

UNESP - Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”

Campus de Bauru

Faculdade de Engenharia de Bauru

Departamento de Engenharia Mecânica

**Simulação numérica de escoamentos gás-sólido em
leito fluidizado borbulhante utilizando a teoria
cinética dos escoamentos granulares**

Andreza Tangerino Mineto

Licenciada em Matemática

Bauru

2009

**Simulação numérica de escoamentos gás-sólido em leito
fluidizado borbulhante utilizando a teoria cinética dos
escoamentos granulares**

Andreza Tangerino Mineto

Dissertação apresentada à Faculdade de
Engenharia da UNESP – Campus de Bauru,
como parte dos requisitos para obtenção do
título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Hélio Aparecido Navarro

Bauru
2009

Aos meus amados pais, José Angelo e Suney, fonte de inspiração sem os quais eu nada seria, dedico este trabalho.

Agradecimentos

A Deus, pela vida, pela capacidade concedida para realização de sonhos como este trabalho, por responder as orações de todos e por me abençoar com a presença de pessoas essenciais na minha vida.

Aos meus pais José Angelo e Suney, meu irmão Rogério e minha cunhada Rosana, a tia Marilda, avô Adélio, avó Marília e demais familiares pelo amor, pela paciência, pelas orações, por acreditarem e incentivarem meu trabalho.

As minhas sobrinhas Larissa e Suzana, simplesmente por existirem.

Ao Celso, meu namorado, pelo seu sentimento, apoio e compreensão.

Ao Professor Dr. Hélio Aparecido Navarro, pelo apoio e orientação no desenvolvimento do trabalho.

Ao Professor Dr. Luiz Eduardo de Ângelo Sanchez e sua esposa Andréa Rosa Sanchez, pela amizade.

Ao Professor Dr. Luben Cabezas-Gómez, pelo auxílio com material bibliográfico e transmissão de conhecimentos.

Aos Professores do Departamento de Engenharia Mecânica da Unesp – Bauru, que contribuíram no desenvolvimento deste trabalho.

Aos amigos, que estiveram presentes e contribuíram direta ou indiretamente na realização do trabalho.

Aos funcionários da Pós Graduação da FEB, pelo atendimento e colaboração.

Ao Núcleo de Engenharia Térmica e Fluidos do Departamento de Engenharia Mecânica da EESC/USP, pela acolhida e facilidades oferecidas.

A CAPES, pelo auxílio financeiro concedido para a realização do trabalho.

A todos que eu não tenha mencionado, mas que contribuíram para realização deste trabalho, minha sincera gratidão.

**“A mente que se abre a uma nova
idéia jamais voltará ao seu
tamanho original” (Albert
Einstein)**

Sumário

LISTA DE FIGURAS	i
LISTA DE TABELAS	iii
SIMBOLOGIA	iv
RESUMO	vii
ABSTRACT	viii
INTRODUÇÃO.....	1
1.1 Aplicações dos escoamentos gás – sólido em leitos fluidizados.....	1
1.2 A presença da difusão numérica na simulação do escoamento gás – sólido em leitos fluidizados	2
1.3 Características do escoamento gás – sólido.....	3
1.4 Objetivos e apresentação do trabalho	4
TEORIA HIDRODINÂMICA	6
2.1 Introdução.....	6
2.2 Formulação Euleriana/Euleriana Clássica	9
2.2.1 Procedimentos para a formulação do modelo das duas fases separadas	9
2.3 Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares	10
2.4 Modelo Hidrodinâmico.....	13
2.4.1 Leis de Fechamento	15
METODOLOGIA DE SOLUÇÃO NUMÉRICA	26
3.1 Introdução.....	26
3.2 Equação de transporte escalar e integração sobre um volume de controle	27
3.3 Solução numérica para escoamento gás – sólido.....	30
3.3.1 Equação de Quantidade de Movimento.....	32
3.3.1.1 Equação de Quantidade de Movimento discreta	33
3.3.1.2 Condições de contorno	34
3.3.1.3 Eliminação parcial do acoplamento na interface	35
3.3.2 Equação para a correção da pressão do fluido.....	38
3.3.2.1 Formulação	38
3.3.2.2 Condições de contorno	42
3.3.3 Equação para correção da fração volumétrica do sólido	44
3.3.3.1 Termo convectivo	44

3.3.3.2 Termo transiente	46
3.3.3.3 Termo de geração	46
3.3.3.4 Equação de correção.....	47
RESULTADOS	50
4.1 Introdução.....	50
4.2 Comparação dos resultados de simulação obtidos pela TCEG algébrica e TCEG com o modelo de uma EDP para o computo da temperatura granular.....	54
4.3 Comparação dos resultados de simulação obtidos pela TCEG algébrica variando o diâmetro das partículas	66
4.4 Resultados de simulação obtidos pela TCEG_edp_JJ para partículas de diâmetros $d_p = 125 \mu\text{m}$	71
CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	74
5.1 Comentários finais.....	74
5.2 Conclusões do trabalho.....	74
5.3 Recomendações para futuros trabalhos	75
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	77
APÊNDICE A – Teoremas utilizados para obter as equações de balanço locais instantâneas generalizadas	85
APÊNDICE B – O Código Computacional MFIX.....	86

Lista de Figuras

Figura 1.1 Leito fluidizado borbulhante.....	4
Figura 2.1 Diferentes regimes de escoamentos bifásicos de acordo com Ishii (1975).....	7
Figura 2.2 Subdivisões do método das médias Ishii (1975), Ishii e Mishima (1984).....	8
Figura 2.3 Procedimento geral para a formulação do modelo de duas fases Enwald, Peirano e Almstedt (1996)	10
Figura 2.4 Procedimento geral simplificado para formulação da TCEG, baseado no trabalho de Therdtthianwong (1994).....	12
Figura 2.5 Regimes de escoamentos granulares.....	19
Figura 3.1 Volume de controle em uma malha unidimensional.....	29
Figura 3.2 Volume de controle deslocado unidimensional	33
Figura 3.3 Condição de deslizamento livre e plena aderência na parede leste.....	35
Figura 3.4 Condições de contorno para o fluxo.....	43
Figura 4.1 Geometria e condições iniciais e de contorno usadas nas simulações.....	52
Figura 4.2 Fração de vazio no tempo $t = 0,36s$ na simulação com: a) TCEG_alg., b) TCEG_edp_JJ e c) TCEG_edp_nsw.....	56
Figura 4.3 Fração de vazio no tempo $t = 0,79s$ na simulação com: a) TCEG_alg., b) TCEG_edp_JJ e c) TCEG_edp_nsw.....	57
Figura 4.4 Bolhas simuladas por Guenther e Syamlal (2001): a) distribuição da velocidade do gás ao redor de uma bolha isolada e b) fluxo de massa da fase gasosa na superfície da bolha.....	58
Figura 4.5 Bolhas experimentais de Kuipers <i>et al.</i> (1993): a) bolha no tempo $t = 0,460s$ e b) bolha no tempo $t = 0,560s$	58
Figura 4.6 Fração de vazio no tempo $t = 1,0s$ na simulação com: a) TCEG_alg., b) TCEG_edp_JJ e c) TCEG_edp_nsw.....	59
Figura 4.7 Perfis da velocidade axial média no tempo com altura 0,05 metros acima da entrada do leito considerando os modelos TCEG_alg., TCEG_edp_JJ e TCEG_edp_nsw. a) velocidade do sólido e b) velocidade do gás.....	60
Figura 4.8 Perfis da velocidade axial média no tempo com altura 0,15 metros acima da entrada do leito considerando os modelos TCEG_alg., TCEG_edp_JJ e TCEG_edp_nsw. a) velocidade do sólido e b) velocidade do gás.....	61

Figura 4.9 Perfis da velocidade axial média no tempo com altura 0,29 metros acima da entrada do leito considerando os modelos TCEG_alg., TCEG_edp_JJ e TCEG_edp_nsw. a) velocidade do sólido e b) velocidade do gás.....	61
Figura 4.10 Perfis da temperatura granular no tempo $t = 0,36s$ na simulação com: a) TCEG_alg., b) TCEG_edp_JJ e c) TCEG_edp_nsw.....	63
Figura 4.11 Perfis da temperatura granular no tempo $t = 0,79s$ na simulação com: a) TCEG_alg., b) TCEG_edp_JJ e c) TCEG_edp_nsw.....	64
Figura 4.12 Perfis da temperatura granular no tempo $t = 1,0s$ na simulação com: a) TCEG_alg., b) TCEG_edp_JJ e c) TCEG_edp_nsw.....	65
Figura 4.13 Fração de vazio na simulação considerando a TCEG_alg. com $d_p = 125\mu m$ para: a) tempo $t = 0,36s$, b) tempo $t = 0,79s$ e c) tempo $t = 1,0s$	67
Figura 4.14 Formação de bolhas de Makkawi, Wright e Ocone (2006)	68
Figura 4.15 Perfil da temperatura granular no tempo $t = 0,79s$ na simulação considerando a TCEG_alg. com $d_p = 125\mu m$	69
Figura 4.16 Perfis da velocidade axial média no tempo da fase sólida considerando o modelo TCEG_alg com partículas de $d_p = 500 \mu m$ e $d_p = 125 \mu m$ para: a) 0,05 metros acima da entrada do leito, b) 0,15 metros acima da entrada do leito e c) 0,29 metros acima da entrada do leito.....	70
Figura 4.17 Fração de vazio na simulação considerando a TCEG_edp_JJ com $d_p = 125\mu m$ para: a) tempo $t = 0,36s$ e b) tempo $t = 0,79s$	72
Figura 4.18 Perfis da velocidade axial média no tempo da fase sólida comparando os modelos TCEG_edp_JJ e TCEG_alg.com partículas de $d_p = 125\mu m$ para: a) 0,05 metros acima da entrada do leito e b) 0,29 metros acima da entrada do leito.....	72
Figura 4.19 Perfil da temperatura granular no tempo $t = 0,79s$ na simulação considerando a TCEG_edp_JJ com $d_p = 125\mu m$	73

Lista de Tabelas

Tabela 4.1 Condições de contorno na parede para a fase sólida.....	52
Tabela 4.2 Modelo hidrodinâmico usado nas simulações.....	53
Tabela 4.3 Parâmetros do MFX.....	54

Simbologia

Símbolos Arábicos

A	Área da face do volume de controle, [m ²].
C_{Ds}	Coefficiente de arrasto para uma partícula num meio infinito.
$\overline{\overline{D}}$	Tensor taxa de deformação.
d_p	Diâmetro da partícula, [m].
e	Coefficiente de restituição para a colisão entre as partículas.
\vec{f}	Forças de interação entre as fases gás e sólida.
\vec{g}	Aceleração da gravidade, [m/s ²].
g_0	Função radial de distribuição.
$\overline{\overline{I}}$	Tensor identidade.
J_{col}	Taxa de dissipação de energia granular através das colisões inelásticas.
J_{vis}	Taxa de dissipação de energia granular através do amortecimento viscoso.
\vec{q}	Fluxo difusivo de energia granular, [J/(m ² s)].
P_g	Pressão da fase gasosa, [Pa].
P_s	Pressão do sólido, [Pa].
Re_s	Número de Reynolds baseado no diâmetro da partícula.
R_ϕ	Termo fonte.
$\overline{\overline{s}}_g$ e $\overline{\overline{s}}_s$	Tensor das tensões para a fase fluido e sólida, [Pa]
t	Tempo, [s].
\vec{v}_g e \vec{v}_s	Velocidades médias axial da fase gás e sólida, respectivamente, [m/s].
u_m, v_m, w_m	Velocidades nas direções x, y, z da fase gasosa / sólida no volume de controle, [m/s].
V_{rs}	Correlação para a velocidade terminal para a fase sólida.

Símbolos Gregos

β	Função de arrasto.
---------	--------------------

Γ_{desl}	Taxa de produção de energia granular pelo deslizamento gás-partícula.
Γ_{ϕ}	Coefficiente de difusão da propriedade transportada ϕ .
ϵ_m	Fração volumétrica da fase m (gás ou sólido).
ϵ_g	Fração volumétrica da fase gasosa (fração de vazio).
ϵ_g^*	Fração de vazio para mínima fluidização.
ϵ_s	Fração volumétrica da fase sólida.
η	Coefficiente da função de restituição.
θ	Temperatura granular, [m ² /s ²].
λ	Viscosidade volumétrica, [kg/m.s].
λ_g e λ_s	Viscosidade volumétrica das fases gasosa e sólida, respectivamente, [kg/m.s].
μ	Viscosidade dimâmica, [kg/m.s].
μ_g e μ_s	Viscosidade dinâmica da fase gasosa e sólida, respectivamente, [kg/m.s].
ρ_g e ρ_s	Densidade do gás e do sólido, respectivamente, [kg/m ³].
$\overline{\sigma}$	Tensor das tensões.
$\overline{\sigma}_g$ e $\overline{\sigma}_s$	Tensor das tensões para a fase gás e sólida.
τ	Tensor das tensões viscosas, [Pa].
τ_s	Tensor das tensões viscosas do sólido, [Pa].
ϕ	Propriedade transportada.
ϕ_s	Ângulo de atrito interno.
ω_{pk}	Fator de sob relaxação para a correção da pressão da fase k.

Subscritos

g	Fase gasosa.
m	Índice da fase (m=g ou m=s).
s	Fase sólida.
b	Face da base do volume de controle.
e	Face leste do volume de controle.
n	Face norte do volume de controle.
s	Face sul do volume de controle.

t	Face do topo do volume de controle.
w	Face oeste do volume de controle.

Sobrescritos

p	Regime plástico.
v	Regime viscoso.

Abreviaturas e Siglas

CFD	Computational Fluid Dynamics.
EDP	Equação diferencial parcial.
IIT	Illinois Institute of Technology.
LFB	Leito fluidizado borbulhante.
LFC	Leito fluidizado circulante.
MFIX	Multiphase Flow with Interphase eXchanges.
NETL	National Energy Technology Laboratory.
SIMPLE	Semi Implicit Methd for Pressure Linked Equations.
TCEG	Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares.
VC	Volume de controle.

Resumo

Mineto, A. T. (2009). *Simulação numérica de escoamentos gás-sólido em leito fluidizado borbulhante utilizando a teoria cinética dos escoamentos granulares*. Bauru, 2009. 88 p. Dissertação (Mestrado) – Faculdade de Engenharia de Bauru, Universidade Estadual Paulista.

No presente trabalho desenvolve-se um estudo de modelagem matemática e simulação numérica do escoamento bifásico gás-sólido em um leito fluidizado borbulhante. É apresentado o modelo hidrodinâmico, A, para escoamentos bifásicos gás-sólido considerando a Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares. É usado o modelo Euleriano de duas fases separadas considerando a modelagem do tensor das tensões da fase sólida através do atrito entre as partículas e da teoria cinética dos escoamentos granulares. O código fonte MFIX (*Multiphase Flow with Interphase eXchanges*) desenvolvido no NETL (*National Energy Technology Laboratory*) é utilizado para as simulações numéricas. Os resultados de simulação são obtidos resolvendo a temperatura granular algebricamente ou através de uma equação diferencial parcial. Obtêm-se resultados mais realísticos no uso da EDP com condição de contorno de deslizamento parcial na parede. Uma variação no diâmetro das partículas (partículas do grupo B e do grupo A/B) é investigada, concluindo-se que deve ser acrescentado ao código MFIX outros parâmetros físicos para simulações com partículas do grupo A/B.

Palavras-chave: Escoamento gás-sólido, leitos fluidizados borbulhantes, teoria cinética dos escoamentos granulares, MFIX, simulação numérica.

Abstract

Mineto, A. T. (2009). *Numerical simulation of gas-solid flow in bubbling fluidized bed using the kinetic theory of granular flows*. Bauru, 2009. 88 p. Dissertação (Mestrado) – Faculdade de Engenharia de Bauru, Universidade Estadual Paulista.

In the present work is described a mathematical model and numerical simulation of gas-solid flow in the bubbling fluidized bed. It is presented the hydrodynamic model, A, for gas-solid flow considering the Kinetic Theory of Granular Flows. It is used the two fluids Eulerian model where the solid phase stress tensor is modeled considering the friction between the particles and the kinetic theory of granular flows. The code MFIX (Multiphase Flow with Interphase eXchanges) developed in NETL (National Energy Technology Laboratory) is used for numerical simulations. The results are obtained with the compute of the granular temperature using a partial differential equation or an algebraic expression. It was obtained more realistic results when is used a PDE with boundary conditions of the partial slip. A variation in the diameter of the particles (particles in Group B and Group A/B) it is analyzed. It is also concluded that should be added to the code MFIX other physical parameters for simulations with particles of group A/B.

Keywords: Gas-solid flow, bubbling fluidized bed, kinetic theory of granular flows, MFIX, numerical simulation.

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

1.1 Aplicações dos escoamentos gás – sólido em leitos fluidizados

A simulação de escoamentos gás-sólido é uma importante área dentro da mecânica dos fluidos. Escoamentos gás-sólido têm várias aplicações em indústrias de petróleo, química, metalúrgica, farmacêutica e de geração de energia. Dessas aplicações, destacam-se mais importantes economicamente os craqueadores catalíticos para conversão de frações pesadas de petróleo em gasolina e os combustores de leito fluidizado para geração de energia térmica e elétrica.

Embora as reações químicas e os processos de transferência de calor influenciem diretamente as taxas de conversão dos reatores catalíticos e a eficiência térmica de instalações energéticas, estas são altamente influenciadas pelos processos hidrodinâmicos, os quais determinam a distribuição espacial das fases e espécies envolvidas. Como a hidrodinâmica é dominante nos processos de transporte de massa e energia em certas escalas temporais e espaciais, é imprescindível o seu estudo e compreensão. Ainda na atualidade a compreensão dos processos hidrodinâmicos básicos que acontecem em escoamentos multifásicos nas instalações industriais é incompleta e insuficiente.

Leitos fluidizados de escoamentos gás-sólido aparecem em diversas aplicações industriais. Existem os reatores de leito fluidizado borbulhante (LFB) e os reatores de leito fluidizado circulante (LFC), os quais se distinguem pelo regime de fluidização. Os leitos borbulhantes são caracterizados por altas densidades de particulado, pelo desenvolvimento de bolhas de gás que promovem recirculação e mistura, e pelo processo de elutriação que promove o arrasto de particulados mais finos. A maior parte do leito é formada de partículas cujas velocidades terminais são maiores que a velocidade do gás. Os leitos circulantes operam em regime de fluidização rápida, onde o escoamento de gás ocorre com velocidades superiores à velocidade terminal do particulado. Baixas densidades de particulado e altas taxas de circulação são características desse tipo de leito.

1.2 A presença da difusão numérica na simulação do escoamento gás – sólido em leitos fluidizados

Uma característica dos leitos fluidizados gás-sólido é a presença de bolhas, as quais afetam o desempenho do reator. Assim, é importante entender as suas características e comportamento. Comumente podem-se definir bolhas como regiões com pouco ou sem sólido. Uma definição da bolha dentro do leito faz-se necessária, pois a caracterização da região com pouco sólido pode ser ambígua. Gidaspow (1994), Bouillard, Gidaspow e Lyczkowski (1991) entre outros caracterizam essas regiões como aquelas com frações de vazio maiores do que 0,8. Esse aspecto físico entre outros devem ser analisados durante a obtenção dos resultados de simulação. No estudo de escoamentos bifásicos podem-se descrever os escoamentos gás-sólido que acontecem em leitos fluidizados como modelos hidrodinâmicos de duas fases, os quais tratam o fluido e o sólido como duas fases separadas contínuas em que todas as partículas são consideradas idênticas e caracterizadas por um diâmetro médio efetivo e com propriedades de materiais idênticas.

Essa idéia de descrever os leitos fluidizados como modelo hidrodinâmico de dois fluidos existe desde os anos sessenta. Diversos autores descreveram esses modelos na época, Davidson (1961), Jackson (1963), Murray (1965), Collins (1965) Anderson e Jackson (1967), e Stewart (1968). O conjunto de equações proposto por esses pesquisadores é difícil de se resolver, e soluções numéricas para predizerem bolhas apareceu mais tarde com Gidaspow (1994), Bouillard, Gidaspow e Lyczkowski (1991), Kuipers *et al.* (1993), Sanyal e Cesmebasi (1994), Boemer, Qi e Renz (1997) e Syamlal e O'Brien (1989). Nos estudos realizados por esses autores foram observadas, a partir do contorno da fração de vazio, bolhas de formas alongadas e pontiagudas ao invés de bolhas com formas arredondadas encontradas experimentalmente e utilizadas nas análises teóricas de Collins (1965) e de Stewart (1968). Estes estudos levaram ao questionamento se o modelo de dois fluidos é de alguma forma incompleto que resultaria na predição de bolhas com formas não-físicas ou se a técnica numérica utilizada era inadequada para resolver as equações corretamente. Recentemente estudos numéricos mostraram que o problema talvez esteja na técnica numérica. Guenther e Syamlal (2001) investigaram os efeitos de difusão numérica das equações do escoamento gás-sólido em um leito fluidizado borbulhante. Segundo os autores, métodos de alta ordem produziram bolhas mais realísticas, com uma forma arredondada. No presente trabalho será adotado um esquema de discretização de alta ordem que produza resultado físico coerente na forma da bolha, como o Superbee de Sweby (1984).

1.3 Características do escoamento gás – sólido

Nos escoamentos gás-sólido existem regiões que são caracterizadas pela cinética ou colisões do particulado, outras dominadas pelo atrito, e outras pela combinação dos dois fatores. A contribuição aditiva dos efeitos cinéticos e devido ao atrito no tensor das tensões do particulado foi estudada por Savage (1982) e por Johnson e Jackson (1987). De acordo com Agrawal *et al.* (2001) os efeitos cinéticos são baseados na teoria cinética dos escoamentos granulares que considera o efeito intersticial do gás. O tensor das tensões cinético utiliza a temperatura granular que pode ser calculada de duas formas: através de uma equação diferencial parcial adicional que representa o balanço da energia pseudo-térmica das flutuações das velocidades das partículas, isto é, uma equação adicional para a temperatura granular, ou através de uma expressão algébrica. Os efeitos devidos ao atrito são caracterizados por um modelo de escoamento quase-estático proposto por Schaeffer (1987) e modificado por Srivastava e Sundaresan (2003) para contabilizar flutuações no tensor taxa de deformação.

As forças interfaciais incluem força de arrasto, força de sustentação, força de massa virtual, entre outras. Nas equações de escoamentos de duas fases devido a grande diferença de densidades as forças interfaciais são menos significantes exceto a força de arrasto. Conseqüentemente, em diversas simulações somente as forças de arrasto são contabilizadas. Uma descrição detalhada do equacionamento e das forças interfaciais é apresentada por Enwald, Peirano e Almstedt (1996). Geralmente a força de arrasto atuando em uma partícula em um escoamento fluido-sólido pode ser representada pelo produto do coeficiente de transferência da quantidade de movimento pela velocidade de deslizamento entre as duas fases. Um dos primeiros trabalhos para o cálculo desse coeficiente foi proposto por Richardson e Zaki (1954). Wen e Yu (1966) estenderam o trabalho desses autores apresentando uma correlação para grandes frações de vazio. Ding e Gidaspow (1990) utilizaram a equação de Ergun (1952) para fase densa e a equação de Wen e Yu (1966) para fase dispersa. Syamlal e O'Brien (1988) propuseram um modelo para o cálculo do coeficiente de arrasto baseado na medida das velocidades terminais das partículas em leitos fluidizados. Um estudo detalhado sobre as diversas correlações para cálculo do coeficiente de arrasto é apresentado recentemente por Du *et al.* (2006).

1.4 Objetivos e apresentação do trabalho

Neste trabalho pretende-se analisar a influência em um escoamento gás-sólido em leito fluidizado borbulhante, quando na teoria cinética dos escoamentos granulares utiliza-se uma expressão algébrica ou resolve-se uma equação diferencial parcial (EDP) para o computo da temperatura granular.

Para isto utiliza-se um leito fluidizado borbulhante retangular com jato central, apresentado na figura 1.1. Na base do leito injeta-se gás a uma velocidade uniforme para que ocorra a fluidização das partículas sólidas existentes em seu interior. No jato, centralizado na base, o gás entra com velocidade superior ocasionando a formação de bolhas.

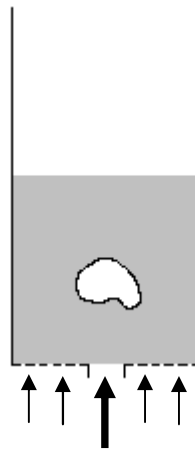


Figura 1.1 Leito fluidizado borbulhante

O trabalho tem como objetivos realizar simulações numéricas com modelos eulerianos do contínuo para ambas as fases e comparar resultados para diversos parâmetros como fração de vazio, velocidades do gás e do sólido e temperatura granular. As comparações serão feitas variando o diâmetro das partículas e resolvendo-se a temperatura granular algebricamente ou através de uma EDP.

As simulações numéricas foram realizadas utilizando o código MFIX “Multiphase Flow with Interphase eXchanges”. Informações sobre o MFIX podem ser encontradas em Syamlal, Rogers e O’Brien (1993) e na página www.mfix.org.

O trabalho está estruturado em cinco capítulos. No capítulo 1 apresenta-se uma pequena descrição do escoamento gás-sólido, com destaque para principais características e aplicações, presença de difusão numérica em simulações e finalmente, apresentam-se os objetivos para o desenvolvimento do trabalho. O capítulo 2 traz a formulação teórica

hidrodinâmica do modelo de duas fases separadas utilizando o procedimento da TCEG (Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares). No terceiro capítulo tem-se a metodologia de solução numérica utilizada no código MFIX, onde se encontram as fórmulas de correção discretizadas. O capítulo 4 mostra resultados de simulação numérica bidimensional obtidos a partir do modelo hidrodinâmico A para leito fluidizado borbulhante com jato central. Apresentam-se simulações com o emprego da TCEG com formulação algébrica e com resolução de uma equação diferencial parcial para o computo da temperatura granular. Comparam-se resultados para dois tipos de condições de contorno na parede da fase sólida, no caso em que se resolve a EDP. Além disso, analisa-se a influência do diâmetro das partículas nas simulações com o uso da formulação algébrica. Conclui-se o trabalho no capítulo 5, com propostas de trabalhos futuros.

Capítulo 2

TEORIA HIDRODINÂMICA

2.1 Introdução

A modelagem numérica para escoamentos de fluidos utiliza modelos matemáticos que se baseiam fundamentalmente em equações diferenciais parciais, com condições iniciais e de contorno prescritas, as quais representam matematicamente os fenômenos físicos que ocorrem nos escoamentos. Aplicação de leis físicas de conservação, tais como conservação de massa, de quantidade de movimento (2º lei de Newton) e de energia (1º lei da Termodinâmica) e das equações constitutivas são essenciais para o fechamento do sistema de EDPs. Em escoamentos bifásicos existe um agravante na aplicação dessas leis devido à presença de duas fases diferentes e a existência de interfaces que separam essas fases, assim o modelo matemático será expresso através de duas equações de balanço de massa, quantidade de movimento e energia, para cada fase. Os escoamentos bifásicos são classificados em regimes de escoamentos e vários mecanismos de transporte entre as fases e a parede bem como entre as duas fases dependem desses regimes. Ishii (1975) apresenta uma tabela com vários regimes de escoamentos bifásicos (escoamentos com fases contínuas, escoamentos mistos e escoamentos com fases dispersas) que dependem da geometria das interfaces existentes no escoamento, regimes os quais podem ocorrer simultaneamente num sistema simples dificultando sua modelagem. A referida tabela pode ser vista na figura 2.1.



