piersol, 1971). Na seção 2.2 descreve-se a metodologia estatística convencional relevante, que agora é adaptada para a condição do presente sinal.

As Equações 25 e 26 são adequadas para sinais contínuos, ou onde o avanço de tempo τ pode assumir valores tão pequenos quanto se queira. No presente caso,

contudo, dispõe-se de um sinal discreto onde τ é, além de grosseiro, bastante irregular. A Tabela 3 mostra os dados de simulação (sinal) em questão. Note-se que estes são estabelecidos em intervalos de tempo relativamente grosseiros, em vista de limitações de armazenamento de dados. Note-se também que o intervalo de tempo entre os dados é irregular. Ocorre que no procedimento iterativo de solução numérica, convergência não é obtida para todos os avanços de tempo praticados e, evidentemente, apenas dados convergidos podem ser considerados.

Considerando as particularidades do presente sinal, propõe-se, no presente trabalho, assumir estacionariedade quando μ e R não variarem significativamente ao se aumentar o intervalo de tempo de observação, praticando-se os menores τ variáveis disponíveis, e partindo-se de $t_1 = 0$. Esta proposição é particularmente adequada tendo em vista o presente objetivo de estabelecer o mínimo intervalo de observação necessário para se obter estacionariedade. Nesse caso, convém expressar média e auto-correlação, respectivamente, como:

$$\mu < x > = \frac{1}{T} \int_0^T x(t) dt \quad (27)$$

$$R < x > = \frac{1}{T - \tau} \int_0^{T-\tau} x(t) x(t + \tau) dt \quad (28)$$

Os cálculos das equações 27 e 28 foram realizados via integrações numéricas no Origin 7.5.

Tabela 3: Sinal discreto obtido por simulação numérica computacional.

t (s)	τ (s)	v_g	v_s	α_s	G_s
0,0	---	4,92798	0,35045	0,04177	38,3518
0,1	0,1	4,91844	0,09115	0,04000	9,5527
0,2	0,1	4,91494	0,30643	0,03186	25,5785
0,5	0,3	4,90369	0,23905	0,02904	18,1878
0,6	0,1	4,87466	0,33404	0,02452	21,4593

1,2	0,6	4,92885	-0,48214	0,04123	-52,0820
1,4	0,2	4,91881	-0,76446	0,06702	-134,2330
1,5	0,1	4,90375	-0,53001	0,04295	-59,6416
1,8	0,3	5,03001	-0,47570	0,06529	-81,3724
1,9	0,1	5,10627	1,55136	0,16532	671,9530
2,0	0,1	4,97558	1,04283	0,08257	225,5980
2,5	0,5	4,87521	0,31632	0,02316	19,1940
3,2	0,7	4,86336	-1,16118	0,02826	-85,9751
3,3	0,1	4,99719	0,29651	0,08980	69,7611
3,4	0,1	4,89516	0,14565	0,05637	21,5109
3,5	0,1	4,89283	-0,14332	0,05540	-20,8029
3,7	0,2	4,91182	-0,81892	0,04932	-105,8200
3,8	0,1	4,88657	-1,16737	0,04162	-127,2950
4,0	0,2	4,87785	-0,65961	0,01346	-23,2612
4,2	0,2	4,87386	-0,73292	0,01918	-36,8302
4,5	0,3	4,86817	0,00538	0,02124	0,2993
4,6	0,1	4,83170	-0,41006	0,01949	-20,9394
4,7	0,1	4,85105	-0,47584	0,01807	-22,5277
4,8	0,1	4,86389	-0,06176	0,01551	-2,5095
4,9	0,1	4,86702	0,79813	0,01847	38,6224
5,1	0,2	4,86624	0,65150	0,01653	28,2156
5,2	0,1	4,86733	0,86263	0,01679	37,9471
5,3	0,1	5,03996	1,83746	0,10620	511,2620
5,4	0,1	4,95151	1,24064	0,08765	284,9050
5,5	0,1	5,17460	1,12013	0,17379	510,0280
5,8	0,3	4,96527	0,31112	0,05891	48,0190
5,9	0,1	4,99665	-0,11450	0,07436	-22,3082
6,0	0,1	5,00712	0,38344	0,06624	66,5450
6,1	0,1	4,92644	0,04073	0,05396	5,7578
6,2	0,1	4,89428	-0,16411	0,04437	-19,0779
6,6	0,4	4,88727	-0,47961	0,03592	-45,1362
6,7	0,1	4,89049	0,21970	0,02262	13,0201
6,8	0,1	4,85129	0,98269	0,01434	36,9204
6,9	0,1	5,03614	-1,22685	0,10391	-334,0040
7,0	0,1	4,96841	-0,99594	0,05529	-144,2710
7,1	0,1	4,91688	-0,82063	0,03703	-79,6168
7,2	0,1	4,93412	-0,89431	0,02996	-70,1987
7,3	0,1	4,92279	-0,52967	0,02417	-33,5415
7,4	0,1	4,90684	-0,76338	0,02464	-49,2813
7,5	0,1	4,87670	-0,26673	0,01965	-13,7320
7,6	0,1	4,90924	0,99733	0,03374	88,1625
7,7	0,1	4,93280	0,12499	0,03401	11,1373
7,8	0,1	4,91086	0,51675	0,02567	34,7540
7,9	0,1	4,91601	0,85907	0,02589	58,2725
8,0	0,1	4,85400	0,26770	0,01917	13,4452
8,5	0,5	5,02591	0,77095	0,06811	137,5750
8,6	0,1	5,03442	0,66998	0,07680	134,8110
8,7	0,1	5,06087	0,52772	0,09956	137,6550
8,8	0,1	5,02679	0,38472	0,12508	126,0760
8,9	0,1	5,00271	-0,22761	0,12373	-73,7854

