



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA  
"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"



Efeitos numéricos na simulação de  
escoamentos gás-sólido em leito fluidizado  
borbulhante utilizando a teoria cinética  
dos escoamentos granulares

Meire Pereira de Souza

Bauru

2009



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA  
"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"



# Efeitos numéricos na simulação de escoamentos gás-sólido em leito fluidizado borbulhante utilizando a teoria cinética dos escoamentos granulares

Meire Pereira de Souza

Orientador: Hélio Aparecido Navarro

Dissertação apresentada à faculdade de Engenharia da Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", Campus de Bauru, como parte dos requisitos para obtenção do título de mestre em Engenharia Mecânica.

Bauru

2009

Dedico este trabalho aos meus amados  
pais **Luiza** e **Renato** (in memoriam).

# Agradecimentos

A Deus, pela dádiva da vida, por ter me concedido sabedoria para a realização deste trabalho, por me abençoar e me confortar nas horas difíceis.

Aos meus pais Luiza e Renato (in memoriam) pelo amor incondicional, pelos ensinamentos, e pelo apoio em todos os momentos da minha vida.

Aos meus irmãos Marisa, Amauri, Mauricéia e Renato Filho que sempre me apoiaram em tudo, que são e sempre serão meus melhores amigos.

Ao Francisco, pelo apoio, amor e carinho.

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

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

Aos Professores do Departamento de Engenharia Mecânica da Unesp, Campus de 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, meu muito obrigada.

“Aprender é a única coisa de que a mente nunca se cansa, nunca tem medo e nunca se arrepende”

**Leonardo da Vinci**

# Sumário

<b>Simbologia Principal</b>	<b>vi</b>
<b>Resumo</b>	<b>ix</b>
<b>Abstract</b>	<b>x</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
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 . . . . .	3
1.3 Modelagem numérica aplicada a fluidização . . . . .	3
1.4 Objetivos e apresentação do trabalho . . . . .	5
<b>2 Teoria Hidrodinâmica</b>	<b>7</b>
2.1 Introdução . . . . .	7
2.2 Formulação Euleriana-Euleriana clássica . . . . .	9
2.3 Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares . . . . .	9
2.4 Formulação do modelo das duas fases separadas . . . . .	12
2.5 Modelo hidrodinâmico . . . . .	13
2.5.1 Leis de fechamento . . . . .	14
<b>3 Metodologia de Solução Numérica</b>	<b>22</b>
3.1 Introdução . . . . .	22
3.2 Estudo sobre a discretização de termos de convecção e difusão . . . . .	23
3.2.1 Esquemas de primeira ordem . . . . .	23
3.2.2 Esquemas de alta ordem . . . . .	25
3.2.3 Variável normalizada para o limitador de fluxo . . . . .	27
3.2.4 Fator de ponderação “Downwind” . . . . .	30

3.2.5	Equação de transporte escalar . . . . .	34
3.3	Solução numérica do modelo hidrodinâmico para escoamento gás-sólido . . . . .	38
3.3.1	Equação da conservação da quantidade de movimento . . . . .	40
3.3.2	Eliminação parcial do acoplamento na interface . . . . .	44
3.3.3	Equação para correção da pressão do fluido . . . . .	46
3.3.4	Equação para a correção da fração de volume do sólido . . . . .	50
3.4	Metodologia computacional . . . . .	55
<b>4</b>	<b>Resultados</b>	<b>58</b>
4.1	Introdução . . . . .	58
4.2	Características do leito para as simulações numéricas . . . . .	58
4.3	Resultados das simulações . . . . .	60
4.3.1	Comparação entre os dois esquemas de discretização para os termos convectivos . . . . .	60
4.3.2	Considerações sobre a influência da malha computacional nos resultados de simulação . . . . .	71
<b>5</b>	<b>Conclusões e recomendações</b>	<b>78</b>
5.1	Considerações gerais . . . . .	78
5.2	Conclusões . . . . .	79
5.3	Recomendações para futuros trabalhos . . . . .	80
<b>A</b>	<b>Teoremas</b>	<b>89</b>
A.1	Teorema de Leibniz . . . . .	89
A.2	Teorema de Gauss-Ostragradskii . . . . .	89
<b>B</b>	<b>"Convection Boundedness Criterion"(CBC)</b>	<b>90</b>
B.1	Crítério de Harten . . . . .	91
B.2	Exemplos de limitadores . . . . .	93

# Lista de Figuras

1.1	Diferentes regimes de fluidização quando aumenta-se a velocidade do gás. . . . .	2
1.2	Leito fluidizado borbulhante com jato central. . . . .	5
2.1	Método das médias para modelagem de escoamento bifásico Ishii (1975) e Ishii e Mishima (1984) . . . . .	8
2.2	Procedimento geral simplificado para formulação da TCEG, baseado no trabalho de Therdtianwong (1994). . . . .	11
2.3	Procedimento geral para formulação do modelo de duas fases apresentado por Enwald, Peirano e Almstedt, (1996) . . . . .	13
2.4	Regime plástico e viscoso para escoamentos granulares . . . . .	16
2.5	Função de distribuição radial $g_0$ Syamlal, Rogers e O'Brien (1993). . . . .	18
2.6	Viscosidade dinâmica do sólido Syamlal, Rogers e O'Brien (1993). . . . .	19
3.1	Volume de controle típico em uma malha unidimensional . . . . .	24
3.2	Localização dos nós baseados na direção do escoamento. . . . .	28
3.3	Restrições do Limitador Universal no Diagrama de Variável Normalizada. . . . .	29
3.4	Restrições do Limitador Universal em termos do fator $DWF$ . . . . .	31
3.5	Fatores Downwind em função de $\tilde{\phi}_C$ . . . . .	32
3.6	Localização dos nós. . . . .	33
3.7	Volume de controle para a componente x da equação de quantidade de movimento. . . . .	41
3.8	Condição de Deslizamento livre e de Não Deslizamento na parede leste. . . . .	43
3.9	Condições de contorno de correção da pressão. . . . .	50
3.10	Interface do usuário MFIX . . . . .	56
4.1	Geometria e condições iniciais e de contorno usadas na simulação considerando o sistema de coordenadas cartesianas . . . . .	60
4.2	Contorno da fração de vazio ( $\epsilon_g$ ), para o esquema FOUP . . . . .	62
4.3	Contorno da fração de vazio ( $\epsilon_g$ ) (Bouillard, Gidaspow e Lyczkowski (1991)) . . . . .	63

4.4	Contorno da fração de vazio ( $\epsilon_g$ ), utilizando o esquema FOUP (Guenther e Syamlal (2001)) . . . . .	63
4.5	Contorno da fração de vazio ( $\epsilon_g$ ), para o esquema Superbee . . . . .	64
4.6	Contorno da fração de vazio ( $\epsilon_g$ ), utilizando o esquema Superbee (Guenther e Syamlal (2001)) . . . . .	65
4.7	Perfis radiais médio no tempo da velocidade, para a fase sólida 0,15 metros acima da entrada do leito . . . . .	65
4.8	Velocidade axial média no tempo, 0,05 metros acima da entrada do leito para os esquemas FOUP e Superbee . . . . .	67
4.9	Velocidade axial média no tempo, 0,20 metros acima da entrada do leito para os esquemas FOUP e Superbee . . . . .	67
4.10	Velocidade axial média no tempo, 0,29 metros acima da entrada do leito para os esquemas FOUP e Superbee . . . . .	68
4.11	Contorno da temperatura granular ( $\theta$ ), em $t=0,36s$ . . . . .	69
4.12	Fração de vazio ( $\epsilon_g$ ) utilizando o esquema FOUP . . . . .	70
4.13	Fração de vazio ( $\epsilon_g$ ) utilizando o esquema Superbee . . . . .	70
4.14	Fração de vazio ( $\epsilon_g$ ), em $t = 0,36s$ . . . . .	71
4.15	Fração de vazio ( $\epsilon_g$ ), em $t = 0,59s$ . . . . .	72
4.16	Fração de vazio ( $\epsilon_g$ ), instantes antes de atingir à superfície do leito . . . . .	73
4.17	Dados experimentais de Kuipers <i>et al.</i> (1993) . . . . .	74
4.18	Velocidade axial média no tempo, para a fase sólida, em várias alturas do leito, para as quatro malhas distintas . . . . .	75
4.19	Velocidade axial da fase sólida ( $V_s$ ) . . . . .	76
B.1	Representação do diagrama CBC em variáveis normalizadas. . . . .	91

# Lista de Tabelas

3.1	Fórmulas de Discretização em termos do fator DWF. . . . .	31
4.1	Dados numéricos da simulação . . . . .	59
4.2	Modelo hidrodinâmico utilizado nas simulações . . . . .	61
4.3	Tempo de processamento (CPU) utilizado nas simulações . . . . .	77

# Simbologia Principal

$A$	Área da face do volume de controle, [m <sup>2</sup> ].
$C_{D_s}$	Função de arrasto para uma partícula num meio infinito.
$d_p$	Diâmetro de partícula, [m].
$\overline{D}$	Tensor taxa de deformação, [s <sup>-1</sup> ].
$e$	Coefficiente de restituição para a colisão entre as partículas sólidas.
$\vec{f}$	Força de interação entre as fases, [N/m <sup>3</sup> ].
$\vec{g}$	Campo gravitacional, [m/s <sup>2</sup> ].
$g_0$	Função de distribuição radial.
$\overline{I}$	Tensor unitário.
$I_{2D}$	Segundo invariante do tensor taxa de deformação.
$p_g$	Pressão da fase gasosa, [Pa].
$p_s$	Pressão da fase sólida, [Pa].
$p_k$	Pressão da fase $k$ , [Pa].
$Re_s$	Número adimensional de Reynolds para fase sólida.
$tr$	Traço da matriz.
$\vec{v}_g$	Velocidade média local da fase gasosa, [m/s].
$\vec{v}_s$	Velocidade média local da fase sólida, [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, [m/s].

## Símbolos Gregos

$\beta$	Coeficiente de arrasto da interface.
$\Gamma$	Coeficiente de difusão.
$\epsilon_g$	Fração de vazio.
$\epsilon_s$	Fração volumétrica da fase sólida.
$\theta$	Temperatura granular, [m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ].
$\lambda_g$	Viscosidade volumétrica da fase gasosa, [kg/ms].
$\lambda_s$	Viscosidade volumétrica da fase sólida, [kg/ms].
$\mu_g$	Viscosidade dinâmica do gás, [kg/ms].
$\mu_s$	Viscosidade dinâmica do sólido, [kg/ms].
$\rho_g$	Densidade do gás, [kg/m <sup>3</sup> ].
$\rho_s$	Densidade do sólido, [kg/m <sup>3</sup> ].
$\rho'_m$	Densidade efetiva macroscópica da fase m (gás ou sólido), [kg/m <sup>2</sup> ].
$\overline{\sigma}_g$	Tensor das tensões para fase gasosa, [Pa].
$\overline{\sigma}_s$	Tensor das tensões para fase sólida, [Pa].
$\overline{\sigma}_k$	Tensor das tensões da fase $k$ , [Pa].
$\overline{\tau}_g$	Tensor das tensões viscosas do gás, [Pa].
$\overline{\tau}_s$	Tensor das tensões viscosas do sólido, [Pa].
$\phi$	Propriedade transportada.

## Sobrescritos

$p$	Regime plástico.
$v$	Regime viscoso.

## Subscritos

- g* Fase gasosa.
- s* Fase sólida.
- w* Face oeste do volume de controle.
- e* Face leste do volume de controle.
- n* Face norte do volume de controle.
- s* Face sul do volume de controle.
- b* Face da base do volume de controle.
- t* Face do topo do volume de controle.

## Abreviaturas e siglas

- 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 Method for Pressure Linked Equations.
- TCEG Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares.

# Resumo

**Souza, M. P. (2008)** *Efeitos numéricos na simulação de escoamento gás-sólido em leito fluidizado borbulhante utilizando a teoria cinética dos escoamentos granulares*. Bauru, 2008. 93p. 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 leito fluidizado borbulhante. Utiliza-se o modelo Euleriano de duas fases separadas formulando o tensor das tensões da fase sólida através da teoria cinética dos escoamentos granulares. As simulações numéricas são realizadas através do código fonte MFIX (*Multiphase Flow with Interphase eXchanges*) desenvolvido no NETL (*National Energy Technology Laboratory*). Os resultados de simulação numérica são avaliados por meio da análise da influência dos seguintes parâmetros: malha computacional e esquemas de discretização dos termos convectivos das equações de conservação. Com base nos estudos teóricos e resultados obtidos durante o trabalho conclui-se que esquemas de primeira, tais como FOUP são altamente difusivos, já os resultados obtidos utilizando o esquema de alta ordem, Superbee, produziu resultados de melhor qualidade para as malhas testadas neste trabalho. Além disso, os resultados mostraram-se bastante dependentes do tamanho da malha computacional.

**Palavras chaves:** escoamentos bifásicos gás-sólido, modelo das duas fases separadas, leitos fluidizados borbulhantes, teoria cinética dos escoamentos granulares, MFIX, simulação numérica, esquemas de discretização, difusão numérica, influência da malha computacional.

# Abstract

**Souza, M. P. (2008)** *Numerical effects on simulation of gas-solid flow in the bubbling fluidized bed using the Kinetic Theory of Granular Flows*. Bauru, 2008. 93p. 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 two-phase flow in a bubbling fluidized bed. It is used the Eulerian gas-solid two-fluid model and the solid phase stress tensor is modeled considering the kinetic theory of granular flows. The numerical simulations were developed using the MFIX (*Multiphase Flow with Interphase eXchanges*) code developed in NETL (*National Energy Technology Laboratory*). The numerical diffusion is analyzed considering a single bubbling detachment and its movement process in a two-dimensional bubbling fluidized bed using the bubble shape as a metric for results description. The influence of computational grid it is also analyzed. It is concluded that SuperBee scheme produces the better results and analysis about estimating uncertainty in grid refinement should be studied.

**Keywords:** two-phase gas-solid flow, two-fluid model, bubbling fluidized bed, kinetic theory of granular flows, MFIX, numerical simulation, discretization schemes, numerical diffusion, computational grid.

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Aplicações dos escoamentos gás-sólido em leitos fluidizados

A fluidização em escoamentos gás-sólido constitui uma das mais importantes aplicações industriais que envolvem escoamentos bifásico. Entre as variadas aplicações dos escoamentos gás-sólido, duas são mais representativas e 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, estes são altamente influenciados 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. Um tipo são os reatores de leito fluidizado borbulhante (LFB), e outro os reatores de leito fluidizado circulante (LFC) que 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. 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 pode-se definir bolhas como regiões com pouco ou sem sólido.

Por operarem em regime denso, os leitos fluidizados borbulhante apresentam uma alta concentração para a fração de volume dos sólidos ( $\epsilon_s$ ), porém com o aumento da velocidade superficial do gás, a concentração média dos sólidos diminui, e diferentes regimes de fluidização são encontrados (Figura 1.1).

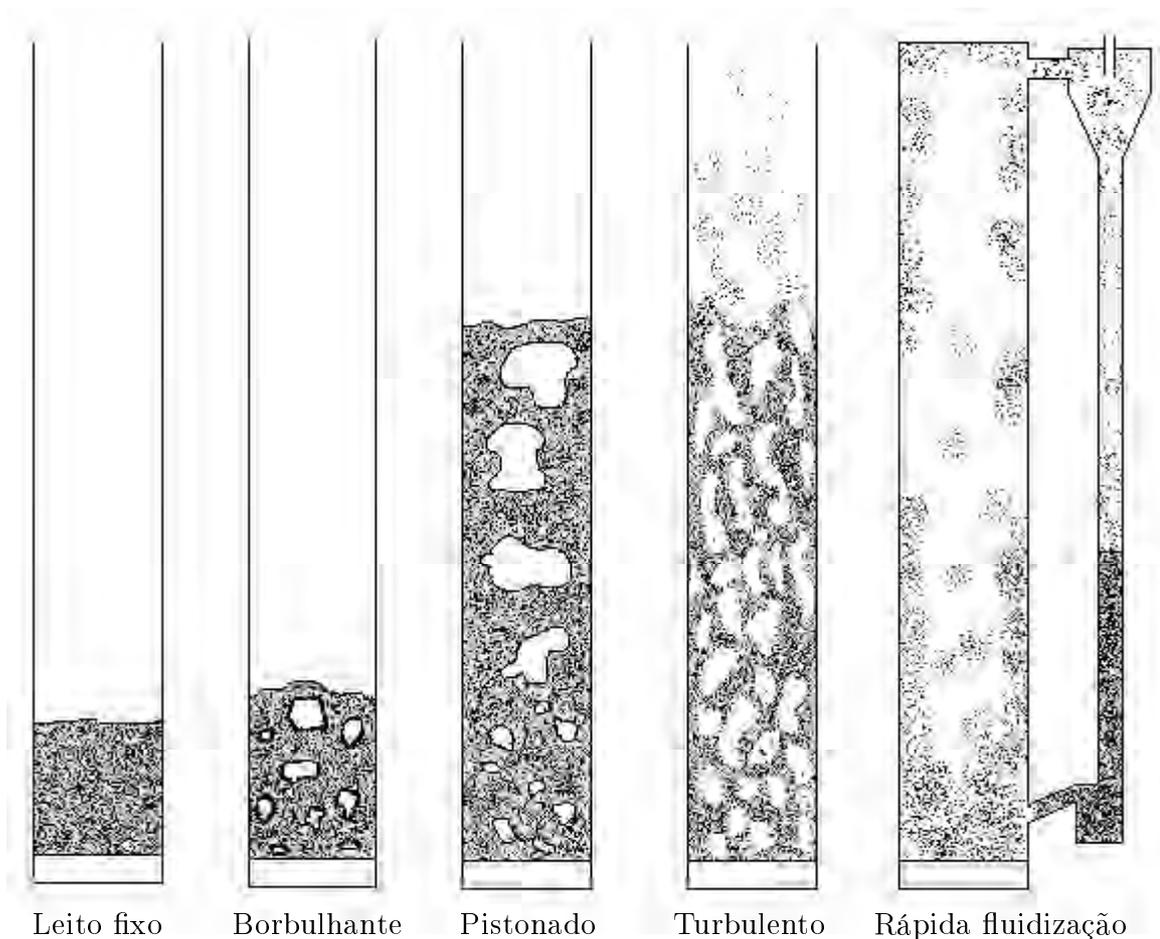


Figura 1.1: Diferentes regimes de fluidização quando aumenta-se a velocidade do gás.

O regime de rápida fluidização prevalecem em leito fluidizados circulantes, onde a fração de volume dos sólidos é geralmente inferior a 10% ( $\epsilon_s < 0.1$ ). Tanto as unidades de LFB quanto as de LFC possuem várias vantagens, tais como:

- Possibilidade de funcionamento contínuo;
- Condições quase isotérmica durante todo leito do reator causada pela rápida mistura dos sólidos;
- Excelentes taxas de transferência de calor e massa entre o gás e as partículas suspensas;
- Excelentes taxas de transferência de calor entre o leito e superfícies imersas.

## 1.2 A Presença da difusão numérica na simulação do escoamento gás-sólido em leitos fluidizados

No estudo de escoamentos bifásicos podem-se descrever os 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 caracterizadas por um diâmetro efetivo e com propriedades de materiais idênticas. Essa idéia de descrever os leitos fluidizados como modelo hidrodinâmico de dois fluidos existe desde a década de 60. Diversos autores descreveram esse modelo na época, Davidson (1961) *apud* Guenther e Syamlal (2001), Jackson (1963), Murray (1965), Collins (1965), Stewart (1968) *apud* Guenther e Syamlal (2001) e Anderson e Jackson (1967) *apud* Guenther e Syamlal (2001).