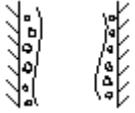
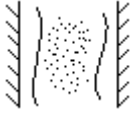

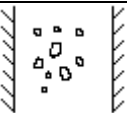
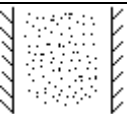
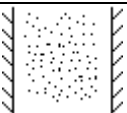
Tipos	Padrões	Geometria	Configuração	Exemplos
Escoamentos com fases contínuas	ESCOAMENTO EM PELÍCULA		Filme líquido em gás. Filme gasoso em um líquido.	Resfriamento por líquido. Ebulição em película.
	ESCOAMENTO ANULAR		Núcleo líquido e filme gasoso. Núcleo gasoso e filme líquido	Ebulição em película. Condensadores.
	JATOS		Jato de líquido em um gás Jato de gás em um líquido.	Pulverização. Condensadores a jato.
Escoamentos mistos	ESCOAMENTO PISTONADO		Bolsão de gás em um líquido.	Ebulição de sólido líquido em convecção forçada.
	ESCOAMENTO ANULAR COM BOLHAS		Bolhas de gás em um filme líquido, núcleo gasoso.	Evaporadores com nucleação junto à parede.
	ESCOAMENTO ANULAR DISPERSO		Gotas de um núcleo gasoso, filme líquido na parede.	Geradores de vapor.
	ESCOAMENTO ANULAR DISPERSO COM BOLHAS		Gotas de líquido no núcleo gasoso, bolhas de gás no filme líquido junto a parede.	Canal de um reator tipo BWR.
Escoamentos com fase dispersa	ESCOAMENTO EM BOLHAS		Bolhas de gás em um líquido.	Colunas de extração.
	ESCOAMENTO EM NÉVOA		Gotas em um gás.	Resfriamento por pulverização.
	ESCOAMENTO COM PARTÍCULAS SÓLIDAS		Partículas sólidas em um gás ou líquido.	Transporte pneumático ou hidráulico.

Figura 2.1 Diferentes regimes de escoamentos bifásicos de acordo com Ishii (1975)

Pode-se contornar esse problema aplicando localmente as equações de balanço em cada fase, modelando apropriadamente as condições de contorno na interface. Porém, uma formulação geral baseada em variáveis locais instantâneas e interface em movimento, resultam em um problema de multifronteiras, com posição de interface desconhecida. Isso torna impraticável para a maioria dos casos a obtenção de modelos matemáticos e, portanto de

soluções (ISHII e MISHIMA, 1984). Para eliminar parcialmente essas dificuldades Ishii e Mishima (1984) relatam três procedimentos principais adotados para desenvolver modelos matemáticos bifásicos, a partir do ponto de vista macroscópico:

- 1) Modelo da Difusão: Considera um contínuo interagindo;
- 2) Volume de Controle: Equações de balanço postuladas;
- 3) Método das Médias: Equações de balanço médias.

Os dois primeiros procedimentos baseiam-se principalmente em hipóteses, intuição física e similaridade assumida com escoamentos monofásicos. O método das médias é matematicamente mais rigoroso e requer uma ampla manipulação das equações. Uma descrição mais detalhada de cada método pode ser encontrada em Ishii e Mishima (1984).

O método das médias é o mais utilizado na atualidade e dividi-se em três grupos (ISHII, 1975): as médias de Euler; as médias de Lagrange; e as médias estatísticas de Boltzmann. Esses grupos também se subdividem em vários outros grupos como é mostrado na figura 2.2. Dependendo do procedimento de médias adotado, existem varias formulações diferentes para um sistema bifásico.

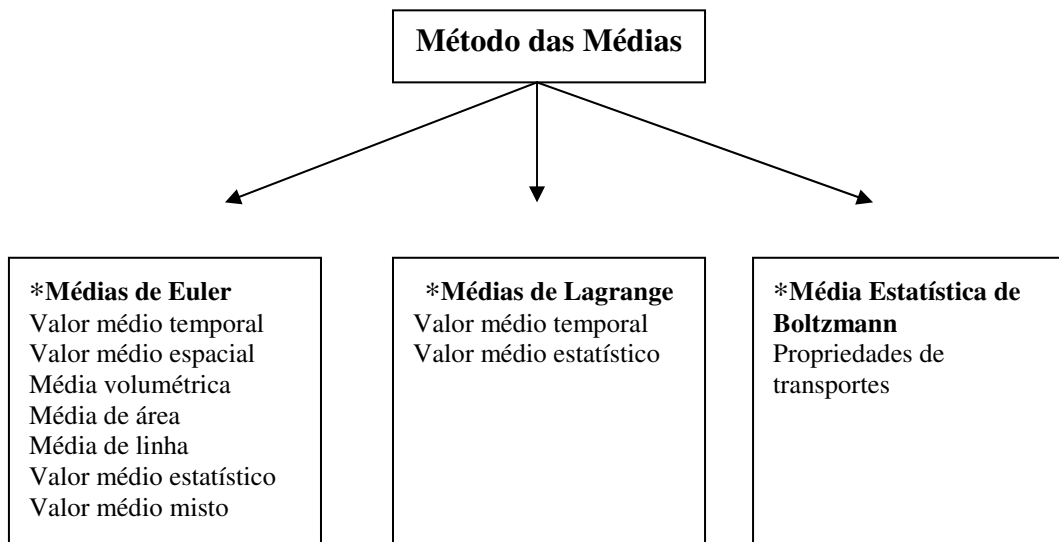


Figura 2.2 Subdivisões do método das médias Ishii (1975), Ishii e Mishima (1984)

Neste trabalho foram utilizadas a formulação Euler/ Euler e a formulação Euler/ Boltzmann (Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares - TCEG) que são descritas nas seções 2.2 e 2.3.

2.2 Formulação Euleriana/Euleriana Clássica

A formulação Euleriana/Euleriana clássica permite a obtenção do denominado modelo de duas fases separadas. Este modelo utiliza o procedimento das médias de Euler, e constitui-se numas das principais formulações das equações de campo para um sistema bifásico. Tal formulação é bem descrita na literatura e pode ser encontrada em Ishii (1975), Delhay e Achard (1976) e (1977), Drew (1983), entre outros.

O modelo de duas fases é formulado considerando cada fase em separado, em termos de um sistema de equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia, para cada fase respectivamente. Visto que ambas as fases interagem entre si, aparecem nas equações de campo termos devido a essa interação, que especificam os transportes de massa, quantidade de movimento e energia através da interface.

2.2.1 Procedimentos para a formulação do modelo das duas fases separadas

O procedimento para a formulação do modelo de duas fases separadas é apresentado na figura 2.3 proveniente de Enwald, Peirano e Almstedt. (1996). A idéia geral é formular balanços integrais de massa, quantidade de movimento e energia em um volume de controle fixo que envolva ambas as fases. Posteriormente aplicando os teoremas de Leibniz e Gauss-Ostragradskii (apêndice A) os balanços integrais dão origem a dois tipos de equações locais: as equações locais instantâneas para cada fase e as equações de salto locais instantâneas que representam a interação entre as duas fases. Numa segunda etapa aplica-se o procedimento de médias de Euler às equações locais. Devido à introdução de novas variáveis nas equações de campo, os termos de interação na interface, realiza-se um terceiro passo que consiste na aplicação de leis de fechamento com o objetivo de modelar os termos não conhecidos nas equações de balanço. Por último são estabelecidas condições iniciais e de contorno, completando a formulação do modelo de duas fases separadas.

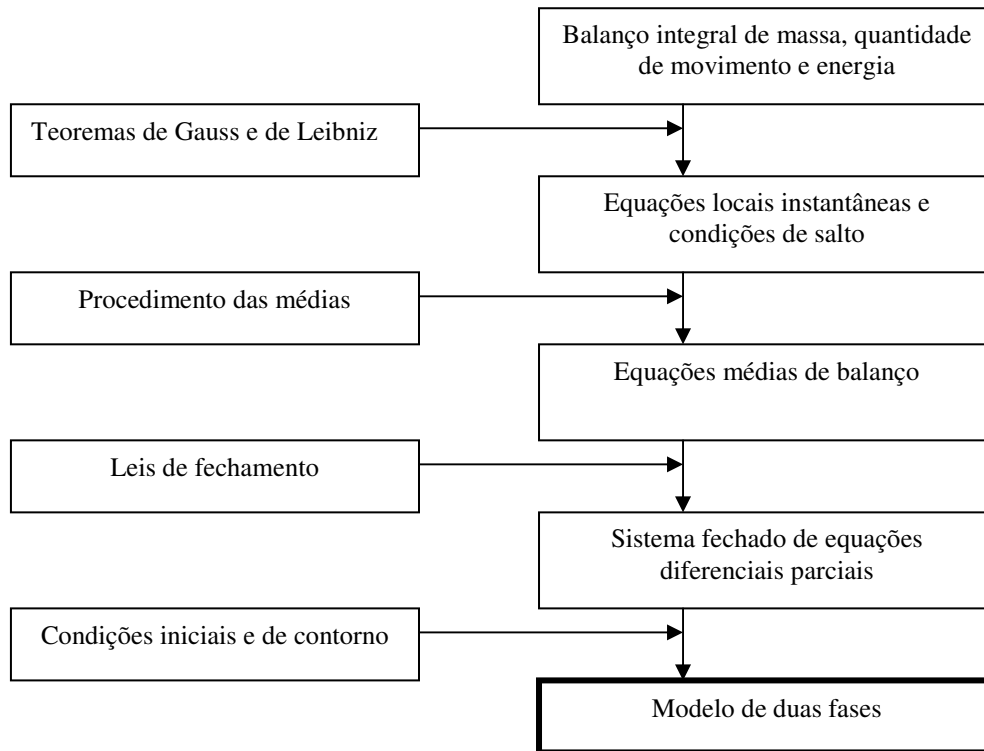


Figura 2.3 Procedimento geral para a formulação do modelo de duas fases Enwald, Peirano e Almstedt (1996)

Um desenvolvimento detalhado desta metodologia voltado para escoamento gás-sólido é apresentado em Enwald, Peirano e Almstedt (1996). Cabezas-Gómez (1999) e Cabezas-Gómez (2003) também apresentam um estudo desse desenvolvimento.

2.3 Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares

O modelo das duas fases separadas para escoamentos gás-sólido necessita de leis constitutivas para a formulação do tensor das tensões em cada fase analisada. Para o caso da fase contínua (gás) considera-se um modelo reológico Newtoniano, o que é bastante razoável. No caso da fase dispersa (particulado) assume-se essa mesma hipótese de fluido Newtoniano, o que constitui uma aproximação muito grosseira, ainda mais quando a fase dispersa é composta de partículas sólidas.

Nestes casos a consideração da fase sólida como fluido Newtoniano implica na procura de um valor, coerente fisicamente, da viscosidade dinâmica e volumétrica da fase sólida, para resolver o sistema de equações de EDPs que compõe o modelo tradicional das duas fases separadas. Para contornar esse problema muitos pesquisadores na atualidade

utilizam a teoria cinética dos escoamentos granulares (TCEG). Esta teoria apóia-se na formulação de Euler/Boltzmann.

A TCEG baseia-se nas similaridades entre o escoamento de um material granular, o qual compreende uma população de partículas com ou sem gás intersticial e as moléculas de um gás (PEIRANO e LECKNER, 1998).

Um significado importante na TCEG é o da “temperatura granular”, que constitui uma definição de temperatura para o sólido semelhante à temperatura de um gás que normalmente apresenta-se na termodinâmica clássica e na estatística. A seguir descreve-se de maneira sucinta esse significado, segundo Sinclair e Jackson (1989) que foram os primeiros a propor uma descrição fundamental das tensões na fase sólida no contexto do modelo das duas fases separadas usando a TCEG.

As interações das partículas e do gás eram restritas a força de arrasto mútuo, cujo valor era dependente da concentração das partículas e da diferença entre os valores médios locais das velocidades das fases gasosa e sólida. Desde que o gás não desliza livremente nas paredes do duto, existe um perfil de velocidade do gás completamente desenvolvido e correspondentemente um perfil de velocidade do particulado induzido pela força de arrasto exercida pelo gás sobre as partículas. Como resultado deste movimento cisalhante, as partículas colidem entre si, gerando uma componente aleatória do movimento do particulado. Estas flutuações do particulado geram uma pressão efetiva na fase sólida, junto com uma viscosidade efetiva as quais resistem às tensões cisalhantes do conjunto de partículas. Ambas a pressão e a viscosidade efetivas dependem fortemente da temperatura granular, que deve ser calculada algebricamente ou pela solução de uma EDP separada que representa o balanço da energia pseudotérmica do movimento flutuante das partículas. A energia cinética do movimento aleatório ou flutuante do particulado é análoga àquela do movimento térmico das moléculas de um gás. Esta energia pseudotérmica é gerada pelo trabalho efetuado pelas tensões de cisalhamento efetivo na fase particulada, dissipada pelas colisões inelásticas partícula – partícula e conduzida de acordo com os gradientes da temperatura granular.

A formulação da TCEG pode ser desenvolvida seguindo o procedimento geral simplificado mostrado na figura 2.4. Este procedimento é um resumo do material apresentado em Therdthianwong (1994).

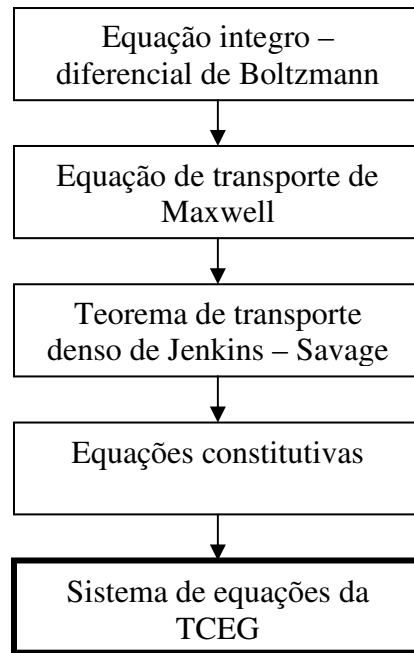


Figura 2.4 Procedimento geral simplificado para formulação da TCEG, baseado no trabalho de Therdthianwong (1994)

Primeiramente formula-se a equação integro – diferencial de Boltzmann para frequência de distribuição de velocidade f . Esta equação modela o escoamento desde o ponto de vista microscópico do sistema. Numa segunda etapa formula-se a equação de transporte de Maxwell. Esta equação permite formular o escoamento desde o ponto de vista macroscópico, proporcionando uma equação de transporte hidrodinâmica que possibilita o cálculo de uma propriedade ψ transportada (por exemplo, massa, quantidade de movimento ou energia). Num terceiro passo formula-se o teorema de transporte para escoamentos densos de Jenkins – Savage, apresentado em Jenkins e Savage (1983) e em Lun, Savage e Jeffrey (1984). Este teorema baseia-se na equação de transporte para gases densos apresentada em Chapman e Cowling (1961) e é denominado também como equação de transporte de Maxwell – Chapman por Savage (1983) e Gidaspow (1994), generalizando o teorema de transporte válido para gases e escoamentos de partículas diluídos. Por último formulam-se as equações constitutivas que permitem calcular os termos não modelados que foram introduzidos nas equações de transporte macroscópicas (THERDTHIANWONG, 1994 *apud* SILVA, 2006).

A formulação da TCEG para o modelo dos dois fluidos, segundo Peirano e Leckner (1998), é desenvolvida através de dois procedimentos fundamentais: o primeiro que considera um escoamento granular seco, (sem influência do gás intersticial). Para este tipo de procedimento, após o trabalho pioneiro de Sinclair e Jackson (1989), Ding (1990) e Ding e

Gidaspow (1990) aplicaram pela primeira vez a TCEG na simulação bidimensional transiente de um leito borbulhante a frio com base nos trabalhos de Savage (1983), Jenkins e Savage (1983), Lun, Savage e Jeffrey (1984) e Chapman e Cowling (1961). Nesses trabalhos a função distribuição de velocidade do sólido foi modelada através da função de distribuição de velocidade de Maxwell, o que fez válido este procedimento apenas para escoamentos gás-sólido densos (leitos borbulhantes). Entretanto, Gidaspow (1994) estendeu esta metodologia para escoamentos dispersos (leitos circulantes). O segundo procedimento considera o gás intersticial entre as partículas do escoamento. Peirano e Leckner (1998) apresentam uma detalhada discussão do segundo procedimento aplicado a escoamentos turbulentos gás-sólido em leitos fluidizados circulantes. Ma e Ahmadi (1988) e Koch (1990) também consideram o segundo procedimento em seus estudos.

Na TCEG a resolução da equação da conservação da temperatura granular pode ser feita algebricamente ou através de uma EDP. Os dois procedimentos são apresentados no modelo hidrodinâmico.

2.4 Modelo Hidrodinâmico

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

Apresenta-se o modelo hidrodinâmico A de Gidaspow (1994) assumindo a não existência de transferência de massa e energia entre as fases (fases não reagentes) e tratando-se de um modelo isotérmico para ambas as fases (gás e sólido).

Conservação da Massa para a fase gasosa

$$\frac{\partial(\rho_g \epsilon_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \epsilon_g \vec{v}_g) = 0 \quad (2.1)$$

Conservação da Massa para a fase sólida

$$\frac{\partial(\rho_s \varepsilon_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s \varepsilon_s \vec{v}_s) = 0 \quad (2.2)$$

Nas equações de conservação de massa o primeiro termo da esquerda representa a variação temporal de acúmulo de massa por unidade de volume e o segundo termo representa a variação de fluxo de massa convectivo.

Conservação da Quantidade de Movimento para a fase gasosa

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_g \rho_g \vec{v}_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{v}_g \vec{v}_g) = \varepsilon_g \vec{\nabla} \cdot \overline{\overline{\sigma}}_g - \vec{f} + \varepsilon_g \rho_g \vec{g} \quad (2.3)$$

Conservação da Quantidade de Movimento para a fase sólida

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s \vec{v}_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \vec{v}_s \vec{v}_s) = \vec{\nabla} \cdot \overline{\overline{\sigma}}_s + \varepsilon_s \vec{\nabla} \cdot \overline{\overline{\sigma}}_g + \vec{f} + \varepsilon_s \rho_s \vec{g} \quad (2.4)$$

onde ε_g e ε_s são as frações de vazio e de sólido, respectivamente; \vec{v}_g e \vec{v}_s são as velocidades médias locais das fases gasosa e sólida, respectivamente; $\overline{\overline{\sigma}}_g$ e $\overline{\overline{\sigma}}_s$ são os tensores das tensões das duas fases; \vec{f} é a força de interação entre as duas fases por unidade de volume e \vec{g} é o campo gravitacional.

Nas equações (2.3) e (2.4), o primeiro termo da esquerda representa a taxa líquida de aumento da quantidade de movimento. O segundo termo da esquerda representa a transferência de quantidade de movimento por convecção. Do lado direito das equações os termos que envolvem os tensores das tensões representam as forças de superfície normal e de cisalhamento.

2.4.1 Leis de Fechamento

Nas equações conservativas médias de balanço aparecem termos desconhecidos, tais termos serão modelados pelas leis de fechamento, as quais são classificadas em três tipos:

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

Uma discussão detalhada sobre as leis de fechamento pode ser encontrada em Enwald, Peirano e Almstedt (1996), Cabezas-Gómez (1999), Arnold, Drew e Lahey (1990), entre outros.

Força de interação entre as fases

Os mecanismos e formulações das forças de interações entre as fases têm sido estudados com detalhes por diversos autores. Dos estudos na dinâmica de partícula em fluido, diversos mecanismos foram encontrados: força de arrasto, causada por diferenças nas velocidades entre as fases; empuxo, causada pelo gradiente de pressão do fluido; efeito de massa virtual, causada por aceleração relativa entre as fases; força de elevação de Saffman, causada pelo gradiente de velocidade do fluido; força Magnus, causada pela rotação da partícula; força Basset, a qual depende do movimento das partículas através do fluido; força Faxen, a qual é uma correção aplicada para o efeito de força virtual e força de Basset para o gradiente de velocidade do fluido e forças devido a gradientes de temperatura e pressão (SYAMLAL, ROGERS e O'BRIEN, 1993).

Nas equações de escoamentos de duas fases devido a grande diferença de densidades as forças interfaciais são menos significantes exceto a força de arrasto. Essa força modela-se em função da velocidade relativa entre as fases e do coeficiente de quantidade de movimento na interface, também denominado função de arrasto β e pode-se determiná-la através de dois procedimentos: a partir de correlações para o coeficiente de arrasto sobre uma partícula numa

suspensão de partículas, C_{Ds} , ou a partir da queda de pressão por unidade de comprimento numa suspensão de partículas.

Assim a força de arrasto entre as fases gás e sólida é expressa por $\vec{f} = \beta(\vec{v}_g - \vec{v}_s)$, onde a função de arrasto β depende do procedimento adotado. Análises mais rigorosas sobre os procedimentos de obtenção de funções de arrasto são apresentadas em Enwald, Peirano e Almstedt (1996).

Um dos primeiros modelos para o arrasto foi proposto por Richardson e Zaki (1954):

$$\beta = \frac{\rho_s \varepsilon_g |\vec{g}|}{V_{rs} \varepsilon_s^{n-1}} \quad (2.5)$$

onde n depende do número de Reynolds baseado na velocidade terminal, V_{rs} , de uma partícula isolada. A expressão de Garside e Al-Dibouni (1977) pode ser usada para o cálculo de V_{rs} .

$$V_{rs} = 0,5 \left(A - 0,06 \text{Re}_s + \sqrt{(0,06 \text{Re}_s)^2 + 0,12 \text{Re}_s (2B - A) + A^2} \right) \quad (2.6)$$

onde o número de Reynolds para a fase sólida é dado por:

$$\text{Re}_s = \frac{\varepsilon_g \rho_g |\vec{v}_g - \vec{v}_s| d_p}{\mu_g} \quad (2.7)$$

e os valores para A e B são: $A = \varepsilon_g^{4,14}$ e $B = \begin{cases} 0,8 \varepsilon_g^{1,28} & \text{se } \varepsilon_g \leq 0,85 \\ \varepsilon_g^{2,65} & \text{se } \varepsilon_g > 0,85 \end{cases}$

Wen e Yu (1966) estenderam o trabalho de Richardson e Zaki (1954), apresentando uma correlação para grandes frações de vazios ($\varepsilon_s \geq 0,8$):

$$\beta = \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{|\vec{v}_g - \vec{v}_s|}{d_p} \rho_g \varepsilon_s \varepsilon_g^{-2,65} \quad (2.8)$$

Ding e Gidaspow (1990) empregaram a equação de Ergun (1952) para o cálculo na região densa e a equação de Wen e Yu (1966) para o cálculo na região dispersa:

$$\beta = \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{|\vec{v}_g - \vec{v}_s|}{d_p} \rho_g \varepsilon_s \varepsilon_g^{-2,65} \quad \text{se } \varepsilon_g \geq 0,8$$

(2.9)

$$\beta = 150 \frac{\varepsilon_s^2 \mu_g}{\varepsilon_g d_p^2} + 1,75 \frac{|\vec{v}_g - \vec{v}_s|}{d_p} \rho_g \varepsilon_s \quad \text{se } \varepsilon_g < 0,8$$

onde o coeficiente de arrasto é expresso por:

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

(2.10)

Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) propuseram uma correlação de arrasto considerando um modelo baseado em medidas de velocidades terminais das partículas nos leitos fluidizados na forma:

$$\beta = \frac{3}{4} \frac{C_{Ds}}{V_{rs}^2} \frac{|\vec{v}_g - \vec{v}_s|}{d_p} \varepsilon_g \varepsilon_s$$

(2.11)

aqui C_{Ds} é um coeficiente de arrasto para uma esfera:

$$C_{Ds} = \left(0,63 + 4,8 \sqrt{V_{rs}/\text{Re}_s}\right)^2$$

(2.12)

Recentemente, Du *et al.* (2006) apresentaram um detalhado estudo sobre modelos para cálculo do coeficiente de arrasto na transferência de quantidade de movimento na interface entre as fases.

Tensor das tensões

O tensor das tensões $\overline{\sigma}$ é representado por $\overline{\sigma} = -P\overline{I} + \overline{\tau}$, onde o primeiro termo representa a pressão hidrostática (\overline{I} é o tensor unitário) e o segundo termo denominado tensor das tensões viscosas refere-se ao movimento dinâmico da ação das forças superficiais viscosas.

Segundo Kuipers *et al.* (1992), apesar de que o tensor das tensões viscosas para ambas as fases deva depender da fração do vazio e das derivadas espaciais de velocidade, considerando também um efeito de memória, não há disponível uma formulação geral com os valores corretos das constantes do material. De fato, os assuntos relacionados a reologia dos pós de fluidização ainda não conduziram à proposição de um modelo reológico unificado.

Pelo fato citado o tensor das tensões viscosas $\overline{\tau}$ para ambas as fases, é modelado assumindo a relação tensão/deformação para um fluido Newtoniano.

$$\overline{\tau} = 2\mu\overline{D} + \lambda tr(\overline{D})\overline{I} \quad (2.13)$$

onde \overline{D} , o tensor taxa de deformação é dado por:

$$\overline{D} = \frac{1}{2} \left[\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T \right] \quad (2.14)$$

Para a fase gasosa usa-se a hipótese de Stokes apresentada em White (1992),

$$\lambda = -\frac{2}{3}\mu \quad (2.15)$$

Assim, para esta fase o tensor das tensões é expresso por $\overline{\sigma}_g = -P_g\overline{I} + 2\mu_g\overline{S}_g$, onde

$$\overline{S}_g = \frac{1}{2} \left[\nabla \vec{v}_g + (\nabla \vec{v}_g)^T \right] - \frac{1}{3} \nabla \cdot \vec{v}_g \overline{I} \quad (2.16)$$

em que P_g é a pressão do gás, μ_g é a viscosidade dinâmica da fase gasosa e \overline{I} é o tensor unitário.

A modelagem da fase sólida é um tanto mais complexa, assumindo-se a mesma hipótese de fluido Newtoniano para o particulado fica-se com uma aproximação muito grosseira e o tensor das tensões desta fase deve ser modelado com teorias propostas na literatura que descrevem escoamentos granulares para contornar o problema. Existem dois regimes que classificam os escoamentos granulares, representados na figura 2.5: um viscoso ou rápido, no qual a tensão é causada por transferência de movimento colisional, e um plástico ou lento, no qual a tensão é causada devido ao atrito entre as partículas (JENKINS e COWIN,1979).

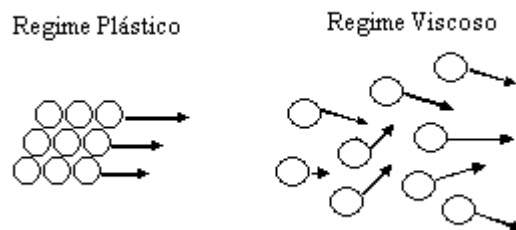


Figura 2.5 Regimes de escoamentos granulares

Srivastava e Sundaresan (2003) assumem o tensor das tensões da fase sólida como simples soma de um tensor das tensões cinético σ_s^v e um tensor das tensões de atrito σ_s^p .

$$\sigma_s = \sigma_s^v + \sigma_s^p \quad (2.17)$$

Tal formulação captura os dois limites extremos de um escoamento granular; o regime viscoso onde a contribuição dominante se dá devido à cinética do escoamento e o regime plástico onde o atrito é dominante.

Makkawi, Wright e Ocone (2006), além dos efeitos de atrito e cinética, julga ser de extrema importância a consideração de forças coesivas entre as partículas para a formulação do tensor das tensões do particulado.