9,0	0,1	4,93210	-0,17119	0,04934	-22,1295
9,1	0,1	4,92179	0,23246	0,03757	22,8818
9,2	0,1	4,91309	0,59829	0,04179	65,5068
9,3	0,1	4,91349	0,49040	0,03762	48,3358
9,4	0,1	4,87059	0,18683	0,03177	15,5510
10,5	1,1	5,07062	1,94849	0,10262	523,8790
10,6	0,1	4,99715	1,21336	0,06991	222,2450
11,1	0,5	4,87738	0,38275	0,03402	34,1150
11,2	0,1	4,87504	0,17444	0,03159	14,4377
11,7	0,5	4,95092	-1,30138	0,03968	-135,2940
11,8	0,1	4,86328	-0,60850	0,01996	-31,8217
11,9	0,1	4,87292	-0,35091	0,01723	-15,8408
12	0,1	4,93559	-1,58025	0,03658	-151,4510
12,1	0,1	4,90844	-0,87718	0,02711	-62,3048
12,2	0,1	4,93537	-0,30354	0,02403	-19,1106
12,3	0,1	4,87835	-0,11360	0,01887	-5,6163
12,4	0,1	4,88332	-1,42037	0,02900	-107,9200
12,5	0,1	4,86953	-0,78843	0,01645	-33,9806
12,7	0,2	4,87504	-0,50244	0,01890	-24,8799
12,9	0,2	4,89361	0,43034	0,02715	30,6111
13	0,1	4,83476	0,05502	0,02056	2,9640
13,2	0,2	4,87573	-1,37523	0,02859	-103,0130
13,4	0,2	4,83719	-1,23010	0,01532	-49,3743
13,6	0,2	4,85599	-0,98883	0,01336	-34,6123
14,3	0,7	4,96372	0,45640	0,07300	87,2917
14,5	0,2	4,95521	-0,57194	0,06865	-102,8710
14,6	0,1	4,90350	-0,79902	0,05284	-110,6170
14,8	0,2	4,88717	-1,06263	0,02352	-65,4818
15,5	0,7	4,97765	0,82669	0,03826	82,8684
15,6	0,1	4,94177	0,33395	0,05222	45,6895
15,7	0,1	4,95740	0,20961	0,04820	26,4710
15,8	0,1	4,92007	-0,10687	0,04230	-11,8441
15,9	0,1	4,88355	-0,38632	0,03570	-36,1345
16,0	0,1	4,89608	-0,14753	0,02807	-10,8501
16,1	0,1	4,95335	0,44934	0,03069	36,1301
16,2	0,1	4,95273	0,28403	0,03501	26,0533
16,3	0,1	4,88676	0,34715	0,03650	33,1980
16,4	0,1	4,90159	0,44753	0,02685	31,4825
16,5	0,1	4,89442	0,56783	0,02470	36,7464
16,6	0,1	4,88655	0,34932	0,02375	21,7367
16,7	0,1	4,90535	0,18994	0,02376	11,8239
16,8	0,1	4,95601	-3,31410	0,02164	-187,8990
16,9	0,1	4,91436	-0,21286	0,04766	-26,5802
17,0	0,1	4,91994	-0,44573	0,02308	-26,9530
17,3	0,3	4,86831	0,53708	0,02206	31,0419
17,4	0,1	4,86355	-0,18427	0,01925	-9,2935
17,5	0,1	4,86067	-0,86200	0,01520	-34,3282
17,6	0,1	4,98387	3,17350	0,01257	104,5140
17,7	0,1	4,98248	1,62570	0,03916	166,7960
17,8	0,1	4,97973	2,40044	0,04476	281,5020