O conjunto de equações proposto por esses pesquisadores é muito difícil de se resolver, e soluções numéricas para predizerem bolhas apareceram mais tarde nos trabalhos de Gidaspow e Eftehadieh (1983) *apud* Guenther e Syamlal (2001), Syamlal e O'Brien (1989) *apud* Guenther e Syamlal (2001), Bouillard, Gidaspow e Lyczkowski (1991), Gidaspow (1994), Sanyal e Cesmebasi, (1994), Boemer, Qi e Renz (1997), Kuipers *et al.* (1993). 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) *apud* Guenther e Syamlal (2001). Estes estudos levaram ao questionamento se o modelo de dois fluidos, é de alguma forma, incompleto que resultaria na predição de bolhas como formas diferentes das reais ou se a técnica numérica utilizada era inadequada para resolver as equações corretamente. Recentemente, estudos mostraram que um dos problemas está na técnica numérica.

## 1.3 Modelagem numérica aplicada a fluidização

As pesquisas em processos de fluidização gás-sólido tiveram início fundamentalmente na segunda metade do século XX. Os primeiros trabalhos relacionavam-se principalmente a estudos experimentais. Mais recentemente, em função da evolução nos campos das técnicas numéricas e dos recursos computacionais, têm-se desenvolvido consideravelmente as áreas de modelagem matemática e simulação numérica.

Existem diversas aproximações para os termos convectivos das equações de conservação, entre as quais se destacam os esquemas de primeira ordem tais como "FOUP" (First

Order UPwind) de Courant, Isaacson e Reeves (1952), HYBRID de Spalding (1972) entre outros. Embora esses esquemas “upwind” de primeira ordem tenham sido muito empregados por serem incondicionalmente estáveis, eles introduzem uma viscosidade numérica que suaviza a solução. Os esquemas de alta ordem como, por exemplo, o de diferença centrada (CD), upwind de segunda ordem “SOU” de Price, Varga e Warren (1966) e upwind de terceira ordem “QUICK” (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics) de Leonard (1979) melhoram a precisão dos cálculos. Entretanto, esses esquemas apresentam problemas quanto à limitação, ou seja, as soluções podem apresentar oscilações não-físicas nas descontinuidades.

Diversas pesquisas são desenvolvidas para construir esquemas de alta ordem e limitados. Geralmente os esquemas propostos se baseiam em dois conceitos: as restrições TVD (Total Variation Diminishing) e a abordagem em variáveis normalizadas NVD (Normalized Variable Diagram). Este conceito normaliza as variáveis e também a variação do sentido do escoamento. Os esquemas que satisfazem as restrições TVD apresentam soluções livres de oscilação e convergentes. Esquemas que satisfazem as condições TVD são sempre limitados, um exemplo é o esquema “MUSCL” (Monotonic Upstream Scheme for Conservation Laws) de van Leer (1979) em que foi obtida precisão espacial de segunda ordem. Outro esquema de ordem superior é o “Superbee” de Sweby (1984).

Para problemas estacionários, o esquema “SHARP” (Simple High-Accuracy Resolution Program) de Leonard, (1988), formulado no contexto de variáveis normalizadas (NVD), é limitado e possui um bom desempenho. Outro exemplo é o esquema “SMART” (Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport) de Gaskell e Lau (1988), que também utiliza a formulação em variáveis normalizadas e é linear por partes. Ambos os esquemas “SHARP” e “SMART” podem alcançar terceira ordem de precisão. Zhu e Leschziner (1988) propuseram um esquema híbrido chamado “HLPA” (Hybrid Linear Parabolic Approximation Scheme), que possui precisão de ordem dois, e em 1998 Varonos e Bergeles (1998) propuseram o esquema “VONOS” (Variable-Order Non-Oscillatory Scheme) .

Utilizando os conceitos TVD e NVD, Song *et al.* (2000) construíram um esquema com precisão de ordem três e limitado. O esquema foi designado como “WACEB” (Weighted-Average Coefficient Ensuring Boundedness). Resultados numéricos para alguns problemas de convecção mostraram que este esquema possui a habilidade do esquema QUICK em reduzir a difusão numérica sem introduzir oscilações. Entretanto, segundo Alves, Oliveira e Pinho (2003) o esquema WACEB possui problemas de convergência para escoamentos viscoelásticos. Eles propuseram um esquema para esses tipos de escoamentos denominado “CUBISTA” (Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for Treatment of Advection) baseado

em restrições TVD e associado ao número de Courant.

Portanto, a técnica numérica pode influenciar na solução do problema e para cada tipo de aplicação um determinado esquema pode-se adequar melhor.

## 1.4 Objetivos e apresentação do trabalho

A presente pesquisa tem como objetivo investigar os efeitos de difusão numérica quando esquemas de ordens diferentes são utilizados na discretização dos termos convectivos nas equações de conservação para problemas de escoamento gás-sólido em leitos fluidizados borbulhantes.

Para isto, utiliza-se um modelo para a simulação de um leito fluidizado borbulhante com um jato central, conforme figura 1.2. Jatos de ar entram na base do leito com uma velocidade específica e uniforme para manter o leito em um estado de mínima fluidização. Através de um jato central é injetado gás com velocidade superior provocando a formação de bolhas.

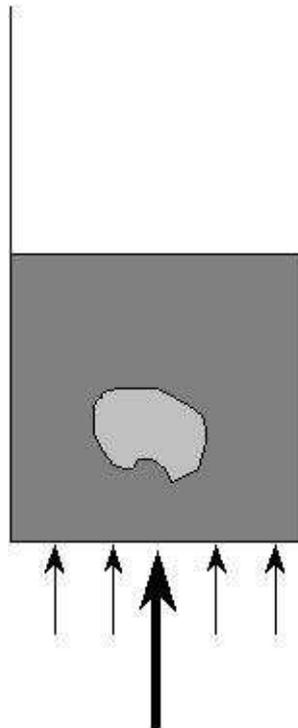


Figura 1.2: Leito fluidizado borbulhante com jato central.

Os parâmetros analisados no presente trabalho são os esquemas de discretização e a malha computacional. A avaliação dos resultados de simulação numérica será efetuada comparando-se parâmetros tais como, fração de vazio, velocidade do gás e do sólido, e temperatura granular, em diferentes seções do leito.

Os experimentos computacionais foram realizados utilizando-se o código MFIX - “Multiphase Flow with Interphase eXchange”, desenvolvido pelo Departamento de Energia NETL (National Energy Technology Laboratory). O MFIX é um código cujo modelo hidrodinâmico descreve reações químicas e transferência de calor em escoamentos densos ou diluídos, escoamentos estes que aparecem tipicamente em processos de conversão de energia e em reatores químicos. Outras informações do código MFIX podem ser obtidas no trabalho de Syamlal, Rogers e O’Brien (1993) e na web: [www.mfix.org](http://www.mfix.org).

O trabalho subdivide-se em cinco capítulos, sendo que no capítulo 1 foi apresentada uma breve descrição do escoamento gás-sólido, com ênfase às suas principais características e aplicações. Apresentou-se também uma motivação para o desenvolvimento do trabalho com uma discussão sobre a difusão numérica na simulação do escoamento gás-sólido em leitos fluidizados borbulhantes. No capítulo 2 é apresentada uma formulação matemática que modela escoamento gás-sólido considerando o modelo de dois fluidos. Nesta etapa são descritas as equações de balanço considerando a abordagem Euleriana-Euleriana para ambas as fases, e também são definidas as equações constitutivas para o fechamento do modelo proposto. O tensor das tensões para a fase sólida é avaliado com base na teoria cinética dos escoamentos granulares, em que a temperatura granular é calculada por uma equação algébrica. No capítulo 3 é feita uma discussão da metodologia de solução numérica utilizada no código MFIX, com ênfase na obtenção das fórmulas discretas dos termos de convecção presentes na equação de transporte de uma propriedade escalar. O capítulo 4 apresenta os resultados de simulação numérica 2D obtidos a partir do modelo hidrodinâmico descrito no capítulo 2. Comparam-se os resultados para os esquemas numéricos de discretização dos termos convectivos presentes nas equações de conservação. Analisa-se a influência do tamanho da malha computacional nos resultados de simulação. No capítulo 5 apresentam-se as conclusões sobre o estudo desenvolvido e propostas para futuros trabalhos.

# Capítulo 2

## Teoria Hidrodinâmica

### 2.1 Introdução

Os fenômenos físicos que ocorrem na modelagem numérica de fluidos utilizam modelos matemáticos que são fundamentalmente baseados em sistemas de equações diferenciais parciais (EDP), com condições iniciais e de contorno prescritas. A obtenção deste sistema fechado de equações segue uma lógica baseada na aplicação de leis físicas de conservação, tais como, a conservação da massa, a segunda lei de Newton da conservação da quantidade de movimento e a conservação de energia. A dificuldade de aplicação destas leis, em escoamentos bifásicos deve-se ao fato de que este tipo de escoamento caracteriza-se pela presença de duas fases diferentes, e de interfaces que separam essas fases entre si. Sendo assim, dependendo da geometria das interfaces existem vários regimes de escoamentos da mistura bifásica caracterizados por diferentes mecanismos de transporte (ISHII (1975)). Tais regimes de escoamentos podem ocorrer simultaneamente em um sistema simples, dificultando a modelagem dos escoamentos bifásicos.

Pode-se contornar teoricamente este problema aplicando localmente as equações de balanço em cada fase, e modelando apropriadamente as condições de contorno na interface. Porém, uma formulação geral baseada em variáveis locais instantâneas e interfaces em movimento, resulta em um problema de multifronteiras com a posição de interfaces desconhecidas, o que torna impraticável para a maioria dos casos a obtenção de modelos matemáticos e portanto de soluções. Ishii e Mishima (1984) resumem os três principais procedimentos adotados pra desenvolver modelos matemáticos para escoamentos bifásicos ou multifásicos:

1. Modelo da Difusão;
2. Volume de Controle;

## 3. Método das Médias.

Tais procedimentos são tratados a partir de um ponto de vista macroscópico, eliminando parcialmente os detalhes da formulação local instantânea.

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

Atualmente o procedimento mais utilizado é o das equações de balanço médias ou método das médias. Por sua vez, esse procedimento, é subdividido em três grupos, dependendo do conceito físico básico usado para formular o problema que se analisa. Segundo Ishii (1975), esses grupos são: médias de Euler, médias de Lagrange e média estatística de Boltzmann. Esses grupos também se subdividem em vários subgrupos, dependendo da variável utilizada para estabelecer as médias. Essa classificação é mostrada na figura 2.1.

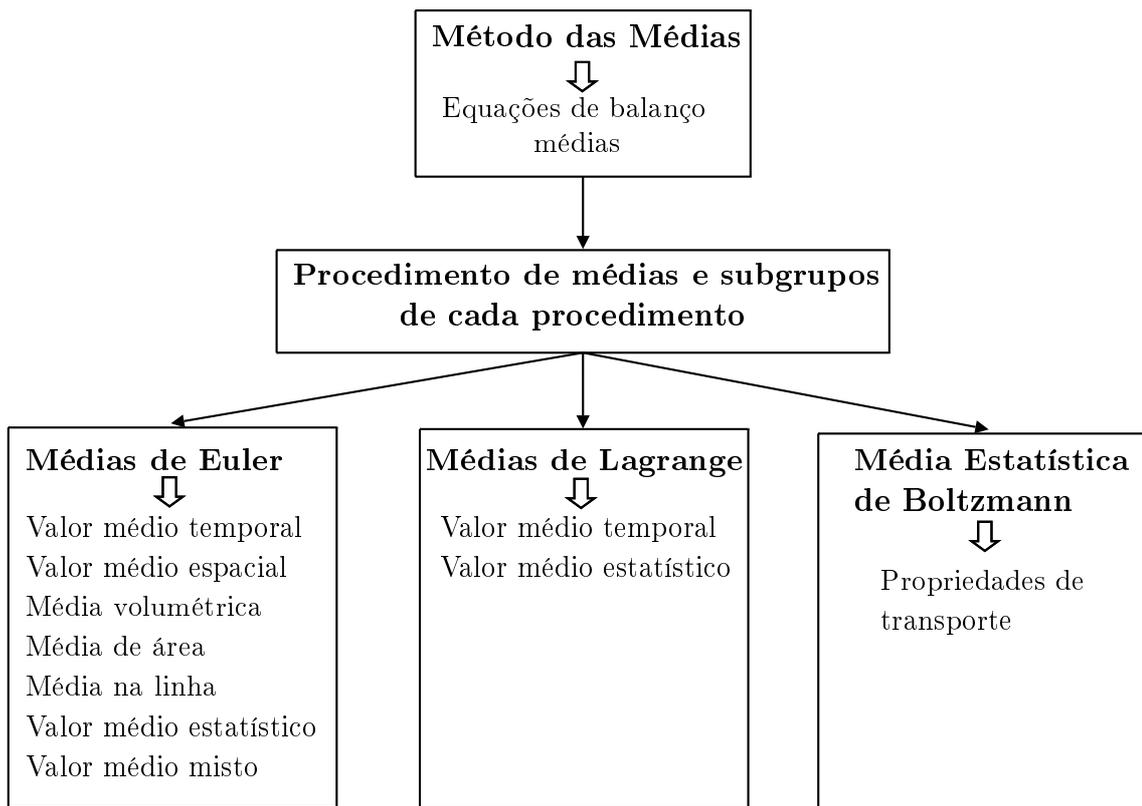


Figura 2.1: Método das médias para modelagem de escoamento bifásico Ishii (1975) e Ishii e Mishima (1984)

De acordo com a figura 2.1, dependendo do procedimento de médias adotado, existem várias formulações diferentes para um sistema bifásico. Neste capítulo apresenta-se duas destas formulações: a formulação Euleriana-Euleriana clássica e a formulação de Euler/Boltzmann

(Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares - TCEG).

## 2.2 Formulação Euleriana-Euleriana clássica

A formulação Euleriana-Euleriana clássica permite a obtenção do modelo denominado *modelo das duas fases separadas*. Este modelo é geralmente obtido utilizando o procedimento de médias de Euler, e constitui uma das principais formulações das equações de campo macroscópicas para um sistema bifásico. O modelo é formulado considerando cada fase em separado, em termos de um sistema de equações de conservação de massa, quantidade de movimento, e energia, para cada fase. Como ambas as fases interagem entre si, aparecem nas equações de campo termos devidos a essa interação, que especificam os transportes de massa, quantidade de movimento e energia através da interface. Análises mais rigorosas sobre a formulação Euleriana-Euleriana clássica podem ser encontrados nos trabalhos de Delhay e Achard (1976) e Delhay e Achard (1977).

## 2.3 Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares

Na formulação do modelo das duas fases separadas para escoamentos gás-sólido é necessário especificar as leis constitutivas que modelam o tensor das tensões para cada fase analisada. Para fases contínuas, como o gases e os líquidos, geralmente este termo é modelado considerando-se a hipótese de fluido Newtoniano, o que é bastante razoável. No caso de fases dispersas (particulado) assumir essa mesma hipótese constitui uma aproximação muito grosseira, ainda mais quando a fase dispersa é composta de partículas sólidas. A consideração da fase sólida como um contínuo e como um fluido Newtoniano implica na procura de um valor, coerente fisicamente, da viscosidade dinâmica da fase sólida  $\mu_s$ , para resolver o sistema de equações de EDPs que compõe o modelo tradicional das duas fases separadas. Para contornar este problema, muitos pesquisadores na atualidade utilizam a Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares (TCEG). Esta teoria baseia-se na formulação de Euler/Boltzmann e correspondentemente permite a obtenção de um modelo reológico teórico para a fase sólida, através da modelagem das flutuações da velocidade das partículas com ajuda de equações complementares (algébricas ou diferenciais).

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)).

A formulação da Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares para o modelo de dois fluidos, de acordo com Peirano e Leckner (1998), é desenvolvida através de dois procedimentos fundamentais: o primeiro que considera um escoamento granular seco (sem influência do gás intersticial, de acordo com Ding e Gidaspow (1990)) e o segundo, descrito por Ma e Ahmadi (1998) que considera o gás intersticial entre as partículas do escoamento. No livro de Gidaspow (1994) discute exaustivamente o primeiro procedimento. Peirano e Leckner (1998) apresentam uma detalhada discussão do segundo procedimento aplicado a escoamentos turbulentos gás-sólido em leitos fluidizados circulantes.

Sinclair e Jackson (1989) foram os primeiros a proporem uma descrição fundamental das tensões na fase sólida no contexto do modelo das duas fases separadas usando a TCEG. Estes autores descrevem de maneira sucinta o significado físico da “temperatura do particulado” ou “temperatura granular”, que constitui uma definição de temperatura para o sólido semelhante a temperatura de um gás que normalmente apresenta-se na termodinâmica clássica e na estatística. Em escoamentos granulares, Jenkins e Savage (1983) designam a temperatura granular como um terço da velocidade ao quadrado média.

Segundo Sinclair e Jackson (1989), devido ao fato do gás não deslizar livremente pelas paredes do duto, existe um perfil de velocidade do gás, que induz um perfil de velocidade para o sólido em razão da força de arrasto que o gás exerce sobre as partículas. Como resultado deste movimento cisalhante as partículas colidem entre si, gerando uma componente aleatória do movimento das partículas. Este movimento aleatório ou flutuante é completamente independente das flutuações da velocidade do gás, podendo sua magnitude exceder as flutuações da velocidade do gás, devido a massa das partículas.

Estas flutuações da velocidade do particulado geram uma pressão efetiva na fase sólida, que junto com uma viscosidade efetiva resistem as tensões cisalhantes do conjunto de partículas. Tanto a pressão como a viscosidade efetiva, dependem fortemente da “temperatura granular”, acima definida, que pode ser calculada através de uma equação algébrica ou pela solução de uma EDP separada que representa o balanço da denominada energia pseudotérmica, ou seja, a energia do movimento aleatório das partículas segundo Agrawal *et al.* (2001). A energia cinética do movimento aleatório do particulado é análoga a do movimento térmico das moléculas em um gás. Essa energia pseudotérmica é gerada pelo trabalho efetuado pelas tensões de cisalhamento efetiva na fase particulada, dissipada pelas colisões inelásticas entre as partículas e conduzida como resultado dos gradientes da “temperatura do particulado”.

A formulação da TCEG, pode ser desenvolvida seguindo o procedimento geral simplificado mostrado na figura 2.2. Este procedimento relata as etapas básicas usadas na mo-

delagem da TCEG. Primeiramente, formula-se a equação integro-diferencial de Boltzmann para a frequência de distribuição da velocidade  $f$ . Esta equação formula 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  $\psi$  transportada (por exemplo, massa, quantidade de movimento ou energia). Num terceiro passo formula-se o teorema de transporte para escoamentos densos Jenkins-Savage apresentados em Jenkins e Savage (1983) e em Lun, Savage e Jeffrey (1984). Este teorema baseia-se na equação de transporte para gases densos apresentada por Chapman e Cowling (1960) e é denominado também como equação de transporte de Maxwell-Chapman, em Savage (1983), e em Gidaspow (1994), tal teorema generaliza o teorema de transporte válido para gases e escoamentos de partículas diluídas. Por último formulam-se as equações constitutivas que permitem calcular os termos não modelados que foram introduzidos nas equações de transporte macroscópicas de acordo com Therdthianwong (1994).