Nos estudos de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), a teoria cinética dos escoamentos granulares, que é bem descrita por Jenkins e Savage (1983), Lun, Savage e Jeffrey (1984), usada para escoamentos dispersos (rápidos) e a teoria de estado crítico, segundo Schaeffer (1987), usada para escoamentos densos (lentos) são combinadas por meio de uma chave no ponto de compactação crítico para a mínima fluidização alternando a formulação do tensor das tensões da fase sólida entre as duas diferentes relações constitutivas:

$$\bar{\sigma}_s = \begin{cases} -P_s^p \bar{I} + \bar{\tau}_s^p, & \text{se } \varepsilon_g \leq \varepsilon_g^* \\ -P_s^v \bar{I} + \bar{\tau}_s^v, & \text{se } \varepsilon_g > \varepsilon_g^* \end{cases} \quad (2.18)$$

em que ε_g^* é a fração de vazio para mínima fluidização e os sobrescritos p e v indicam os regimes plástico e viscoso, respectivamente.

Os tensores das tensões no regime plástico são usualmente descritos pela teoria da mecânica dos solos. Esta teoria idealiza os materiais de tal forma que seu comportamento possa ser assumido como independente da taxa de tensão (TUZUN *et al.*, 1982). Os tensores das tensões originam-se da fricção entre as partículas e são descritos por modelos fenomenológicos. Nas teorias da mecânica dos solos existem dois principais componentes. O primeiro é a função de campo, que define uma superfície no espaço das tensões dentro da qual o material se comportará elasticamente (ou permanecerá rígido se a elasticidade for desconsiderada) e o ponto de tensão deve encontrar-se durante a deformação plástica. O segundo é a regra de escoamento, a qual estabelece relações entre os componentes de tensão e taxas dos tensores das tensões. Mais detalhes podem ser encontrados em Tuzun *et al.* (1982).

Similarmente às funções usadas nas teorias de escoamentos plásticos de Jekine (1987), uma função arbitrária que permite certa quantidade de compressibilidade na fase sólida representa o termo da pressão do sólido para o regime de escoamento plástico:

$$P_s^p = \varepsilon_s P^* \quad (2.19)$$

onde P^* é representado por uma lei empírica:

$$P^* = \varepsilon_s A (\varepsilon_g^* - \varepsilon_g)^n \quad (2.20)$$

com valores típicos das constantes de $A=10^{25}$ e $n=10$.

A formulação para o tensor das tensões é baseada nos estudos de Schaeffer (1987) que propôs uma equação relacionada com a pressão do sólido:

$$\bar{\tau}_s^p = 2\mu_s^p \bar{D}_s \quad (2.21)$$

onde

$$\mu_s^p = \frac{P^* \sin \phi_s}{2\sqrt{I_{2D}}} \quad (2.22)$$

e ϕ_s é o ângulo da partícula no atrito interno e I_{2D} é o segundo invariante do tensor taxa de deformação:

$$I_{2D} = \frac{1}{6} \left[(D_{s11} - D_{s22})^2 + (D_{s22} - D_{s33})^2 + (D_{s33} - D_{s11})^2 \right] + D_{s12}^2 + D_{s23}^2 + D_{s31}^2 \quad (2.23)$$

Os termos viscosos na equação do tensor das tensões da fase sólida são baseados em uma forma modificada da teoria cinética de partículas esféricas, inelásticas e suaves desenvolvida por Lun, Savage e Jeffrey (1984). A pressão da fase sólida é expressa por:

$$P_s^v = k_1 \varepsilon_s^2 \theta \quad (2.24)$$

com $k_1 = 2(1+e)\rho_s g_0$ onde e é o coeficiente de restituição para as colisões da fase sólida e g_0 é a função de distribuição radial no contato das partículas. Na literatura as formulações para g_0 diferem consideravelmente, abaixo cita-se algumas dessas formulações:

Ding e Gidaspow (1990):

$$g_0 = \frac{3}{5} \left[1 - \left(\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{s,\max}} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^{-1} \quad (2.25)$$

Ma e Ahmadi (1986):

$$g_0 = \frac{(1 + 2,5\varepsilon_s + 4,5904\varepsilon_s^2 + 4,515439\varepsilon_s^3)}{\left[1 - \left(\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{s,\max}} \right)^3 \right]^{0,678021}} \quad (2.26)$$

Carnahan e Starling (1969):

$$g_0 = \frac{1}{\varepsilon_g} + \frac{1,5\varepsilon_s}{\varepsilon_g^2} + \frac{0,5\varepsilon_s^2}{\varepsilon_g^3} \quad (2.27)$$

Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) desprezam o terceiro termo da equação (2.27) e adotam a função de distribuição radial sendo:

$$g_0 = \frac{1}{\varepsilon_g} + \frac{1,5\varepsilon_s}{\varepsilon_g^2} \quad (2.28)$$

A função de distribuição radial g_0 é introduzida como uma medida para a probabilidade de contato/colisão entre partículas quando o gás torna-se denso (LU *et al.*, 2004). Isto significa que num gás rarefeito g_0 é igual a unidade, mas tende ao infinito quando as moléculas estão bem perto, de maneira que o movimento seja quase impossível (PEIRANO e LECKNER, 1998). Na literatura existe uma concordância com o fato de que g_0 deve aumentar com o aumento da fração volumétrica do sólido, mas as correlações diferem consideravelmente entre si (BOEMER *et al.*, 1995).

Já o coeficiente de restituição é a medida da elasticidade da colisão entre duas partículas e pode ser definido como razão das diferenças de velocidades antes e depois das colisões. Diz-se que uma colisão é perfeitamente elástica se o coeficiente de restituição é $e = 1$ e perfeitamente plástica se $e = 0$. Experimentos mostram que e não é constante e depende fortemente da velocidade de impacto das partículas (DU *et al.*, 2006). Goldschmidt, Kuipers e Van Swaaij (2001) mostraram que a hidrodinâmica de leitos de gás fluidizado denso depende fortemente da energia dissipada pela colisão partícula-partícula. Lu *et al.* (2004) mostram que a temperatura granular aumenta com o aumento do coeficiente de restituição. Estes e muitos outros estudos revelam que os valores de e são sensíveis nos resultados de simulações de escoamentos gás-sólido.

Continuando com a teoria cinética desenvolvida por Lun, Savage e Jeffrey (1984), o tensor das tensões viscosas da fase sólida é expresso por:

$$\overline{\overline{\tau}}_s^v = 2\mu_s^v \overline{\overline{D}}_s + \lambda_s^v tr\left(\overline{\overline{D}}_s\right) \overline{\overline{I}} \quad (2.29)$$

onde μ_s^v e λ_s^v são as viscosidades dinâmica e volumétrica da fase sólida no regime viscoso, respectivamente, as quais não são propriedades físicas reais, mas podem ser deduzidas, e são expressas por:

$$\lambda_s^v = K_2 \varepsilon_s \sqrt{\theta} \quad (2.30)$$

$$\mu_s^v = K_3 \varepsilon_s \sqrt{\theta} \quad (2.31)$$

A constante K_2 é dada por $K_2 = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} d_p \rho_s (1+e) \varepsilon_s g_0 - \frac{2}{3} K_3$ e a constante K_3 é

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

Observa-se que a partir da equação (2.24) introduziu-se nas formulações a variável θ denominada temperatura granular.

A temperatura granular é proporcional à energia cinética do particulado e é definida como a média da flutuação da velocidade das partículas \bar{C} :

$$\theta = \frac{1}{3} \langle \bar{C}^2 \rangle \quad (2.32)$$

Assim, uma equação representando o balanço da energia pseudo-térmica (temperatura granular) das flutuações das velocidades das partículas conforme Srivastava e Sundaresan (2003) e Agrawal *et al.*(2001), é dada por:

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s \theta) + \bar{\nabla} \cdot (\varepsilon_s \rho_s \bar{v}_s \theta) \right] = -\bar{\nabla} \cdot \bar{q} - \tau_s : \nabla \bar{v}_s + \Gamma_{desl} - J_{col} - J_{vis} \quad (2.33)$$

onde a taxa de produção de energia granular devido ao deslizamento gás-partícula, a taxa de dissipação de energia granular através das colisões inelásticas e a taxa de dissipação de energia granular através do amortecimento viscoso, são expressas respectivamente por:

$$\Gamma_{dest} = \frac{81\varepsilon_s \mu_g^2 |\vec{v}_g - \vec{v}_s|}{g_0 d_p^3 \rho_s \sqrt{\pi\theta}} \quad (2.34)$$

$$J_{col} = \frac{48}{\sqrt{\pi}} \eta(1-\eta) \frac{\rho_s \varepsilon_s^2}{d_p} g_0 \theta^{3/2} \quad (2.35)$$

$$J_{vis} = 3\beta\theta \quad (2.36)$$

O fluxo difusivo \bar{q} de energia granular é calculado por:

$$\bar{q} = -\frac{\lambda^*}{g_0} \left\{ \left(1 + \frac{12}{5} \eta \varepsilon_s g_0 \right) \left[1 + \frac{12}{5} \eta^2 (4\eta - 3) \varepsilon_s g_0 \right] + \frac{64}{25\pi} (41 - 33\eta) (\eta \varepsilon_s g_0)^2 \right\} \nabla \theta \quad (2.37)$$

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

Outra abordagem é utilizar uma expressão algébrica para o cálculo da temperatura granular, θ , obtida da equação da conservação da energia de Lun, Savage e Jeffrey (1984), assumindo que a energia granular é dissipada localmente, desprezando contribuições de difusão e de convecção e retendo somente os termos de dissipação e geração. A equação da energia granular algébrica é:

$$\theta = \left(\frac{-(K_1 \varepsilon_s + \rho_s) tr(\overline{D_s}) + \sqrt{\left[(K_1 \varepsilon_s + \rho_s)^2 tr^2(\overline{D_s}) + 4K_4 \varepsilon_s \left[2K_3 tr(\overline{D_s}^2) + K_2 tr^2(\overline{D_s}) \right] \right]}}{2\varepsilon_s K_4} \right) \quad (2.38)$$

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

Assim o tensor das tensões do regime viscoso da fase sólida é expresso por:

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_s^v = & -[\varepsilon_s \rho_s (1 + 4\eta \varepsilon_s g_0) \theta - \eta \mu_b (\nabla \cdot \bar{v}_s)] \bar{I} + \\ & + \left(\frac{2 + \alpha}{3} \right) \left\{ \frac{2\mu^*}{g_0 \eta (2 - \eta)} \left(1 + \frac{5}{8} \varepsilon_s \eta g_0 \right) \left[1 + \frac{5}{8} \eta (3\eta - 2) \varepsilon_s g_0 \right] + \frac{6}{5} \eta \mu_b \right\} \bar{S}_s \end{aligned} \quad (2.39)$$

$$\text{com } \alpha = 1,6; \quad \bar{S}_s = \frac{1}{2} [\nabla \bar{v}_s + (\nabla \bar{v}_s)^T] - \frac{1}{3} \nabla \cdot \bar{v}_s \bar{I}; \quad g_0 = \frac{(2 - \varepsilon_s)}{2(1 - \varepsilon_s)^3}; \quad \mu^* = \frac{\mu}{1 + \frac{2\beta\mu}{(\rho_s \varepsilon_s)^2 g_0 \theta}};$$

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

Nos resultados deste trabalho serão apresentadas comparações de simulações de escoamento gás-sólido utilizando para o cálculo da temperatura granular ambas abordagens apresentadas no modelo descrito, a solução com EDP e a algébrica.

Capítulo 3

METODOLOGIA DE SOLUÇÃO NUMÉRICA

3.1 Introdução

Fenômenos relacionados com escoamentos de fluidos são descritos matematicamente por equações diferenciais parciais (EDP). Tais equações envolvem não – linearidade em suas formulações o que torna impraticável, na maioria das vezes, uma resolução analítica. Com o advento do computador digital a partir da década de 50 surgiu a possibilidade de buscar soluções numéricas para EDP's.

Os métodos numéricos oferecem uma ferramenta indispensável na determinação de soluções aproximadas. Para obter uma solução aproximada, faz-se o uso de um método de discretização que aproxima as equações diferenciais por um sistema de equações algébricas, que podem ser resolvidas no computador. As aproximações são aplicadas a pequenos domínios no espaço e/ou tempo tal que a solução numérica fornece resultados em locais discretos no espaço e tempo. Muito embora, a precisão dos dados experimentais depende da qualidade das ferramentas utilizadas, a precisão da solução numérica é dependente da qualidade da discretização utilizada (FERZIGER e PERIC, 1999).

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

3.2 Equação de transporte escalar e integração sobre um volume de controle

A técnica de volumes finitos é utilizada para obter a versão discreta de uma EDP, integrando essa em uma região ou volume do espaço. Este método está intrinsecamente ligado ao conceito de fluxo entre regiões, ou volumes, adjacentes. O fluxo de uma grandeza é a quantidade dessa grandeza que atravessa uma fronteira com área A , por unidade de tempo. A quantidade líquida de uma grandeza ϕ , que atravessa as fronteiras do volume de controle VC por unidade de tempo, é calculada pela integração, sobre essas fronteiras, da diferença entre os fluxos que entram e os que saem de VC . Esses fluxos podem ser convectivos, devido à velocidade e difusivos, causados pela não uniformidade da distribuição espacial de ϕ (FORTUNA, 2000).

Para obterem-se as equações discretas, utiliza-se a equação de transporte dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_m \rho_m \phi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon_m \rho_m v_{mi} \phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + R_\phi \quad (3.1)$$

A equação (3.1) é a equação de transporte para uma propriedade escalar ϕ da fase gás $m = g$ ou fase sólida $m = s$. O primeiro termo da esquerda representa a taxa de intercâmbio; o segundo termo da esquerda e o primeiro termo da direita representam os efeitos de convecção e difusão respectivamente e o último termo é o termo fonte R_ϕ para a quantidade ϕ . Em escoamento multifásico o termo fonte contabiliza a transferência de massa e de quantidade de movimento na interface.

Integrando a equação (3.1) termo a termo sobre um volume de controle, representado na figura 3.1, e escrevendo da esquerda para a direita, tem-se:

Termo Transiente

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

Termo Convectivo

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

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

Termo Difusivo

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

Termo Fonte

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

$$R_\phi \approx \bar{R}_\phi - R'_\phi \phi_P \tag{3.5}$$

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

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

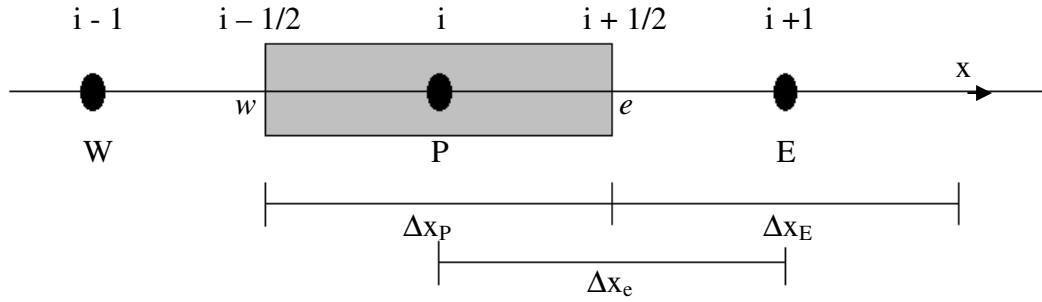


Figura 3.1 Volume de controle em uma malha unidimensional

Segundo Kaibara, Ferreira e Navarro (2004), atualmente as restrições TVD – “Total Variation Diminishing” tem demonstrado grande utilidade na construção de esquemas de discretização de ordem elevada. O mecanismo fundamental deste modelo é o uso da natureza dissipativa da diferenciação de primeira ordem. Esquemas que satisfaçam as restrições TDV possuem características atrativas, suas soluções são bem resolvidas, livres de oscilações e convergentes. Estes esquemas usam um limitador que delimita os valores da propriedade ϕ na face do volume de controle quando a variação local em ϕ é monótona. Mais detalhes sobre esquemas TVD podem ser encontrados em Harten (1984).

Neste trabalho utiliza-se o esquema de discretização Superbee de Sweby (1984) de segunda ordem, o qual é um esquema TVD e está implementado no MFIX, para obter resultados de simulação para a hidrodinâmica do escoamento gás-sólido em um leito fluidizado borbulhante com jato central. Encontra-se no Apêndice B algumas informações sobre os arquivos e as técnicas de solução do MFIX.

Assim, usando o método de volumes finitos e técnicas de discretização obtém-se a versão discretizada da equação de transporte (3.1):

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{(\rho_m \phi)_P - (\rho_m)^{old}}{\Delta t} \right) \Delta V + \\
 & + \left\{ \xi_e (\rho_m \phi)_E + \bar{\xi}_e (\rho_m \phi)_P \right\} (u_m)_e A_e - \left\{ \xi_w (\rho_m \phi)_P + \bar{\xi}_w (\rho_m \phi)_W \right\} (u_m)_w A_w + \\
 & + \left\{ \xi_n (\rho_m \phi)_N + \bar{\xi}_n (\rho_m \phi)_P \right\} (v_m)_n A_n - \left\{ \xi_s (\rho_m \phi)_P + \bar{\xi}_s (\rho_m \phi)_S \right\} (v_m)_s A_s + \\
 & + \left\{ \xi_t (\rho_m \phi)_T + \bar{\xi}_t (\rho_m \phi)_P \right\} (w_m)_t A_t - \left\{ \xi_b (\rho_m \phi)_P + \bar{\xi}_b (\rho_m \phi)_B \right\} (w_m)_b A_b = \\
 & = \left\{ (\Gamma_\phi)_e \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x_e} A_e - (\Gamma_\phi)_w \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\Delta x_w} A_w \right\} + \left\{ (\Gamma_\phi)_n \frac{(\phi_N - \phi_P)}{\Delta y_n} A_n - (\Gamma_\phi)_s \frac{(\phi_P - \phi_S)}{\Delta y_s} A_s \right\} + \\
 & + \left\{ (\Gamma_\phi)_t \frac{(\phi_T - \phi_P)}{\Delta z_t} A_t - (\Gamma_\phi)_b \frac{(\phi_P - \phi_B)}{\Delta z_b} A_b \right\} + (\bar{R}_\phi - R'_\phi \phi_P) \Delta V
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

onde ξ ($\bar{\xi} = 1 - \xi$) é um fator de convecção ponderado, calculado por conveniência de programação. Aqui define-se as densidades macroscópicas como: $\rho_m = \varepsilon_m \rho_m$.

A equação (3.7) pode ser rearranjada de forma a obter o seguinte sistema de equações lineares para ϕ :

$$a_P \phi_P = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + S_P \quad (3.8)$$

onde S_P é a contribuição da discretização dos termos transientes e a integral do termo fonte linearizado, o subscrito nb representa a contribuição das faces E, W, N, S, T e B da célula.

3.3 Solução numérica para escoamento gás – sólido

Esta seção descreve a solução numérica para escoamentos multifásicos adotada pelo código MFIX. Uma extensão do SIMPLE – Semi Implicit Method for Pressure-Linked Equations de Patankar (1980) é utilizada para a resolução das equações discretizadas. Vários pontos importantes precisam ser discutidos quando algoritmos desenvolvidos para escoamentos monofásicos é estendido para resolver as equações de um escoamento multifásico. Spalding (1980) lista três pontos a seguir, os quais ele classifica como “o primeiro é óbvio, o segundo um tanto menos, e o terceiro pode passar sem ser notado”.

- i) Há mais campos de variáveis e, portanto mais equações comparadas com escoamentos monofásicos. Isto desacelera a computação, mas não torna o algoritmo mais complexo.
- ii) A pressão aparece nas três equações de quantidade de movimento para escoamento monofásico, mas não há uma equação conveniente para resolver o campo de pressão. O fundamental do algoritmo SIMPLE é a dedução de uma equação para a pressão – a equação de correção para a pressão. A correção da pressão propicia a correção para o campo da velocidade tal que a equação da continuidade é satisfeita exatamente (para a precisão da máquina). Não há uma única maneira para a dedução de tal equação para escoamento multifásico, desde que há mais de uma equação para a continuidade no escoamento multifásico.
- iii) As equações de quantidade de movimento para o escoamento multifásico são fortemente acopladas por meio do termo de intercâmbio de quantidade de movimento. Fazer este termo totalmente implícito é essencial para o sucesso do

esquema numérico. Esta é a principal idéia no “Implicit Multifield Field” (IMF), técnica de Harlow e Amsden (1975), que esta implementada no K-Fix (Kachina-Fully Implicit Exchange) programa de Rivard e Torrey (1977). No MFIX, as equações de quantidade de movimento são resolvidas em todo o domínio computacional. Para tornar o termo de intercâmbio totalmente implícito todas as equações para cada componente de velocidade (tanto da fase gás como da fase sólida) devem ser resolvidas juntas, o que origina uma matriz com estrutura não padrão. Uma alternativa mais barata é utilizar o algoritmo de eliminação parcial (PEA – “Partial Elimination Algorithm”) de Spalding, 1980 que será discutido adiante.

No escoamento granular multifásico outros dois pontos críticos determinam o sucesso do esquema numérico. Um é o tratamento das regiões com altas concentrações de sólido (regiões próximas ao empacotamento). A fração de volume de sólido varia de zero até um valor máximo em torno de 0,6 na região do empacotamento. O limite inferior é facilmente manipulável pela formulação de equações lineares tais que valores não-negativos da fração de volume são calculados. A restrição da fração de volume de sólido no ou abaixo do valor máximo é mais difícil. A formação da região de empacotamento é análoga à condensação do vapor compressível em um líquido incompressível. As forças de reação que resistem à compactação do meio granular resultam na pressão do sólido, a qual deve ser distinguida da pressão do fluido. Esta situação foi tratada nos modelos S^3 , de Pritchett, Blake e Garg (1978), e IIT – “Illinois Institute of Technology”, de Gidaspow e Ettehadieh (1983) pela introdução de uma equação de estado que relaciona a pressão do sólido com a fração de volume do sólido. A função da pressão do sólido aproxima-se do limite do empacotamento, e assim retarda a compactação do sólido. Este método permite ao meio granular ser suavemente compressível. O meio granular pode também ser considerado incompressível como foi feito por Syamlal e O’Brien (1988).

O MFIX utiliza uma equação para a correção da fração volumétrica de sólido. A equação para a correção da pressão do sólido requer que $\frac{\partial P_s}{\partial \varepsilon_s}$ não desapareça quando $\varepsilon_s \rightarrow 0$. A equação para a correção da fração volumétrica de sólido não possui tal restrição, mas deve contabilizar o efeito da pressão do sólido tal que a computação seja estabilizada na região de empacotamento.

Uma segunda questão importante é a dificuldade no cálculo dos campos das variáveis nas interfaces nas quais uma fração volumétrica tende a zero. O campo de variáveis associado

a uma fase não está definido nas regiões onde a fração volumétrica é zero, e assim pode admitir valores arbitrários. Entretanto, um algoritmo computacional não deve utilizar tal arbitrariedade no conjunto de valores. O cálculo das componentes das velocidades em tais interfaces é mais difícil do que as quantidades escalares devido a linearização dos termos convectivos não lineares. Em uma interface onde a fração volumétrica da fase está próxima de zero a componente normal da velocidade torna-se muito grande. Desde que o produto da fração volumétrica da fase e da componente da velocidade é ainda próximo de zero, o erro na conservação de quantidade de movimento é negligenciável. Entretanto, valores elevados da velocidade da fase rapidamente desestabilizam os cálculos, e o método é necessário para prevenir tais desestabilizações. O MFIX utiliza um cálculo aproximado da velocidade normal nas interfaces (definido por um pequeno valor inicial para a fração volumétrica da fase).

Escoamentos gás-sólido são inerentemente instáveis. Cálculos no estado estável são possíveis somente para poucos casos, tais como transporte pneumático (diluído) de sólidos. Para a maioria dos escoamentos gás-sólido, uma simulação transiente é conduzida e os resultados são médio-temporais. Simulações transientes divergem, se grande amplitude para o passo temporal é admitida. Passos temporais com amplitude muito pequena torna a computação muito lenta. O MFIX ajusta automaticamente a amplitude do passo, dentro de limites especificados pelo usuário, para reduzir o tempo de processamento.

3.3.1 Equação de Quantidade de Movimento

A discretização das equações de quantidade de movimento é semelhante àquela de transporte escalar, exceto que os volumes de controle são deslocados. De acordo com Patankar (1980), se as componentes de velocidade e pressão são armazenadas numa mesma localização da malha, valores irrealistas para pressão podem aparecer. Uma malha deslocada é usada para prevenir tais campos de pressão não físicos. Como mostrado na figura 3.2, o volume de controle escalar é deslocado. Na direção x descola-se meia célula para leste, da mesma forma na direção y desloca-se meia célula para norte e na direção z desloca-se meia célula para o topo.

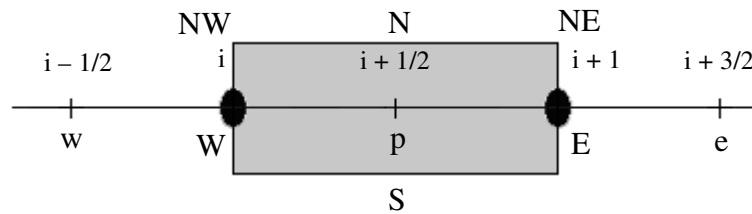


Figura 3.2 Volume de controle deslocado unidimensional

3.3.1.1 Equação de Quantidade de Movimento discreta

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

$$(u_m)_E = f_E (u_m)_p + (1 - f_E)(u_m)_e \quad (3.9)$$

$$(v_m)_N = f_p (v_m)_{NW} + (1 - f_p)(v_m)_{NE} \quad (3.10)$$

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

$$(\alpha_m)_p = f_p (\alpha_m)_W + (1 - f_p)(\alpha_m)_E \quad (3.11)$$

em que

$$f_E = \frac{\Delta x_e}{\Delta x_p + \Delta x_e} \quad (3.12)$$

e

$$f_p = \frac{\Delta x_E}{\Delta x_W + \Delta x_E} \quad (3.13)$$

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

$$a_p (u_m)_p = \sum_{nb} a_{nb} (u_m)_{nb} + b_p - A_p (\alpha_m)_p \left((P_g)_E - (P_g)_W \right) + \left(\sum_l F_{lm} (u_l - u_m)_p \right) \Delta V_e \quad (3.14)$$

A equação (3.14) é semelhante à equação de transporte escalar discretizada, exceto pelos dois últimos termos: o termo do gradiente de pressão é determinado baseado no valor corrente de P_g e é adicionado ao termo fonte da equação linear. O termo de transferência na interface acopla todas as equações para a mesma componente (x , y ou z). O procedimento para desacoplar as equações será discutido adiante.

A definição dos termos restantes na equação (3.14) é dada nas dez relações seguintes:

$$\begin{aligned}
a_e &= D_E - \xi_E (\alpha_m \rho_m)_e (u_m)_E A_E; \\
a_w &= D_W - \bar{\xi}_W (\alpha_m \rho_m)_w (u_m)_W A_W; \\
a_n &= D_N - \xi_N (\alpha_m \rho_m)_n (v_m)_N A_N; \\
a_s &= D_S - \bar{\xi}_S (\alpha_m \rho_m)_s (v_m)_S A_S; \\
a_t &= D_T - \xi_T (\alpha_m \rho_m)_t (w_m)_T A_T; \\
a_b &= D_B - \bar{\xi}_B (\alpha_m \rho_m)_b (w_m)_B A_B \\
a_p &= \sum_{nb} a_{nb} + a_p^0 + R'_{u_m} \Delta V_e + \left[\sum R_l \right] \Delta V_e + S'; \\
b &= a_p^0 u_m^0 + \bar{R}_{u_m} \Delta V_e + u_m \left[- \sum R_l \right] \Delta V_e + (\alpha_m \rho_m)_e g_x \Delta V_e + \bar{S}; \\
a_p^0 &= \frac{(\alpha_m \rho_m)^0}{\Delta t} \Delta V_e; \\
D_e &= \frac{(u_m)_E A_E}{\Delta x_e}
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Nas equações apresentadas em (3.15) a definição do duplo colchete é dada por:

$$\left[\left[R \right] \right] = \begin{cases} 0, & R \leq 0 \\ R, & R > 0 \end{cases}$$

3.3.1.2 Condições de contorno

Na simulação de um escoamento gás-sólido bidimensional, utilizou-se para a fase gasosa a hipótese de plena aderência na parede, ou seja, condição de não deslizamento. No caso da fase sólida o estabelecimento das condições de contorno na parede é mais complicado devido à dificuldade da caracterização da interação das partículas com a parede.