17,9	0,1	4,91027	0,45526	0,06369	75,9683
18,0	0,1	4,92262	0,61548	0,04573	73,7427
18,1	0,1	4,88417	0,20288	0,04614	24,5260
18,2	0,1	4,92141	0,40003	0,03878	40,6448
18,3	0,1	4,90573	0,45028	0,03464	40,8664
18,4	0,1	4,90736	0,48844	0,02978	38,1097
18,5	0,1	4,90299	0,41451	0,02682	29,1269
18,6	0,1	4,90293	0,16391	0,02595	11,1439
18,7	0,1	4,90372	-0,12398	0,02608	-8,4712
18,8	0,1	4,85915	-0,25709	0,02528	-17,0279
18,9	0,1	4,89421	-0,84804	0,02391	-53,1246
19,0	0,1	4,85985	0,10753	0,02690	7,5787
19,1	0,1	4,86728	0,30030	0,01604	12,6201
19,2	0,1	4,86188	-0,08714	0,01333	-3,0434
19,3	0,1	4,87140	-2,55002	0,01412	-94,3364
19,4	0,1	4,83925	-0,26688	0,02304	-16,1104
19,9	0,5	4,87856	1,31840	0,01303	45,0085
20,0	0,1	4,89087	0,69625	0,02067	37,7057

4. Análise de resultados

Os dados de simulação numérica utilizados neste trabalho foram descritos na seção 3.3, e apresentados nas Figuras 10 a 13. Na Tabela 3 apresenta-se a parte do sinal de interesse, obtida em condições de regime estatisticamente permanente. Estes dados estão plotados nas Figuras 18 a 21, que mostram variações temporais de valores médios numa seção transversal do *riser*, da velocidade da fase gás (v_g), velocidade da fase sólido (v_s), fração volumétrica de sólido (α_s) e fluxo de sólido (G_s). No procedimento numérico iterativo transiente real, os dados foram armazenados a cada 0,1 segundos de fluidização. Em muitos casos não houve convergência do procedimento iterativo para determinados avanços de tempo, e nestes casos os dados foram descartados. Em consequência, o intervalo de tempo entre dados sucessivos resultou irregular, como já observado na seção 3.3.

Figura 18: Velocidade da fase gás, v_g .

Figura 19: Velocidade da fase sólido, v_s .

Figura 20: Fração volumétrica de sólido, α_s .

Para cada um dos resultados de simulação numérica das Figuras 18 a 21 são determinados média e auto-correlação utilizando as equações 27 e 28, para diferentes intervalos de tempo de observação, dentro do intervalo de tempo de observação total de 20 segundos. Os resultados deste procedimento são apresentados nas Tabelas 4 e 5, e nas Figuras 22 a 29.

Figura 21. Fluxo de sólido, G_s .

Tabela 4: Valores de média em função do intervalo de tempo de observação.