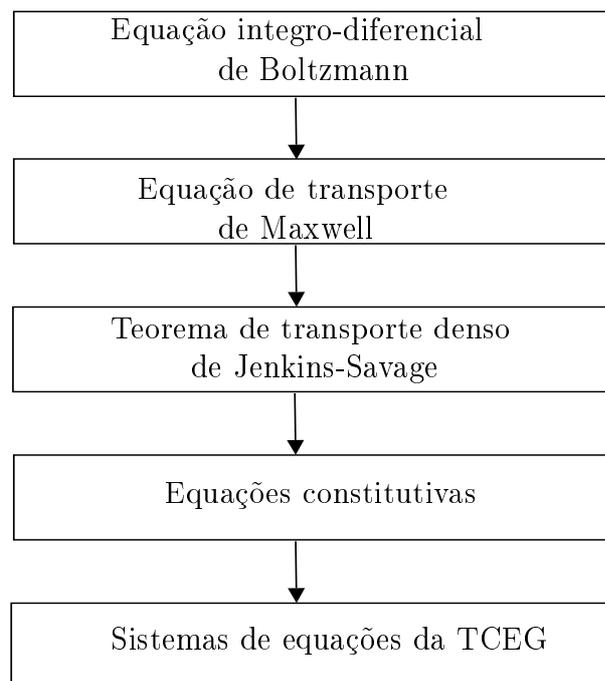


Figura 2.2: Procedimento geral simplificado para formulação da TCEG, baseado no trabalho de Therdthianwong (1994).

Após o trabalho pioneiro de Sinclair e Jackson (1989), Ding e Gidaspow (1990) aplicaram pela primeira vez a TCEG na simulação bidimensional transiente de um leito borbulhante a frio considerando um escoamento granular seco com base nos seguintes trabalhos: Chapman e Cowling (1960), Savage (1983), Jenkins e Savage (1983) e Lun, Savage e Jeffrey (1984). 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).

Segundo Peirano e Leckner (1998) uma das análises mais completas desenvolvida com o modelo das duas fases separadas utilizando a TCEG tem sido realizada pelo grupo da EDF (Electricité de France). A TCEG desenvolvida por este grupo considera a influência do fluido intersticial, o que possibilita aplicar o modelo para todas as concentrações de sólido, assim como modular a turbulência do escoamento. Esta modulação significa considerar a influência da presença das partículas sobre a turbulência da fase gasosa e vice-versa (CROWE (2000)). As simulações desenvolvidas pelo grupo da EDF utilizam modelos de turbulência completos para ambas as fases (de segunda ordem), e resolvem quatro equações de transporte acopladas entre si.

A modelagem da turbulência em escoamentos multifásicos, especificamente em escoamentos bifásicos gás-sólido não será abordada neste trabalho. Além das dificuldades inerentes à formulação do fenômeno da turbulência em escoamentos monofásicos, deve-se considerar esses efeitos na interação entre fases através da interface que as separa.

## 2.4 Formulação do modelo das duas fases separadas

A formulação do modelo das duas fases tem como idéia geral em formular balanços integrais de massa, quantidade de movimento e energia para um volume de controle fixo que contenha ambas as fases. Posteriormente, aplicando-se os teoremas de Leibniz e de Gauss-Ostrogradskii (Apêndice A), os balanços de integrais vão dar origem à dois tipos de equações: as equações locais instantâneas para cada uma das fases, e as equações de salto locais instantâneas, que representam a interação entre as fases. Em seguida, aplica-se o procedimento de médias de Euler às equações locais, de acordo com a variável escolhida para efetuar as médias, como mostrado na figura 2.3. Numa terceira etapa, aplica-se as leis de fechamento com o objetivo de modelar os termos desconhecidos nas equações de balanço. Finalmente são estabelecidas condições iniciais e de contorno completando a formulação do modelo das duas fases. O esquema a seguir ilustra a formulação do modelo das duas fases descrito por Enwald, Peirano e Almstedt, (1996).

A importância de se ter equações locais instantâneas está no fato de que estas constituem a base fundamental para todos os modelos bifásicos obtidos a partir de procedimentos de médias, além do mais, as equações locais instantâneas permitem a modelagem direta de escoamento separados, tais como escoamentos estratificado, em películas ou anulares, segundo

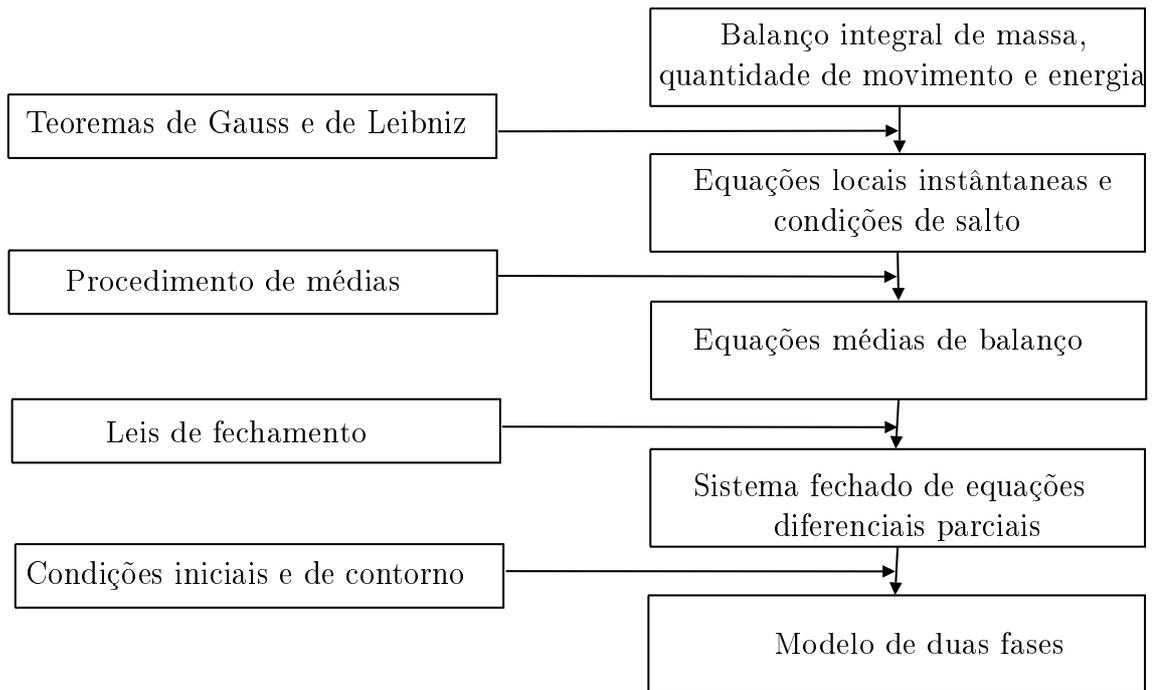


Figura 2.3: Procedimento geral para formulação do modelo de duas fases apresentado por Enwald, Peirano e Almstedt, (1996)

Ishii (1975). Já a importância em se aplicar o processo de médias é que através dele eliminam-se as flutuações locais instantâneas de um escoamento multifásico, possibilitando a obtenção de valores médios dos movimentos e propriedades do escoamento. Com isso, de acordo com Ishii (1975) modela-se os aspectos macroscópicos de escoamento, que são de maior interesse em problemas de engenharia.

O desenvolvimento detalhado desta metodologia voltado para escoamentos gás-sólido é apresentado por Enwald, Peirano e Almstedt, (1996), com base em inúmeros trabalhos da literatura, tais como: Ishii (1975), Delhaye e Achard (1976), Delhaye e Achard (1977), Drew (1983).

## 2.5 Modelo hidrodinâmico

Nesta seção são descritas as equações gerais médias para um escoamento bifásico gás-sólido, bem como, as leis de fechamento que são adotadas neste trabalho. O modelo hidrodinâmico adotado é modelo A de Gidaspow (1994). Neste modelo, o gradiente de pressão do gás está incluído em cada equação de quantidade de movimento para cada fase.

Em condições isotérmicas, com duas fases (gás e sólido), e sem reações químicas, as equações da conservação da massa e conservação da quantidade de movimento são expressas a seguir.

Conservação da Massa para a fase gás.

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

Conservação da Massa para a fase sólida.

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

Nas equações de conservação da massa, equações (2.1) e (2.2), o primeiro termo à esquerda representa a variação temporal de acúmulo de massa por unidade de volume e o segundo termo representa a variação do fluxo de massa convectivo.

Conservação da Quantidade de Movimento para a fase gás.

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

Conservação da Quantidade de Movimento para a fase sólida.

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

onde,  $\epsilon_g$  e  $\epsilon_s$  são as frações de vazio do gás e do sólido respectivamente;  $\vec{v}_g$  e  $\vec{v}_s$  são as velocidades médias locais das fases gasosa e sólida, respectivamente;  $\vec{\sigma}_g$  e  $\vec{\sigma}_s$  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 da conservação da quantidade de movimento (2.3) e (2.4), o primeiro termo à esquerda representa a taxa líquida de aumento do momento, já o segundo termo representa a transferência de momento por convecção.

O modelo das duas fases será obtido através da aplicação das leis de fechamento, condições iniciais e de contorno ao sistema fechado de equações diferenciais parciais, como descrito na seção 2.4.

### 2.5.1 Leis de fechamento

Para se obter o sistema fechado geral das equações diferenciais parciais que modelam um escoamento gás-sólido é necessário especificar as leis de fechamento. Nesta seção serão discutidas apenas as leis de fechamento apropriadas para escoamentos bifásicos gás-sólidos.

As leis de fechamento são classificadas em três tipos: constitutivas, de transferência e topológicas.

**Leis Constitutivas:** especificam como as propriedades físicas das fases se relacionam, mas não descrevem parâmetros de transporte entre as fases na interface. Modelam propriedades tais como: tensor das tensões, viscosidade dinâmica e viscosidade volumétrica.

**Leis de Transferência:** são equações empíricas que descrevem as diferentes interações entre as fases que ocorrem na interface. Modelam as propriedades que ocorrem na interface entre as fases

**Leis Topológicas:** descrevem a distribuição espacial de uma variável específica do escoamento analisado.

A seguir serão definidas as leis de fechamento utilizadas na modelagem hidrodinâmica do escoamento gás-sólido em leito fluidizado borbulhante do presente trabalho.

### Tensor das tensões

O tensor das tensões,  $\bar{\sigma}_k$ , para fase  $k = (g, s)$  é dado por:

$$\bar{\sigma}_k = -p_k \bar{I} + \bar{\tau}_k \quad (2.5)$$

onde, o primeiro termo da equação (2.5) representa a pressão hidrostática,  $\bar{I}$  é o tensor unitário e o segundo termo denominado tensor das tensões viscosas refere-se ao movimento.

Para a fase gás, o tensor das tensões viscosas será modelado assumindo a relação tensão/deformação para um fluido Newtoniano, considerando-se a hipótese de Stokes. Mais detalhes sobre tratamento de fluidos Newtonianos, pode-se consultar White (1991).

Considerando o gás como um fluido Newtoniano o tensor das tensões viscosas da fase gás será expresso por:  $\bar{\tau}_g = 2\mu_g \bar{D}_g + \lambda_g \text{tr}(\bar{D}) \bar{I}$ , onde  $\mu_g$  e  $\lambda_g$  são a viscosidade dinâmica e volumétrica da fase gasosa, respectivamente.  $\bar{D}$ , denominado tensor taxa de deformação é dado por:

$$\bar{D}_g = \frac{1}{2} \left[ \nabla \vec{v}_g + \left( \nabla \vec{v}_g \right)^T \right] \quad (2.6)$$

Assumindo a hipótese de Stokes, tem-se que:  $\lambda_g + \frac{2}{3}\mu_g = 0$ . Assim, o tensor das tensões viscosas da fase gasosa será expresso por:

$$\bar{\tau}_g = \mu_g \left[ \nabla \vec{v}_g + \left( \nabla \vec{v}_g \right)^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v}_g \bar{I} \right] \quad (2.7)$$

A formulação do tensor das tensões para a fase sólida é um pouco mais complexa e será feita adotando as teorias apropriadas da literatura para escoamentos granulares. De acordo com Jenkins e Cowin (1979) *apud* Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) os escoamentos granulares podem ser classificados em dois regimes distintos: um regime plástico ou lento, no qual a tensão será causada devido ao atrito entre as partículas, e um regime viscoso ou rápido, no qual a tensão é causada por colisões. A figura 2.4 ilustra os diferentes regimes de escoamentos granulares.

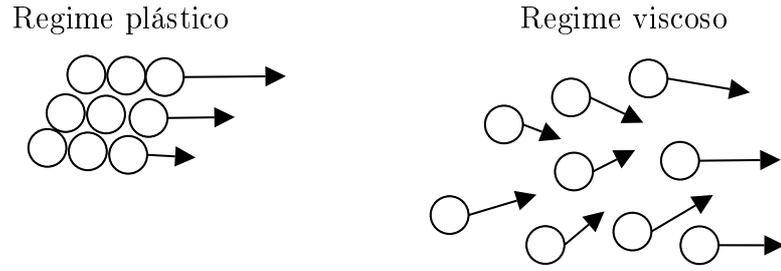


Figura 2.4: Regime plástico e viscoso para escoamentos granulares

Nos estudos de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), a teoria cinética dos escoamentos granulares descrita por Jenkins e Savage (1983) usada para escoamentos dispersos (rápidos) e a teoria do estado crítico de 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 entre as duas diferentes relações constitutivas:

$$\bar{\sigma}_s = \begin{cases} -p_s^p \bar{I} + \bar{\tau}_s^p & \text{se } \epsilon_g \leq \epsilon_g^* \\ -p_s^v \bar{I} + \bar{\tau}_s^v & \text{se } \epsilon_g > \epsilon_g^* \end{cases} \quad (2.8)$$

em que  $\epsilon_g^*$  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 de acordo com Tuzun *et al.* (1982). Eles originam-se da fricção entre as partículas e são descritos por modelos fenomenológicos. Existem dois componentes principais na teoria dos regimes plásticos. O primeiro é uma função de campo, que define uma superfície no espaço das tensões, na qual o material irá comportar-se elasticamente (ou irá permanecer rígido, se a elasticidade for desprezada), e onde o ponto de tensão deverá encontrar-se durante a deformação plástica. A função de campo pode mudar enquanto a variação plástica ocorre. Quando ela se expande diz-se que há um trabalho de endurecimento, quando ela se contrai o trabalho é de amolecimento, e quando ela permanece fixa, o material é considerado perfeitamente plástico.

O segundo componente da teoria dos regimes plásticos é a regra de escoamento dos materiais, a qual estabelece relações entre os componentes de tensão e taxas do tensor das tensões. Quando o ponto de tensão alcança as tensões plásticas da superfície, ocorrem que em cada ponto da superfície os componentes dos incrementos plásticos da tensão são fixadas pela regra do escoamento. Mais detalhes sobre regras de escoamento podem ser encontrados em Tuzun *et al.* (1982).

Similarmente as funções usadas nas teorias de escoamento plásticos no trabalho de

Jenike (1987), define-se uma função arbitrária que permite certa quantidade de compressibilidade na fase sólida, e representa os termos da pressão do sólido para o regime de escoamento plástico:

$$p_s^p = \epsilon_s p^* \quad (2.9)$$

onde  $p^*$  é representado por uma lei empírica:

$$p^* = \epsilon_s A (\epsilon_g^* - \epsilon_g)^n \quad (2.10)$$

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:

$$\bar{\tau}_s^p = 2\mu_s^p \bar{D}_s \quad (2.11)$$

onde

$$\mu_s^p = \frac{p^* \sin \phi}{2\sqrt{I_{2D}}} \quad (2.12)$$

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

$$I_{2D} = \frac{1}{6} [(D_{s11} - D_{s22})^2 + (D_{s22} - D_{s33})^2 + (D_{s33} - D_{s11})^2] + D_{s12}^2 + D_{s23}^2 + D_{s31}^2 \quad (2.13)$$

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:

$$p_s^v = K_1 \epsilon_s^2 \theta \quad (2.14)$$

com  $K_1 = 2(1 + e)\rho_s g_0$ , onde  $e$  é o coeficiente de restituição para colisão da fase sólida e  $g_0$  é a função de distribuição radial no contato das partículas, dada por:

$$g_0 = \frac{1}{\epsilon_g} + \frac{1,5\epsilon_s}{\epsilon_g^2} \quad (2.15)$$

O coeficiente de restituição  $e$ , é a medida da elasticidade de colisão entre duas partículas, e refere-se a quantidade de energia cinética das partículas antes e após a colisão. Uma colisão perfeitamente elástica possui coeficiente de restituição igual a 1, e uma colisão completamente plástica ou inelástica possui coeficiente de restituição igual a 0. Em geral experimentos mostram que o coeficiente de restituição não é constante (DU *et al.* (2006)).

Goldschmidt, Kuipers e Van Swaaij, (2001), mostraram que a hidrodinâmica dos leitos fluidizados para gases densos dependem fortemente da energia dissipada nos encontros

de partículas-partículas. Lu *et al.* (2004), mostraram que a temperatura granular aumenta com o incremento de  $e$ . Estes e mais outros resultados atestam que as simulações de leitos fluidizados são sensíveis ao coeficiente de restituição  $e$ .

A função de distribuição radial  $g_0$ , pode ser vista como uma medida para a probabilidade do contato entre as partículas segundo Lu *et al.* (2004). No escopo da teoria cinética, a função de distribuição radial é introduzida para considerar o incremento da probabilidade das colisões quando o gás torna-se denso. 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 dos sólidos. Uma ilustração deste aumento é mostrada na figura 2.5, que representa a função de distribuição radial de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), a qual será adotada no presente trabalho.

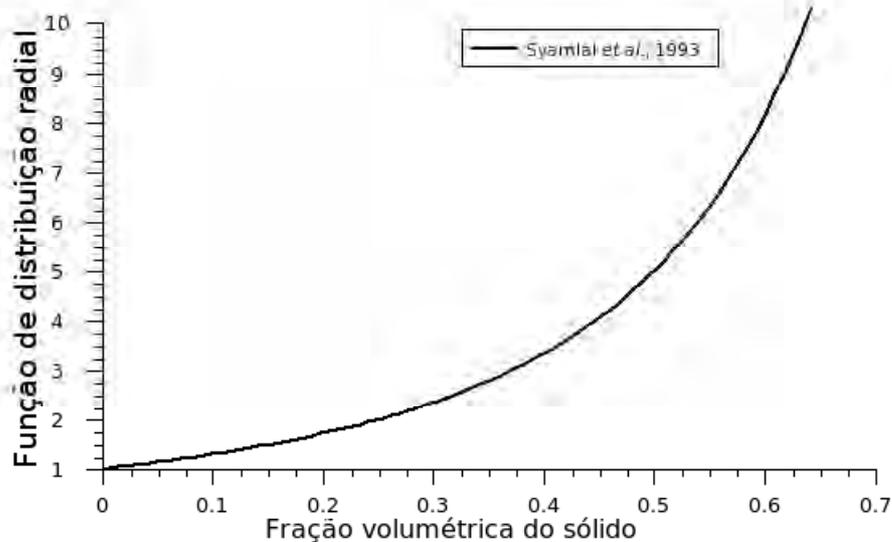


Figura 2.5: Função de distribuição radial  $g_0$  Syamlal, Rogers e O'Brien (1993).