As condições de contorno na parede, implementadas no MFIX para a solução da equação linear são dadas a seguir. A componente da velocidade na direção y na parede leste é

utilizada como exemplo, figura 3.3. A implementação para as outras componentes e localizações é análoga.

1. Deslizamento Livre na parede

$$v_m(i, j+1/2, k) - v_m(i-1, j+1/2, k) = 0 \quad (3.16)$$

2. Plena Aderência na parede

$$v_m(i, j+1/2, k) + v_m(i-1, j+1/2, k) = 0 \quad (3.17)$$

3. Deslizamento Parcial na parede

$$\frac{\partial v_m}{\partial n} + h_v(v_m - v_w) = 0 \quad (3.18)$$

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

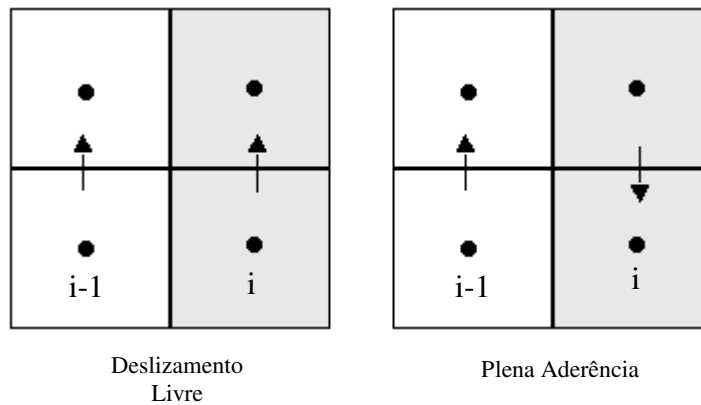


Figura 3.3 Condição de deslizamento livre e plena aderência na parede leste

A forma discreta da equação (3.18), por exemplo, na face leste é:

$$v_m(i, j+1/2, k) \left(\frac{h_v}{2} + \frac{1}{\Delta x_E} \right) + v_m(i-1, j+1/2, k) \left(\frac{h_v}{2} - \frac{1}{\Delta x_E} \right) = h_v v_w \quad (3.19)$$

A equação (3.19) é uma condição de deslizamento generalizada, que pode descrever a condição de não deslizamento ($h_v \rightarrow \infty, v_w = 0$), deslizamento livre ($h_v = 0$) e uma condição de deslizamento parcial ($h_v \neq 0, v_w \neq 0$).

3.3.1.3 Eliminação parcial do acoplamento na interface

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

$$\varepsilon_m \rho_m \frac{\partial \phi}{\partial t} + \varepsilon_m \rho_m (v_m)_i \frac{\partial \phi_m}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_{\phi n} \frac{\partial \phi_m}{\partial x_i} \right) + R_{\phi n} - \phi_m \left(\sum R_{lm} \right) + \sum_{l=0}^M F_{lm} (\phi_l - \phi_m) \quad (3.20)$$

(Note que $F_{lm} = F_{ml}$ e $F_{mm} = 0$). Este último termo da equação (3.20) é o termo que acopla as equações.

A equação correspondente discreta é:

$$(a_m)_P (\phi_m)_P = \sum_{nb} (a_m)_{nb} (\phi_m)_{nb} + b_m + \Delta V \sum_{l=0}^M F_{lm} [(\phi_l)_P - (\phi_m)_P] \quad (3.21)$$

a qual é semelhante em forma à equação discreta da quantidade de movimento.

Primeiramente, discuti-se o problema com um desacoplamento direto das equações.

Por exemplo, considere o caso do fluxo de duas fases ($M = 1$):

$$(a_0)_P (\phi_0)_P = \sum_{nb} (a_0)_{nb} (\phi_0)_{nb} + b_0 + \Delta V F_{10} [(\phi_1)_P - (\phi_0)_P] \quad (3.22)$$

$$(a_1)_P (\phi_1)_P = \sum_{nb} (a_1)_{nb} (\phi_1)_{nb} + b_1 + \Delta V F_{10} [(\phi_0)_P - (\phi_1)_P] \quad (3.23)$$

Quando $F_{10} \rightarrow 0$ as duas equações estão desacopladas e a solução para $(\phi_0)_P$, por exemplo, é:

$$(\phi_0)_P = \frac{\sum_{nb} (a_0)_{nb} (\phi_0)_{nb} + b_0}{(a_0)_P} \quad (3.24)$$

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

$$(\phi_0)_P = (\phi_1)_P = \frac{\sum_{nb} (a_0)_{nb} (\phi_0)_{nb} + b_0 + \sum_{nb} (a_1)_{nb} (\phi_1)_{nb} + b_1}{(a_0)_P + (a_1)_P} \quad (3.25)$$

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

Resolve-se para $(\phi_1)_P$ da equação (3.23) para obter:

$$(\phi_1)_P = \frac{\sum_{nb} (a_1)_{nb} (\phi_1)_{nb} + b_1 + \Delta VF_{10} (\phi_0)_P}{(a_1)_P + \Delta VF_{10}} \quad (3.26)$$

Substitui na equação (3.22) para obter-se:

$$\left[(a_0)_P + \frac{(a_1)_P \Delta VF_{10}}{(a_1)_P + \Delta VF_{10}} \right] (\phi_0)_P = \sum_{nb} (a_0)_{nb} (\phi_0)_{nb} + b_0 + \frac{\Delta VF_{10}}{(a_1)_P + \Delta VF_{10}} \left\{ \sum_{nb} (a_1)_{nb} (\phi_1)_{nb} + b_1 \right\} \quad (3.27)$$

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

$$\left[(a_1)_P + \frac{(a_0)_P \Delta VF_{10}}{(a_0)_P + \Delta VF_{10}} \right] (\phi_1)_P = \sum_{nb} (a_1)_{nb} (\phi_1)_{nb} + b_1 + \frac{\Delta VF_{10}}{(a_0)_P + \Delta VF_{10}} \left\{ \sum_{nb} (a_0)_{nb} (\phi_0)_{nb} + b_0 \right\} \quad (3.28)$$

O conjunto de equações lineares para ϕ_0 e ϕ_1 são desacoplados por meio do tratamento dos últimos termos nas equações (3.27) e (3.28) como termos fontes avaliados com $(\phi_0)_{nb}$ e $(\phi_1)_{nb}$ da iteração anterior. Quando $F_{10} \rightarrow 0$ ou $F_{10} \rightarrow \infty$, pode-se recorrer aos limitantes das soluções das equações acima. Portanto, a expectativa é que um esquema iterativo baseado na equação anterior convirja para todos os valores de F_{10} .

3.3.2 Equação para a correção da pressão do fluido

Um passo importante é a dedução da equação discreta para a pressão do fluido, a qual será descrita nesta seção.

3.3.2.1 Formulação

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

$$a_{0P}(u_0)_P = \sum_{nb} a_{0nb}(u_0)_{nb} + b_0 - A_P(\epsilon_0)_P \left((P_g)_E - (P_g)_W \right) + F_{10} [(u_1)_P - (u_0)_P] \Delta V \quad (3.29)$$

e

$$a_{1P}(u_1)_P = \sum_{nb} a_{1nb}(u_1)_{nb} + b_1 - A_P(\epsilon_1)_P \left((P_g)_E - (P_g)_W \right) + F_{10} [(u_0)_P - (u_1)_P] \Delta V - A_P \left((P_s)_E - (P_s)_W \right) \quad (3.30)$$

onde 0 denota a fase fluido e $P_s = P_s(\epsilon_1)$ é a pressão do sólido.

Como estabelecido na seção 3.3, primeiro resolve-se as equações (3.29) e (3.30) utilizando o campo de pressão P_g^* e o campo da fração de vazio ϵ_0^* da iteração anterior para calcular uma tentativa dos campos de velocidade u_0^* , u_1^* e outras componentes da velocidade.

$$\begin{aligned}
a_{0P}(u_0^*)_P &= \sum_{nb} a_{0nb}(u_0^*)_{nb} + b_0 - A_P(\varepsilon_0^*)_P \left((P_g^*)_E - (P_g^*)_W \right) + \\
&+ F_{10} \left[(u_1^*)_P - (u_0^*)_P \right] \Delta V
\end{aligned} \tag{3.31}$$

e

$$\begin{aligned}
a_{1P}(u_1^*)_P &= \sum_{nb} a_{1nb}(u_1^*)_{nb} + b_1 - A_P(\varepsilon_1^*)_P \left((P_g^*)_E - (P_g^*)_W \right) + \\
&+ F_{10} \left[(u_0^*)_P - (u_1^*)_P \right] \Delta V - A_P \left((P_s^*)_E - (P_s^*)_W \right)
\end{aligned} \tag{3.32}$$

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

$$\begin{aligned}
(P_g)_E &= (P_g^*)_E + (P_g')_E; \\
(P_s)_E &= (P_s^*)_E + (P_s')_E; \\
(u_0)_P &= (u_0^*)_P + (u_0')_P; \\
(u_1)_P &= (u_1^*)_P + (u_1')_P
\end{aligned} \tag{3.33}$$

para as outras componentes da velocidade as fórmulas são similares.

Substituem-se as correções (equações (3.33)) nas equações (3.29) e (3.30), e da equação resultante subtraem-se as equações (3.31) e (3.32) para obter-se:

$$\begin{aligned}
a_{0P}(u_0')_P &= \sum_{nb} a_{0nb}(u_0')_{nb} - A_P(\varepsilon_0^*)_P \left((P_g')_E - (P_g')_W \right) + \\
&+ F_{10} \left[(u_1')_P - (u_0')_P \right] \Delta V
\end{aligned} \tag{3.34}$$

e

$$\begin{aligned}
a_{1P}(u_1')_P &= \sum_{nb} a_{1nb}(u_1')_{nb} - A_P(\varepsilon_1^*)_P \left((P_g')_E - (P_g')_W \right) + \\
&+ F_{10} \left[(u_0')_P - (u_1')_P \right] \Delta V - A_P \left((P_s')_E - (P_s')_W \right)
\end{aligned} \tag{3.35}$$

Para desenvolver uma equação aproximada para a correção da pressão do fluido, omitiram-se os termos de convecção e pressão do sólido da equação de quantidade de movimento, obtendo-se:

$$a_{0P}(u_0')_P = -A_P(\varepsilon_0^*)_P \left((P_g')_E - (P_g')_W \right) + F_{10} \left[(u_1')_P - (u_0')_P \right] \Delta V \tag{3.36}$$

e

$$a_{1P}(\dot{u}_1)_P = -A_P(\varepsilon_1^*)_P \left((P'_g)_E - (P'_g)_W \right) + F_{10} \left[(\dot{u}_0)_P - (\dot{u}_1)_P \right] \Delta V \quad (3.37)$$

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

Da equação (3.37), obtém-se:

$$(a_{1P} + F_{10}\Delta V)(\dot{u}_1)_P = -A_P(\varepsilon_1^*)_P \left((P'_g)_E - (P'_g)_W \right) + F_{10}(\dot{u}_0)_P \Delta V \quad (3.38)$$

Substituindo na equação (3.36), tem-se:

$$\begin{aligned} a_{0P}(\dot{u}_0)_P &= -A_P(\varepsilon_0^*)_P \left((P'_g)_E - (P'_g)_W \right) + \\ &+ F_{10} \left[\frac{-A_P(\varepsilon_1^*)_P \left((P'_g)_E - (P'_g)_W \right) + F_{10}(\dot{u}_0)_P}{a_{1P} + F_{10}} - (\dot{u}_0)_P \right] \Delta V \end{aligned} \quad (3.39)$$

Isolando $(\dot{u}_0)_P$, obtém-se:

$$\left[a_{0P} + \frac{F_{10}\Delta Va_{1P}}{a_{1P} + F_{10}\Delta V} \right] (\dot{u}_0)_P = - \left[A_P(\varepsilon_0^*)_P + A_P(\varepsilon_1^*)_P \frac{F_{10}\Delta V}{a_{1P} + F_{10}\Delta V} \right] \left((P'_g)_E - (P'_g)_W \right) \quad (3.40)$$

que pode-se reescrever como:

$$(\dot{u}_0)_P = -d_{0P} \left((P'_g)_E - (P'_g)_W \right) \quad (3.41)$$

onde

$$d_{0P} = \frac{A_P \left[(\varepsilon_0^*)_P + \frac{(\varepsilon_1^*)_P F_{10}\Delta V}{a_{1P} + F_{10}\Delta V} \right]}{\left[a_{0P} + \frac{F_{10}\Delta Va_{1P}}{a_{1P} + F_{10}\Delta V} \right]} \quad (3.42)$$

Semelhantemente,

$$(\dot{u}_1)_P = -d_{1P} \left((P'_g)_E - (P'_g)_W \right) \quad (3.43)$$

onde

$$d_{1P} = \frac{A_P \left[(\varepsilon_1^*)_P + \frac{(\varepsilon_0^*)_P F_{10} \Delta V}{a_{0P} + F_{10} \Delta V} \right]}{\left[a_{1P} + \frac{F_{10} \Delta V a_{0P}}{a_{0P} + F_{10} \Delta V} \right]} \quad (3.44)$$

Logo as correções para as velocidades são dadas por:

$$(u_m)_P = (u_m^*)_P - d_{mP} \left((P'_g)_E - (P'_g)_W \right) \quad (3.45)$$

Substituindo a equação (3.45) e equações semelhantes para as demais componentes da velocidade na equação da continuidade na sua forma discreta, (tal equação é a equação de transporte discreta para $\phi = 1$, detalhes de sua dedução podem ser encontrados em Syamlal (1998)) para a fase fluido, obtém-se uma equação para a correção da pressão.

$$\begin{aligned} & \left(\frac{(\varepsilon_0 \rho_0)_P - (\varepsilon_0 \rho_0)_P^0}{\Delta t} \right) \Delta V + \\ & + \left\{ \xi_e (\varepsilon_0 \rho_0)_E + \bar{\xi}_e (\varepsilon_0 \rho_0)_P \right\} \left[(u_0^*)_e - d_{0e} \left((P'_g)_E - (P'_g)_P \right) \right] A_e - \\ & - \left\{ \xi_w (\varepsilon_0 \rho_0)_P + \bar{\xi}_w (\varepsilon_0 \rho_0)_W \right\} \left[(u_0^*)_w - d_{0w} \left((P'_g)_P - (P'_g)_W \right) \right] A_w + \\ & + \left\{ \xi_n (\varepsilon_0 \rho_0)_N + \bar{\xi}_n (\varepsilon_0 \rho_0)_P \right\} \left[(v_0^*)_n - d_{0n} \left((P'_g)_N - (P'_g)_P \right) \right] A_n - \\ & - \left\{ \xi_s (\varepsilon_0 \rho_0)_P + \bar{\xi}_s (\varepsilon_0 \rho_0)_S \right\} \left[(v_0^*)_s - d_{0s} \left((P'_g)_P - (P'_g)_S \right) \right] A_s + \\ & + \left\{ \xi_t (\varepsilon_0 \rho_0)_T + \bar{\xi}_t (\varepsilon_0 \rho_0)_P \right\} \left[(w_0^*)_t - d_{0t} \left((P'_g)_T - (P'_g)_P \right) \right] A_t - \\ & - \left\{ \xi_b (\varepsilon_0 \rho_0)_P + \bar{\xi}_b (\varepsilon_0 \rho_0)_B \right\} \left[(w_0^*)_b - d_{0b} \left((P'_g)_P - (P'_g)_B \right) \right] A_b = \\ & = \Delta V \sum_l (R_{lm})_P \end{aligned} \quad (3.46)$$

onde $\bar{\xi}_e = 1 - \xi_e$. A equação (3.46) pode ser escrita na forma padrão:

$$a_P (P'_g)_P = \sum_{nb} a_{nb} (P'_g)_{nb} + b \quad (3.47)$$

onde

$$\begin{aligned}
a_E &= \left\{ \xi_e(\varepsilon_0 \rho_0)_E + \bar{\xi}_e(\varepsilon_0 \rho_0)_P \right\} d_{0e} A_e ; \\
a_W &= \left\{ \xi_w(\varepsilon_0 \rho_0)_P + \bar{\xi}_w(\varepsilon_0 \rho_0)_W \right\} d_{0w} A_w ; \\
a_N &= \left\{ \xi_n(\varepsilon_0 \rho_0)_N + \bar{\xi}_n(\varepsilon_0 \rho_0)_P \right\} d_{0n} A_n ; \\
a_S &= \left\{ \xi_s(\varepsilon_0 \rho_0)_P + \bar{\xi}_s(\varepsilon_0 \rho_0)_S \right\} d_{0s} A_s ; \\
a_T &= \left\{ \xi_t(\varepsilon_0 \rho_0)_T + \bar{\xi}_t(\varepsilon_0 \rho_0)_P \right\} d_{0t} A_t ; \\
a_B &= \left\{ \xi_b(\varepsilon_0 \rho_0)_P + \bar{\xi}_b(\varepsilon_0 \rho_0)_B \right\} d_{0b} A_b ;
\end{aligned} \tag{3.48}$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B \tag{3.49}$$

$$\begin{aligned}
b &= - \left\{ \left(\frac{(\varepsilon_0 \rho_0)_P - (\varepsilon_0 \rho_0)_P^0}{\Delta t} \right) \Delta V + \right. \\
&+ \left\{ \xi_e(\varepsilon_0 \rho_0)_E + \bar{\xi}_e(\varepsilon_0 \rho_0)_P \right\} (u_0^*)_e A_e - \\
&- \left\{ \xi_w(\varepsilon_0 \rho_0)_P + \bar{\xi}_w(\varepsilon_0 \rho_0)_W \right\} (u_0^*)_w A_w + \\
&+ \left\{ \xi_n(\varepsilon_0 \rho_0)_N + \bar{\xi}_n(\varepsilon_0 \rho_0)_P \right\} (v_0^*)_n A_n - \\
&- \left\{ \xi_s(\varepsilon_0 \rho_0)_P + \bar{\xi}_s(\varepsilon_0 \rho_0)_S \right\} (v_0^*)_s A_s + \\
&+ \left\{ \xi_t(\varepsilon_0 \rho_0)_T + \bar{\xi}_t(\varepsilon_0 \rho_0)_P \right\} (w_0^*)_t A_t - \\
&- \left\{ \xi_b(\varepsilon_0 \rho_0)_P + \bar{\xi}_b(\varepsilon_0 \rho_0)_B \right\} (w_0^*)_b A_b - \\
&\left. - \Delta V \sum_l (R_{lm})_P \right\}
\end{aligned} \tag{3.50}$$

Após resolver a equação (3.47) para a correção da pressão do fluido, as velocidades do fluido e do sólido são corrigidas. Note que quando uma tentativa para o campo de velocidade do fluido satisfaz a equação da continuidade, a correção para a pressão vai à zero. Além de que o campo de velocidade corrigida para o fluido é tal que satisfaz a equação da continuidade.

3.3.2.2 Condições de contorno

As condições de contorno para as equações de correção da pressão nas fronteiras de entrada e saída de fluxo são formuladas como seguem. A figura 3.4 ilustra as células fictícias e as adjacentes para ambos os casos. As células fictícias estão sombreadas. Nenhuma equação

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

- Velocidade Especificada

Para a condição de entrada ilustrada na figura 3.4, a substituição da velocidade especificada na equação (3.46), resulta em:

$$a_s = 0;$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_T + a_B \quad (3.51)$$

note que $(v_0^*)_s$ no termo b (equação (3.50)) é o mesmo que $(v_0)_s$ especificado na fronteira de entrada. As demais fronteiras de entrada são tratadas de maneira análoga.

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

- Pressão Especificada

Quando a pressão é especificada numa célula, a pressão corrigida naquela célula é zero, e para a condição ilustrada na figura 3.4, tem-se:

$$(P'_g)_n = 0 \quad (3.52)$$

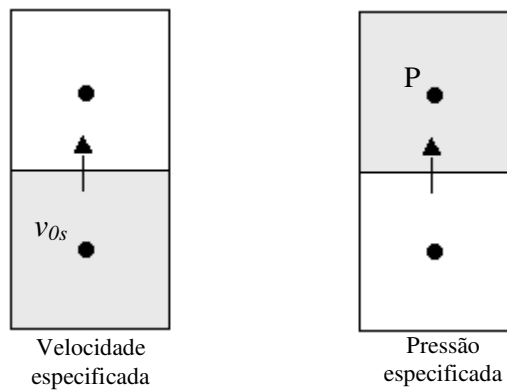


Figura 3.4 Condições de contorno para o fluxo

3.3.3 Equação para correção da fração volumétrica do sólido

O sucesso da técnica numérica depende criticamente da sua capacidade para lidar com o empacotamento do sólido. Nos cálculos do MFIX esses limites são estabilizados incluindo o efeito de pressão do sólido na discretização da equação de continuidade da fase sólida. Isto é realizado derivando uma equação de correção para a fração volumétrica de sólido, como descrito nesta seção.

3.3.3.1 Termo convectivo

Para este método necessita-se de uma equação de estado que relacione a pressão do sólido com a fração volumétrica de sólido.

$$P_m = P_m(\varepsilon_m) \quad (3.53)$$

e define-se

$$K_m = \frac{\partial P_m}{\partial \varepsilon_m} \quad (3.54)$$

Então, uma pequena variação na pressão do sólido pode ser calculada em função de uma variação na fração volumétrica do sólido.

$$P'_m = K_m \varepsilon'_m \quad (3.55)$$

Conforme discutido anteriormente, integrando um termo convectivo em um volume de controle obtém-se, por exemplo:

$$\int_{VC} \frac{\partial}{\partial x} (\varepsilon_m \rho_m u_m) dV = (\varepsilon_m \rho_m u_m)_e A_e - (\varepsilon_m \rho_m u_m)_w A_w \quad (3.56)$$

Assim, precisa-se desenvolver fórmulas para cálculo de fluxos como $(\varepsilon_m \rho_m u_m)_e$.

Denota-se a velocidade do sólido obtida de uma tentativa para os campos de pressão e fração volumétrica do sólido por $(u_m^*)_e$. Este é o campo de velocidade do sólido. A velocidade real do sólido pode ser representada por:

$$(u_m)_e = (u_m^*)_e + (u_m')_e \quad (3.57)$$

onde a correção $(u_m')_e$ é dada pela correção no campo de pressão do sólido:

$$(u_m')_e = e_e \left((P_m')_P - (P_m')_E \right) \quad (3.58)$$

similarmente a seção anterior.

Agora, substituindo (P_m') da equação (3.55) em (3.58), obtém-se:

$$(u_m')_e = e_e \left[(K_m)_P (\varepsilon_m')_P - (K_m)_E (\varepsilon_m')_E \right] \quad (3.59)$$

Além disso, as frações de volume podem ser expressas como uma soma dos valores atuais acrescidos de uma correção.

$$(\varepsilon_m)_e = (\varepsilon_m^*)_e + (\varepsilon_m')_e \quad (3.60)$$

Multiplicando as equações (3.57) e (3.60) e substituindo a equação (3.59), obtém-se:

$$\begin{aligned} (\varepsilon_m)_e (u_m)_e &\approx (\varepsilon_m^*)_e (u_m^*)_e + (\varepsilon_m')_e (u_m^*)_e + (\varepsilon_m^*)_e (u_m')_e \\ &\approx (\varepsilon_m^*)_e (u_m^*)_e + (\varepsilon_m')_e (u_m^*)_e + (\varepsilon_m^*)_e e_e \left[(K_m)_P (\varepsilon_m')_P - (K_m)_E (\varepsilon_m')_E \right] \end{aligned} \quad (3.61)$$

onde ignorou-se o produto das correções.