T (s)	$\mu \langle v_g \rangle$	$\mu \langle v_s \rangle$	$\mu \langle \alpha_s \rangle$	$\mu \langle G_s \rangle$
0 - 0,6	4,9095	0,2541	0,0325	21,1651
0 - 1,9	4,9261	-0,0939	0,0438	-8,6506
0 - 2,5	4,9305	0,1164	0,0489	35,8558
0 - 3,8	4,9164	-0,0582	0,0458	12,0359
0 - 4,9	4,9054	-0,1443	0,0400	3,3756
0 - 5,9	4,9181	0,0246	0,0461	37,0407
0 - 6,9	4,9176	0,0116	0,0459	28,5356
0 - 7,9	4,9186	-0,0255	0,0445	19,9304
0 - 8,9	4,9246	0,0337	0,0466	27,1725
0 - 9,4	4,9246	0,0439	0,0468	26,6365
0 - 10,6	4,9304	0,1646	0,0493	55,1297
0 - 11,9	4,9287	0,1468	0,0482	51,2555
0 - 12,9	4,9259	0,0871	0,0463	43,9919

0 - 13,6	4,9223	0,0393	0,0450	39,3774
0 - 14,8	4,9219	0,0055	0,0453	35,4140
0 - 15,9	4,9227	0,0041	0,0446	33,8730
0 - 16,9	4,9222	-0,0028	0,0437	31,6738
0 - 17,9	4,9218	0,0334	0,0428	32,9326
0 - 18,9	4,9207	0,0430	0,0424	32,4816
0 - 20,0	4,9176	0,0449	0,0411	30,7041

Tabela 5: Valores de auto-correlação em função do intervalo de tempo de observação.

T (s)	$R <v_g>$	$R <v_s>$	$R <\alpha_s>$	$R <G_s>$
0 - 0,6	24,0527	0,0449	0,00098	263,2877
0 - 1,9	24,3662	0,0898	0,00307	755,0119
0 - 2,5	24,3083	0,1034	0,00290	3960,2288
0 - 3,8	24,2181	0,0511	0,00265	2507,3779
0 - 4,9	24,0935	0,0836	0,00213	2058,9988
0 - 5,9	24,2104	0,1919	0,00277	7797,5537
0 - 6,9	24,2018	0,1574	0,00264	6848,0142
0 - 7,9	24,2019	0,1846	0,00245	6594,1955
0 - 8,9	24,2852	0,1950	0,00284	6853,3536
0 - 9,4	24,2829	0,1920	0,00280	6488,8135
0 - 10,6	24,3646	0,3251	0,00307	12895,5129
0 - 11,9	24,3300	0,3194	0,00287	11732,0689
0 - 12,9	24,2978	0,3213	0,00269	10946,9679
0 - 13,6	24,2636	0,3434	0,00258	10458,1997

0 - 14,8	24,2677	0,3043	0,00260	9417,8311
0 - 15,9	24,2769	0,2716	0,00253	8751,6446
0 - 16,9	24,2696	0,2613	0,00243	8281,1268
0 - 17,9	24,2623	0,2863	0,00235	8284,4792
0 - 18,9	24,2486	0,2775	0,00228	7904,4151
0 - 20,0	24,2207	0,2742	0,00218	7525,9530

Figura 22: $\mu < v_g >$ em função do intervalo de tempo de observação.

Figura 23: $R < v_g >$ em função do intervalo de tempo de observação.

Figura 24: $\mu < v_s >$ em função do intervalo de tempo de observação.

Figura 25: $R < v_s^2 >$ em função do intervalo de tempo de observação.

Figura 26: $\mu < \alpha_s >$ em função do intervalo de tempo de observação

Figura 27: $R < \alpha_s >$ em função do intervalo de tempo de observação.

Figura 28: $\mu < G_s >$ em função do intervalo de tempo de observação.

Figura 29: $R < G_s >$ em função do intervalo de tempo de observação.

Em todos os gráficos observa-se uma significativa atenuação das oscilações que os parâmetros sofrem na medida em que o tempo de observação é aumentado. Isso sugere que haverá um intervalo de tempo de observação a partir do qual os resultados se tornarão constantes, e o regime pseudo-estacionário será atingido.

Claramente, os atuais 20 segundos de fluidização não foram suficientes para o estabelecimento rigoroso do regime pseudo-estacionário.

Contudo, a partir de 10 segundos as oscilações se tornam bastante atenuadas, e os parâmetros parecem avançar para patamares estabilizados. É possível que 10 segundos sejam suficientes para a geração de resultados médios temporais representativos, mas este fato permanece por ser demonstrado.