O tensor das tensões da fase sólida para o regime viscoso é expresso por:

$$\bar{\tau}_s^v = 2\mu_s^v \bar{D}_s + \lambda_s^v \text{tr}(\bar{D}_s) \bar{I} \quad (2.16)$$

onde  $\bar{D}_s$  é o tensor taxa de deformação para a fase sólida dado por:

$$\bar{D}_s = \frac{1}{2} \left[ \nabla \vec{v}_s + (\nabla \vec{v}_s)^T \right] \quad (2.17)$$

e  $\mu_s^v$  e  $\lambda_s^v$  são as viscosidades dinâmica e volumétrica da fase sólida no regime viscoso, respectivamente, expressos por:

$$\lambda_s^v = K_2 \epsilon_s \sqrt{\theta} \quad (2.18)$$

$$\mu_s^v = K_3 \epsilon_s \sqrt{\theta} \quad (2.19)$$

a constante  $K_2$ , é dada por:

$$K_2 = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} d_p \rho_s (1 + e) \epsilon_s g_0 - \frac{2}{3} K_3 \quad (2.20)$$

e a constante  $K_3$  é:

$$K_3 = \frac{d_p \rho_s \sqrt{\pi}}{6(3 - e)} \left[ 1 + \frac{2}{5} (1 + e) (3e - 1) \epsilon_s g_0 \right] + \frac{8 d_p \rho_s \epsilon_s}{10\sqrt{\pi}} g_0 (1 + e) \quad (2.21)$$

Visto que a fase sólida, não é contínua como o gás ou o líquido, sua viscosidade dinâmica não é uma propriedade física real. Porém, de acordo Boemer *et al.* (1995), a viscosidade dinâmica do sólido pode ser derivada através da TCEG. Como descrito por Gidaspow (1994), o tensor das tensões compõe-se de duas parcelas, a que representa a contribuição devido as colisões e a que considera a contribuição cinética. Estas duas parcelas estão presentes nas correlações para a viscosidade dinâmica do sólido,  $\mu_s$ . A figura 2.6, representa a correlação de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), a qual será usada neste trabalho. Nesta figura, a viscosidade  $\mu_s$  é calculada em função da vazão volumétrica de sólidos assumindo partículas esféricas, com diâmetro médio de particulado de 0,52 mm, densidade de particulado de 2.620 kg/m<sup>3</sup>, considerando a correlação para  $g_0$ , conforme equação (2.15), coeficiente de restituição de 0,9 e temperatura granular igual a 0,1 m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>.

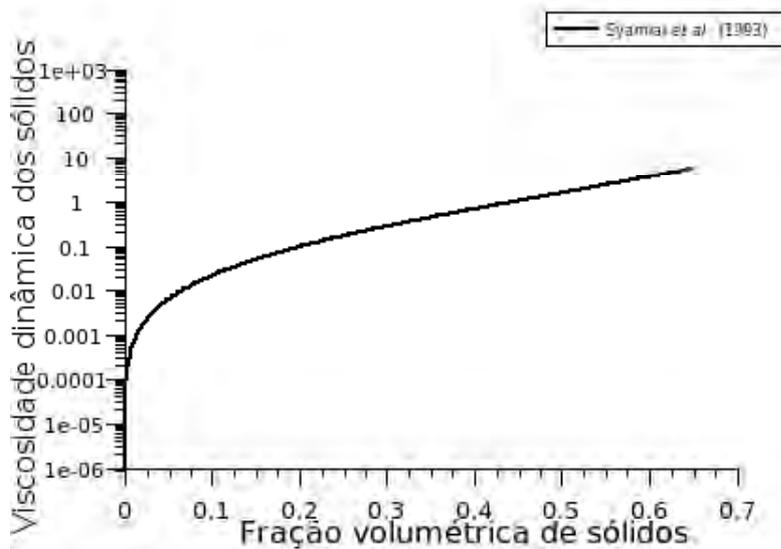


Figura 2.6: Viscosidade dinâmica do sólido Syamlal, Rogers e O'Brien (1993).

Pode-se utilizar uma expressão algébrica para a temperatura granular,  $\theta$ , 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:

$$\theta = \left[ \frac{-(K_1\epsilon_s + \rho_s)tr(\bar{\bar{D}}_s)}{2\epsilon_s K_4} + \sqrt{\frac{[(K_1\epsilon_s + \rho_s)^2 tr^2(\bar{\bar{D}}_s) + 4K_4\epsilon_s [2K_3tr(\bar{\bar{D}}_s^2) + K_2tr^2(\bar{\bar{D}}_s)]]}{2\epsilon_s K_4}} \right] \quad (2.22)$$

onde  $K_4$  é dado por:

$$K_4 = \frac{12(1 - e^2)\rho_g g_0}{d_p \sqrt{\pi}} \quad (2.23)$$

### Forças de interação

Os mecanismos e a formulação de forças de interação foram revistos em detalhes por diversos autores. Dos estudos na dinâmica de uma única partícula em um líquido, diversos mecanismos diferentes foram identificados:

- Força de arrasto: causada pela diferença de velocidade entre as fases.
- Força buoyancy: causada pelo gradiente de pressão do fluido
- Força massa virtual: força requerida para a aceleração da massa da fase circundante, quando a fase é acelerada.
- Força Saffman: força ascensional (lift force) que atua sobre a partícula, devido a existência de gradiente de velocidade.
- Força Magnus: força ascensional (lift force) causada pela existência de gradiente de pressão provocado por diferencial de velocidade devido a rotação da partícula.
- Força Basset: esta força surge como resultado da difusão de quantidade de movimento através da camada limite da fase analisada. Resulta da aceleração de uma fase com respeito à outra e avalia o efeito da aceleração já ocorrida sobre a resistência que a fase oferece ao movimento.

Das forças em questão, no presente estudo, considera-se que a principal contribuição das forças de interação entre as fases é a força de arrasto. Ela pode ser modelada através de dois procedimentos gerais: o primeiro é feito a partir de correlações para o coeficiente de arrasto sobre uma partícula numa suspensão de partículas,  $C_{D_s}$ . O segundo, é a partir da queda de

pressão por unidade de comprimento numa suspensão de partículas,  $\Delta P/L$ . O objetivo da modelagem da força de arrasto é expressá-la em função das variáveis dependentes do sistema de equações governantes. Independente do procedimento adotado, a força de arrasto é definida em função da velocidade relativa entre as fases, e do coeficiente de transferência de quantidade de movimento na interface, denominado função de arrasto (CABEZAS-GÓMEZ (1999)). Mais detalhes sobre os procedimentos de obtenção das funções de arrasto são apresentados em Enwald, Peirano e Almstedt, (1996) e em Cabezas-Gómez (1999).

Portanto, a expressão para a força de arrasto entre as fases gás e sólida será dada por:  $\vec{f} = \beta (\vec{v}_g - \vec{v}_s)$ , onde  $\beta$  é o coeficiente de arrasto na interface.

Neste trabalho será considerada a correlação de arrasto de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993). Os autores propuseram um modelo baseado em medidas de velocidades das partículas nos leitos fluidizados na forma:

$$\beta = \frac{3 C_{Ds}}{4 V_{rs}^2} \frac{|\vec{v}_g - \vec{v}_s|}{d_p} \epsilon_g \epsilon_s \quad (2.24)$$

onde  $V_{rs}$  é a velocidade terminal para a fase sólida.

E a expressão de Garside e Al-Dibouni (1977) é usada:

$$V_{rs} = 0,5 \left( A - 0,06 Re_s + \sqrt{(0,06 Re_s)^2 + 0,12 Re_s (2B - A) + A^2} \right) \quad (2.25)$$

onde:

$$A = \epsilon_g^{4,14}, \text{ e} \quad (2.26)$$

$$B = \begin{cases} 0,8 \epsilon_g^{1,28} & \text{se } \epsilon_g \leq 0,85 \\ \epsilon_g^{2,65} & \text{se } \epsilon_g > 0,85 \end{cases} \quad (2.27)$$

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

$$Re_s = \frac{\epsilon_g \rho_g |\vec{v}_g - \vec{v}_s| d_p}{\mu_g} \quad (2.28)$$

e,  $C_{Ds}$  é uma função de arrasto para uma esfera:

$$C_{Ds} = \left( 0,63 + 4,8 \sqrt{\frac{V_{rs}}{Re_s}} \right)^2 \quad (2.29)$$

# Capítulo 3

## Metodologia de Solução Numérica

### 3.1 Introdução

Uma grande variedade de fenômenos físicos, dentre eles o escoamento de fluidos podem ser descritos através de equações diferenciais parciais (EDP). No entanto, quando tais equações envolvem não linearidade em suas formulações, a obtenção de soluções analíticas torna-se rara. Porém com a crescente disponibilidade dos computadores surgiu uma nova alternativa para o estudo do escoamento de fluidos: as equações que descrevem esses escoamentos são resolvidas numericamente com o auxílio de computadores. Esse novo ramo do conhecimento, recebeu o nome de dinâmica de fluidos computacional (DFC), e tem como principal objetivo complementar, e não substituir os estudos teóricos e experimentais sobre o movimento de fluidos.

Para se obter uma solução aproximada, faz-se o uso de um método de discretização que aproxima as equações diferenciais por um sistema de equações algébricas, que pode ser resolvido no computador. As aproximações são aplicadas a pequenos domínios no espaço e/ou tempo tal que a solução numérica forneça resultados em locais discretos no espaço e no tempo. Muito embora, a precisão dos dados experimentais dependa da qualidade das ferramentas utilizadas, a precisão da solução numérica é dependente da qualidade da discretização utilizada (FERZIGER E PERIC (1999)).

De forma particular, a maneira pela qual as derivadas convectivas nas equações de conservação são aproximadas requer atenção especial, porque esses termos são responsáveis por causar dificuldades na solução numérica do sistema de equações, provocando a obtenção de soluções incorretas ou inexatas e/ou a divergência do método de solução. Via de regra, o processo de discretização introduz termos de segunda ordem adicionais nas equações de balanço discretizadas em relação às equações de balanço contínuas, que produzem a denominada

difusão numérica. Essa difusão numérica introduz uma dissipação na solução numérica muito maior do que a produzida pelo coeficiente de viscosidade molecular do fluido, resultando em soluções incorretas devido à solução de um problema matemático com características completamente diferentes do problema físico. Ferziger e Peric (1999), apresentam uma discussão extensa sobre a definição e significado da difusão numérica.

Neste capítulo, serão apresentadas as deduções das fórmulas para a discretização dos termos transiente, convectivos, difusivos e do termo fonte, afim de se obter um conjunto de equações algébricas (discretizadas) para as equações diferenciais que modelam o escoamento bifásico gás-sólido.

## 3.2 Estudo sobre a discretização de termos de convecção e difusão

### 3.2.1 Esquemas de primeira ordem

As equações de transporte que contém termos convectivos-difusivos são da forma:

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} = \rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \quad (3.1)$$

A estabilidade e precisão do esquema numérico dependem fortemente do método utilizado para discretizar tais termos. É natural discretizar os termos utilizando uma expansão em série de Taylor. Entretanto, em dinâmica dos fluidos computacional, o método de volume de controle (VC) é usualmente mais preferido. O método de VC invoca as bases físicas da dedução das equações de conservação e garante a conservação global de massa, quantidade de movimento e energia (PATANKAR (1980)). Na resolução numérica em uma malha suficientemente fina os dois métodos resultariam na mesma precisão de solução. Em malhas grossas, o método VC é mais adequado do que expansão em série de Taylor porque este último apresenta um erro de truncamento não desprezível nestes tipos de malhas. Assim, o método VC é atraente, pois uma malha fina nem sempre é interessante devido ao custo computacional.

Para a aplicação da técnica de volumes finitos, considere o domínio mostrado na figura 3.1, e a equação de transporte (3.1).

A equação (3.1) é integrada no volume de controle em torno do ponto  $P$ :

$$\int_{VC} \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} dV = \int_{VC} \rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} - \int_{VC} \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dV \quad (3.2)$$

As fronteiras laterais do VC são denominadas  $e$  e  $w$  e elas também são os limites de

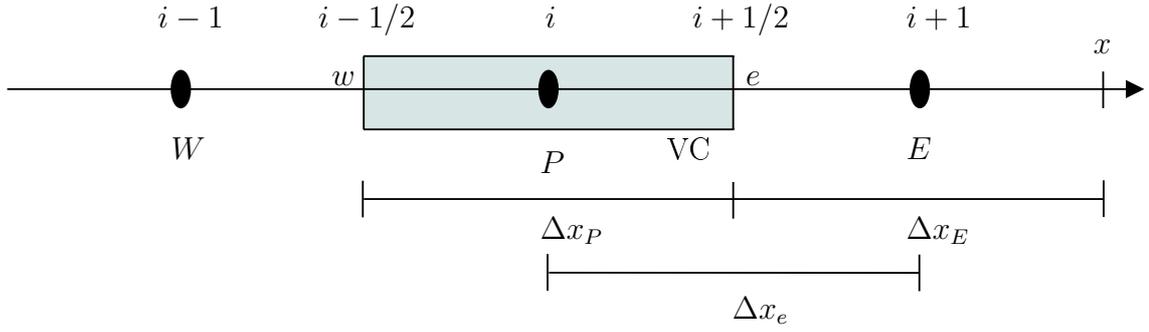


Figura 3.1: Volume de controle típico em uma malha unidimensional

integração. Portanto:

$$\int_w^e \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} dx = \int_w^e \rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} dx - \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx \quad (3.3)$$

Pelo teorema fundamental do cálculo, tem-se que a primeira integral da equação (3.3) sobre o volume de controle VC é dada por:

$$\int_w^e \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} dx = [A_e - A_w] [(\rho \phi)_P - (\rho \phi)_P^{old}] \quad (3.4)$$

onde  $A$  é a área da seção transversal do volume de controle.

O termo de convecção-difusão, também é integrado sobre o volume de controle, o que resulta em:

$$\int_w^e \left[ \rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right] dx = \left[ \rho u \phi_e - \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \right] A_e - \left[ \rho u \phi_w - \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] A_w \quad (3.5)$$

O passo seguinte é determinar, em função das incógnitas nos pontos discretos os valores de  $(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x})_e$  e  $(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x})_w$ .

Os fluxos difusivos  $\frac{\partial \phi}{\partial x}$  são aproximados por um simples esquema de interpolação de segunda ordem de precisão. Assim, tem-se:

$$\left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \Gamma_e \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x_e} \quad \text{e} \quad \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w = \Gamma_w \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\Delta x_w} \quad (3.6)$$

Para malhas irregulares, os valores do coeficiente de difusão  $\Gamma$  nas faces  $e$  e  $w$  são calculados utilizando uma média harmônica dos valores definidos no centro das células segundo Patankar (1980). Por exemplo,  $\Gamma_e$  será dado por:

$$\begin{aligned} \Gamma_e &= \left[ \frac{1 - f_e}{\Gamma_P} + \frac{f_e}{\Gamma_E} \right]^{-1} \\ &= \frac{\Gamma_P \Gamma_E}{f_e \Gamma_P + (1 - f_e) \Gamma_E} \quad \text{onde} \quad f_e = \frac{\Delta x_e}{\Delta x_P + \Delta x_E} \end{aligned} \quad (3.7)$$

A discretização dos termos de convecção é uma tarefa fundamental. Em escoamentos nos quais a convecção tem papel importante, como aqueles com altos números de Reynolds,

a adequada discretização dos termos convectivos é de extrema importância para a qualidade da solução numérica.

A partir da equação (3.5), a discretização do termo de convecção equivale-se a determinar um valor ou expressão para  $\phi$  nas faces  $e$  e  $w$  do VC. Uma interpolação linear entre os valores adjacentes de  $\phi$  resulta em:

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \quad \text{e} \quad \phi_w = \frac{\phi_P + \phi_W}{2} \quad (3.8)$$

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

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_P & \text{se } u \geq 0 \\ \phi_E & \text{se } u \leq 0 \end{cases} \quad \text{e} \quad \phi_w = \begin{cases} \phi_W & \text{se } u \geq 0 \\ \phi_P & \text{se } u \leq 0 \end{cases} \quad (3.9)$$

A discretização “upwind” é de primeira ordem de precisão, e em geral introduz uma forte difusão numérica na solução. Apesar disso, por não produzir soluções oscilatórias, dispersivas ela ainda é encontrada na literatura.

A motivação para o estudo de esquemas numéricos é encontrada na solução analítica para um escoamento unidimensional em regime permanente:

$$\frac{\phi - \phi_P}{\phi_E - \phi_P} = \frac{\exp\left(\frac{P_e x}{\Delta x_e}\right) - 1}{\exp(P_e) - 1} \quad (3.10)$$

onde  $P_e = \frac{\rho u \Delta x_e}{\Gamma}$  é o número de Péclet e indica a razão entre o fluxo convectivo e o difusivo, na face leste do volume de controle. Quanto maior o número de Péclet, maior a intensidade da convecção.

### 3.2.2 Esquemas de alta ordem

Da literatura, sabemos que os esquemas numéricos “upwind” de primeira ordem, apresentam em geral uma forte difusão numérica. Com o objetivo de minimizar a introdução excessiva de viscosidade numérica, e ao mesmo tempo derivar técnicas de alta ordem de consistência, diversos esquemas “upwind”, com ordem igual ou superior a dois surgiram na década de setenta. Dentre os mais populares, podem-se destacar os algoritmos SUDS - “Skew-Upwind Differencing Schemes” de Raithby (1976) e QUICK - “Quadratic Upstream Interpolation for

Convective Kinematics” de Leonard (1979). Entretanto, nas vizinhanças de regiões onde gradientes elevados aparecem a natureza dispersiva desses esquemas podem induzir oscilações espúrias (“wiggles”) na solução, as quais são suficientes para causar instabilidade numérica e, em decorrência, deteriorar completamente a precisão do método numérico.

As dificuldades em superar oscilações/instabilidades na solução numérica levaram ao desenvolvimento de esquemas localmente limitados, e muitas tentativas foram feitas para encontrar um compromisso aceitável entre precisão, estabilidade e simplicidade de implementação. Hoje em dia, os esquemas localmente limitados consistem de uma das metodologias mais bem aceitas em escoamentos incompressíveis, pois proporcionam alta ordem do esquema QUICK e as boas qualidades de estabilidade do esquema FOUP, resultando em esquemas incondicionalmente estáveis e de ordem de consistência razoável (FERREIRA (2001)).

Atualmente, dois conceitos têm demonstrados ser de grande utilidade na construção de esquemas de ordem elevada: as restrições TVD -“Total Variation Diminishing” e as aproximações NVD -“Normalized Variavel Diagram”. O mecanismo comum e fundamental destes dois modelos é o uso da natureza dissipativa da diferenciação de primeira ordem. Esquemas TVD, isto é, esquemas que satisfazem as restrições TVD possuem características atrativas. As soluções obtidas por eles são bem resolvidas, livres de oscilações e convergentes. Usualmente, os esquemas TVD são aplicados à escoamentos compressíveis nos quais as variáveis convectivas sofrem grandes alterações no seu gradiente ou no caso da presença de descontinuidades. Segundo Kaibara, Ferreira e Navarro (2004) esquemas que satisfazem as condições TVD são sempre limitados .

### Esquemas TVD

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

$$TV(\phi(t)) = \sum_{i \in \mathbb{Z}} |\phi_{i+1}(t) - \phi_i(t)| \quad (3.11)$$

Após Harten (1984), esquemas de diferenças que originam uma TV limitada são denominados esquemas TVD. Uma propriedade desejável para uma solução aproximada compartilhar com uma exata é que sua TV diminua no tempo (TADMOR (1988)). TVD é uma propriedade puramente escalar, ela garante que oscilações indesejáveis são removidas da solução numérica de uma lei de conservação não linear.

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

da forma:

$$\phi_i^{n+1} = H(\phi_{i-k}^n, \dots, \phi_{i+k}^n), \forall n \geq 0, i \in \mathbb{Z} \quad (3.12)$$

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

$$TV(\phi^{n+1}) \leq TV(\phi^n) \quad (3.13)$$

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

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

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

Os esquemas TVD utilizam um limitador de fluxo para o valor de  $\phi$  na vizinhança da face de um volume de controle (VC) quando a variação local de  $\phi$  é monótona, prevenindo assim a introdução de oscilações espúrias na solução.