Relembrando que os valores da face de uma célula pode ser escrito em função dos valores do centro da célula usando fatores convectivos, tem-se:

$$(\varepsilon_m)_e = (\varepsilon_m)_E \xi_e + (\varepsilon_m)_P \bar{\xi}_e \quad (3.62)$$

Agora o fluxo $(\varepsilon_m \rho_m u_m)_e$ pode ser escrito como: (ρ_m é constante no Mfix).

$$\begin{aligned}
(\rho_m)_e (\varepsilon_m)_e (u_m)_e \approx & (\rho_m)_e (\varepsilon_m^*)_e (u_m^*)_e + (\rho_m)_e \left[\xi_e (\varepsilon_m^*)_E + \bar{\xi}_e (\varepsilon_m^*)_P \right] (u_m^*)_e + \\
& + (\rho_m)_e (\varepsilon_m^*)_e e_e \left[(K_m)_P (\varepsilon_m^*)_P - (K_m)_E (\varepsilon_m^*)_E \right]
\end{aligned} \tag{3.63}$$

Reescrevendo, tem-se:

$$\begin{aligned}
(\rho_m)_e (\varepsilon_m)_e (u_m)_e \approx & (\rho_m)_e (\varepsilon_m^*)_e (u_m^*)_e + (\rho_m)_e \left[\bar{\xi}_e (u_m^*)_e + (\varepsilon_m^*)_e (K_m)_P e_e \right] (\varepsilon_m^*)_P + \\
& + (\rho_m)_e \left[\xi_e (u_m^*)_e - (\varepsilon_m^*)_e (K_m)_E e_e \right] (\varepsilon_m^*)_E
\end{aligned} \tag{3.64}$$

3.3.3.2 Termo transiente

Integrando o termo transiente no volume de controle, tem-se:

$$\begin{aligned}
\int_{VC} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_m \rho_m)_P dV &= \frac{[(\varepsilon_m)_P (\rho_m)_P - (\varepsilon_m)_P^0 (\rho_m)_P^0]}{\Delta t} \Delta V \\
&= \frac{[(\varepsilon_m^*)_P + (\varepsilon_m^*)_P] (\rho_m)_P - (\varepsilon_m)_P^0 (\rho_m)_P^0}{\Delta t} \Delta V \\
&= \frac{(\varepsilon_m^*)_P (\rho_m)_P \Delta V}{\Delta t} + \frac{[(\varepsilon_m^*)_P (\rho_m)_P - (\varepsilon_m)_P^0 (\rho_m)_P^0]}{\Delta t} \Delta V
\end{aligned} \tag{3.65}$$

3.3.3.3 Termo de geração

O termo de geração é manipulado levando-se em conta a definição da função de duplo colchete de Syamlal (1998).

$$[[R]] = \begin{cases} 0, & R \leq 0 \\ R, & R > 0 \end{cases} \tag{3.66}$$

Da definição acima segue que:

$$R = [[R]] - [[-R]] \tag{3.67}$$

Assim, integrando-se $\sum R_{lm}$ no volume de controle:

$$\begin{aligned}
\int_{VC} \sum R_{lm} dV &= \Delta V \sum R_{lm} = \Delta V \left\{ \left[\sum R_{lm} \right] - \left[- \sum R_{lm} \right] \right\} \\
&= \Delta V \left\{ \left[\sum R_{lm} \right] - \left[- \sum R_{lm} \right] \frac{(\rho_m \varepsilon_m)_P}{(\rho_m \varepsilon_m)_P} \right\} \\
&= \Delta V \left\{ \left[\sum R_{lm} \right] - \left[- \sum R_{lm} \right] \frac{(\rho_m)_P (\varepsilon_m^* + \varepsilon_m')_P}{(\rho_m \varepsilon_m^*)_P} \right\} \\
&= \Delta V \left\{ \left[\sum R_{lm} \right] - \left[- \sum R_{lm} \right] - \left[- \sum R_{lm} \right] \frac{(\rho_m)_P (\varepsilon_m')_P}{(\rho_m \varepsilon_m^*)_P} \right\} \\
&= \Delta V \sum R_{lm} - \left[- \sum R_{lm} \right] \frac{(\varepsilon_m')_P (\rho_m)_P}{(\rho_m \varepsilon_m^*)_P} \Delta V
\end{aligned} \tag{3.68}$$

3.3.3.4 Equação de correção

Juntando todos os termos anteriores, a equação para correção da fração volumétrica de sólido pode ser escrita como:

$$a_P (\varepsilon_m')_P = \sum_{nb} a_{nb} (\varepsilon_m')_{nb} + b \tag{3.69}$$

$$a_E = \left[(\rho_m \varepsilon_m^*)_e e_e (K_m)_E - \xi_e (\rho_m)_E (u_m^*)_e \right] A_e \tag{3.70}$$

$$a_W = \left[(\rho_m \varepsilon_m^*)_w e_w (K_m)_W + \bar{\xi}_w (\rho_m)_W (u_m^*)_w \right] A_w \tag{3.71}$$

$$a_N = \left[(\rho_m \varepsilon_m^*)_n e_n (K_m)_N - \xi_n (\rho_m)_N (v_m^*)_n \right] A_n \tag{3.72}$$

$$a_S = \left[(\rho_m \varepsilon_m^*)_s e_s (K_m)_S + \bar{\xi}_s (\rho_m)_S (v_m^*)_s \right] A_s \tag{3.73}$$

$$a_T = \left[(\rho_m \varepsilon_m^*)_t e_t (K_m)_T - \xi_t (\rho_m)_T (w_m^*)_t \right] A_t \tag{3.74}$$

$$a_B = \left[(\rho_m \varepsilon_m^*)_b e_b (K_m)_B + \bar{\xi}_b (\rho_m)_B (w_m^*)_b \right] A_b \tag{3.75}$$

$$\begin{aligned}
a_P = & (\rho_m)_P \left[\bar{\xi}_e (u_m^*)_e A_e - \xi_w (u_m^*)_w A_w + \right. \\
& + \bar{\xi}_n (v_m^*)_n A_n - \xi_s (v_m^*)_s A_s + \\
& \left. + \bar{\xi}_t (w_m^*)_t A_t - \xi_b (w_m^*)_b A_b \right] + \\
& + (K_m)_P \left[(\rho_m \varepsilon_m^*)_e e_e A_e + (\rho_m \varepsilon_m^*)_w e_w A_w + \right. \\
& + (\rho_m \varepsilon_m^*)_n e_n A_n + (\rho_m \varepsilon_m^*)_s e_s A_s + \\
& \left. + (\rho_m \varepsilon_m^*)_t e_t A_t + (\rho_m \varepsilon_m^*)_b e_b A_b \right] + \\
& + (\rho_m)_P \frac{\Delta V}{\Delta t} + \left[\left[- \sum R_{lm} \right] \right] \frac{(\rho_m)_P \Delta V}{(\rho_m \varepsilon_m^*)_P}
\end{aligned} \tag{3.76}$$

$$\begin{aligned}
b = & -(\rho_m \varepsilon_m^*)_e (u_m^*)_e A_e + (\rho_m \varepsilon_m^*)_w (u_m^*)_w A_w - \\
& -(\rho_m \varepsilon_m^*)_n (v_m^*)_n A_n + (\rho_m \varepsilon_m^*)_s (v_m^*)_s A_s - \\
& -(\rho_m \varepsilon_m^*)_t (w_m^*)_t A_t + (\rho_m \varepsilon_m^*)_b (w_m^*)_b A_b - \\
& - \left[(\rho_m \varepsilon_m^*)_P - (\rho_m \varepsilon_m)_P^0 \right] \frac{\Delta V}{\Delta t} + \Delta V \sum R_{lm}
\end{aligned} \tag{3.77}$$

Depois de calcular a correção da fração volumétrica do sólido pela equação (3.69), a velocidade do sólido (equações 3.57 e 3.59) e a fração volumétrica do sólido (equação 3.60) são corrigidas.

Sumarizando o procedimento de cálculo para escoamentos gás – sólido apresenta-se o algoritmo 3.1 que ilustra os passos da solução numérica, envolvendo as equações de correção descritas no decorrer do capítulo.

Algoritmo

1. Início do passo temporal. Cálculo das propriedades físicas, coeficiente de intercâmbio e taxas de reação.
2. Cálculo do campo de velocidade baseado no campo de pressão atual: u_m^*, v_m^*, w_m^* . (equações (3.9) e (3.10))
3. Cálculo da correção da pressão do fluido P_g' . (equação (3.47))

4. Atualização do campo de pressão do fluido aplicando uma sob relaxação: $P_g = P_g^* + \omega_{pg} P_g'$.
Calcula a “velocidade de correção” de P_g' e atualiza o campo de velocidade: $u_m = u_m^* + u_m'$,
para $m = 0$ até M . (Para a fase sólida, u_m calculado neste passo é denotado como u_m^* no passo
6).
5. Cálculo dos gradientes $\frac{\partial P_m}{\partial \varepsilon_m}$ para utilizar na equação de correção da fração volumétrica do
sólido. Calcula a correção da fração volumétrica do sólido ε_m' . (equação (3.69))
6. Atualização da fração volumétrica do sólido ($\varepsilon_m \rho_m$ no Mfix): $\varepsilon_m = \varepsilon_m^* + \omega_{ps} \varepsilon_m'$. Sob
relaxação somente nas regiões onde $\varepsilon_0 < \varepsilon_{cp}$ e $\varepsilon_m > 0$; isto é, onde o sólido está densamente
empacotado e a fração volumétrica de sólido está aumentando. Calcula-se a correção da
velocidade para a fase sólida e atualiza o campo de velocidade da fase sólida: $u_m = u_m^* + u_m'$.
(para $m = 1$ até M).
7. Calcula-se a fração de vazio: $\varepsilon_0 = \varepsilon_v - \sum_{m \neq 0} \varepsilon_m$. (ε_v é usualmente igual a 1).
8. Cálculo da pressão do sólido a partir da equação de estado $P_m = P_m(\varepsilon_m)$.
9. Cálculo da temperatura e espécies.
10. Utiliza-se o resíduo normalizado calculado nos passos 2, 3, 5 e 9 para checar a
convergência. Se o critério de convergência não é satisfeito continua as iterações (passo 2),
senão incrementa-se o passo temporal. (passo 1).
-

Capítulo 4

RESULTADOS

4.1 Introdução

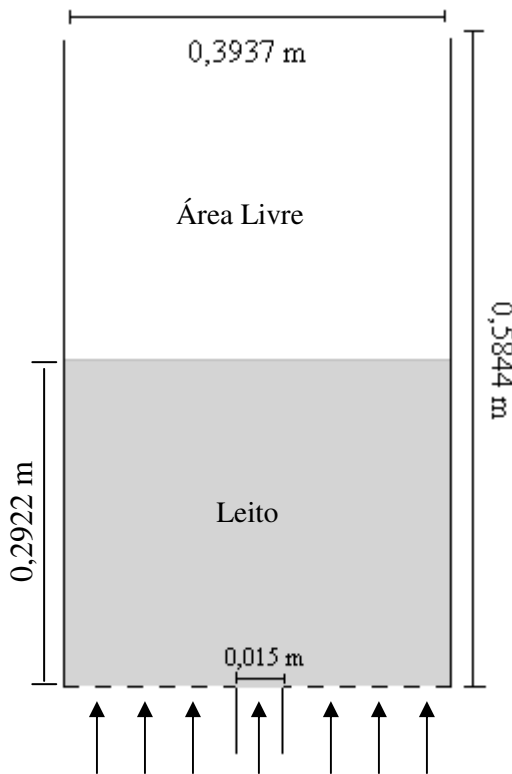
Neste capítulo apresentam-se os resultados de simulação numérica do escoamento hidrodinâmico gás-sólido em um leito fluidizado borbulhante considerando o procedimento baseado na teoria cinética dos escoamentos granulares – TCEG para o cálculo do tensor das tensões da fase sólida. A temperatura granular foi calculada de duas formas: através de uma equação diferencial parcial ou através de uma expressão algébrica. Considerou-se o modelo de discretização “Superbee” para ambos os casos, devido este ser de alta ordem e produzir resultado físico coerente na forma da bolha, segundo Guenther e Syamlal (2001).

As simulações foram realizadas em um código computacional aberto escrito na linguagem de programação Fortran. Esse código é denominado MFIX (Multiphase Flow with Interphase eXchanges) e está em constante desenvolvimento pelo Departamento de Energia *NETL (National Energy Technology Laboratory)*. Detalhes sobre a teoria podem ser encontrados em Syamlal, Rogers e O’Brien (1993). O código descreve a hidrodinâmica, transferência de calor e reações químicas em sistemas fluido-sólido. Ele tem sido usado, para simular LFC e LFB. Os cálculos realizados no MFIX fornecem dados transientes com distribuições tridimensionais de pressão, velocidade, temperatura, e frações de massa para espécies. A versão atual do código se baseia na formulação Euleriana-Euleriana para modelar as fases gasosa e sólida, respectivamente. O uso do código permite testar diversos aspectos, desde numéricos, como efeitos dos esquemas de discretização das equações, e também parâmetros físicos, como o uso de relações constitutivas. O código permite a forma de processamento seqüencial e em paralelo.

Para o desenvolvimento do trabalho utilizou-se um computador Pentium IV com processador de 2,66 GHz e 512MB de memória RAM – “Random Access Memory”. Utilizou-se como plataforma para o código MFIX o sistema operacional LINUX, que é gratuito e regido pelas normas de software livre, na versão OpenSuse 10.3, além do compilador Fortran-Intel na versão acadêmica para a linguagem de programação Fortran, distribuído gratuitamente pela INTEL[®] (www.intel.com).

Nas seções 4.2, 4.3 e 4.4 serão apresentadas comparações entre os resultados das simulações numéricas, para as seguintes variáveis: fração volumétrica do gás, velocidade axial de ambas as fases do escoamento e temperatura granular. Na seção 4.2 comparam-se os resultados obtidos pela aplicação da TCEG com a temperatura granular modelada através de uma equação algébrica, de uma EDP com condição de contorno de deslizamento parcial na parede e de uma EDP com condição de contorno de não deslizamento na parede. Nas seções 4.3 e 4.4 analisam-se os efeitos da variação do diâmetro das partículas. Para isso nessas seções apresentam-se gráficos para partículas com diâmetro $d_p = 125\mu\text{m}$. Esses gráficos são comparados com os obtidos na seção 4.2 para partículas com diâmetro $d_p = 500\mu\text{m}$. De acordo com a classificação de Geldart (1973) as partículas com diâmetro $d_p = 500\mu\text{m}$ pertencem ao grupo B e as partículas com diâmetro $d_p = 125\mu\text{m}$ pertencem ao grupo A/B. Nas simulações da seção 4.3 utilizou a TCEG com a temperatura granular modelada através de uma equação algébrica, enquanto na seção 4.4 modelada através de uma EDP.

A figura 4.1 apresenta a geometria bi-dimensional do leito fluidizado com jato de ar centralizado, empregado nas simulações desenvolvidas. Considerou-se o sistema cartesiano de coordenadas. A dimensão do leito é de 0,3937m de largura por 0,5844m de altura. Inicialmente o ar entra pela base do leito com velocidade de 0,234 m/s a fim de mantê-lo em um estado de mínima fluidização. Após 0,13s de simulação, a velocidade do ar no jato, centralizado na base do leito, aumenta para 5,2 m/s ocorrendo então a formação de bolhas. Tais parâmetros físicos foram adotados de Gidaspow (1994). Outras informações e condições iniciais e de contorno são especificadas na figura. Para as condições de contorno nas paredes, assumiu-se a condição de não deslizamento para a fase gás, ou seja, velocidade nula. Para a fase sólida utilizou-se a condição de não deslizamento na parede quando se resolve a temperatura granular algebricamente na TCEG. Quando o computo da temperatura granular é feito através de uma EDP realizou-se duas simulações, variando as condições de contorno na parede, na primeira utilizou-se o modelo padrão do MFIX proposto por Johnson e Jackson (1987) e na segunda utilizou-se a condição de não deslizamento na parede, ambas as condições apresentadas na tabela 4.1. Na direção normal considerou-se velocidade nula. Para a pressão e fração de sólido nas paredes considerou-se deslizamento livre, ou seja, gradiente nulo na direção normal à parede.



Condições iniciais

No leito:

$$\varepsilon_g = 0,44$$

$$v_g = 0,5318 \text{ m/s}$$

Na área livre:

$$\varepsilon_g = 1$$

$$v_{mf} = 0,234 \text{ m/s}$$

Condições de contorno

No jato central:

$$\varepsilon_g = 1$$

$$v_g = 5,2 \text{ m/s}$$

À esquerda e à direita do jato:

$$\varepsilon_g = 1$$

$$v_g = 0,234 \text{ m/s}$$

Figura 4.1 Geometria e condições iniciais e de contorno usadas nas simulações

Tabela 4.1 Condições de contorno na parede para a fase sólida

Condição de deslizamento parcial na parede, Johnson e Jackson (1987)

$$\vec{n} \cdot \vec{\tau}_s \cdot \vec{t} + \frac{\pi}{2\sqrt{3}\varepsilon_{s \max}} \phi' \rho_s \varepsilon_s g_0 \theta^{1/2} v_{sl} = 0$$

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

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

Condição de não deslizamento na parede

$$v_s = 0$$

A tabela 4.2 retoma as equações, empregadas no escoamento gás-sólido, que foram discretizadas para a realização da simulação.

Tabela 4.2 Modelo hidrodinâmico usado nas simulações

1. Equação da continuidade, fase m (m = g, s)

$$\frac{\partial(\rho_m \varepsilon_m)}{\partial t} + \nabla(\rho_m \varepsilon_m \bar{v}_m) = 0$$

2. Equação da Quantidade de Movimento, Modelo A

Fase gasosa:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_g \rho_g \bar{v}_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \bar{v}_g \bar{v}_g) = \varepsilon_g \bar{\nabla} \cdot \bar{\sigma}_g - \bar{f} + \varepsilon_g \rho_g \bar{g}$$

Fase sólida:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s \bar{v}_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \bar{v}_s \bar{v}_s) = \bar{\nabla} \cdot \bar{\sigma}_s + \varepsilon_s \bar{\nabla} \cdot \bar{\sigma}_g + \bar{f} + \varepsilon_s \rho_s \bar{g}$$

3. Tensor das Tensões

Fase gasosa:

$$\bar{\sigma}_g = \mu_g \left[\left(\bar{\nabla} v_g + (\bar{\nabla} v_g)^T \right) - \frac{3}{2} \bar{\nabla} v_g \bar{I} \right] - P_g \bar{I}$$

Fase sólida:

$$\bar{\sigma}_s = \begin{cases} -P_s^p \bar{I} + \bar{\tau}_s^p, & \text{se } \varepsilon_g \leq \varepsilon_g^* \\ -P_s^v \bar{I} + \bar{\tau}_s^v, & \text{se } \varepsilon_g > \varepsilon_g^* \end{cases}$$

(ver formulação completa no capítulo 2, usa-se uma expressão algébrica ou resolve-se uma EDP para o cálculo da temperatura granular)

4. Definição da Fração Volumétrica

$$\varepsilon_g + \varepsilon_s = 1$$

5. Equação de estado (fase gasosa como gás ideal)

$$\rho_g = \frac{P_g}{RT_g}$$

6. Função de Arrasto na Interface

$$\beta = \frac{3}{4} \frac{C_{Ds}}{V_{rs}^2} \frac{|\bar{v}_g - \bar{v}_s|}{d_p} \varepsilon_g \varepsilon_s, \text{ onde:}$$

$$C_{Ds} = \left(0,63 + 4,8 \sqrt{V_{rs}/Re_s} \right)^2,$$

$$Re_s = \frac{\varepsilon_g \rho_g |\bar{v}_g - \bar{v}_s| d_p}{\mu_g},$$

$$V_{rs} = 0,5 \left(A - 0,06 Re_s + \sqrt{(0,06 Re_s)^2 + 0,12 Re_s (2B - A) + A^2} \right),$$

$$A = \varepsilon_g^{4,14}, \quad B = \begin{cases} 0,8 \varepsilon_g^{1,28} & \text{se } \varepsilon_g \leq 0,85 \\ \varepsilon_g^{2,65} & \text{se } \varepsilon_g > 0,85 \end{cases}$$

A tabela 4.3 apresenta os parâmetros usados no MFIX para simulação.

Tabela 4.3 Parâmetros do MFIX

<u>Dados da Simulação</u>	
Diâmetro das partículas	$d_p = 500\mu\text{m}$ (Grupo B) $d_p = 125\mu\text{m}$ (Grupo A/B)
Densidade do sólido	$\rho_s = 2.660 \text{ kg/m}^3$
Densidade do gás	$\rho_g = 1,2 \text{ kg/m}^3$
Viscosidade do gás	$\mu_g = 1,8 \times 10^{-5} \text{ Pa.s}$
Coefficiente de restituição	$e = 0,8$
Ângulo de atrito interno	$\phi = 30^\circ$
Fração de vazio para mínima fluidização	$\epsilon_{mf} = 0,42$
<u>Condições computacionais</u>	
Malha (124x108) 13.392 nós	$\delta x = 0,003175 \text{ m}$, $\delta y = 0,00541 \text{ m}$
Tempo real de cálculo	$t = 1 \text{ s}$

4.2 Comparação dos resultados de simulação obtidos pela TCEG algébrica e TCEG com o modelo de uma EDP para o computo da temperatura granular

O correto entendimento e a previsão do comportamento de bolhas em leito fluidizado é uma questão fundamental, pois estas são responsáveis por muitas propriedades do leito fluidizado. Especificamente, os processos de transferência de calor e massa são gravemente afetados pela formação e propagação de bolhas de gás (KUIPERS *et al.*, 1993). Segundo Gidaspow (1994) a modelagem de fluidização com jato central é vantajosa, pois estabelece um fluxo padrão.

Neste trabalho foram feitas análises considerando-se o esquema numérico Superbee, e pode-se observar a coerência física na forma das bolhas, tanto nas simulações da TCEG algébrica (aqui denominada TCEG_alg.) quanto da TCEG com EDP (aqui denominada TCEG_edp_JJ para a condição de contorno de Johnson e Jackson (1987) e TCEG_edp_nsw

para a condição de não deslizamento na parede), para partículas com diâmetro $d_p = 500\mu\text{m}$. Para comparações com dados experimentais podem-se usar Gidaspow (1994) e Kuipers *et al.* (1993).

Existe uma grande diferença no tempo de execução entre as simulações onde se resolve a temperatura granular algebricamente ou através de EDP. A simulação com a TCEG algébrica foi realizada em aproximadamente 27 horas, enquanto a TCEG_edp_JJ e a TCEG_edp_nsw levaram aproximadamente 130 e 124 horas, respectivamente. Isto ocorre, pois enquanto na TCEG algébrica se resolve uma equação explícita para o computo da temperatura granular, na TCEG_edp acrescenta-se ao sistema equações uma EDP referente a temperatura granular.

As figuras 4.2 e 4.3 comparam os perfis das bolhas entre a TCEG_alg., a TCEG_edp_JJ e a TCEG_edp_nsw nos tempos $t = 0,36\text{s}$ e $t = 0,79\text{s}$, respectivamente, de simulação numérica. Nessas figuras são plotados as frações de vazio ϵ_g . Ressalta-se que neste capítulo, onde aparecem figuras representando frações de vazio e temperatura granular, o eixo das abscissas representa a largura do leito, assim como o eixo das ordenadas representa a altura do leito.

Qualitativamente, observado na figura 4.2, as formas das bolhas no tempo $t = 0,36\text{s}$ são semelhantes nas três simulações. Com a evolução do tempo de simulação, como pode ser visto na figuras 4.3 que representa o tempo de $0,79\text{s}$, vê-se que existe uma maior proximidade entre a TCEG_alg. e a TCEG_edp_nsw.

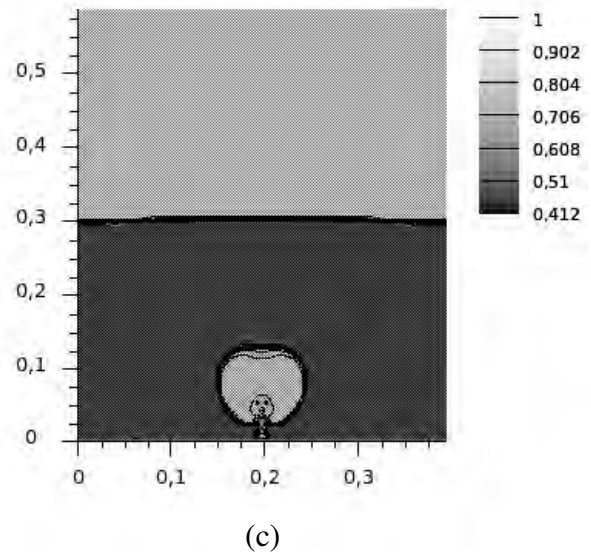
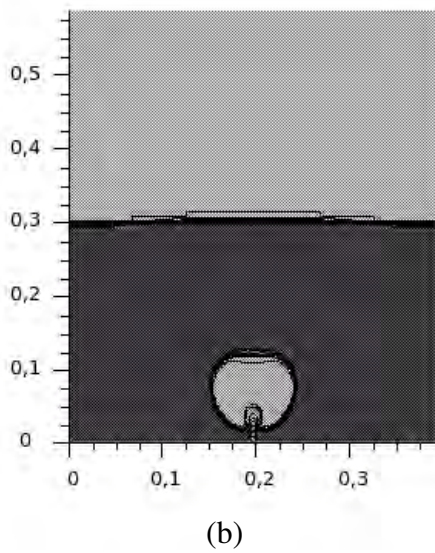
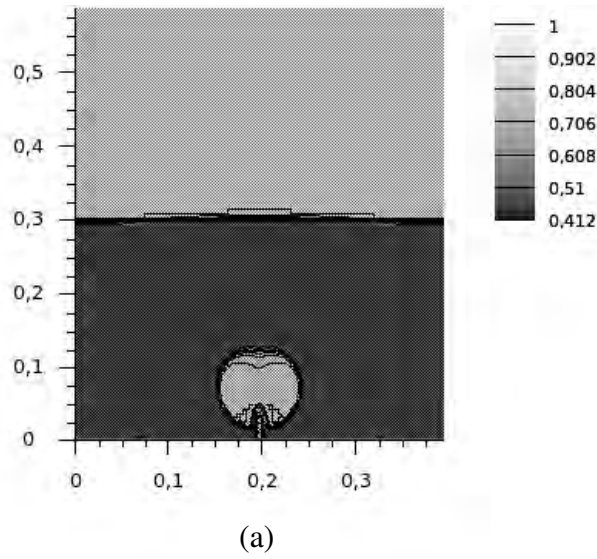


Figura 4.2 Fração de vazio no tempo $t = 0,36s$ na simulação com: a) TCEG_alg., b) TCEG_edp_JJ e c) TCEG_edp_nsw

Na figura 4.3, apresenta-se o perfil das bolhas estourando no tempo $t = 0,79s$, nota-se que a simulação com a TCEG_edp_JJ representou melhor o aspecto físico da bolha devido capturar uma não simetria em sua forma. Esta não simetria é causada pela queda de partículas sólidas através do topo das bolhas. Tais instabilidades, além de causarem irregularidades no perfil das bolhas, podem afetar significativamente a dinâmica do leito.

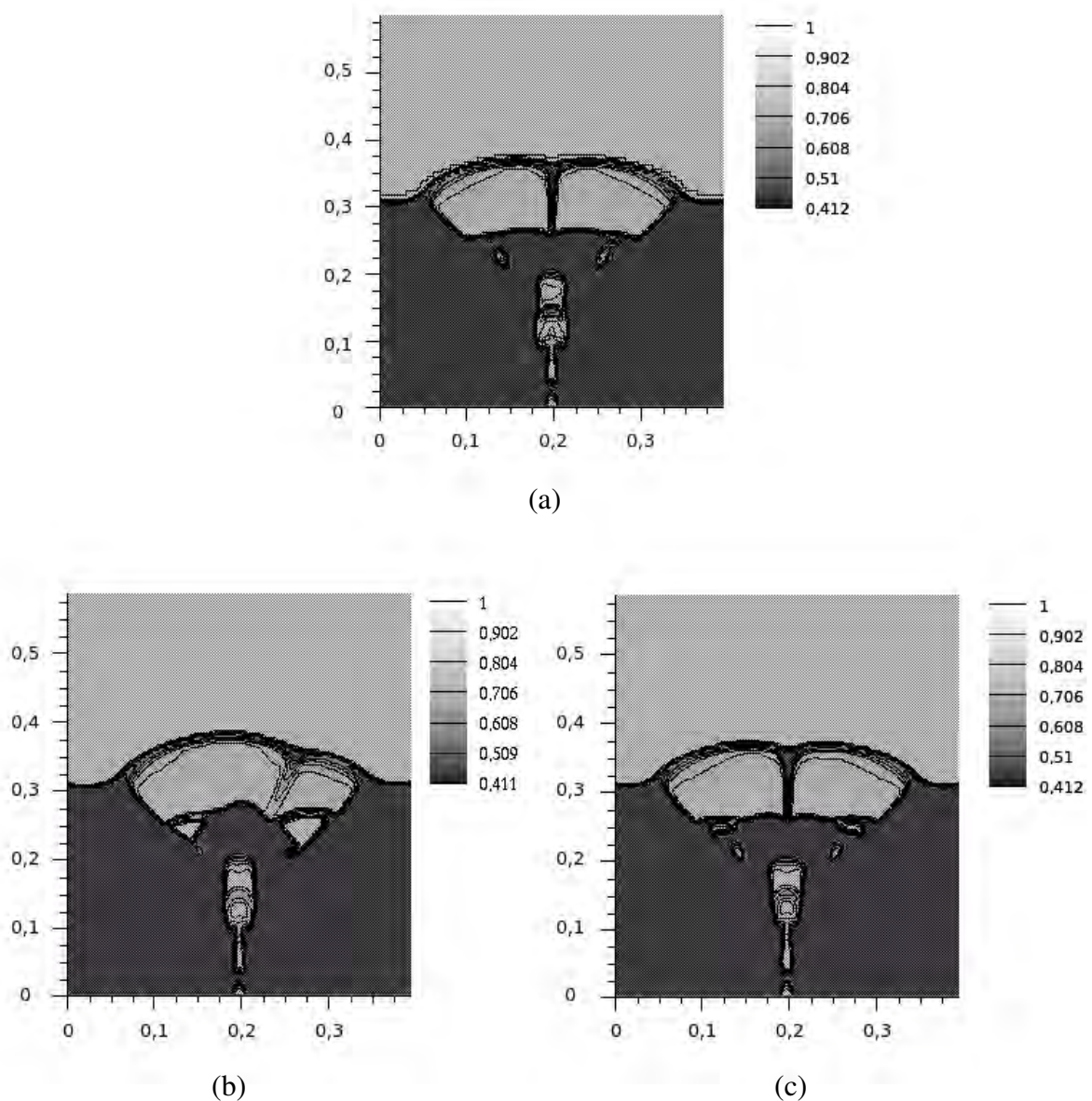


Figura 4.3 Fração de vazio no tempo $t = 0,79s$ na simulação com: a) TCEG_alg., b) TCEG_edp_JJ e c) TCEG_edp_nsw

Fenômenos semelhantes podem ser vistos nas simulações de Guenther e Syamlal (2001) e nos experimentos de Kuipers *et al.* (1993), conforme figuras 4.4 e 4.5, respectivamente.