5. Conclusões e sugestões para trabalhos futuros

Para o caso considerado, de escoamento gás-sólido em riser de leito fluidizado, 20 segundos de fluidização não foram suficientes para o estabelecimento rigoroso do regime estatisticamente permanente ou pseudo-estacionário.

Entretanto, o comportamento da média e da auto-correlação do sinal numérico analisado, em diferentes intervalos de tempo de observação, sugere que 10 segundos de fluidização sejam suficientes para a geração de resultados médios temporais representativos. Isto, porém, permanece por ser demonstrado.

Os presentes resultados e conclusões são válidos apenas para o caso considerado. Porém, a sugestão de 10 segundos de fluidização pode servir como uma referência de tempo de simulação para escoamentos em *risers* em geral.

Para continuidade da presente pesquisa sugere-se:

- Estender o tempo de simulação dentro do regime estatisticamente permanente para o presente caso, de forma a verificar com exatidão se os 10 segundos de fluidização sugeridos são de fato suficientes para uma análise representativa;
- Realizar novas simulações para diferentes casos de escoamento em *risers*, variando-se parâmetros operacionais relevantes, na tentativa de generalizar os resultados;
- Aplicar métodos estatísticos alternativos ou complementares, tais como análises tempo-frequência, visando obter resultados ainda mais rigorosos.

Referências bibliográficas

ADREWS IV, A. T.; LOEZOS, P. N.; SUNDARESAN, S. (2005). Coarse-Grid Simulation of Gas-Particle Flows in Vertical Risers. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, V. 44, p.6022-6037

AGRAWAL, K.; LOEZOS, P. N.; SYAMLAL, M.; SUNDARESAN, S. (2001). The role of meso-scale structures in rapid gas-solid flows. **Journal of Fluid Mechanics**, vol. 445, p.151-185.

BENDAT, S.J, PIERSON. G.A. (1971). **Random Data: Analysis and Measurement procedures**. 2 ed. Canada: Wiley-Interscience.

BUSSAB, W.O, MORRETTIN, P.A. (1987). **Estatística Básica: métodos quantitativos**. 4.ed. São Paulo: Saraiva.

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

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

CABEZAS-GÓMEZ L. (1999). **Um estudo da modelagem matemática e solução numérica de escoamentos bifásicos gás-sólido**. Dissertação (Mestrado), EESC-USP, 1999.

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

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. 147-206.

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., (1996). Eulerian Two-Phase Flow Theory Applied to Fluidization. **Int. J. of Multiphase Flow**, Vol. 22, p.21-66.

ERGUN, S. (1952). Fluid Flow through Packed Columns. **Chem. Engng. Prog.**, Vol. 48, No. 2, p. 89-94.

GEORG, I. C. (2005). **Modelagem e simulação numérica tridimensional transiente do escoamento gás-sólido em um reator de craqueamento catalítico em leito fluidizado**. 292f. 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. (1983). Fluidization in two-dimensional beds with a jet - Part II: hydrodynamic modeling. **Indust. Engng. Chem. Fundam.** v. 22, p. 193-201.

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

GIDASPOW, D.; BEZBURUAH, R.; DING, J. (1992). **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, 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.

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

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

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. (2000). Predictions of gas/particle flow with an Eulerian model including a realistic particle size distribution. **Powder Technology**, v. 112, p.34-45.

MEYER, P.L. (2003). **Probabilidade, Aplicações à Estatística**. São Paulo: Editora Afiliada

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

MILIOLI, C. C.; MILIOLI, F. E. (2006). Reaching the Statistical Steady State Regime in Two-Fluid Simulation of Risers. **Powder Technology**, Vol. 167, pp. 26-32.

MILIOLI, C. C.; MILIOLI, F. E. (2008). On the statistical steady state gas-solid flow in a riser as predicted through a two-fluid simulation. Submetido à **Applied Mathematical Modeling**, 2008.

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

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

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

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

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

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

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

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

Apêndice A.

Diagrama de solução do código computacional implementado no *software* CFX

Figura 30: Fluxograma do procedimento numérico do CFD CFX (Milioli, 2006).