### 3.2.3 Variável normalizada para o limitador de fluxo

A avaliação de termos convectivos requerem uma expressão para  $\phi$ , em cada face de uma célula. Como dito anteriormente, um método amplamente utilizado em escoamentos gás-sólidos é o FOUP, que embora seja estável é apenas de primeira ordem e portanto altamente difusivo. Por outro lado, técnicas de discretização de alta ordem produzem oscilações não físicas que podem causar instabilidade numérica e destruir a precisão do método numérico. Uma maneira de contornar-se este problema é aplicação de um limitador de fluxo. Leonard, (1988) e Gaskell e Lau (1988), propuseram o conceito de variável normalizada e critério CBC - “Convection Boundedness Criterion” (apêndice B) para se obter esquemas capazes de resolver gradientes elevados e ao mesmo tempo manter instabilidades na solução numérica. Leonard e Mokhtari (1990), introduziram um “limitador universal” que pode ser expresso em função de um valor normalizado de  $\phi$ , em qualquer vizinhança da face do VC, definido como:

$$\tilde{\phi} = \frac{\phi - \phi_U}{\phi_D - \phi_U} \quad (3.14)$$

onde os subscritos  $U$  e  $D$ , representam os valores à montante e à justante respectivamente, baseados na direção do escoamento (figura 3.2), e  $C$  é o valor do nó entre  $U$  e  $D$ .

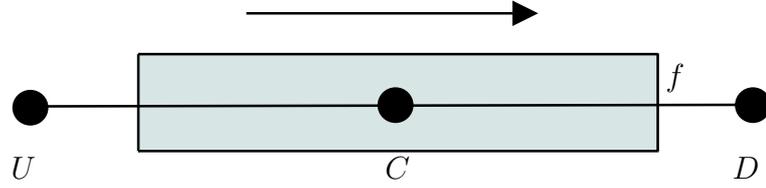


Figura 3.2: Localização dos nós baseados na direção do escoamento.

Por definição  $\tilde{\phi}_U = 0$  e  $\tilde{\phi}_D = 1$ . E também, a distribuição local de  $\phi$  é monótona quando  $0 \leq \tilde{\phi}_C \leq 1$ . Sobre as condições de monotonicidade, as restrições para o limitador universal em  $\tilde{\phi}_f$  podem ser escritas como:

1.  $\phi_f$  está entre  $\phi_C$  e  $\phi_D$ . Ou seja:

$$\tilde{\phi}_C \leq \tilde{\phi}_f \leq 1 \quad \text{para} \quad 0 \leq \tilde{\phi}_C \leq 1 \quad (3.15)$$

isto inclui o caso especial quando  $\phi_C = \phi_D$ . Neste caso,  $\phi_f = \phi_C = \phi_D$ , isto é,  $\tilde{\phi}_f = 1$  para  $\tilde{\phi}_C = 1$ .

2. Se  $\phi_C = \phi_U$ , então  $\phi_f = \phi_C = \phi_U$ . Isto é:

$$\tilde{\phi}_f = 0 \quad \text{para} \quad \tilde{\phi}_C = 0 \quad (3.16)$$

3. Para evitar a não unicidade quando  $\tilde{\phi}_C \rightarrow 0$  a fronteira  $OB$  tem uma pequena inclinação positiva e finita. Isto introduz uma restrição adicional:

$$\tilde{\phi}_f = \frac{\tilde{\phi}_C}{c} \quad \text{para} \quad 0 \leq \tilde{\phi}_C \leq c \quad (3.17)$$

em que  $c$  é uma constante. Para esquema com variação temporal  $c$  é a direção normal do número de Courant  $(\frac{u\Delta t}{\Delta x})$ .

4. Para comportamentos não monótonos ( $\tilde{\phi}_C < 0$  ou  $\tilde{\phi}_C > 1$ ), o limitador não impõe qualquer restrição, com exceção das interpolações que devem ser contínuas com respeito a  $\tilde{\phi}_C$ , isto é,  $\phi_f$  é a curva que deve passar por  $(0, 0)$  e  $(1, 1)$ , com  $\frac{\partial \tilde{\phi}_f}{\partial \tilde{\phi}_C} > 0$  e finita.

As limitações acima, podem ser representadas em um “Diagrama Variável Normalizado” (NVD), isto é, no plano  $\tilde{\phi}_C$  x  $\tilde{\phi}_f$ , conforme a figura 3.3.

O valor de  $\phi_f$  calculado por quaisquer regimes de ordem superior deve atravessar a região sombreada afim de prevenir super ou subestimativa da solução numérica. Além disso,

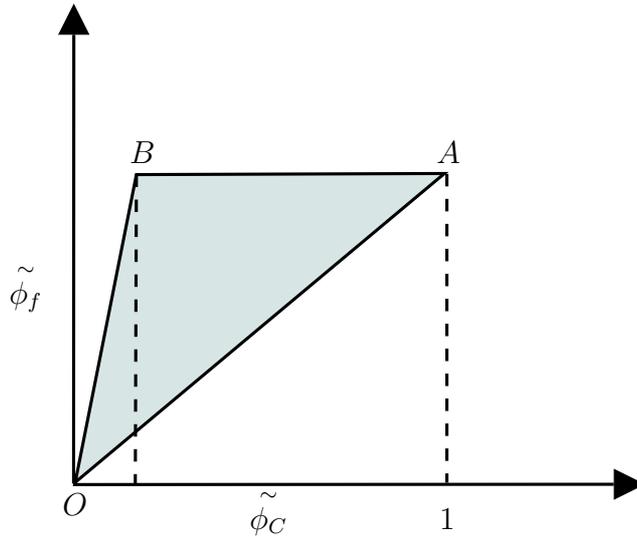


Figura 3.3: Restrições do Limitador Universal no Diagrama de Variável Normalizada.

Leonard (1987) mostrou que uma condição suficiente e necessária para esquemas de segunda ordem é que a representação funcional de  $\phi_f$  deve passar pelo ponto  $(0,5; 0,75)$ . Métodos de ordem superiores a dois, não podem ser representados como uma única curva sobre o NVD. Mais detalhes sobre o diagrama de variável normalizada para limitador de fluxo podem ser encontrados em Leonard (1979) e Leonard (1991).

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

- (i) Para cada face do VC, identifique a direção da componente da velocidade normal atual, portanto, identificando  $\phi_U$ ,  $\phi_C$  e  $\phi_D$ .
- (ii) Calcule explicitamente uma tentativa para o valor de face com alta ordem, multidimensional, “upwind” baseado na estimativa de  $\phi_f$
- (iii) Calcule o correspondente valor de face normalizado,  $\tilde{\phi}_f$ , e o valor nodal adjacente “upwind”,  $\tilde{\phi}_C$ .
- (iv) Se o ponto  $(\tilde{\phi}_C, \tilde{\phi}_f)$  não pertence à região triangular da figura 3.3, proceda para a próxima face do VC.
- (v) Se não,  $\tilde{\phi}_f$  está limitado e a uma vizinhança apropriada da restrição da fronteira para um dado valor de  $\tilde{\phi}_C$ .
- (vi) O valor da face não normalizado é então reconstruído por:  $\phi_f = \tilde{\phi}_f (\phi_D - \phi_U) + \phi_U$ .
- (vii) O mesmo procedimento é utilizado para cada face do VC.

Então, em um algoritmo de marcha temporal, os fluxos convectivos (limitados) e correspondentes difusivos (calculados utilizando uma diferenciação central de segunda ordem) estão agora disponíveis para o passo de atualização explícita. Alternativamente, soluções iterativas implícitas podem ser implementadas pela introdução do fator ponderado de “downwind”, descrito por Leonard e Mokhtari (1990).

### 3.2.4 Fator de ponderação “Downwind”

O limitador universal de Leonard e Mokhtari (1990) pode ser expresso em termos do “Downwind Weighting Factor” (DWF), que ao invés de limitar diretamente os valores na face do VC, é introduzido como uma variável auxiliar, gerando assim um esquema compacto implícito conveniente para métodos de solução de sistema tridiagonais. Após calcular explicitamente uma estimativa para  $\phi_f$ , define-se:

$$DWF = \frac{\phi_f - \phi_C}{\phi_D - \phi_C} \quad (3.18)$$

O que é equivalente à:

$$DWF = \frac{\tilde{\phi}_f - \tilde{\phi}_C}{1 - \tilde{\phi}_C} \quad (3.19)$$

Em termos do  $DWF$ , as restrições para o limitador universal, referentes à figura 3.3, tornam-se:

$$0 \leq DWF \leq 1 \quad \text{para} \quad 0 < \tilde{\phi}_C \leq 1 \quad (3.20)$$

A figura 3.4 ilustra um diagrama das restrições do limitador universal em termos do fator DWF. Note que o ponto  $A$  dado por  $(1, 1)$  na figura 3.3 foi estendido numa linha vertical na figura 3.4

A partir da definição do fator DWF, claramente, o valor de  $\phi_f$  na face do VC é dado por:

$$\phi_f = DWF\phi_D + (1 - DWF)\phi_C \quad (3.21)$$

Para vários esquemas de discretização, pode-se deduzir fórmulas explícitas para o fator Downwind. As fórmulas DWF utilizadas no MFIX são mostradas na tabela 3.1, como uma função de  $\gamma$ , onde  $\gamma \equiv \tilde{\phi}_C / (1 - \tilde{\phi}_C)$ . Algumas destas fórmulas são plotadas nas figuras 3.5.

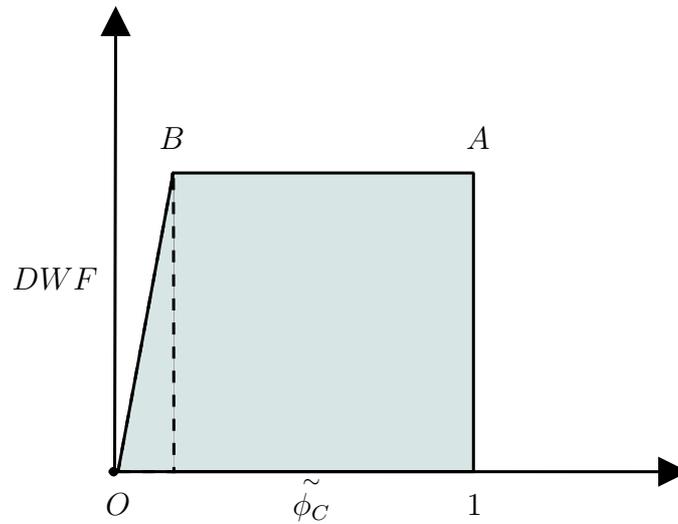


Figura 3.4: Restrições do Limitador Universal em termos do fator  $DWF$ .

Tabela 3.1: Fórmulas de Discretização em termos do fator  $DWF$ .

Esquema de Discretização	DWF
FOUP	0
Diferença Central	0,5
Upwind de segunda ordem	$\frac{1}{2}\gamma$
Esquemas TVD	0 se $(\tilde{\phi}_c < 0$ ou $\tilde{\phi}_C > 1)$ senão
Van Leer	$\tilde{\phi}_C$
Minmod	$\frac{1}{2}\max[0, \min(1, \gamma)]$
MUSCL	$\frac{1}{2}\max[0, \min(2\gamma; 0,5 + 0,5\gamma; 2)]$
UMIST	$\frac{1}{2}\max[0, \min(2\gamma; 0,75 + 0,25\gamma; 2)]$
SMART	$\frac{1}{2}\max[0, \min(4\gamma; 0,75 + 0,25\gamma; 2)]$
Superbee	$\frac{1}{2}\max[0, \min(1, 2\gamma), \min(2, \gamma)]$
ULTRA-QUICK	$\frac{1}{2}\gamma$ para $\tilde{\phi}_C < 0$ $(\frac{1}{c} - 1)\gamma$ para $0 \leq \tilde{\phi}_C < \frac{3c}{8-6c}$ $0,375 + 0,125\gamma$ para $\frac{3c}{8-6c} \leq \tilde{\phi}_C < \frac{5}{6}$ $1$ para $\frac{5}{6} \leq \tilde{\phi}_C \leq 1$ $0,5$ para $\tilde{\phi}_C > 1$

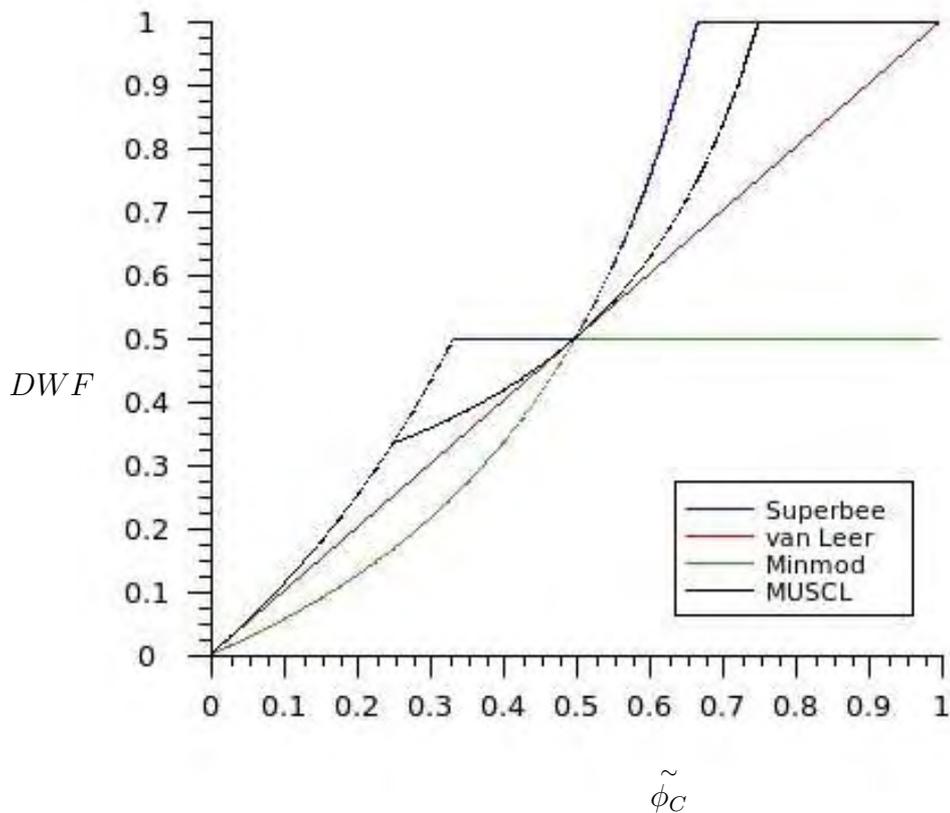


Figura 3.5: Fatores Downwind em função de  $\tilde{\phi}_C$ .

Esquemas com valores maiores (em um dado valor de  $\phi_C$  normalizado),  $\tilde{\phi}_c$  tendem a ser mais compressivos do que esquemas com valores menores. Portanto o esquema Superbee é mais compressivo que o MUSCL, por exemplo, por outro lado, o esquema Minmod é mais difusivo.

### Algoritmo para a utilização do fator “Downwind”

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

$$\xi = \begin{cases} DWF & \text{se } u \geq 0 \\ 1 - DWF & \text{se } u < 0 \end{cases} \quad (3.22)$$

Tal método é ilustrado através do cálculo de  $\xi$  na face leste, para as outras faces o procedimento é análogo. As localizações dos nós são mostradas na figura 3.6. Refere-se também a figura 3.2 para as definições dos nós  $C$ ,  $D$  e  $U$ .

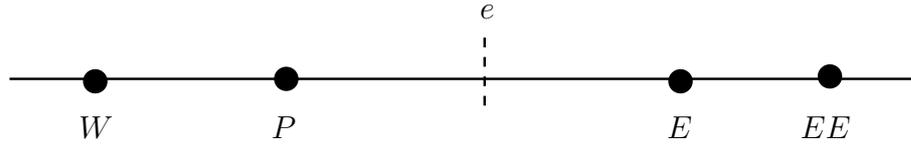


Figura 3.6: Localização dos nós.

1. **Algoritmo 3.1** (*Cálculo de  $\tilde{\phi}_C$* ):

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

$$\tilde{\phi}_C = \frac{\phi_P - \phi_W}{\phi_E - \phi_W} \quad (3.23)$$

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

$$\tilde{\phi}_C = \frac{\phi_E - \phi_{EE}}{\phi_P - \phi_{EE}} \quad (3.24)$$

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

3. Aplicando a equação (3.21), obtém-se:

$$\phi_e = DW F_e \phi_D + (1 - DW F_e) \phi_C \quad (3.25)$$

calcula-se  $\xi$  conforme algoritmo 3.2:

**Algoritmo 3.2** (*Cálculo de  $\xi$* ):

Se  $u_e \geq 0$  ( $P \equiv C; E \equiv D$ )

$$\phi_f = DW F_e \phi_E + (1 - DW F_e) \phi_P \quad (3.26)$$

$$\xi_e = DW F_e \quad (3.27)$$

Senão ( $E \equiv C; P \equiv D$ )

$$\phi_f = DW F_e \phi_P + (1 - DW F_e) \phi_E \quad (3.28)$$

$$\xi_e = 1 - DW F_e \quad (3.29)$$

O valor de  $\phi$  na face leste, por exemplo, é escrito como:

$$\phi_e = \xi_e \phi_E + \bar{\xi}_e \phi_P \quad (3.30)$$

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

### 3.2.5 Equação de transporte escalar

#### Equação de transporte discreta

Nas seções anteriores, fórmulas para discretização dos termos de convecção-difusão foram estudadas. Nesta seção aplicando as fórmulas discutidas obtém-se uma equação algébrica (discretizada) para um equação de transporte para uma propriedade escalar  $\phi$ :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\epsilon_m \rho_m \phi) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\epsilon_m \rho_m v_m \phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + R_\phi \quad (3.31)$$

A equação (3.31) é a equação de transporte para um propriedade escalar  $\phi$  da fase gás  $m = g$  ou fase sólida  $m = s$ . Os termos na equação (3.31) representam: a taxa de variação da quantidade  $\phi$ , os efeitos de convecção e difusão, e um termo fonte  $R_\phi$  para  $\phi$ . Em escoamento multifásico o termo fonte contabiliza a transferência de massa e de quantidade de movimento na interface.