Nas simulações de Guenther e Syamlal (2001) as dimensões do leito utilizado, as condições de contorno e iniciais e demais parâmetros de simulações foram iguais às apresentadas neste trabalho. A figura 4.4 (a) apresenta a distribuição da velocidade do gás ao redor de uma bolha isolada e a figura 4.4 (b) o fluxo de massa da fase gasosa na superfície da bolha, ambas figuras representam o tempo $t = 0,59s$ de simulação. Observa-se que a não simetria mencionada anteriormente está presente nestas figuras.

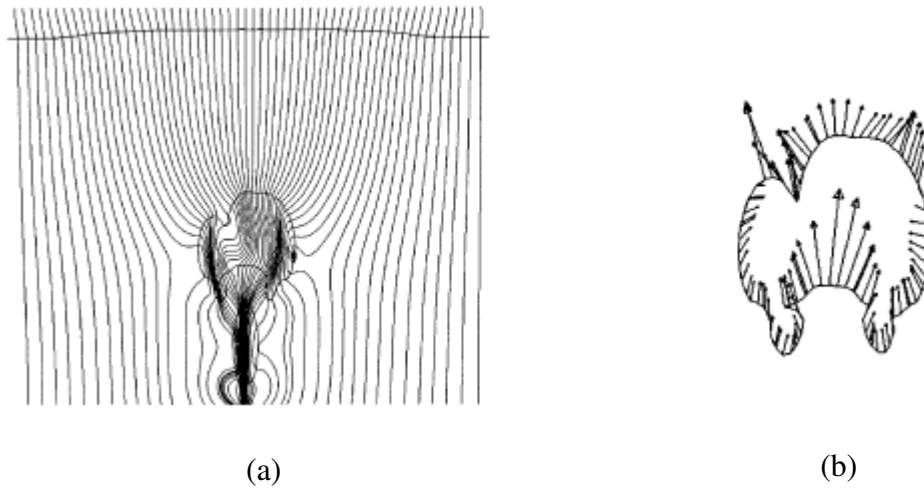


Figura 4.4 Bolhas simuladas por Guenther e Syamlal (2001): a) distribuição da velocidade do gás ao redor de uma bolha isolada e b) fluxo de massa da fase gasosa na superfície da bolha

Nos experimentos de Kuipers *et al.* (1993), cujo leito apresenta dimensões de 0,57m de largura por 0,5m de altura, a velocidade de injeção do gás no jato central é superior ao apresentado neste trabalho, chegando a 10m/s. As figuras 4.5 (a) e 4.5 (b) representam as bolhas no tempo $t = 0,460s$ e $t = 0,560s$, respectivamente. Pelo fato da velocidade do jato ser superior, nota-se que nestas figuras a bolha chega à superfície em tempos inferiores se comparados aos tempos apresentados nas simulações deste trabalho. Mas as assimetrias das bolhas persistem, confirmando os resultados de simulação apresentados anteriormente.

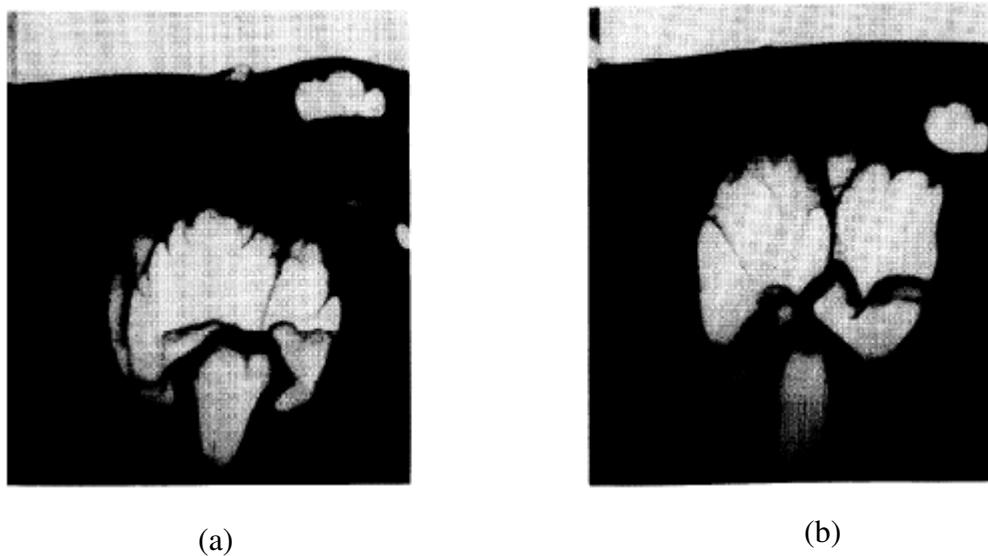


Figura 4.5 Bolhas experimentais de Kuipers *et al.* (1993): a) bolha no tempo $t = 0,460s$ e b) bolha no tempo $t = 0,560s$

A figura 4.6 compara os perfis das bolhas entre a TCEG_alg., a TCEG_edp_JJ e a TCEG_edp_nsw no tempo de simulação $t = 1s$. Observa-se que a superfície do leito tem comportamento semelhante nas simulações da TCEG_alg. e da TCEG_edp_nsw. Nota-se que os resultados da TCEG_edp_JJ apresentam maior instabilidade na superfície do leito. Isso se deve a assimetria na forma das bolhas. Assim, o modelo da TCEG_edp_JJ permite captar melhor o comportamento físico do leito. Salienta-se que o processo de formação de bolhas no leito é uma das principais causas de instabilidade do escoamento em leito borbulhante.

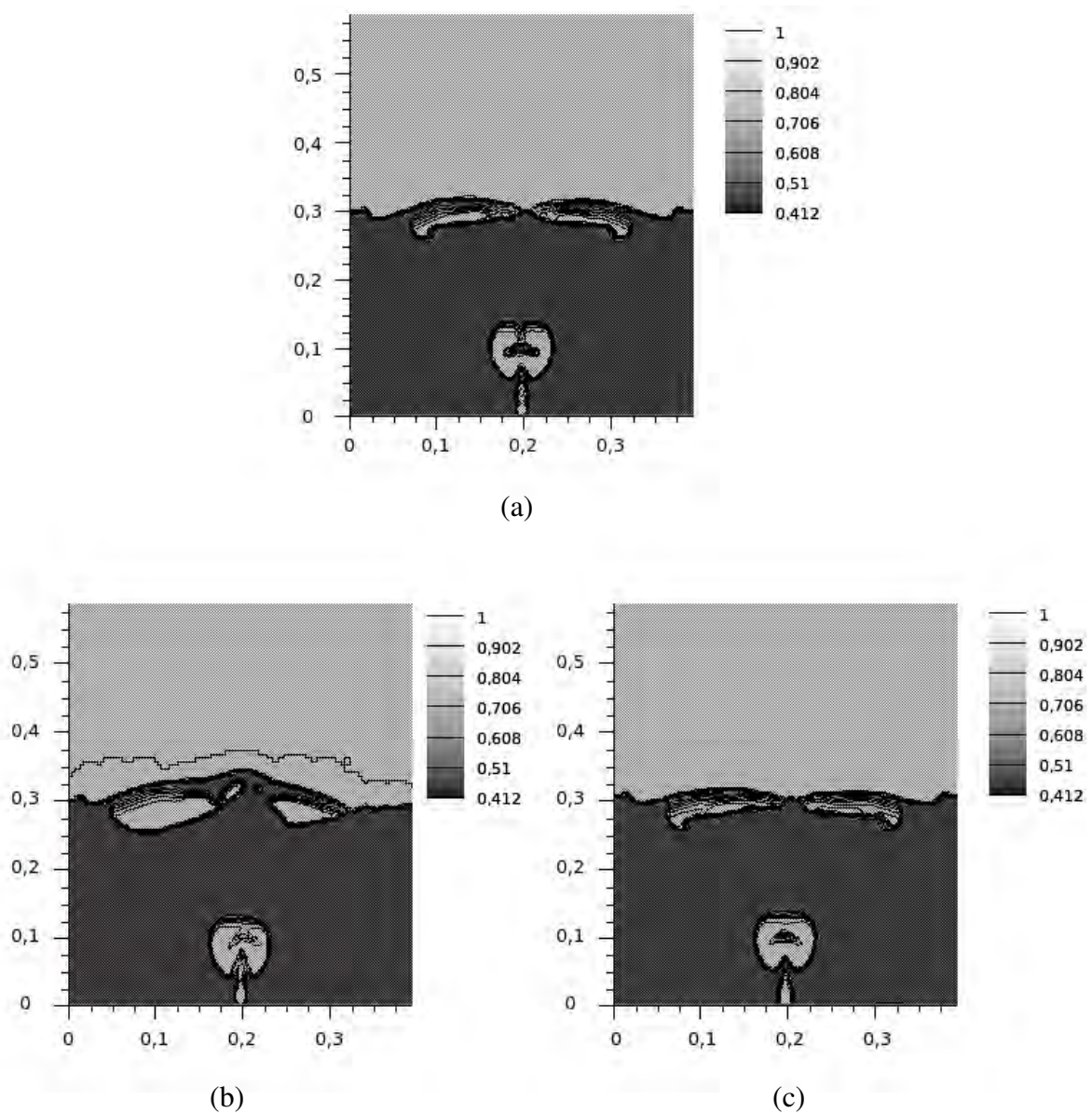


Figura 4.6 Fração de vazio no tempo $t = 1,0s$ na simulação com: a) TCEG_alg., b) TCEG_edp_JJ e c) TCEG_edp_nsw

Nas figuras 4.7, 4.8 e 4.9 são ilustrados os gráficos para a velocidade média no tempo da fase sólida e gasosa em três alturas do leito, 0,05m, 0,15m e 0,29m, respectivamente. Nessas figuras são comparados os perfis axiais de velocidades para as três simulações: TCEG_alg; TCEG_edp_JJ e TCEG_edp_nsw.

Nota-se nas figuras 4.7, 4.8 e 4.9 que os gráficos da velocidade do sólido e da velocidade do gás seguem o mesmo perfil, isso devido à força de arrasto ser a única força de interação entre as fases, o perfil de velocidade do particulado é induzido pela força de arrasto exercida pelo gás sobre as partículas. Nestas figuras constata-se que a velocidade do gás alcança valores superiores à velocidade das partículas, o que está coerente fisicamente devido à fase sólida ser mais densa do que a fase gasosa.

Na base do leito, visto na figura 4.7 os gráficos da TCEG_alg., TCEG_edp_JJ e TCEG_edp_nsw coincidem para ambas as fases do escoamento. Conforme essa altura aumenta, observam-se nas figuras 4.8 e 4.9 que os perfis das velocidades do gás e do sólido são aproximadamente semelhantes no caso dos modelos da TCEG_alg e da TCEG_edp_nsw, diferindo do modelo da TCEG_edp_JJ.

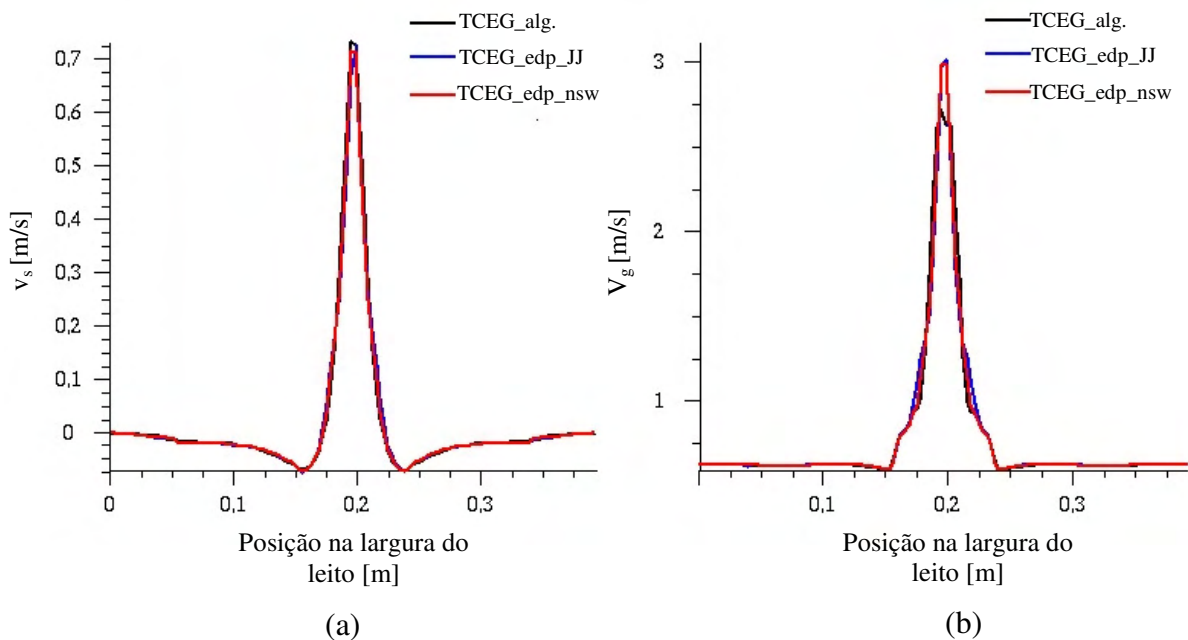


Figura 4.7 Perfis da velocidade axial média no tempo com altura 0,05 metros acima da entrada do leito considerando os modelos TCEG_alg., TCEG_edp_JJ e TCEG_edp_nsw. a) velocidade do sólido e b) velocidade do gás

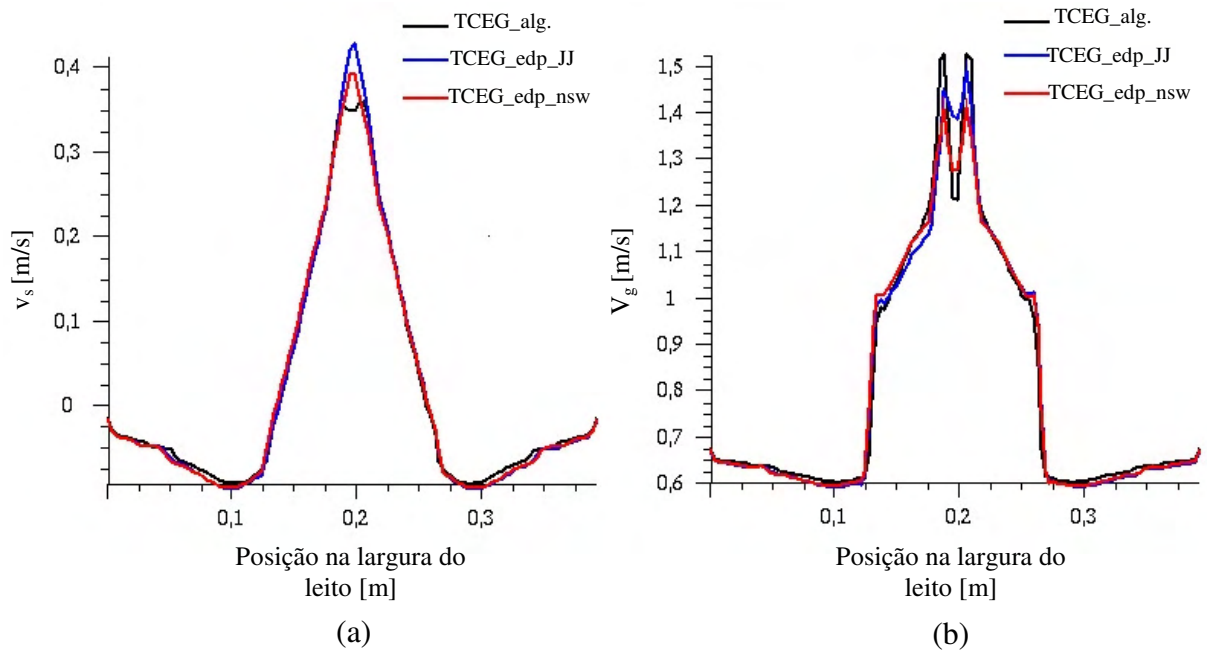


Figura 4.8 Perfis da velocidade axial média no tempo com altura 0,15 metros acima da entrada do leito considerando os modelos TCEG_alg., TCEG_edp_JJ e TCEG_edp_nsw. a) velocidade do sólido e b) velocidade do gás

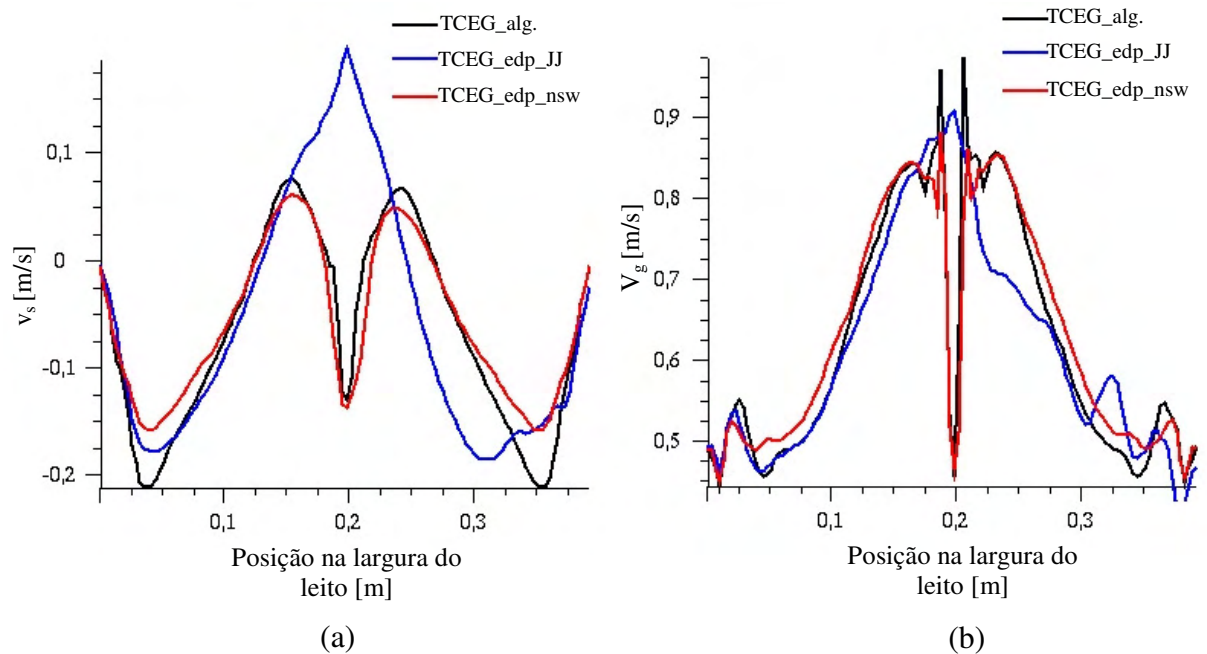


Figura 4.9 Perfis da velocidade axial média no tempo com altura 0,29 metros acima da entrada do leito considerando os modelos TCEG_alg., TCEG_edp_JJ e TCEG_edp_nsw. a) velocidade do sólido e b) velocidade do gás

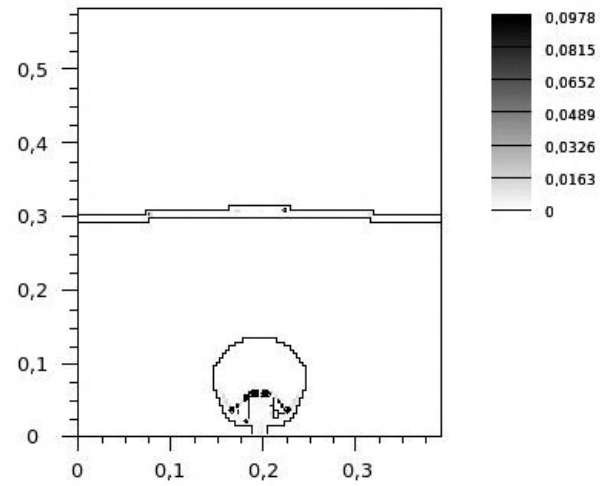
Nas figuras 4.7 e 4.8 observa-se que o máximo das velocidades acontecem onde se encontra o jato. A figura 4.9 mantém esse comportamento para o caso da TCEG_edp_JJ, o que não é evidenciado, nesta figura, para os casos da TCEG_alg. e da TCEG_edp_nsw. Na figura 4.9 nota-se que o modelo de EDP com condição de Johnson e Jackson (1987) (TCEG_edp_JJ) também apresentou um gráfico não simétrico para a velocidade média do gás e do sólido, captando assim a assimetria na forma da bolha conforme visto na figura 4.3 (b).

O perfil de velocidade apresentado nos gráficos das figuras 4.7, 4.8, e 4.9, no caso da TCEG_edp_JJ, sugere que a presença de bolhas induzem uma circulação global do material do leito, as partículas são elevadas pelo jato de gás e depois começam a perder movimento devido ao atrito.

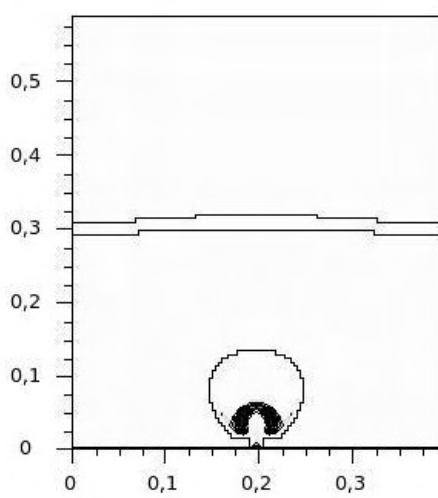
Outra variável importante a ser analisada é a temperatura granular θ . A maior diferença no uso da equação simplificada da TCEG algébrica em relação à TCEG com resolução de uma EDP é que na primeira a energia granular é dissipada localmente em estado estacionário, sendo os processos de convecção e difusão desprezíveis. Esta aproximação é válida somente sob a hipótese que a fração volumétrica da fase sólida mantenha-se elevada e a velocidade do sólido mantenha-se relativamente baixa (VAN WACHEN *et al.*, 1998). Este é um regime típico dos LFB`s.

Nas simulações realizadas com a TCEG_alg. apareceram, esporadicamente, valores muito alto para a temperatura granular nas regiões próximas ao jato, tais valores eram destoantes com aqueles encontrados em literaturas, portanto para a plotagem dos gráficos esses valores foram desconsiderados, já que não afetariam o perfil da figura.

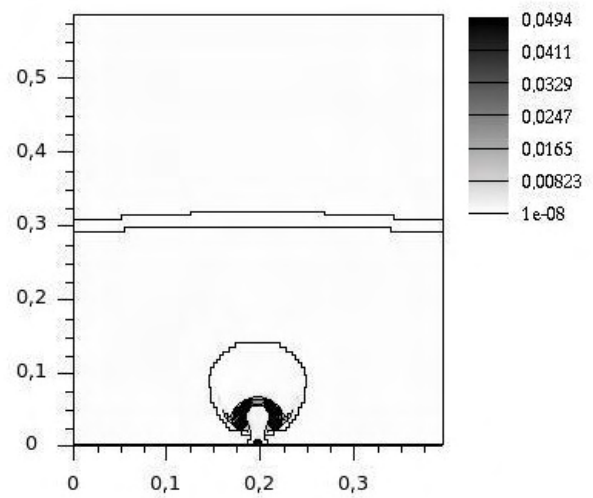
Nas regiões densas do leito, com alta concentração de particulado, taxas elevadas de colisão entre partículas causam forte dissipação de energia flutuante e a temperatura granular atinge o limite mínimo. O limite máximo da temperatura granular é atingido na região borbulhante perto da injeção do gás, onde a forte aceleração gera energia flutuante (BOEMER, QI e RENZ, 1997). Esta afirmação está de acordo com os resultados encontrados nas figuras 4.10, 4.11 e 4.12.



(a)

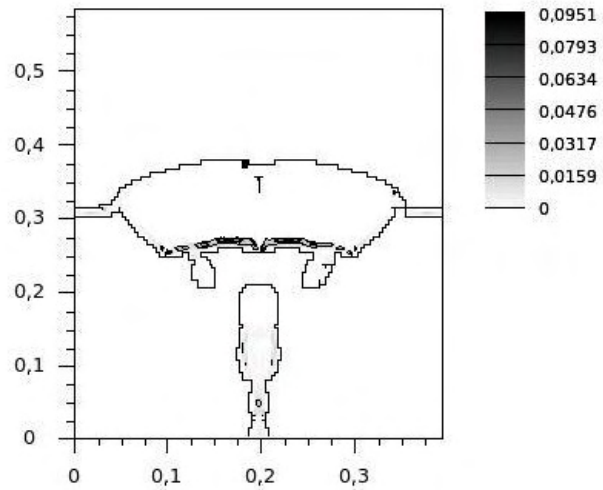


(b)

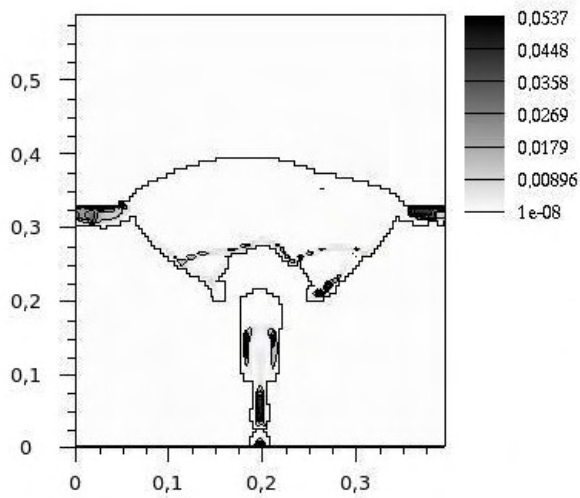


(c)

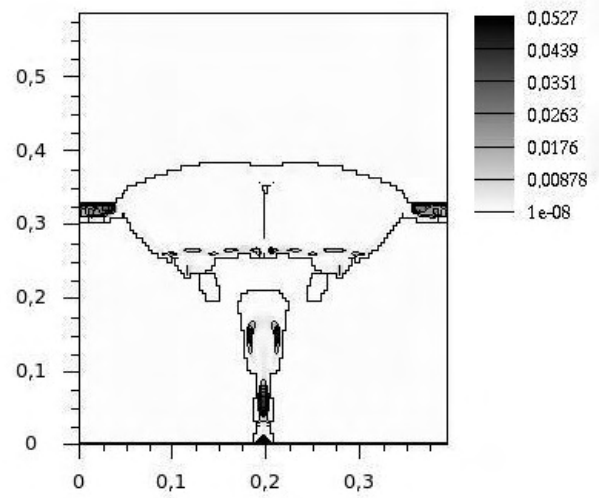
Figura 4.10 Perfis da temperatura granular no tempo $t = 0,36s$ na simulação com: a) TCEG_alg., b) TCEG_edp_JJ e c) TCEG_edp_nsw



(a)



(b)



(c)

Figura 4.11 Perfis da temperatura granular no tempo $t = 0,79s$ na simulação com: a) TCEG_alg., b) TCEG_edp_JJ e c) TCEG_edp_nsw

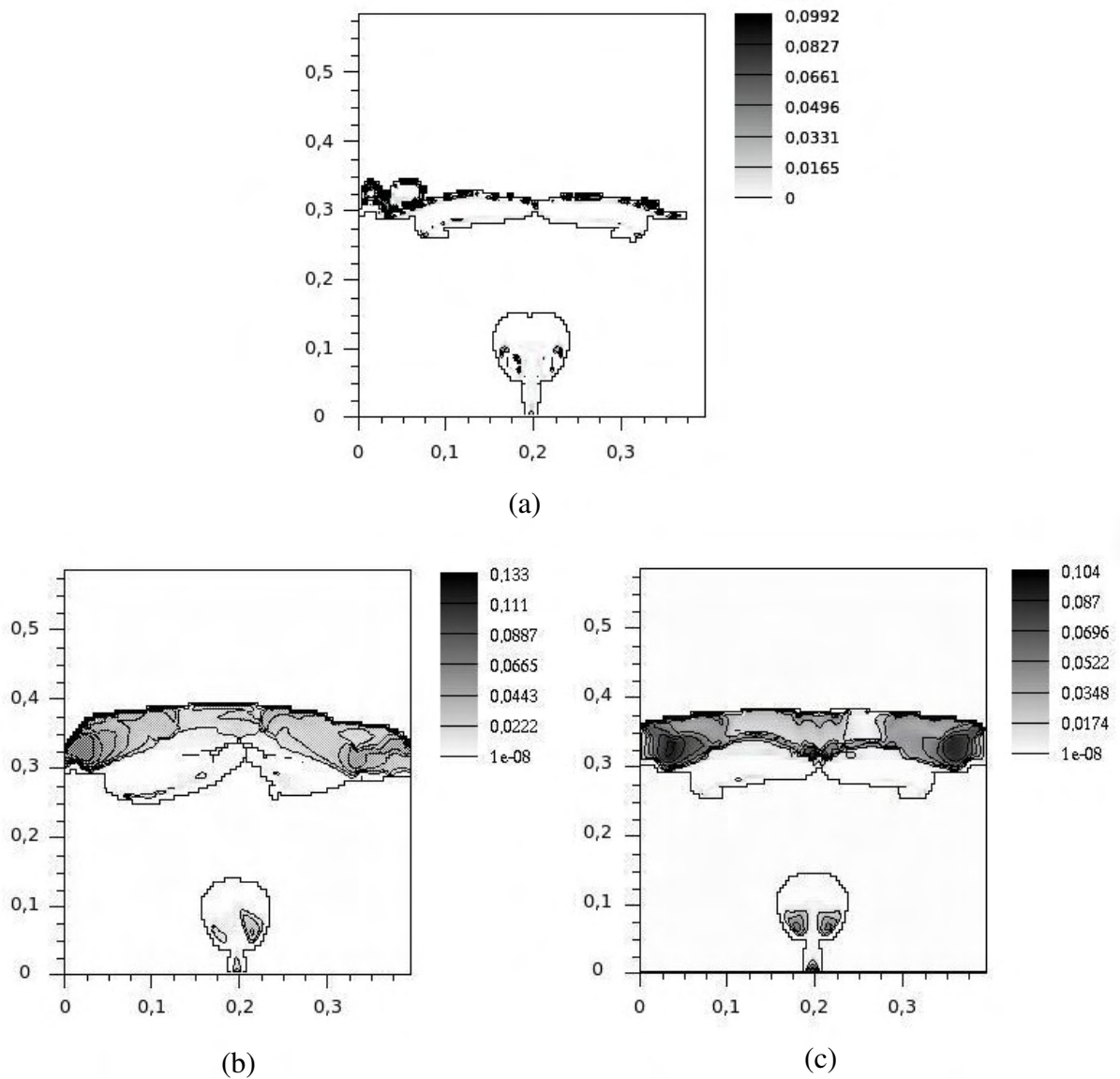


Figura 4.12 Perfis da temperatura granular no tempo $t = 1,0s$ na simulação com: a) TCEG_alg., b) TCEG_edp_JJ e c) TCEG_edp_nsw

Comparando as figuras 4.2, 4.3, 4.6 e 4.10, 4.11, 4.12, respectivamente, nota-se a influência da fração volumétrica do sólido na temperatura granular, a qual acompanha visivelmente o perfil da bolha.

Segundo Boemer, Qi e Renz (1997) no que se refere à energia flutuante em termos de temperatura granular, teoricamente, as soluções onde se resolve uma equação diferencial parcial apresentariam melhores resultados. Mas no caso de leitos densos como os leitos fluidizados borbulhantes esses resultados seriam similares ao calculado com a expressão algébrica. Entretanto nas simulações realizadas foram obtidos resultados diferentes quando se utiliza uma equação algébrica ou uma EDP para o computado da temperatura granular.

As figuras 4.10, 4.11 e 4.12 mostram diferenças obtidas na temperatura granular entre os modelos da TCEG_alg., da TCEG_edp_nsw, e da TCEG_edp_JJ. Nota-se que o modelo da TCEG_edp_JJ apresentou melhores resultados que o modelo da TCEG_edp_nsw, e esse último foi melhor que o modelo da TCEG_alg. Isso se deve a forma de cálculo da temperatura granular e das condições de contorno consideradas. O modelo da TCEG_edp_JJ captou a não simetria do perfil das bolhas. Comparando o modelo que calcula simplificada a temperatura granular (TCEG_alg.) com os modelos que utilizam EDP (TCEG_edp_nsw e TCEG_edp_JJ), destaca-se que esses últimos apresentaram, como esperado, uma maior energia cinética granular em regiões de instabilidades da superfície do leito e da bolha assim como na região do jato central.

Devido a semelhança obtida no perfil das bolhas entre a TCEG_alg. e a TCEG_edp_nsw, visto nas figuras 4.2, 4.3, e 4.6, conclui-se que para as simulações realizadas, o uso da TCEG_alg. apesar de apresentar resultados simplificados para a temperatura granular, seria adequado por requerer um tempo computacional menor nas simulações. Nesse caso, deveria, por exemplo, alterar outros parâmetros para captar os mesmos resultados da EDP, como refinar a malha computacional. No caso de resolver-se a TCEG com EDP, a condição de contorno de Johnson e Jackson (1987) certamente é mais indicada, pois captura melhor os aspectos físicos do escoamento. Entretanto o tempo computacional requerido para esse caso é mais alto.

4.3 Comparação dos resultados de simulação obtidos pela TCEG algébrica variando o diâmetro das partículas

Os resultados da simulação com as partículas do grupo A/B, ou seja, partículas com diâmetro $d_p = 125\mu\text{m}$, resolvendo-se a temperatura granular algebricamente, são apresentados a seguir. Para a realização desta simulação necessitaram-se aproximadamente 17 horas. Nota-se uma significativa diferença no perfil das bolhas e um alto domínio da fração de vazio, implicando numa sobre expansão do leito.

A figura 4.13 apresenta as frações de vazio para partículas com diâmetro $d_p = 125\mu\text{m}$ nos tempos $t = 0,36\text{ s}$, $t = 0,79\text{ s}$, e $t = 1\text{ s}$. Essa figura mostra uma diferença crítica em relação às figuras 4.2 (a), 4.3 (a) e 4.6 (a), ou seja, em relação à simulação onde se usou partículas com diâmetro $d_p = 500\mu\text{m}$ para a TCEG_alg. As partículas de diâmetro $d_p = 125\mu\text{m}$

apresentam um escoamento homogêneo e bem misturado com bolhas sem contornos definidos, espalhadas por todo leito. Enquanto na simulação com partículas maiores as bolhas são bem definidas e posicionadas no centro do leito. Na figura 4.13 constata-se também uma sobre expansão do leito, ultrapassando a altura de 0,2922m.

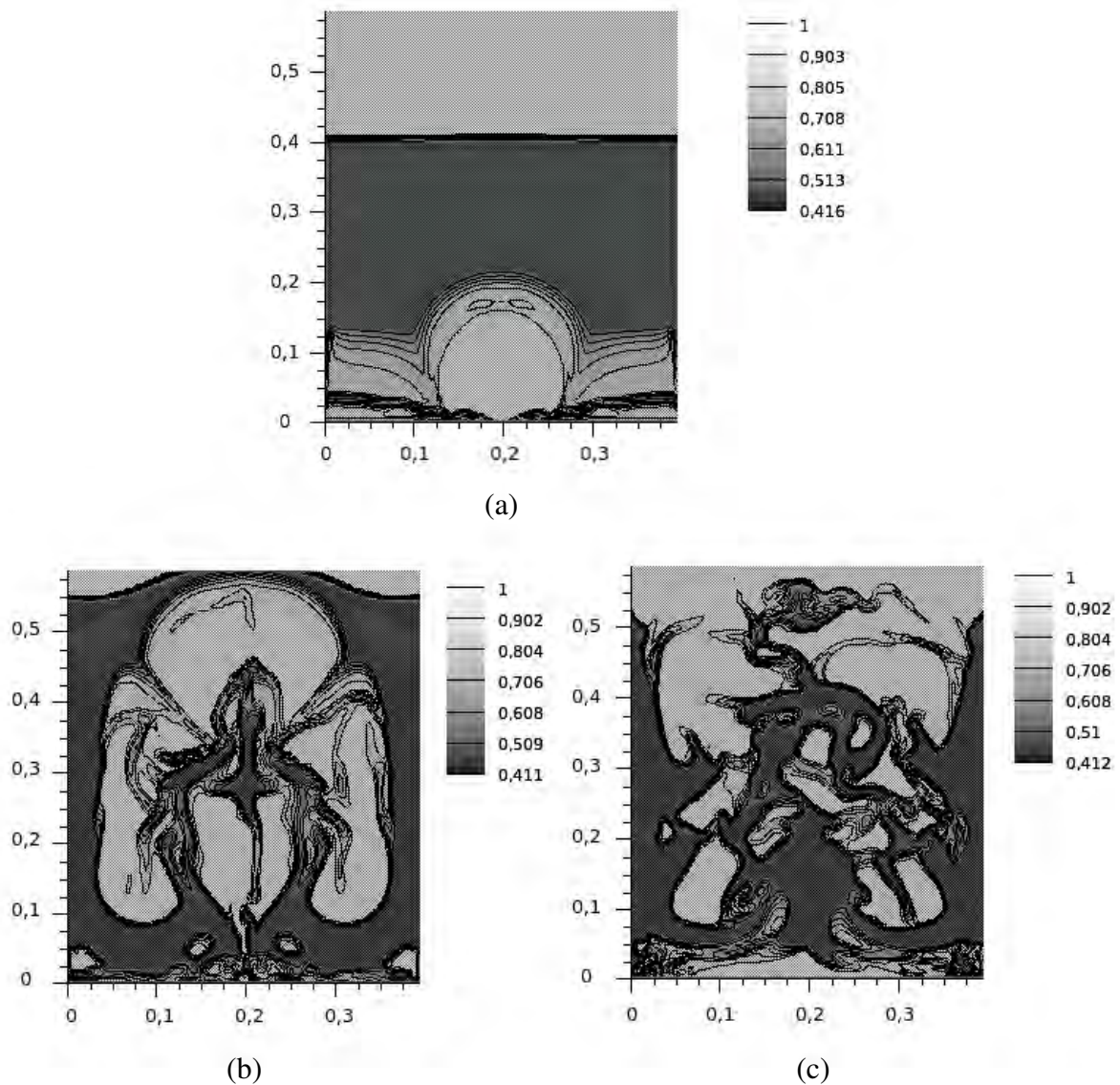


Figura 4.13 Fração de vazio na simulação considerando a TCEG_alg. com $d_p = 125\mu\text{m}$ para: a) tempo $t = 0,36\text{s}$, b) tempo $t = 0,79\text{s}$ e c) tempo $t = 1,0\text{s}$

Makkawi, Wright e Ocone (2006) comparam resultados experimentais com simulações em leitos fluidizados com partículas do grupo B e grupo A/B. Segundo estes autores a sobre expansão do leito para o grupo A/B ocorre pelo fato do MFIX negligenciar a

força coesiva existente entre partículas em suas simulações. Esses autores propõem um modelo considerando a coexistência de atrito-colisão, no intermédio do escoamento denso, no tensor das tensões e um termo envolvendo forças coesivas entre partículas, para que ocorra a redução da sobre expansão do leito.

De fato, para partículas maiores como do grupo B, Molerus (1982) descreve as forças coesivas como “não importantes” e então podem ser desprezadas. Mas de acordo com Massimilla e Donsi (1976) as forças coesivas entre partículas de diâmetro menores são excessivamente altas em relação ao peso da partícula e, portanto consideradas como principal fator na estabilidade do comportamento do escoamento.

A figura 4.14 mostra a formação de bolhas no experimento de Makkawi, Wright e Ocone (2006) e em suas simulações no MFIX. O leito experimental utilizado foi de 0,138m de diâmetro por 0,15m de altura e o tempo de realização do experimento foi de 50s. Detalhes sobre o equipamento onde se realizou o experimento podem ser encontrados também em Makkawi e Wright (2004). Para as simulações Makkawi, Wright e Ocone (2006) utilizaram as mesmas especificações do experimento, sendo o tempo de simulação igual a 40s.

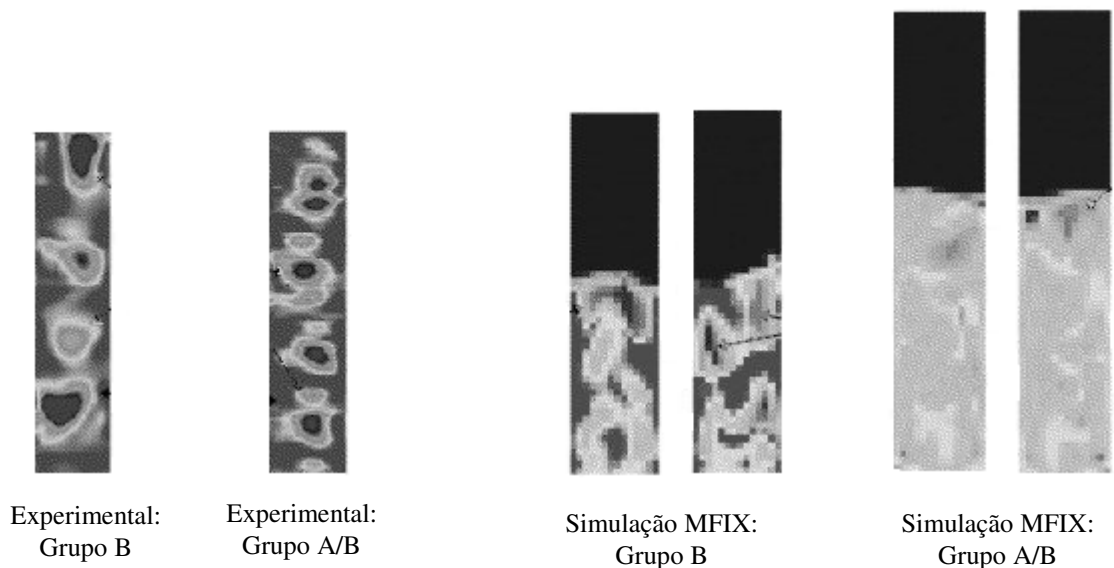


Figura 4.14 Formação de bolhas de Makkawi, Wright e Ocone (2006)

Observa-se que as bolhas experimentais, tanto para o grupo B quanto para o grupo A/B de partículas, aparecem no centro do leito e com contornos bem definidos. A diferença crítica entre as formas das bolhas aparece em suas simulações, assim como nas realizadas neste trabalho, onde para partículas do grupo A/B ocorre a sobre expansão do leito e bolhas sem contornos definidos.

A figura 4.15 apresenta o perfil da temperatura granular no tempo de simulação $t = 0,79s$ para partículas de diâmetros $d_p = 125\mu m$. Lembrando que, assim como na plotagem dos gráficos da temperatura granular com a TCEG_alg. para partículas de diâmetro $d_p = 500\mu m$, valores não coerentes fisicamente foram desprezados para plotagem do gráfico.

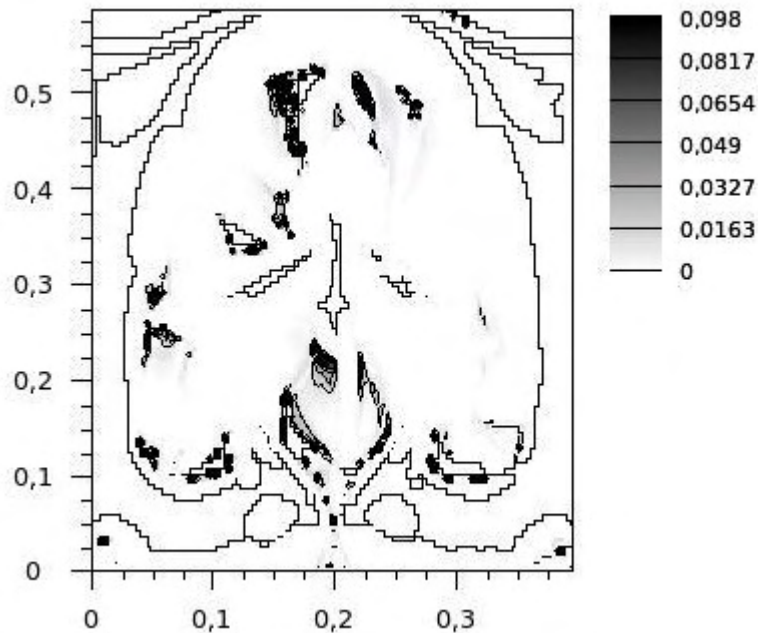


Figura 4.15 Perfil da temperatura granular no tempo $t = 0,79s$ na simulação considerando a TCEG_alg. com $d_p = 125\mu m$

Nesta simulação confirma-se a forte relação entre a temperatura granular θ e a fração volumétrica do sólido. Isto fica visível na figura 4.15, assim como o perfil da fração de vazio espalha-se pelo leito o mesmo acontece com o perfil da temperatura granular. Observe que os valores mais altos de θ ocorrem onde existe mais gás, ou seja, a temperatura granular acompanha o perfil da bolha.

Na figura 4.16 apresentam-se os gráficos do perfil de velocidade axial, da fase sólida, com média no tempo em alturas diferentes do leito. Comparam-se as simulações com partículas de diâmetro $d_p = 500\mu\text{m}$ e $d_p = 125\mu\text{m}$.

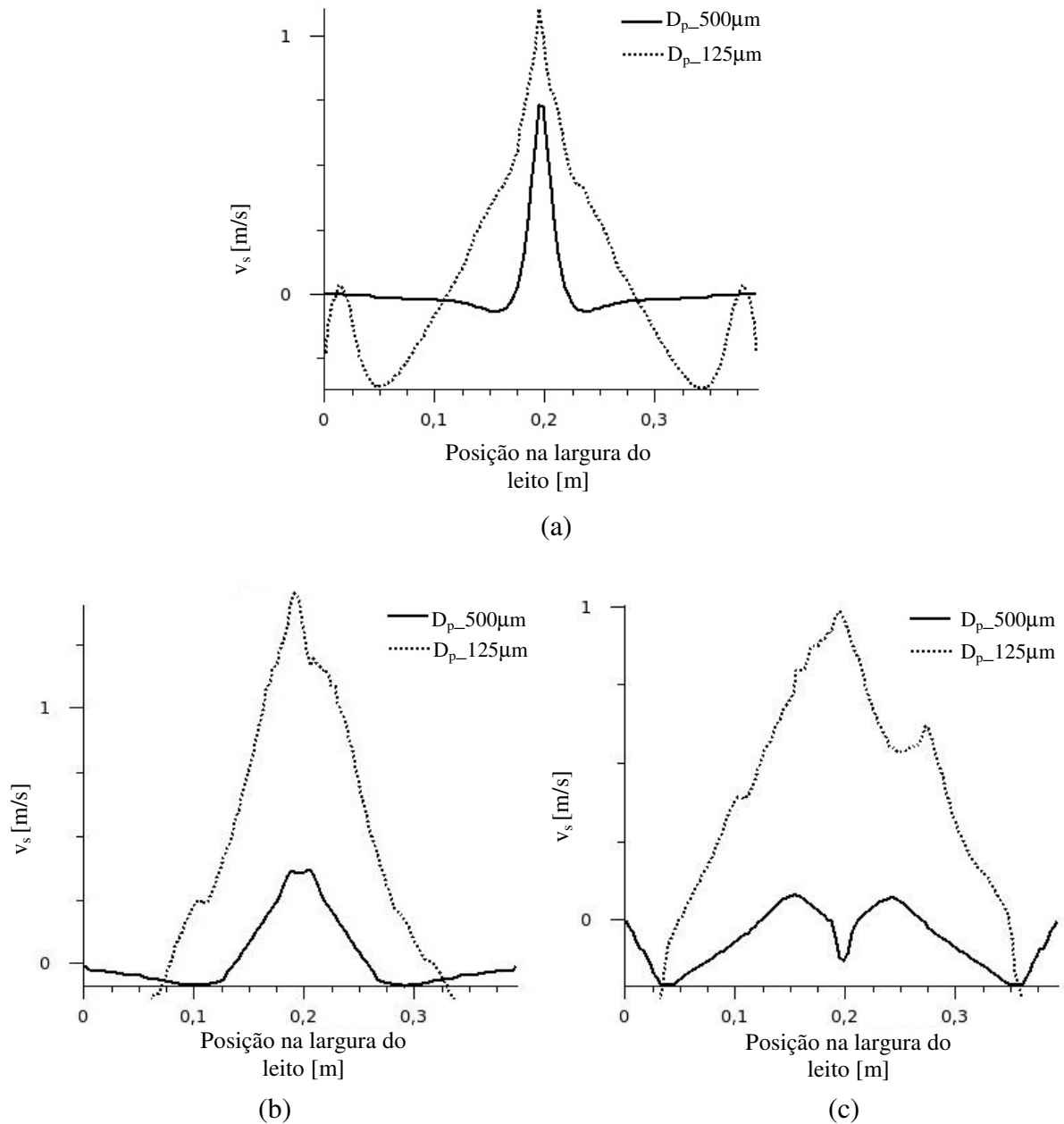


Figura 4.16 Perfis da velocidade axial média no tempo da fase sólida considerando o modelo TCEG_alg com partículas de $d_p = 500\mu\text{m}$ e $d_p = 125\mu\text{m}$ para: a) 0,05 metros acima da entrada do leito, b) 0,15 metros acima da entrada do leito e c) 0,29 metros acima da entrada do leito

Constata-se novamente que a velocidade máxima ocorre no centro do leito onde está localizado o jato. Como já era esperado, as partículas com diâmetros menores atingem

velocidades superiores em relação às partículas maiores, isto fica visível na figura 4.16. Estes perfis de velocidades confirmam as características do escoamento com as partículas menores que foram apresentadas na figura 4.13 do perfil da bolha.

Segundo os estudos de Makkawi, Wright e Ocone (2006) os valores da velocidade das partículas diminuem quando se aumentam os valores da força coesiva. Sendo assim, nas simulações com partículas do grupo A/B não se deve negligenciar os efeitos de coesão entre partículas para obtenção de melhores resultados.

4.4 Resultados de simulação obtidos pela TCEG_edp_JJ para partículas de diâmetros $d_p = 125 \mu\text{m}$

Visto que, a simulação com a TCEG algébrica para partículas de diâmetros $d_p = 125 \mu\text{m}$ não apresentou resultados coerentes fisicamente e que a simulação com a TCEG resolvendo uma EDP para a temperatura granular e utilizando a condição de contorno de Johnson e Jackson (1987) para partículas de diâmetros $d_p = 500 \mu\text{m}$ apresentou um resultado mais realístico na forma da bolha, outra simulação foi realizada. Assim utilizou-se a TCEG_edp_JJ com partículas de diâmetros $d_p = 125 \mu\text{m}$. O tempo total desta simulação foi de aproximadamente 43 horas. A seguir apresentam-se os resultados.

A figura 4.17 traz o perfil da fração de vazio, ou seja, a forma das bolhas nos tempos $t = 0,36\text{s}$ e $t = 0,79\text{s}$. A figura 4.18 apresenta os gráficos de velocidade axial da fase sólida com média no tempo, nas alturas 0,05 metros e 0,29 metros acima da entrada do leito. Por fim na figura 4.19 pode-se ver o perfil da temperatura granular no tempo de simulação $t = 0,79\text{s}$.