Integrando a equação (3.31) sobre um volume de controle (figura 3.1) e escrevendo termo a termo, da esquerda para a direita, tem-se:

- Termo Transiente

$$\int_{VC} \frac{\partial}{\partial t} (\epsilon_m \rho_m \phi) dV \approx \left[ (\epsilon_m \rho_m \phi)_P - (\epsilon_m \rho_m \phi)_P^{old} \right] \frac{\Delta V}{\Delta t} \quad (3.32)$$

- Termo Convectivo

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial}{\partial x_i} (\epsilon_m \rho_m v_m \phi) dV &\approx \left\{ \xi_e (\epsilon_m \rho_m \phi)_E + \bar{\xi}_e (\epsilon_m \rho_m \phi)_P \right\} (u_m)_e A_e \\ &- \left\{ \xi_w (\epsilon_m \rho_m \phi)_P + \bar{\xi}_w (\epsilon_m \rho_m \phi)_W \right\} (u_m)_w A_w \\ &+ \left\{ \xi_n (\epsilon_m \rho_m \phi)_N + \bar{\xi}_n (\epsilon_m \rho_m \phi)_P \right\} (v_m)_n A_n \\ &- \left\{ \xi_s (\epsilon_m \rho_m \phi)_P + \bar{\xi}_s (\epsilon_m \rho_m \phi)_S \right\} (v_m)_s A_s \\ &+ \left\{ \xi_t (\epsilon_m \rho_m \phi)_T + \bar{\xi}_t (\epsilon_m \rho_m \phi)_P \right\} (w_m)_t A_t \\ &- \left\{ \xi_b (\epsilon_m \rho_m \phi)_P + \bar{\xi}_b (\epsilon_m \rho_m \phi)_B \right\} (w_m)_b A_b \end{aligned} \quad (3.33)$$

- Termo Difusivo

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) dV &\approx \left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e A_e - \left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w A_w \\ &+ \left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n A_n - \left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s A_s \\ &+ \left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_t A_t - \left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_b A_b \end{aligned} \quad (3.34)$$

Os fluxos difusivos são aproximados utilizando a equação (3.6). Por exemplo, o fluxo difusivo da face leste será dado por:

$$\left( \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \approx (\Gamma_\phi)_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x_e} \quad (3.35)$$

Os valores do coeficiente de difusão são calculados de acordo com a equação (3.7). Assim:

$$\begin{aligned} (\Gamma_\phi)_e &= \left[ \frac{1 - f_e}{(\Gamma_\phi)_P} + \frac{f_e}{(\Gamma_\phi)_E} \right]^{-1} \\ &= \frac{(\Gamma_\phi)_P (\Gamma_\phi)_E}{f_e (\Gamma_\phi)_P + (1 - f_e) (\Gamma_\phi)_E} \quad \text{onde} \quad f_e = \frac{\Delta x_E}{\Delta x_P + \Delta x_E} \end{aligned} \quad (3.36)$$

- Termo Fonte

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

$$R_\phi \approx \overline{R_\phi} - R'_\phi \phi_P \quad (3.37)$$

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 resulta em:

$$\int_{VC} R_\phi dV \approx \overline{R_\phi} \Delta V - R'_\phi \phi_P \Delta V \quad (3.38)$$

Combinando as equações deduzidas acima, obtém-se:

$$\begin{aligned} & \left( \frac{(\rho'_m \phi)_P - (\rho'_m \phi)^0}{\Delta t} \right) \Delta V \\ & + \left\{ \xi_e (\epsilon_m \rho_m \phi)_E + \bar{\xi}_e (\epsilon_m \rho_m \phi)_P \right\} (u_m)_e A_e - \left\{ \xi_w (\epsilon_m \rho_m \phi)_P + \bar{\xi}_w (\epsilon_m \rho_m \phi)_W \right\} (u_m)_w A_w \\ & + \left\{ \xi_n (\epsilon_m \rho_m \phi)_N + \bar{\xi}_n (\epsilon_m \rho_m \phi)_P \right\} (v_m)_n A_n - \left\{ \xi_s (\epsilon_m \rho_m \phi)_P + \bar{\xi}_s (\epsilon_m \rho_m \phi)_S \right\} (v_m)_s A_s \\ & + \left\{ \xi_t (\epsilon_m \rho_m \phi)_T + \bar{\xi}_t (\epsilon_m \rho_m \phi)_P \right\} (w_m)_t A_t - \left\{ \xi_b (\epsilon_m \rho_m \phi)_P + \bar{\xi}_b (\epsilon_m \rho_m \phi)_B \right\} (w_m)_b A_b \\ & = \left\{ (\Gamma_\phi)_e \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x_e} A_e - (\Gamma_\phi)_w \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\Delta x_w} A_w \right\} \\ & + \left\{ (\Gamma_\phi)_n \frac{(\phi_N - \phi_P)}{\Delta y_n} A_n - (\Gamma_\phi)_s \frac{(\phi_P - \phi_S)}{\Delta y_s} A_s \right\} \\ & + \left\{ (\Gamma_\phi)_t \frac{(\phi_T - \phi_P)}{\Delta z_t} A_t - (\Gamma_\phi)_b \frac{(\phi_P - \phi_B)}{\Delta z_b} A_b \right\} + \left( \overline{R_\phi} - R'_\phi \phi_P \right) \Delta V \end{aligned} \quad (3.39)$$

Onde se define as densidades macroscópicas como:  $\rho'_m = \epsilon_m \rho_m$ .

A equação (3.39) pode ser rearranjada de forma a obter o seguinte sistema de equações lineares para  $\phi$ :

$$a_P \phi_P = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + S_P \quad (3.40)$$

onde  $S_P$  é a contribuição dos termos transientes e a integral do termo fonte linearizado, o subscrito  $nb$  representa a contribuição das faces  $E, W, N, S, T$  e  $B$  da célula. Antes de utilizar a equação acima para determinação de  $\phi$ , é recomendado que a equação da continuidade discretizada multiplicada por  $\phi$  seja subtraída de (3.40). A razão para tal manipulação é discutida em detalhes por Patankar (1980).

A parte homogênea da equação diferencial parcial para  $\phi$  (Eq.3.31) admite infinitas soluções da forma  $(\phi + c)$ , onde  $c$  é uma constante arbitrária. A equação de diferenças finitas para  $\phi$  deve admitir o mesmo número de soluções. Do contrário, uma pequena flutuação no balanço de massa durante as iterações pode produzir grandes flutuações nos valores de  $\phi$ , afetando de maneira adversa a convergência. Pode-se mostrar que as equações de diferenças finitas terão a propriedade desejada se:

$$a_P = \sum_{nb} a_{nb} \quad (3.41)$$

quando as contribuições das instabilidades e do termo fonte à  $a_P$  são descartadas. Patankar (1980) denomina esta restrição de *Regra 4*. Uma equação da forma (3.40) deduzida da equação (3.39) não satisfaz a *Regra 4*.

A forma discretizada da equação da continuidade pode ser obtida da equação (3.39), assumindo  $\phi = 1$  e substituindo o termo fonte por  $\sum_l R_l$ . Então, subtraindo a equação da continuidade discretizada multiplicada por  $\phi$  da equação (3.39), obtém-se uma equação linear da forma (3.40), na qual os coeficientes são definidos como segue:

$$a_E = D_e - \xi_e (\epsilon_m \rho_m)_E (u_m)_e A_e \quad (3.42)$$

$$a_W = D_w - \bar{\xi}_w (\epsilon_m \rho_m)_W (u_m)_w A_w \quad (3.43)$$

$$a_N = D_n - \xi_n (\epsilon_m \rho_m)_N (v_m)_n A_n \quad (3.44)$$

$$a_S = D_s - \bar{\xi}_s (\epsilon_m \rho_m)_S (v_m)_s A_s \quad (3.45)$$

$$a_T = D_t - \xi_t (\epsilon_m \rho_m)_T (w_m)_t A_t \quad (3.46)$$

$$a_B = D_b - \bar{\xi}_b (\epsilon_m \rho_m)_B (w_m)_b A_b \quad (3.47)$$

$$a_P = \sum_{nb} a_{nb} + a_P^0 + R'_\phi \Delta V + [[\sum R_l]] \Delta V \quad (3.48)$$

$$S_P = a_P^0 \phi_P^0 + \bar{R}_\phi \Delta V + \phi_P [[-\sum R_l]] \Delta V \quad (3.49)$$

$$a_P^0 = \frac{(\epsilon_m \rho_m)^0}{\Delta t} \Delta V \quad (3.50)$$

$$D_k = \frac{(\Gamma_\phi)_k A_k}{\Delta x_k}, k = e, w, n, s, t, b \quad (3.51)$$

### Observações

Diferentemente do escoamento monofásico, a equação da continuidade para escoamento multifásico apresenta um termo fonte ( $\sum_l R_l$ ) que contabiliza a transferência de massa na interface. Desde que a equação da continuidade multiplicada por  $\phi$  é subtraída da equação (3.40), o termo aparece na equação de transporte discretizada. A inclusão deste termo fonte diminuiria a velocidade de convergência, e a sua inclusão no coeficiente central desestabilizaria as iterações quando  $\sum_l R_l < 0$ . Portanto, o termo é manipulado de forma que, sua contribuição para  $a_P$  é não negativa. Utilizando a definição da função de duplo colchete:

$$[[R]] = \begin{cases} 0, & R \leq 0 \\ R, & R > 0 \end{cases} \quad (3.52)$$

Da definição acima, segue que:

$$R = [[R]] - [[-R]] \quad (3.53)$$

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

$$\phi_P \sum_l R_l = \phi_P \left[ \left[ \sum_l R_l \right] \right] - \phi_P \left[ \left[ - \sum_l R_l \right] \right] \quad (3.54)$$

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

Se uma discretização em lei de potências é procurada, toma-se o fator de convecção como zero, isto é,  $\xi = 0$  e  $\bar{\xi} = 1$  e substitui-se  $D$  por:  $DA(|P|)$ , onde  $P$  é o número de Péclet para a face. Por exemplo, substituindo-se  $D_e$  na equação (3.42) por  $D_e A(|P_e|)$ , onde  $A(|P_e|) = [[(1 - 0, 1|P_e|)^5]]$ .

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

O uso de métodos de ordem elevada pode resultar na violação, em algumas regiões da *Regra 2* de Patankar (1980). A *Regra 2* estabelece que todos os coeficientes  $a_{nb}$  na equação (3.40) devem possuir o mesmo sinal, dito positivo. As bases físicas para esta regra é que o aumento (ou diminuição) no valor de  $\phi$  em uma célula vizinha deveria causar um aumento (ou diminuição) nos valores de  $\phi_P$ , não o contrário. Esta regra quando combinada com a

*Regra 4* também garante que a discretização produz um sistema de equações diagonalmente dominante. A regra é estritamente satisfeita pela equação acima somente quando utilizamos o esquema FOUP. Quando esquemas de ordem superior são utilizados, alguns coeficientes podem tornar-se negativos quando o comportamento local de  $\phi$  é monótona. Tais violações da *Regra 2* não são motivos para inquietações, desde que o limitador utiliza considerações mais elaboradas para garantir que a solução é limitada e fisicamente realística.

### 3.3 Solução numérica do modelo hidrodinâmico para escoamento gás-sólido

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

- (i) Há mais campos de variáveis e, portanto mais equações comparadas com escoamentos monofásicos. Isto desacelera a computação, mas não torna o algoritmo mais complexo.
- (ii) A pressão aparece nas componentes da equação 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 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 está implementada no K-FIX “Kachina-Fully Implicit Exchange”. No MFIX, as equações de quantidade de movimento são resolvidas em todo o domínio computacional.

Para tornar o termo de intercâmbio totalmente implícito todas as equações para cada componente de velocidade (tanto da fase gás como da fase sólida) devem ser resolvidas juntas, o que origina uma matriz com estrutura não padrão. Uma alternativa mais barata é utilizar o algoritmo de eliminação parcial (PEA - “Partial Elimination Algorithm”) de Spalding (1980), que será discutido adiante.

No fluxo granular multifásico outros dois pontos críticos determinam o sucesso do esquema numérico. Um é o tratamento das regiões com altas concentrações de sólido (regiões próximas de 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 das equações lineares tais que valores não-negativos da fração de volume são calculados. A restrição da fração de volume de sólido no ou abaixo do valor máximo é mais difícil. A formação da região de empacotamento é análoga a 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 pelo “Illinois Institute of Technology” (ITT) em Gidaspow e Etehadieh (1983) através da introdução de uma equação de estado que relaciona a pressão do sólido com a fração de volume do sólido. A função da pressão do sólido aumenta exponencialmente quando a fração volumétrica de sólido aproxima-se do limite do empacotamento, e assim retarda a compactação do sólido. Este método permite o meio granular ser suavemente compressível. O meio granular pode também ser considerado incompressível como foi feito por Syamlal e O’Brien (1988). É também o método utilizado no código FLUENT<sup>TM</sup> (“Fluent Users Manual”, 1996). Neste método nenhuma equação de estado para a pressão do sólido é necessária. A fração volumétrica de sólido no empacotamento máximo precisa ser especificada, que também é um parâmetro explícito ou implícito na equação de estado utilizada para o caso de suave compressibilidade.

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

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

uma fase não está definido nas regiões onde a fração volumétrica é zero, e assim podem admitir valores arbitrários. Entretanto, um algoritmo computacional não deve utilizar arbitrariedade no conjunto de valores. Como exemplo, em seção anterior mostrou-se que o uso de uma média harmônica para os cálculos dos valores dos coeficiente de difusão da face de uma célula previne a difusão de  $\phi$  nas regiões onde a fase associada com ela é ausente. O cálculo das componentes das velocidades em tais interfaces é mais difícil do que as quantidades escalares devido a linearização dos termos convectivos não lineares. Em uma interface onde a fração volumétrica da fase está próxima de zero, a componente normal da velocidade torna-se muito grande. Desde que o produto da fração volumétrica da fase e da componente da velocidade é ainda próxima 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 médios-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 da conservação da quantidade de movimento

A discretização das equações de quantidade de movimento é semelhante àquela de transporte escalar, exceto que os volumes de controles estão deslocados. De acordo com Patankar (1980), se os componentes de velocidade e pressão são armazenados em um mesmo local do grid, obtém-se uma solução aceitável. Um grid deslocado é usado para prevenir resultados não físicos para os campos de pressão. Conforme mostrado na figura 3.7, em relação ao volume de controle escalar, a direção  $x$  é deslocada para a metade leste da célula do volume de controle. Similarmente as direções  $y$  e  $z$  são deslocadas para a metade das células.

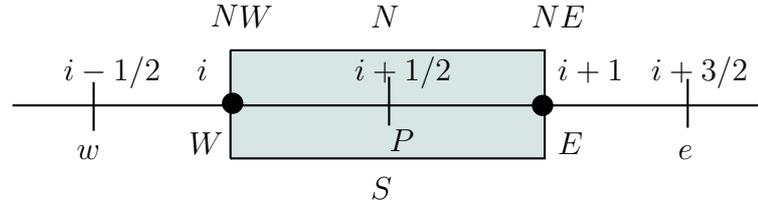


Figura 3.7: Volume de controle para a componente  $x$  da equação de quantidade de movimento.

### Equação da conservação da 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:

$$(u_m)_E = f_E (u_m)_P + (1 - f_E) (u_m)_e \quad (3.55)$$

$$(v_m)_N = f_P (v_m)_{NW} + (1 - f_P) (v_m)_{NE} \quad (3.56)$$

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

$$(\epsilon_m)_P = f_P (\epsilon_m)_W + (1 - f_P) (\epsilon_m)_E \quad (3.57)$$

onde:

$$f_E = \frac{\Delta x_e}{\Delta x_P + \Delta x_e} \quad \text{e} \quad f_P = \frac{\Delta x_E}{\Delta x_W + \Delta x_E} \quad (3.58)$$

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

$$\begin{aligned} a_P (u_m)_P &= \sum_{nb} a_{nb} (u_m)_{nb} + b_P - A_P (\epsilon_m)_P ((P_g)_E - (P_g)_W) \\ &+ \left( \sum_l F_{lm} (u_l - u_m)_P \right) \Delta V_e \end{aligned} \quad (3.59)$$

A equação (3.59) é semelhante à equação de transporte escalar discretizada, exceto pelos dois últimos termos: o termo do gradiente de pressão é determinado baseado no campo de pressão atual  $P_g$  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  $z$ ).

A definição dos termos restantes na equação (3.59) é dada nas relações abaixo:

$$\begin{aligned}
a_e &= D_E - \xi_E (\epsilon_m \rho_m)_e (u_m)_E A_E \\
a_w &= D_W - \bar{\xi}_W (\epsilon_m \rho_m)_w (u_m)_W A_W \\
a_n &= D_N - \xi_N (\epsilon_m \rho_m)_n (u_m)_N A_N \\
a_s &= D_S - \bar{\xi}_S (\epsilon_m \rho_m)_s (u_m)_S A_S \\
a_t &= D_T - \xi_T (\epsilon_m \rho_m)_t (u_m)_T A_T \\
a_b &= D_B - \bar{\xi}_B (\epsilon_m \rho_m)_b (u_m)_B A_B \\
a_P &= \sum_{nb} a_{nb} + a_P^0 + R'_{u_m} \Delta V_e + \left[ \left[ \sum R_l \right] \right] \Delta V_e + S' \\
b &= a_P^0 u_m^0 + \bar{R}_{u_m} \Delta V_e + u_m \left[ \left[ - \sum R_l \right] \right] \Delta V_e + (\epsilon_m \rho_m)_e g_x \Delta V_e + \bar{S} \\
a_P^0 &= \frac{(\epsilon_m \rho_m)^0}{\Delta t} \Delta V_e \\
D_E &= \frac{(u_m)_E A_E}{\Delta x_E}
\end{aligned} \tag{3.60}$$

O coeficiente central  $a_P$  e o termo fonte  $b$  contêm os termos adicionais  $S'$  e  $\bar{S}$ , os quais contabilizam as fontes que surgem das coordenadas cilíndricas, do modelo de meio poroso e do termo da tensão de cisalhamento.

### Condições de contorno

Nas simulações realizadas no presente trabalho, utilizou-se para a fase gasosa a hipótese de plena aderência na parede. Tal hipótese implica na condição de contorno denominada condição de não deslizamento na parede. Esta estabelece que as componentes normal e tangencial do vetor velocidade em uma parede estacionária são nulas, isto é,  $u_{g,W} = v_{g,W} = 0$ . No caso da fase sólida, o estabelecimento das condições de contorno na parede é mais complicado devido à dificuldade da caracterização da interação das partículas com a parede. As condições de contorno na parede, implementadas no MFIX para a solução da equação linear são dadas a seguir (Syamlal (1998)). A componente da velocidade na direção  $y$  na parede leste é utilizada como um exemplo, figura 3.8. A implementação para as outras componentes é análoga.

1. Deslizamento livre na parede

$$v_m(i, j + 1/2, k) - v_m(i - 1, j + 1/2, k) = 0 \tag{3.61}$$

2. Não deslizamento na parede

$$v_m(i, j + 1/2, k) + v_m(i - 1, j + 1/2, k) = 0 \tag{3.62}$$

Uma outra condição de contorno devido ao deslizamento das partículas na parede é apresentada a seguir:

### 3. Deslizamento parcial na parede

$$\frac{\partial v_m}{\partial n} + h_v (v_m - v_w) = 0 \quad (3.63)$$

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

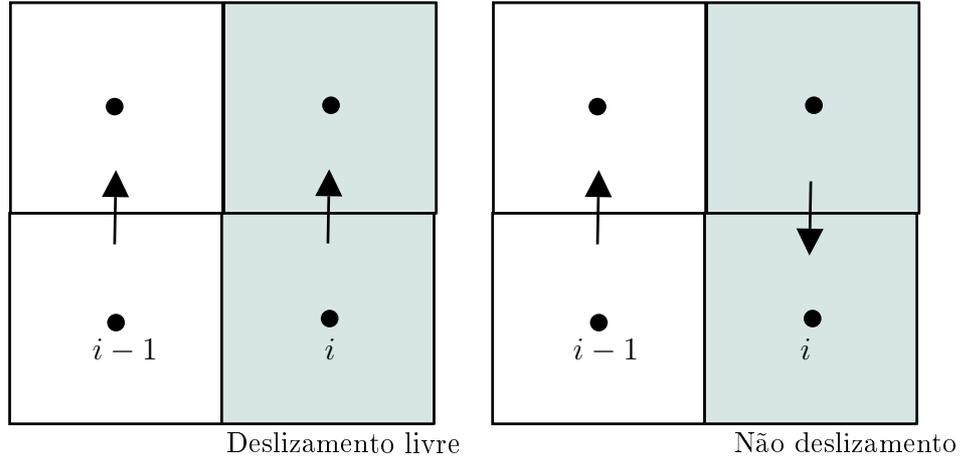


Figura 3.8: Condição de Deslizamento livre e de Não Deslizamento na parede leste.

A forma discreta da equação (3.63), por exemplo, na face leste é:

$$v_m(i, j + 1/2, k) \left( \frac{h_v}{2} + \frac{1}{\Delta x_E} \right) + v_m(i-1, j + 1/2, k) \left( \frac{h_v}{2} - \frac{1}{\Delta x_E} \right) = h_v v_w \quad (3.64)$$

A equação (3.64) é uma condição de deslizamento generalizada. Os coeficientes  $h_v$  e  $v_w$  podem descrever a condição de não deslizamento quando  $h_v \rightarrow \infty$  e  $v_w = 0$ ; deslizamento livre quando  $h_v = 0$  e uma condição de deslizamento parcial quando  $h_v \neq 0$  e  $v_w \neq 0$ .

Para as simulações realizadas neste trabalho, no caso da fase sólida, considerou-se a hipótese de não deslizamento na parede.

### Algoritmo para equação linear

#### Algoritmo 3.3 :

As equações lineares para resolução das equações de quantidade de movimento que foram modificadas seguem:

1. Cálculo da velocidade média da quantidade de movimento das faces das células. (eq.(3.55 e 3.56)).
2. Cálculo do coeficiente de convecção  $\xi$ . (alg.3.2).

3. Cálculo do coeficiente  $a_{nb}$ . (eq.(3.60)).
4. Modificar os coeficientes vizinhos para ter em conta a presença de superfícies internas (assume-se livre deslizamento nas paredes) (eq.(3.61)).
5. Cálculo do coeficiente central e termos fontes. Para paredes impermeáveis superfícies internas todos os coeficientes vizinhos e a componente normal da velocidade são zero.

### 3.3.2 Eliminação parcial do acoplamento na interface

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

$$\epsilon_m \rho_m \frac{\partial \phi}{\partial t} + \epsilon_m \rho_m (v_m)_i \frac{\partial \phi_m}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \Gamma_{\phi_m} \frac{\partial \phi_m}{\partial x_i} \right) + R_{\phi_m} - \phi_m \left( \sum R_{lm} \right) + \sum_{l=0}^M F_{lm} (\phi_l - \phi_m) \quad (3.65)$$

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

A equação correspondente discreta é:

$$(a_m)_P (\phi_m)_P = \sum_{nb} (a_m)_{nb} (\phi_m)_{nb} + b_m + \Delta V \sum_{l=0}^M F_{lm} [(\phi_l)_P - (\phi_m)_P] \quad (3.66)$$

que é semelhante em forma à equação discreta da quantidade de movimento, discutida na seção 3.3.1.

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

$$(a_0)_P (\phi_0) = \sum_{nb} (a_0)_{nb} (\phi_0)_{nb} + b_0 + \Delta V F_{10} [(\phi_1)_P - (\phi_0)_P] \quad (3.67)$$

$$(a_1)_P (\phi_1)_P = \sum_{nb} (a_1)_{nb} (\phi_1)_{nb} + b_1 + \Delta v F_{10} [(\phi_0)_P - (\phi_1)_P] \quad (3.68)$$

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

$$(\phi_0)_P = \frac{\sum_{nb} (a_0)_{nb} (\phi_0)_{nb} + b_0}{(a_0)_P} \quad (3.69)$$

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

$$(\phi_0)_P = (\phi_1)_P = \frac{\sum_{nb} (a_0)_{nb} (\phi_0)_{nb} + b_0 + \sum_{nb} (a_1)_{nb} (\phi_1)_{nb} + b_1}{(a_0)_P + (a_1)_P} \quad (3.70)$$

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 com valores  $b_0$  e  $b_1$ . Para obter convergência enquanto utilizam-se grandes amplitudes para o passo temporal, o esquema iterativo deve ser projetado tal que ele possa calcular as duas soluções limitadas acima. Por esta razão Spalding (1980) sugere o seguinte algoritmo de eliminação parcial:

Resolve-se para  $(\phi_1)_P$  da equação (3.68) para obter:

$$(\phi_1)_P = \frac{\sum_{nb} (a_1)_{nb} (\phi_1)_{nb} + b_1 + \Delta V F_{10} (\phi_0)_P}{(a_1)_P + \Delta V F_{10}} \quad (3.71)$$

Substitui na equação (3.67) para obter-se:

$$\left[ (a_0)_P + \frac{(a_1)_P \Delta V F_{10}}{(a_1)_P + \Delta V F_{10}} \right] (\phi_0)_P = \sum_{nb} (a_0)_{nb} (\phi_0)_{nb} + b_0 + \frac{\Delta V F_{10}}{(a_1)_P + \Delta V F_{10}} \left\{ \sum_{nb} (a_1)_{nb} (\phi_1)_{nb} + b_1 \right\} \quad (3.72)$$

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

$$\left[ (a_1)_P + \frac{(a_0)_P \Delta V F_{10}}{(a_0)_P + \Delta V F_{10}} \right] (\phi_1)_P = \sum_{nb} (a_1)_{nb} (\phi_1)_{nb} + b_1 + \frac{\Delta V F_{10}}{(a_0)_P + \Delta V F_{10}} \left\{ \sum_{nb} (a_0)_{nb} (\phi_0)_{nb} + b_0 \right\} \quad (3.73)$$

O conjunto de equações lineares para  $\phi_0$  e  $\phi_1$  são desacoplados por meio do tratamento dos últimos termos nas equações (3.72) e (3.73) com termos fontes avaliados como  $(\phi_0)_{nb}$  e  $(\phi_1)_{nb}$ . 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  $F_{10}$ .

### 3.3.3 Equação para correção da pressão do fluido

#### Formulação

A componente  $x$  para a equação da quantidade de movimento discreta (seção 3.3.1) para duas fases, por exemplo, é:

$$\begin{aligned} a_{0P}(u_0)_P &= \sum_{nb} a_{0nb}(u_0)_{nb} + b_0 - A_P(\epsilon_0)_P \left( (P_g)_E - (P_g)_W \right) \\ &+ F_{10} [(u_1)_P - (u_0)_P] \Delta V \end{aligned} \quad (3.74)$$

$$\begin{aligned} a_{1P}(u_1)_P &= \sum_{nb} a_{1nb}(u_1)_{nb} + b_1 - A_P(\epsilon_1)_P \left( (P_g)_E - (P_g)_W \right) \\ &+ F_{10} [(u_0)_P - (u_1)_P] \Delta V - A_P \left( (P_s)_E - (P_s)_W \right) \end{aligned} \quad (3.75)$$

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

Conforme o algoritmo 3.4, primeiramente resolve-se as equações (3.74) e (3.75) utilizando o campo de pressão  $P_g^*$  e o campo de fração de vazio  $\epsilon_0^*$ , obtidos da iteração anterior para calcular uma tentativa para os campos de velocidade  $u_0^*$ ,  $u_1^*$  e outras componentes da velocidade.

$$\begin{aligned} a_{0P}(u_0^*)_P &= \sum_{nb} a_{0nb}(u_0^*)_{nb} + b_0 - A_P(\epsilon_0^*)_P \left( (P_g^*)_E - (P_g^*)_W \right) \\ &+ F_{10} [(u_1^*)_P - (u_0^*)_P] \Delta V \end{aligned} \quad (3.76)$$

$$\begin{aligned} a_{1P}(u_1^*)_P &= \sum_{nb} a_{1nb}(u_1^*)_{nb} + b_1 - A_P(\epsilon_1^*)_P \left( (P_g^*)_E - (P_g^*)_W \right) \\ &+ F_{10} [(u_0^*)_P - (u_1^*)_P] \Delta V - A_P \left( (P_s^*)_E - (P_s^*)_W \right) \end{aligned} \quad (3.77)$$

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

$$\begin{aligned} (P_g)_E &= (P_g^*)_E + (P'_g)_E; \\ (P_s)_E &= (P_s^*)_E + (P'_s)_E; \\ (u_0)_P &= (u_0^*)_P + (u'_0)_P; \\ (u_1)_P &= (u_1^*)_P + (u'_1)_P \end{aligned} \quad (3.78)$$

para as outras componentes da velocidade as fórmulas são semelhantes.

Substituem-se as correções equações (3.78) nas equações (3.74) e (3.75), e da equação resultante subtraem-se nas equações (3.76) e (3.77) para obter-se:

$$a_{0P}(u'_0)_P = \sum_{nb} a_{0nb}(u'_0)_{nb} - A_P(\epsilon_0^*)_P \left( (P'_g)_E - (P'_g)_W \right) + F_{10} \left[ (u'_1)_P - (u'_0)_P \right] \Delta V \quad (3.79)$$

$$\begin{aligned}
a_{1P} (u'_1)_P &= \sum_{nb} a_{1nb} (u'_1)_{nb} - A_P (\epsilon_1^*)_P \left( (P'_g)_E - (P'_g)_W \right) + F_{10} \left[ (u'_0)_P - (u'_1)_P \right] \Delta V \\
&\quad - A_P \left( (P'_s)_E - (P'_s)_W \right)
\end{aligned} \tag{3.80}$$

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

$$a_{0P} (u'_0)_P = -A_P (\epsilon_0^*)_P \left( (P'_g)_E - (P'_g)_W \right) + F_{10} \left[ (u'_1)_P - (u'_0)_P \right] \Delta V \tag{3.81}$$

$$a_{1P} (u'_1)_P = -A_P (\epsilon_1^*)_P \left( (P'_g)_E - (P'_g)_W \right) + F_{10} \left[ (u'_0)_P - (u'_1)_P \right] \Delta V \tag{3.82}$$

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

Da equação (3.82), obtêm-se:

$$(a_{1P} + F_{10}\Delta V) (u'_1)_P = -A_P (\epsilon_1^*)_P \left( (P'_g)_E - (P'_g)_W \right) + F_{10} (u'_0)_P \Delta V \tag{3.83}$$

Substituindo na equação (3.81), tem-se:

$$\begin{aligned}
a_{0P} (u'_0)_P &= -A_P (\epsilon_0^*)_P \left( (P'_g)_E - (P'_g)_W \right) \\
&\quad + F_{10} \left[ \frac{-A_P (\epsilon_1^*)_P \left( (P'_g)_E - (P'_g)_W \right) + F_{10} (u'_0)_P \Delta V}{a_{1P} + F_{10}\Delta V} - (u'_0)_P \right] \Delta V
\end{aligned} \tag{3.84}$$

Resolvendo para  $(u'_0)_P$ , obtêm-se:

$$\left[ a_{0P} + \frac{F_{10}\Delta V a_{10}}{a_{1P} + F_{10}\Delta V} \right] (u'_0)_P = - \left[ A_P (\epsilon_0^*)_P + A_P (\epsilon_1^*)_P \frac{F_{10}\Delta V}{a_{1P} + F_{10}\Delta V} \right] \left( (P'_g)_E - (P'_g)_W \right) \tag{3.85}$$

que pode ser reescrita como:

$$(u'_0)_P = -d_{0P} \left( (P'_g)_E - (P'_g)_W \right) \tag{3.86}$$

onde

$$d_{0P} = \frac{A_P \left[ (\epsilon_0^*)_P + \frac{(\epsilon_1^*)_P F_{10}\Delta V}{a_{1P} + F_{10}\Delta V} \right]}{\left[ a_{0P} + \frac{F_{10}\Delta V a_{10}}{a_{1P} + F_{10}\Delta V} \right]} \tag{3.87}$$

Analogamente,

$$(u'_1)_P = -d_{1P} \left( (P'_g)_E - (P'_g)_W \right) \tag{3.88}$$

onde

$$d_{1P} = \frac{A_P \left[ (\epsilon_1^*)_P + \frac{(\epsilon_0^*)_P F_{10}\Delta V}{a_{0P} + F_{10}\Delta V} \right]}{\left[ a_{1P} + \frac{F_{10}\Delta V a_{0P}}{a_{0P} + F_{10}\Delta V} \right]} \tag{3.89}$$

Assim, as correções para as velocidades são dadas por:

$$(u_m)_P = (u_m^*)_P = -d_{mP} \left( (P'_g)_E - (P'_g)_W \right) \quad (3.90)$$

Substituindo a equação acima e equações semelhantes para as demais componentes da velocidade na equação (3.39), com  $\phi = 1$ , para a fase fluido obtém-se uma equação para a correção da pressão.

$$\begin{aligned} & \left( \frac{(\epsilon_0 \rho_0)_P - (\epsilon_0 \rho_0)_P^0}{\Delta t} \right) \Delta V \\ & + \left\{ (\epsilon_0 \rho_0)_E \xi_e + (\epsilon_0 \rho_0)_P \bar{\xi}_e \right\} \left[ (u_0^*)_e - d_{0e} \left( (P'_g)_E - (P'_g)_P \right) \right] A_e \\ & - \left\{ (\epsilon_0 \rho_0)_P \xi_w + (\epsilon_0 \rho_0)_w \bar{\xi}_w \right\} \left[ (u_0^*)_w - d_{0w} \left( (P'_g)_P - (P'_g)_W \right) \right] A_w \\ & + \left\{ (\epsilon_0 \rho_0)_N \xi_n + (\epsilon_0 \rho_0)_P \bar{\xi}_n \right\} \left[ (v_0^*)_n - d_{0n} \left( (P'_g)_N - (P'_g)_P \right) \right] A_n \\ & - \left\{ (\epsilon_0 \rho_0)_P \xi_s + (\epsilon_0 \rho_0)_s \bar{\xi}_s \right\} \left[ (v_0^*)_s - d_{0s} \left( (P'_g)_P - (P'_g)_S \right) \right] A_s \\ & + \left\{ (\epsilon_0 \rho_0)_T \xi_t + (\epsilon_0 \rho_0)_P \bar{\xi}_t \right\} \left[ (w_0^*)_t - d_{0t} \left( (P'_g)_T - (P'_g)_P \right) \right] A_t \\ & - \left\{ (\epsilon_0 \rho_0)_P \xi_b + (\epsilon_0 \rho_0)_B \bar{\xi}_b \right\} \left[ (w_0^*)_b - d_{0b} \left( (P'_g)_P - (P'_g)_B \right) \right] A_b \\ & = \Delta V \sum_l (R_{lm})_P \end{aligned} \quad (3.91)$$

a qual pode ser escrita na forma padrão

$$a_P = (P'_g)_P = \sum_{nb} a_{nb} (P'_g)_{nb} + b \quad (3.92)$$

onde

$$\begin{aligned} a_E &= \left\{ (\epsilon_0 \rho_0)_E \xi_e + (\epsilon_0 \rho_0)_P \bar{\xi}_e \right\} d_{0e} A_e \\ a_W &= \left\{ (\epsilon_0 \rho_0)_P \xi_w + (\epsilon_0 \rho_0)_W \bar{\xi}_w \right\} d_{0w} A_w \\ a_N &= \left\{ (\epsilon_0 \rho_0)_N \xi_n + (\epsilon_0 \rho_0)_P \bar{\xi}_n \right\} d_{0n} A_n \\ a_S &= \left\{ (\epsilon_0 \rho_0)_P \xi_s + (\epsilon_0 \rho_0)_S \bar{\xi}_s \right\} d_{0s} A_s \\ a_T &= \left\{ (\epsilon_0 \rho_0)_T \xi_t + (\epsilon_0 \rho_0)_P \bar{\xi}_t \right\} d_{0t} A_t \\ a_B &= \left\{ (\epsilon_0 \rho_0)_P \xi_b + (\epsilon_0 \rho_0)_B \bar{\xi}_b \right\} d_{0b} A_b \\ a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B \end{aligned} \quad (3.93)$$

$$(3.94)$$

$$\begin{aligned}
b = & - \left\{ \left( \frac{(\epsilon_0 \rho_0)_P - (\epsilon_0 \rho_0)_P^0}{\Delta t} \right) \Delta V \right. \\
& + \left[ (\epsilon_0 \rho_0)_E \xi_e + (\epsilon_0 \rho_0)_P \bar{\xi}_e \right] u_{0e}^* A_e \\
& - \left[ (\epsilon_0 \rho_0)_P \xi_w + (\epsilon_0 \rho_0)_W \bar{\xi}_w \right] u_{0w}^* A_w \\
& + \left[ (\epsilon_0 \rho_0)_N \xi_n + (\epsilon_0 \rho_0)_P \bar{\xi}_n \right] v_{0n}^* A_n \\
& - \left[ (\epsilon_0 \rho_0)_P \xi_s + (\epsilon_0 \rho_0)_S \bar{\xi}_s \right] v_{0s}^* A_s \\
& + \left[ (\epsilon_0 \rho_0)_T \xi_t + (\epsilon_0 \rho_0)_P \bar{\xi}_t \right] w_{0t}^* A_t \\
& - \left[ (\epsilon_0 \rho_0)_P \xi_b + (\epsilon_0 \rho_0)_B \bar{\xi}_b \right] w_{0b}^* A_b \\
& \left. - \Delta v \sum_l (R_{lm})_P \right\}
\end{aligned} \tag{3.95}$$

Após resolver a equação (3.94) 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.

### Fluido compressível

Em fluidos compressíveis, o termo  $\left( \frac{(\epsilon_0 \rho_0)_P - (\epsilon_0 \rho_0)_P^0}{\Delta t} \right) \Delta V$  na equação (3.95), produzirá instabilidades nos cálculos. Uma maneira de resolver este problema é considerar o efeito da pressão sobre a densidade do fluido. Assim:

$$\begin{aligned}
\rho_0 & = \rho_0(P_g) \\
& \approx \rho_0(P_g^*) + \left( \frac{\partial \rho_0}{\partial P_g} \right)_{\rho_0^*} (P_g - P_g^*) \\
& \approx \rho_0^* + \left( \frac{\partial \rho_0}{\partial P_g} \right)^* P_g'
\end{aligned} \tag{3.96}$$

Quando esta correção é inserida na equação para correção da pressão, apenas o coeficiente central precisa ser mudado:

$$a_P = \sum_{nb} a_{nb} + \epsilon_0 \left( \frac{\partial \rho_0}{\partial P_g} \right)^* \frac{\Delta V}{\Delta t} \tag{3.97}$$

### 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 3.9 ilustra as células fictícias

e as internas adjacentes para ambos os casos. As células fictícias são 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 3.9, a substituição da velocidade especificada na equação (3.91), resulta em:

$$\begin{aligned} a_S &= 0 \\ a_P &= a_E + a_W + a_N + a_T + a_B \end{aligned} \quad (3.98)$$

note que  $(v_0^*)_s$  no termo  $b$  (equação (3.95)) é o mesmo que  $(v_0)_s$  especificado na fronteira de entrada. As demais fronteiras de entrada são tratadas de maneira semelhante. A condição de contorno nas paredes impermeáveis é semelhante àquela das fronteiras de entrada, desde que a velocidade normal (à parede) é especificada como zero.

- Pressão Especificada

Quando a pressão é especificada numa célula, a pressão corrigida naquela célula é zero, e para a condição ilustrada na figura 3.9

$$\left(P'_g\right)_n = 0 \quad (3.99)$$

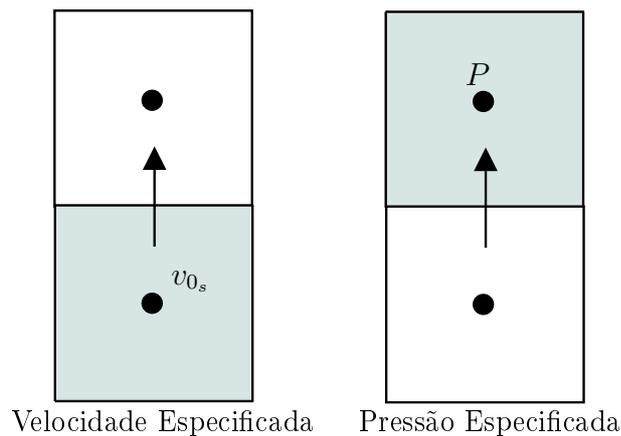


Figura 3.9: Condições de contorno de correção da pressão.