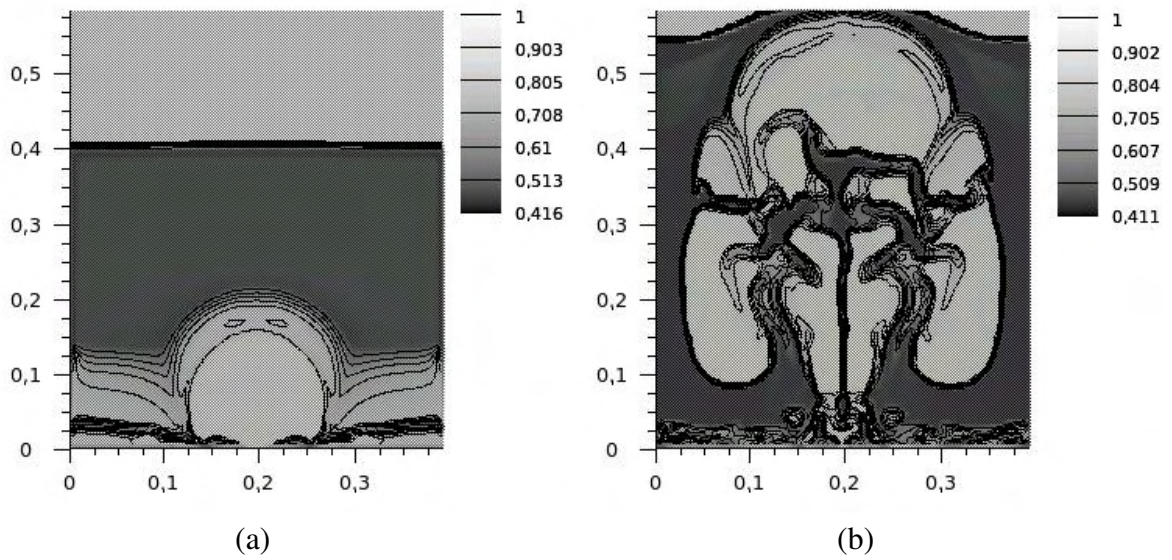


Figura 4.17 Fração de vazio na simulação considerando a TCEG_edp_JJ com $d_p = 125\mu\text{m}$ para: a) tempo $t = 0,36\text{s}$ e b) tempo $t = 0,79\text{s}$

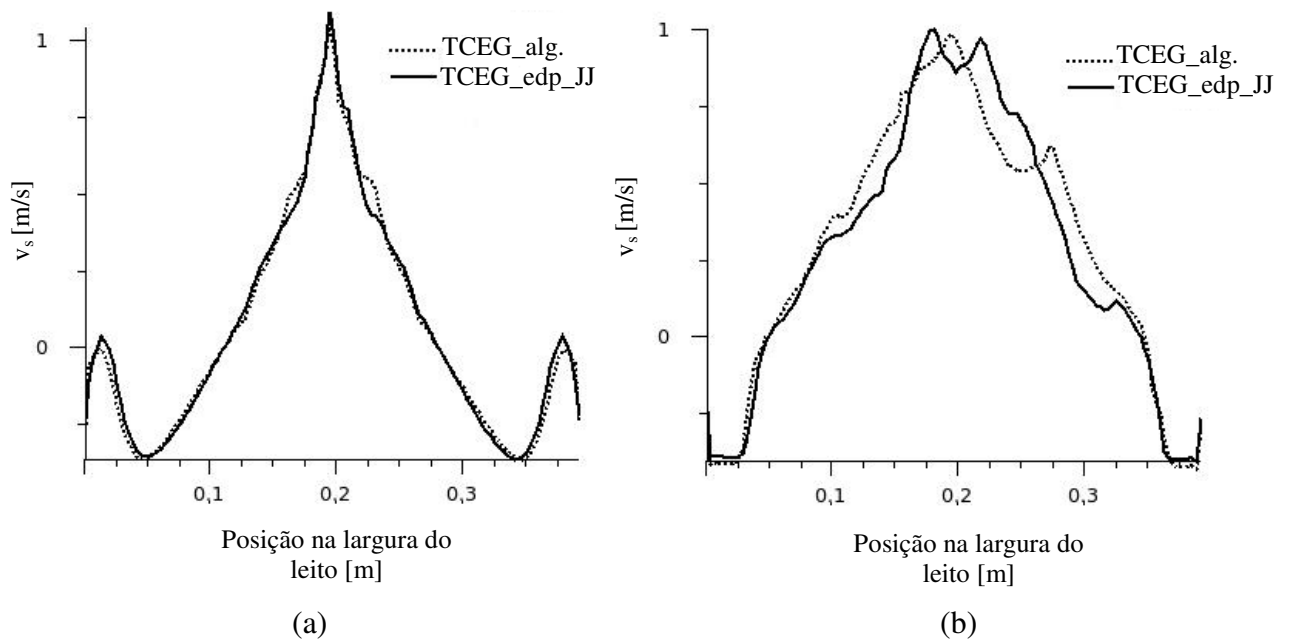


Figura 4.18 Perfis da velocidade axial média no tempo da fase sólida comparando os modelos TCEG_edp_JJ e TCEG_alg. com partículas de $d_p = 125\mu\text{m}$ para: a) 0,05 metros acima da entrada do leito e b) 0,29 metros acima da entrada do leito

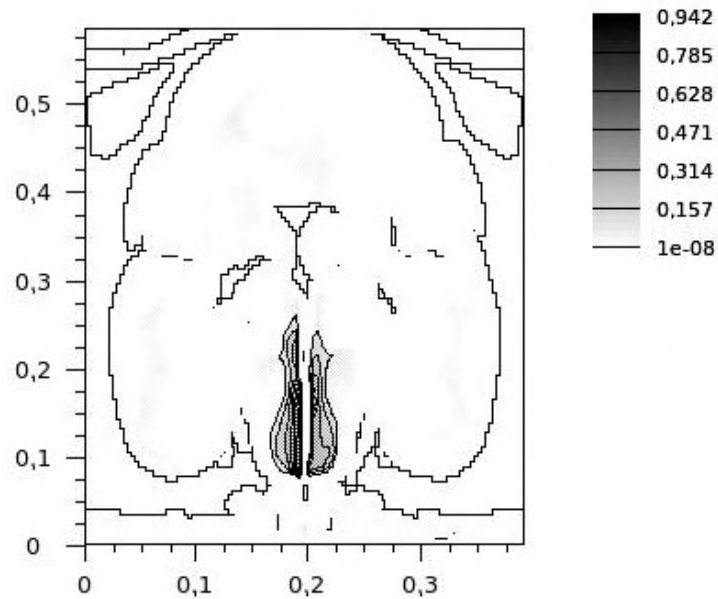


Figura 4.19 Perfil da temperatura granular no tempo $t = 0,79s$ na simulação considerando a TCEG_edp_JJ com $d_p = 125\mu m$

Conforme observado nas figuras 4.17, 4.18 e 4.19, os mesmos resultados não fisicamente coerentes foram obtidos quando se usa a TCEG_edp_JJ para partículas do grupo A/B. Observa-se a sobre expansão do leito e as bolhas sem formas definidas. Obviamente, isto ocorre pelo mesmo motivo da simulação com a TCEG_alg., ou seja, por negligenciar as forças coesivas presentes no escoamento.

Pode-se concluir que a utilização da TCEG_edp_JJ não influencia positivamente nos resultados da simulação com partículas de diâmetro $d_p = 125 \mu m$. Observa-se também que o tempo de realização desta simulação foi bem superior ao da simulação com a TCEG algébrica para o mesmo grupo de partículas. Isto vem ilustrar que, mesmo ocorrendo uma desestabilização do leito, a solução numérica para o computo da temperatura granular através de EDP é mais complexo.

Capítulo 5

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

5.1 Comentários finais

Na teoria apresentada no segundo capítulo pode-se concluir a complexidade envolvida na realização deste trabalho, apesar das simplificações adotadas no modelo empregado. Sendo a mais significativa, a consideração de apenas uma fase sólida caracterizada por um diâmetro médio de particulado d_p . A não consideração dos efeitos turbulentos na fase gasosa é outra grande simplificação do modelo apresentado no capítulo 2.

Uma consideração importante e fundamental inferida no terceiro capítulo é devido à natureza instável e transiente que caracteriza o escoamento bifásico gás-sólido. Nestas condições, a precisão da discretização da derivada temporal na equação de transporte, também é determinante na precisão da solução numérica. Nas simulações apresentadas no quarto capítulo, utilizou-se o esquema Euler implícito para derivada temporal (esquema padrão no MFIX), este esquema é de primeira ordem, isto é, seu erro de truncamento local (ETL) é $O(\Delta t)$. Segundo Fortuna (2000), em problemas transientes o uso do método de Euler deve ser evitado. Recomenda-se métodos de ordem mais elevada, como por exemplo, o método de Crank-Nicolson de $O(\Delta t^2)$.

5.2 Conclusões do trabalho

Considerando as análises desenvolvidas no presente trabalho obtiveram-se as seguintes conclusões:

- O modelo da TCEG com resolução de EDP para o computo da temperatura granular com a condição de contorno de Johnson e Jackson (1987) foi superior aos modelos da TCEG_alg. e da TCEG_edp_nsw, pois mostrou resultados mais coerentes fisicamente.

- O modelo da TCEG_edp_nsw apresentou resultados mais adequados para a temperatura granular que o modelo TCEG_alg. por não tratar o computo da temperatura granular de forma simplificada. Entretanto, para os perfis de fração de vazio das bolhas, ambos modelos apresentaram resultados semelhantes.
- O uso da TCEG_alg. deve ser priorizado quando se faz necessário um tempo de simulação menor.
- Ao simular o modelo da TCEG algébrica com o diâmetro de partícula menor, ficou-se evidente que estas por pertencerem a outro grupo devem ser tratadas de modo diferente, analisando outras forças atuantes no contato partícula-partícula. E assim, ajustando as equações que regem tal escoamento.
- Mesmo utilizando a TCEG_edp_JJ para simulação com partículas de diâmetros menores não se obteve resultados coerentes fisicamente devido a desestabilização do leito.
- O esquema numérico Superbee, por ser de alta ordem e não-difusivo, representou bem o modelo físico simulado.

5.3 Recomendações para futuros trabalhos

A seguir sugerem-se algumas propostas para futuras pesquisas na área.

- Obtenção de dados experimentais dos campos de velocidade, frações volumétricas, temperatura granular, entre outras variáveis.
- Implementação de modelos de turbulência em ambas as fases, ou apenas na fase gasosa.
- Simulação do escoamento considerando várias fases sólidas com intuito de estudar segregação e obter resultados de simulação mais próximos das condições reais de operação da instalação quando for esse o caso.
- Ajuste do modelo hidrodinâmico para outros diâmetros de partículas, levando-se em conta outras forças atuantes, como as forças coesivas.
- No que se refere aos efeitos de atrito e cinética sugere-se uma transição suave entre os regimes plástico e viscoso para a formulação do tensor das tensões do particulado.
- No caso da TCEG com resolução de EDP para o computo da temperatura granular podem-se testar outras condições de contorno.

- Estudo de aplicações em leitos fluidizados como misturas de pós nas indústrias químicas e farmacêuticas através da comparação de resultados de simulações numéricas com dados experimentais obtidos de bancadas
- No âmbito numérico, diversos rumos podem ser adotados, por exemplo, estudo de refinamento de malhas e diferentes esquemas numéricos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Anderson, T.; Jackson, R. A fluid mechanical description of fluidized beds. *Ind. Eng. Chem. Fund.*, v. 6, n.4, p.527–534, 1967.

Agrawal, K.; Loezos, P.N.; Syamlal, M.; Sundaresan, S. The role of meso-scale structures in rapid gas–solid flows. *Journal of Fluid Mechanics*, v.445, p.151-185, 2001.

Arnold, G.S.; Drew, D.A.; Lahey Jr, R.T. An assessment of multiphase flow models using the second Law of thermodynamics. *International Journal of Multiphase Flow*, v.16, n.3, p.481-494, 1990.

Boemer, A.; Qi, H.; Renz, U.; Vasquez, S.; Boysan, F. Eulerian computation of fluidized hydrodynamics – a comparison of physical models. *In: Proc. 13 th Int. Conf. On Fluidized Bed Combustion*, v.2, p.775-787, 1995.

Boemer, A.; Qi, H.; Renz, U. Eulerian simulation of bubble formation at a jet in a two-dimensional fluidized bed. *International Journal of Multiphase flow*, v.23, n.5, p.927–944, 1997.

Bouillard, J.; Gidaspow, D.; Lyczkowski, R. Hydrodynamics of fluidization: fast-bubble simulation in a two-dimensional fluidized bed. *Powder Technology*, v.66, p.107–118, 1991.

Cabezas-Gómez, L. *Um estudo da modelagem matemática e simulação numérica de escoamentos bifásicos gás – sólidos*. Dissertação de mestrado, Escola de Engenharia de São Carlos, USP, São Carlos, Brasil, 1999.

Cabezas-Gómez, L. *Modelagem matemática e simulação numérica de escoamentos bifásicos gás-sólido em colunas de leito fluidizado circulante*. Tese de Doutorado, Escola de Engenharia de São Carlos, USP, São Carlos, Brasil, 2003.

Carnahan, N.F.; Starling, K.E. Equations of state for non-attracting rigid spheres. *Journal of Chemical Physics*. v.51, p. 635-636, 1969

Chapman, S.; Cowling, T.G. *The mathematical theory of non-uniform gases*. 2nd Ed. Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 1960.

Collins, R. An extension of Davidson's theory of bubbles in fluidised beds. *Chemical Engineering Science*, v. 20, p.747–755, 1965.

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

Delhaye, J.M.; Achard, J.L. On the averaging operators introduced in two-phase flow modeling. *Specialists Meeting on Transient Two Phase Flow*, Agosto 3-4, Toronto 1976.

Delhaye, J.M.; Achard, J. L. On the use of averaging operators in two-phase flow modeling. *Thermal and hidraulic aspects of nuclear reactor safety, 1: Light water reactors*. ASME Winter meeting, 1977.

Ding, J. *A fluidization model using kinetic theory of granular flow*. Tese de Doutorado, Illinois Institute of Technology, Chicago. 1990.

Ding, J.; Gidaspow, D. A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow. *AICHE Journal*, v.36, p.523-538, 1990.

Drew, D.A. Mathematical modeling of two-phase flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v.15, p.216-291, 1983.

Du, W.; Bao, X.; Xu, J.; Wei, W. Computational fluid dynamics (CFD) modeling of spouted bed: Assessment of drag coefficient correlations. *Chemical Engineering Science*, v.61, p.1401-1420, 2006.

Enwald, H.; Peirano, E.; Almstedt, A.E. Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. *International Journal of Multiphase Flow*, v.22 (1), p.21–66, 1996.

Ergun, S. Fluid flow through packed columns. *Chemical Engineering Progress*, v.48 (2), p.89–94, 1952.

Ferreira, V.G. *Análise e implementação de esquemas de convecção e modelos de turbulência para simulação de escoamentos incompressíveis envolvendo superfícies livres*. Ph.D. Thesis, Department of Computer Science and Statistic, USP, São Carlos, Brazil, 2001.

Ferziger, J.H.; Peric, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. 2nd Ed. Springer-Verlag, New York, 1999.

Fortuna, A.O. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações*. Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2000.

Garside, J.; Al-Dibouni, M.R. Velocity-voidage relationships for fluidization and sedimentation. *I&EC Process Des. Dev.*, v.16, p.206-214, 1977.

Geldart, D. Types of gas fluidization. *Powder Technology*. v.7, p.285-292, 1973.

Gidaspow, D.; Ettehadieh, B. Fluidization in two-dimensional beds with a jet 2. Hydrodynamics modeling. *Ind. Eng. Chem. Fund.*, v.22, p.193-201, 1983.

Gidaspow, D. *Multiphase Flow and Fluidization*, Academic Press, London, 1994.

Guenther, C.; Syamlal, M. The effect of numerical diffusion on simulation of isolated bubbles in a gas-solid fluidized bed, *Powder Technology*, v.116, p.142–154, 2001.

Goldschmidt, M.J.V.; Kuipers, J.A.M.; Van Swaaij, W.P.M. Hydrodynamic modelling of dense gas-fluidised beds using the kinetic theory of granular flow: effect of coefficient of restitution on bed dynamics. *Chemical Engineering Science*, v.56, p.571-578, 2001.

Harlow, F.H.; Amsdem, A.A. Numerical calculation of multiphase fluid flow. *Journal of Computational Physics*, v.17, p.19-52, 1975.

Harten, A. On a class of high resolution total-variation-stable finite-difference schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, v.21, n.1, p.1-23, 1984.

Ishii, M. *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow*. Eyrolles. Paris 1975.

Ishii, M.; Mishima, K. Two-fluid model and hydrodynamic constitutive relations. *Nuclear Engineering and Design*, v. 82, p.107-126, 1984.

Jackson, R. The mechanics of fluidized beds: Part 1. The stability of the state of uniform fluidization, *Trans. Inst. Chem. Eng.*, v. 41, p.13–21, 1963.

Jenike, A.W. A Theory of flow of particulate solids in converging and diverging channels based on a conical yield function. *Powder Technology*, v.50, p.229-236, 1987.

Jenkins, J.T.; Cowin, S.C. Theories for flowing granular materials. *Mech. Applied to Transport of Bulk Materials*, *Ap. Mech. Div. of ASME*, 31, 79-89, 1979.

Jenkins, J.; Savage, S.B. A theory for rapid flow of identical smooth, nearly elastic spherical particles. *Journal of Fluid Mechanics*, v.130, p.187–202, 1983.

Johnson, P.C.; Jackson, R. Frictional-collisional constitutive relations for granular materials, with applications to plane shearing. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 176, p. 67-93, 1987.

Kaibara, M.K.; Ferreira, V.G.; Navarro, H.A. Upwinding finite-difference schemes for convection dominated problems. Part I: Theoretical results. *Notas do ICMC-USP São Carlos*, 2004.

Koch, D.L. Kinetic theory for a monodisperse gas-solid suspension. *Physics of Fluids A*, v.2, n.10, p.1711-1723, 1990.

Kuipers, J.A.M.; van Duin, K.J.; van Beckum, F.P.H.; van Swaaij, W.P.M. A numerical model of gas-fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, v.47, n.8, p.1913-1924, 1992.

Kuipers, J.A.M.; van Duin, K.J.; van Beckup, F.P.H.; van Swaaij, W.P.M. Computer simulation of the hydrodynamics of a two-dimensional gas-fluidized bed. *Comput. Chem. Eng.*, v. 17, p.839–858, 1993.

Lu, H.; He, Y.; Liu, W.; Ding, J.; Gidaspow, D.; Bouillard, J. Computer simulations of gas–solid flow in spouted beds using kinetic–frictional stress model of granular flow. *Chemical Engineering Science*, v.59, n.4, p. 865–878, 2004.

Lun, C.K.; Savage, S.B.; Jeffrey, D. J. Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in couette flow and slightly inelastic particles in a general flow field. *Journal of Fluid Mechanics*, v.140, p.223–256, 1984.

Ma, D.; Ahmadi, G. An equation of state for dense rigid sphere gases. *Journal of Chemical Physics*, v. 84, p. 3449-3450, 1986.

Ma, D.; Ahmadi, G. A kinetic-model for rapid granular flows of nearly elastic particles including interstitial fluid effects. *Powder Technology*, v.56, n.3, p. 191-207, 1988.

Makkawi, Y.T.; Wright, P.C. Electrical capacitance tomography for conventional fluidized bed measurements – remarks on the measuring technique. *Powder Technology*, v.148, p.142-157, 2004.

Makkawi, Y.T.; Wright, P.C.; Ocone, R. The effect of friction and inter-particle cohesive forces on the hydrodynamics of gas–solid flow: A comparative analysis of theoretical predictions and experiments. *Powder Technology*, v.163, p.69-79, 2006.

Massimilla, L.; Donsi, G. Cohesive force between particles of fluid bed catalyst. *Powder Technology*, v.15, p.253-260, 1976.

Molerus, O. Interpretation of Geldart type A, B, C and D powders by taking into account interparticle forces. *Powder Technology*, v.33, p.81-87, 1982.

Murray, J. On the mathematics of fluidization: Part 1. Fundamental equations and wave propagation, *Journal of Fluid Mechanics*, v.21, p.465–493, 1965.

Patankar, S.V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere, New York, 1980.

Peirano, E.; Leckner, B. Fundamentals of turbulent gas-solid flows applied to circulating fluidized bed combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, v.24, n.4, p.259-296, 1998.

Pritchett, J.W.; Blake, T.R.; Garg, S.K. A numerical model of gas fluidized beds. *AIChE Symposium Series*, v.74, n.176, p.134-148, 1978.

Richardson, J.F.; Zaki, W.N. Sedimentation and fluidization: part I. *Transactions of Institute of Chemical Engineering*, v. 32, n.1, p.35–53, 1954.

Rivard, W.C.; Torrey, M.D. K-FIX: A computer program for transient, two-dimensional, two-fluid flow, *LA-NUREG-6623, Los Alamos National Laboratory*, Los Alamos, 1977.

Sanyal, J.; Cesmebasi, E. On the effect of various momentum transfer coefficient models on bubble dynamics in a rectangular gas fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, v.49, p.3955-3966, 1994

Savage, S.B. Granular flows down rough inclined. Proceedings of U. S./Japan Seminar on new models and constitutive relations in the mechanics of granular materials, Ithaca, ed. J. T. Jenkins and M. Satake (Eds), Elseviers Science Publishers, Amsterdam, 261-282, 1982.

Savage, S.B. Granular Flows at High Shear Rates. In: MEYER, R.E., ed. *Theory of Dispersed Multiphase Flow*. New York, Academic Press, p.339-358, 1983.

Schaeffer, D.G. Instability in the evolution equations describing incompressible granular flow. *Journal of Differential Equations*, v.66, p.19–50, 1987.

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

Sinclair, J.L.; Jackson, R. Gas-solid flows in a vertical pipe with particle-particle interactions. *AIChE Journal*, v.35, n.9, p.1473-1486, 1989.

Spalding, D.B. Numerical computation of multi-phase fluid flow and heat transfer, in *Recent Advances in Numerical Methods in Fluids*, C. Taylor *et al.*, eds, Pineridge Press. 1980.

Srivastava, A.; Sundaresan, S. Analysis of a frictional-kinetic model for gas-particle flow. *Powder Technology*, v.129, p.72–85, 2003.

Stewart, P. Isolated bubbles in fluidised beds-theory and experiment. *Tran. Inst. Chem. Eng.*, v.46, p.60–68, 1968.

Sweby, P.K. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservative laws, *SIAM J. Num. Anal.*, v.21, p.995-1011, 1984.

Syamlal, M.; O'Brien, T.J. Simulation of granular layer inversion in liquid fluidized beds. *International Journal of Multiphase Flow*, v.14, p.473–481, 1988.

Syamlal, M.; O'Brien, T.J. Computer simulation of bubbles in a fluidized bed. In: *Fluidization and Fluid Particle Systems: Fundamentals and Applications*, Ed. L.-S. Fan, AIChE Symposium Series, v.85, n.270, p.22-31, 1989.

Syamlal, M.; Rogers, W.; O'Brien, T.J. MFIX Documentation: Theory Guide. U.S. Department of Energy, Morgantown Energy Technology Center, Technical Note, DOE/METC-95/1013, 1993.

Syamlal, M. MFIX Documentation: Numerical Technique, EG and G *technical report*, DE-AC21-95M31346, 1998.

Therdthianwong, A. *Hydrodynamic and SO₂ sorption in a circulating fluidized bed*. Tese de Doutorado, Illinois Institute of Technology, Chicago, 1994.

Tuzun, U.; Houlsby, G.T.; Nedderman, R.M.; Savage, S.B. The flow of granular materials-II, velocity distributions in slow flow. *Chemical Engineering Science*, v.37, n.12, p.1691-1789, 1982.

Van Wachen, B.G.M.; Schouten, J.C.; Krishna, R.; den Bleek, C.M. Eulerian simulations of bubbling behaviour in gas-solid fluidized beds. *Computers Chemical Engineering*, v. 22, p. s299-s306, 1998

Wen, C.Y.; Yu, Y.H. Mechanics of fluidization. *Chemical Engineering Progress Symposium Series*, v.62, p.100–111, 1966.

White, F. *Viscous fluid flow*. Mc- Graw Hill, 2nd ed., 1991

APÊNDICES

APÊNDICE A – Teoremas utilizados para obter as equações de balanço locais instantâneas generalizadas

Teoremas de Leibniz

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

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

Teorema de Gauss-Ostragradskii

Função escalar (tensor de ordem zero)

$$\int_V \vec{\nabla} \circ f dV = \int_A f \circ \hat{n} dA \quad (\text{A2})$$

Função vetorial (tensor de primeira ordem)

$$\int_V \vec{\nabla} \circ \vec{f} dV = \int_A \vec{f} \circ \hat{n} dA \quad (\text{A3})$$

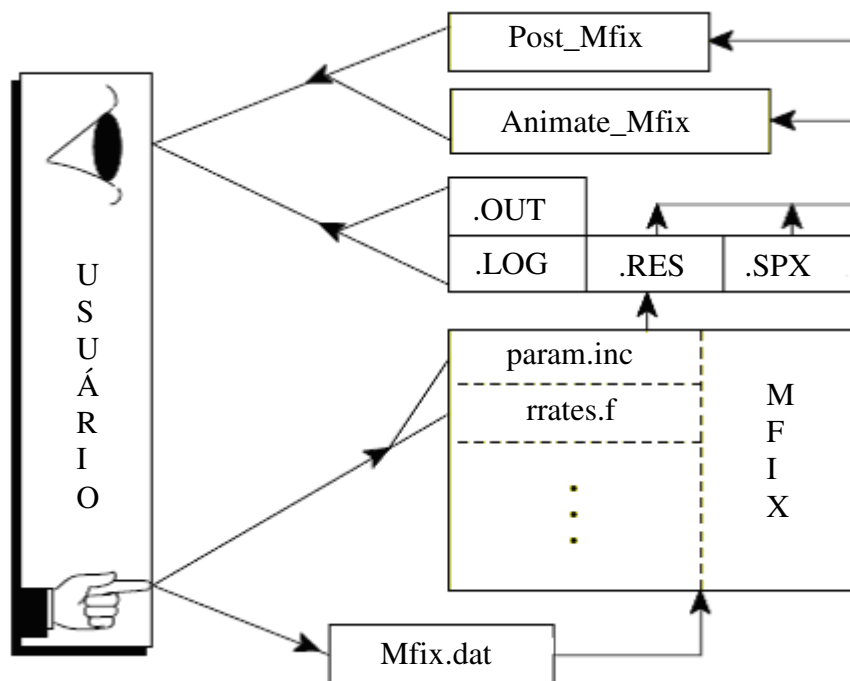
Função tensorial (tensor de segunda ordem)

$$\int_V \vec{\nabla} \circ \overline{\overline{f}} dV = \int_A \overline{\overline{f}} \circ \hat{n} dA \quad (\text{A4})$$

APÊNDICE B – O Código Computacional MFIX

Arquivos de entrada e saída do MFIX

Uma corrida do MFIX executável é controlada com a ajuda de um arquivo de entrada chamado `mfix.dat` e vários arquivos em FORTRAN definidos pelo usuário. O MFIX produz dois arquivos texto que o usuário pode acessar diretamente e oito arquivos binários que o usuário acessa através dos dois códigos de pós – processamento, que são o `Post_Mfix` e o `Animate_Mfix`. A interface do usuário do MFIX está esquematicamente mostrada na figura abaixo.



O programa MFIX consiste de vários arquivos de entrada que são subrotinas, cada uma com um único objetivo, as quais podem ser modificadas pelo usuário.

Os arquivos texto de saída são: `.LOG` e `.OUT`. No `.LOG` contém mensagens de erro, informações sobre convergência e número de iterações e mensagens sobre os arquivos de saída. Na primeira parte do arquivo texto `.OUT` contém dados do `mfix.dat` e valores padrão especificados no MFIX. Se o `OUT_DT` é definido, o arquivo também contém dados sobre o campo de variáveis escritas em intervalos `OUT_DT`. Para problemas com grande número de nós, é recomendado não definir `OUT_DT`, para evitar um arquivo muito volumoso.

Existem mais dois tipos de arquivos de saída: O .RES é um arquivo binário de dupla precisão contendo todos os dados necessários para reiniciar uma corrida. É atualizado em intervalos RES_DT. Apenas o conjunto de dados mais recente é mantido neste arquivo. Outro arquivo binário é o .SPx, este de simples precisão, contendo dados relativos a diversos campos de variáveis. Os arquivos são aumentados em intervalos SPx_DT. Assim mantém todos os conjuntos de dados.

Técnica de Solução na Simulação do MFIX

No início de cada passo no tempo todas as quantidades explícitas são calculadas. Então, as equações diferenciais são resolvidas sequencialmente dentro do looping da iteração. As células são visitadas, uma de cada vez, a partir da célula com o menor índice até a célula com o maior índice. A convergência ocorre quando todas as equações discretizadas são satisfeitas simultaneamente em todas as células sem ter que fazer ajustes em qualquer uma delas.

A solução começa com uma tentativa para o campo de pressão. Primeiro, é verificado se a equação de continuidade do gás é satisfeita. Se isso não acontecer, a pressão é ajustada utilizando o método de Newton ou o método da secante. Se os sólidos estão empacotados no leite, uma pressão para sólido é ajustada de modo que a fração de vazio e a função da pressão do sólido sejam satisfeitas.

Todas as taxas de reação são calculadas. Se a equação de energia ou as equações de balanço de espécies precisam ser resolvidas, resolvem-se por temperaturas e frações mássicas de espécies. A densidade do fluido é atualizada. As equações de movimento do fluido e sólido são resolvidas para as componentes de velocidade. As equações da continuidade dos sólidos (no caso de ter mais de uma) são resolvidas para a fração volumétrica de sólido. A fração de vazio é então calculada subtraindo a soma das frações de sólido da unidade.

As etapas acima completam um passo da iteração no interior de uma célula. A iteração no interior da célula continua até que a equação de continuidade do fluido e a equação da pressão do sólido (apenas para as regiões empacotadas) sejam simultaneamente satisfeitas ou o número de iterações exceder um limite especificado.

As iterações nos interiores das células continuam por todas as células numéricas para completar um passo da iteração externa. A iteração externa continua até a solução atingir o ponto em que não são necessárias iterações interiores à célula, o que implica que a solução

existente satisfaz simultaneamente todas as equações discretizadas em todas as células. Quando tal convergência é obtida ou quando o número de iterações externas excede um limite especificado, os cálculos passam para o próximo passo no tempo.

Após as iterações para a pressão do fluido e dos sólidos terem convergido, é verificado se a solução satisfaz a equação de energia e o balanço das equações de espécies. Se a solução não satisfaz essas equações, não são feitas iterações interiores. Mas uma iteração externa é forçada.