### 3.3.4 Equação para a correção da fração de volume do sólido

O sucesso da técnica numérica depende criticamente da sua capacidade de lidar com o denso empacotamento dos sólidos. No MFIX os cálculos desses limites são estabilizados

incluindo o efeito da pressão sólidos na equação discretizada da continuidade para a fase sólida. Isso será realizado através de uma equação para a correção da fração de volume do sólido como descrito nesta seção.

### Termo convectivo

Para este método é necessário uma equação de estado que relacione a pressão do sólido com a fração de volume do mesmo.

$$P_m = P_m(\epsilon_m) \quad (3.100)$$

Define-se:

$$K_m = \frac{\partial P_m}{\partial \epsilon_m} \quad (3.101)$$

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

$$P'_m = K_m \epsilon'_m \quad (3.102)$$

Como discutido anteriormente, integrando o termo convectivo sob um volume de controle, por exemplo, tem-se:

$$\int \frac{d}{dx} (\epsilon_m \rho_m u_m) dV = (\rho_m \epsilon_m u_m)_e A_e - (\rho_m \epsilon_m u_m)_w A_w \quad (3.103)$$

É necessário o desenvolvimento de fórmulas para calcular fluxos como  $(\rho_m \epsilon_m u_m)_e$ .

Denota-se a velocidade do sólido obtida a partir dos campos de pressão e da fração de volume do sólido como  $(u_m^*)_e$ . Este é o campo de velocidade do sólido obtido no final do passo 4 no algoritmo 3.4. A velocidade atual do sólido pode ser representado como:

$$(u_m)_e = (u_m^*)_e + (u'_m)_e \quad (3.104)$$

onde a correção  $(u'_m)_e$  está relacionada com a correção no campo de pressão do sólido por (ver seção 3.3.3):

$$(u'_m)_e = e_e \left( (P'_m)_P - (P'_m)_E \right) \quad (3.105)$$

a qual é uma derivação semelhante à descrita na seção 3.3.3. Substituindo a equação (3.102), na equação acima, obtém-se

$$(u'_m)_e = e_e \left( (K_m)_P (\epsilon'_m)_P - (K_m)_E (\epsilon'_m)_E \right) \quad (3.106)$$

Além disso, a fração de volume pode ser expressa como uma soma dos valores atuais, acrescidos de uma correção

$$(\epsilon_m)_e = (\epsilon_m^*)_e + (\epsilon'_m)_e \quad (3.107)$$

Combinando as equações (3.106) e (3.107), tem-se

$$\begin{aligned} (\epsilon_m)_e (u_m)_e &\approx (\epsilon_m^*)_e (u_m^*)_e + (\epsilon'_m)_e (u_m^*)_e + (\epsilon_m^*)_e (u'_m)_e \\ &\approx (\epsilon_m^*)_e (u_m^*)_e + (\epsilon'_m)_e (u_m^*)_e + (\epsilon_m^*)_e e_e \left( (K_m)_P (\epsilon'_m)_P - (K_m)_E (\epsilon'_m)_E \right) \end{aligned} \quad (3.108)$$

onde foi ignorado o produto das correções.

Os valores da face da célula podem ser escritos como uma função do valor do centro da célula utilizando o fator de convecção ponderado  $\xi$ . Por exemplo, tem-se:

$$(\epsilon_m)_e = (\epsilon_m)_E \xi_e + (\epsilon_m)_P \bar{\xi}_e \quad (3.109)$$

Assim, o fluxo  $(\rho_m \epsilon_m u_m)_e$  pode ser expresso como:

$$\begin{aligned} (\rho_m)_e (\epsilon_m)_e (u_m)_e &\approx (\rho_m)_e (\epsilon_m^*)_e (u_m^*)_e + (\rho_m)_e \left( \xi_e (\epsilon'_m)_E + \bar{\xi}_e (\epsilon'_m)_P \right) (u_m^*)_e \\ &\quad + (\rho_m)_e (\epsilon_m^*)_e e_e \left( (K_m)_P (\epsilon'_m)_P - (K_m)_E (\epsilon'_m)_E \right) \end{aligned} \quad (3.110)$$

o qual pode ser rearranjando como:

$$\begin{aligned} (\rho_m)_e (\epsilon_m)_e (u_m)_e &\approx (\rho_m)_e (\epsilon_m^*)_e (u_m^*)_e \\ &\quad + (\rho_m)_e \left( \bar{\xi}_e (u_m^*)_e + (\epsilon_m^*)_e (K_m)_P e_e \right) (\epsilon'_m)_P \\ &\quad + (\rho_m)_e (\xi_e (u_m^*)_e - (\epsilon_m^*)_e (K_m)_E e_e) (\epsilon'_m)_E \end{aligned} \quad (3.111)$$

### Termo transiente

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial}{\partial t} (\epsilon_m \rho_m)_P dV &= \frac{[(\epsilon_m)_P (\rho_m)_P - (\epsilon_m)_P^0 (\rho_m)_P^0]}{\Delta t} \Delta V \\ &= \frac{[(\epsilon_m^*)_P + (\epsilon'_m)_P] (\rho_m)_P - (\epsilon_m)_P^0 (\rho_m)_P^0}{\Delta t} \Delta V \\ &= \frac{(\epsilon'_m)_P (\rho_m)_P \Delta V}{\Delta t} + \frac{[(\epsilon_m^*)_P (\rho_m)_P - (\epsilon_m)_P^0 (\rho_m)_P^0]}{\Delta t} \Delta V \end{aligned} \quad (3.112)$$

**Termo fonte**

$$\begin{aligned}
\int \sum R_{lm} dV &= \Delta V \sum R_{lm} = \Delta V \left( \left[ \left[ \sum R_{lm} \right] \right] - \left[ \left[ - \sum R_{lm} \right] \right] \right) \\
&= \Delta V \left( \left[ \left[ \sum R_{lm} \right] \right] - \left[ \left[ - \sum R_{lm} \right] \right] \frac{(\rho_m \epsilon_m)_P}{(\rho_m \epsilon_m)_P} \right) \\
&= \Delta V \left( \left[ \left[ \sum R_{lm} \right] \right] - \left[ \left[ - \sum R_{lm} \right] \right] \frac{(\rho_m)_P (\epsilon_m^* + \epsilon'_m)_P}{(\rho_m \epsilon_m^*)_P} \right) \quad (3.113) \\
&= \Delta V \left( \left[ \left[ \sum R_{lm} \right] \right] - \left[ \left[ - \sum R_{lm} \right] \right] - \left[ \left[ - \sum R_{lm} \right] \right] \frac{(\rho_m)_P (\epsilon'_m)_P}{(\rho_m \epsilon_m^*)_P} \right) \\
&= \Delta V \sum R_{lm} - \left[ \left[ - R_{lm} \right] \right] \frac{(\epsilon'_m)_P (\rho_m)_P}{(\rho_m \epsilon_m^*)_P} \Delta V
\end{aligned}$$

**Equação corrigida**

Combinando todos os termos, uma equação para a correção da fração de volume do sólido pode ser escrita como:

$$a_P = (\epsilon'_m)_P = \sum_{nb} a_{nb} (\epsilon'_m)_{nb} + b \quad (3.114)$$

$$a_E = [(\rho_m \epsilon_m)_e^* e_e (K_m)_E - \xi_e (\rho_m)_E (u_m^*)_e] A_e \quad (3.115)$$

$$a_W = \left[ (\rho_m \epsilon_m)_w^* e_w (K_m)_W + \bar{\xi}_w (\rho_m)_W (u_m^*)_w \right] A_w \quad (3.116)$$

$$a_N = [(\rho_m \epsilon_m)_n^* e_n (K_m)_N - \xi_n (\rho_m)_N (v_m^*)_n] A_n \quad (3.117)$$

$$a_S = \left[ (\rho_m \epsilon_m)_s^* e_s (K_m)_S + \bar{\xi}_s (\rho_m)_S (v_m^*)_s \right] A_s \quad (3.118)$$

$$a_T = [(\rho_m \epsilon_m)_t^* e_t (K_m)_T - \xi_t (\rho_m)_T (w_m^*)_t] A_t \quad (3.119)$$

$$a_B = \left[ (\rho_m \epsilon_m)_b^* e_b (K_m)_B + \bar{\xi}_b (\rho_m)_B (w_m^*)_b \right] A_b \quad (3.120)$$

$$\begin{aligned}
a_P &= (\rho_m)_P \left[ \bar{\xi}_e (u_m^*)_e A_e - \xi_w (u_m^*)_w A_w \right. \\
&\quad + \bar{\xi}_n (v_m^*)_n A_n - \xi_s (v_m^*)_s A_s \\
&\quad \left. + \bar{\xi}_t (w_m^*)_t A_t - \xi_b (w_m^*)_b A_b \right] \\
&\quad + (K_m)_P [(\rho_m \epsilon_m^*)_e e_e A_e + (\rho_m \epsilon_m^*)_w e_w A_w \\
&\quad + (\rho_m \epsilon_m^*)_n e_n A_n + (\rho_m \epsilon_m^*)_s e_s A_s \\
&\quad + (\rho_m \epsilon_m^*)_t e_t A_t + (\rho_m \epsilon_m^*)_b e_b A_b] \\
&\quad + (\rho_m)_P \frac{\Delta V}{\Delta t} + \left[ \left[ - \sum R_{lm} \right] \right] \frac{(\rho_m)_P \Delta V}{(\rho_m \epsilon_m^*)_P} \quad (3.121)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b = & - (\rho_m \epsilon_m^*)_e (u_m^*)_e A_e + (\rho_m \epsilon_m^*)_w (u_m^*)_w A_w \\
& - (\rho_m \epsilon_m^*)_n (v_m^*)_n A_n + (\rho_m \epsilon_m^*)_s (v_m^*)_s A_s \\
& - (\rho_m \epsilon_m^*)_t (w_m^*)_t A_t + (\rho_m \epsilon_m^*)_b (w_m^*)_b A_b \\
& - [(\rho_m \epsilon_m^*)_P - (\rho_m \epsilon_m)_P^0] \frac{\Delta V}{\Delta t} \\
& + \Delta V \sum R_{lm}
\end{aligned} \tag{3.122}$$

Nos cálculos da equação de correção para a fração de volume do sólido, nenhum fator de sob relaxação foi aplicado, pois deseja-se manter o equilíbrio entre a massa do sólido e a precisão da máquina durante as iterações. No entanto, uma exceção será aberta, ao aplicar uma sob relaxação nas regiões densamente empacotadas.

Sumarizando o procedimento de cálculo para escoamento gás-sólido, apresenta-se o algoritmo que ilustra os passos da solução numérica envolvendo as equações apresentadas no decorrer deste capítulo.

**Algoritmo 3.4 :**

1. *Início do passo temporal. Cálculo das propriedades físicas, coeficientes de intercâmbio e taxas de reação.*
2. *Cálculo do campo de velocidade baseado no campo de pressão atual:  $u_m^*, v_m^*, w_m^*$ . (seções 3.3.1 e 3.3.2).*
3. *Cálculo da correção da pressão do fluido  $P_g'$ . (seção 3.3.3).*
4. *Atualização do campo de pressão do fluido aplicando uma sob relaxação:  
 $P_g = P_g^* + \omega_{pg} P_g'$ . Calcula a “velocidade de correção” de  $P_g'$  e atualiza o campo de velocidade:  $u_m = u_m^* + u_m'$ , para  $m = 0$  até  $M$ . Para a fase sólida,  $u_m$  calculado neste passo é denotado como  $u_m^*$  no passo 6.*
5. *Calcula os gradientes  $\frac{\partial P_m}{\partial \epsilon_m}$  para utilizar na equação de correção da pressão volumétrica do sólido. Calcula a correção da fração volumétrica de sólido  $\epsilon_m'$ . (seção 3.3.4).*
6. *Atualiza a fração volumétrica de sólido ( $\epsilon_m \rho_m$  no MFIX):  $\epsilon_m = \epsilon_m^* + \omega_{ps} \epsilon_m'$ . Sob relaxação somente nas regiões onde  $\epsilon_0 < \epsilon_{cp}$  e  $\epsilon_m > 0$ ; isto é, onde o sólido está densamente empacotado e a fração volumétrica de sólido está aumentando. Calcula-se a correção da velocidade para a fase sólida e atualiza o campo de velocidade da fase sólida:  $u_m = u_m^* + u_m'$  (para  $m = 1$  até  $M$ ).*

7. *Calcula a fração de vazio:  $\epsilon_0 = \epsilon_v - \sum_{m \neq 0} \epsilon_m$  ( $\epsilon_v$  é usualmente igual a 1).*
8. *Calcula a pressão do sólido a partir da equação de estado  $P_m = P_m(\epsilon_m)$ .*
9. *Calcula a temperatura e espécies.*
10. *Utiliza o resíduo normalizado calculado nos passos, 2, 3, 5, e 9 para checar a convergência. Se o critério de convergência não é satisfeito continua as iterações (passo2), senão incrementa-se o passo temporal (passo 1).*

### 3.4 Metodologia computacional

Para realizar as simulações utilizou-se o código computacional aberto MFIX - “Multiphase Flow with Interphase eXchanges”, escrito na linguagem de programação Fortran e que está em constante desenvolvimento no NETL (National Energy Technology Laboratory)(Syamlal, Rogers e O’Brien (1993)). Esse código descreve a hidrodinâmica, transferência de calor e reações químicas em sistemas fluido-sólidos. Ele tem sido usado para simular leito fluidizado borbulhante e circulante. Os cálculos realizados no MFIX fornecem dados transientes com distribuições tridimensionais de pressão, velocidade, temperatura e frações de massa para as espécies. A versão atual do código baseia-se na formulação Euleriana-Euleriana para modelar as fases gasosa e sólida, respectivamente. O uso do código permite testar diversos aspectos, desde numéricos, como o efeito 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 paralelo.

Para o desenvolvimento do trabalho utilizou-se como plataforma para o código MFIX o sistema operacional LINUX, que é gratuito e regido pelas normas de software livre, e também o compilador Fortran-Intel para a linguagem de programação Fortran, distribuído gratuitamente pela INTEL® para fins acadêmicos ([www.intel.com](http://www.intel.com)).

Uma simulação numérica utilizando o código MFIX 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 (`post_MFIX` e `animate_MFIX`). A interface do usuário MFIX está esquematizada conforme mostra a figura 3.10.

O arquivo `mfix.dat` definido pelo usuário e necessário para se realizar uma simulação deve conter informações sobre o controle da corrida, tais como: as equações que serão

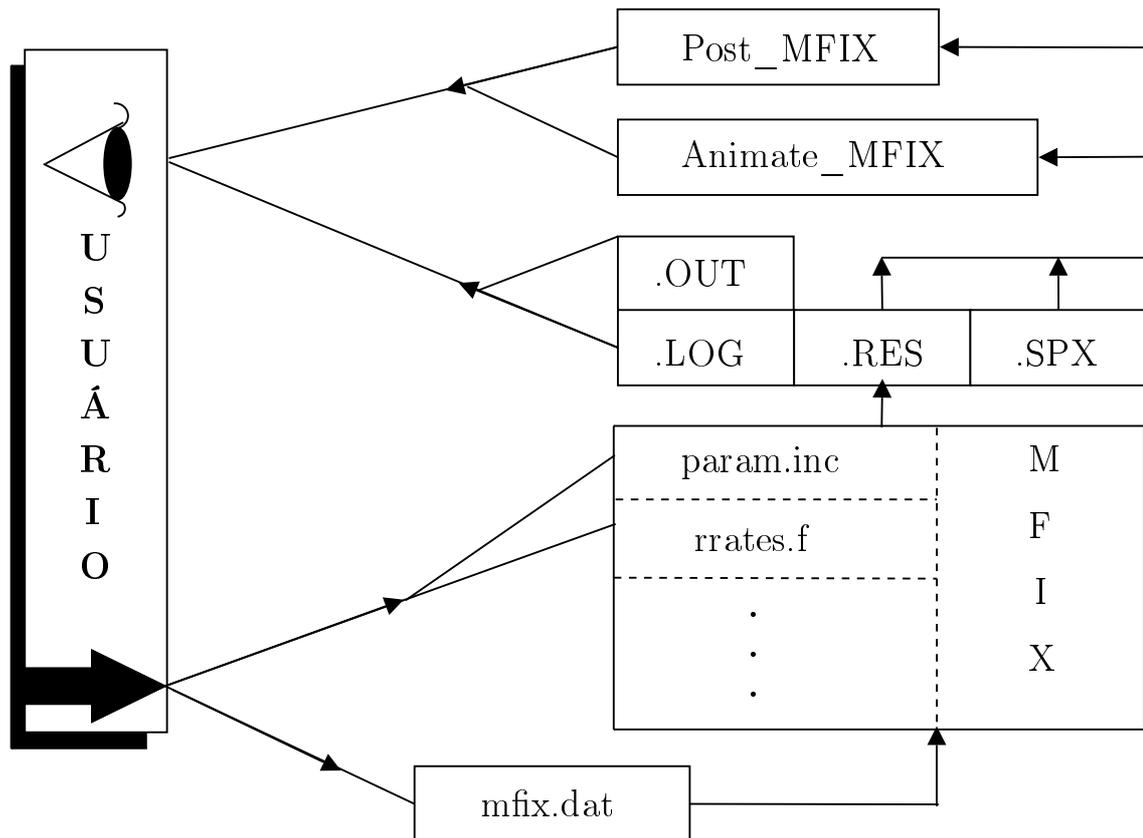


Figura 3.10: Interface do usuário MFIX

resolvidas, tempo de simulação, rotinas que serão utilizadas entre outras. O arquivo `mfix.dat` determina também os parâmetros físicos e numéricos que devem ser utilizados, a geometria e o tipo de discretização, condições iniciais e de contorno e por fim o controle sobre os dados de saída, como por exemplo, o intervalo em que estes dados serão atualizados e salvos nos respectivos arquivos.

Informações adicionais às que são fornecidas pelo `mfix.dat` (expressões para reações químicas e cinéticas, dimensão de matrizes e etc.) podem ser oferecidas modificando adequadamente as subrotinas correspondentes.

Os dois arquivos texto de saída que o usuário poderá acessar diretamente são: `.LOG` e `.OUT`. O arquivo `.LOG` irá conter mensagens de erro, informações sobre convergência e número de iterações, além de mensagens sobre os arquivos de saída que estão sendo escritos. O arquivo `.OUT` trará as informações especificadas no arquivo `mfix.dat` e os valores padrões do MFIX, além de informações sobre a simulação em toda malha computacional. Cada célula computacional é representada por uma seqüência de três caracteres que permite identificar o tipo de célula e informações sobre condições iniciais e de contorno em toda malha computacional. Dessa forma é possível verificar se a entrada de dados foi processada corretamente.

O programa de pós-processamento `post_MFIX` é utilizado para recuperar os dados

dos arquivos .RES e .SPX. A primeira opção do `post_MFIX` permite examinar dados da simulação, tais como fração de vazio, pressão, velocidade, temperatura, entre outros e escrevê-los em arquivos de texto. Ainda é possível escrever arquivos .RES a partir de arquivos no formato .SPX, interpolar arquivos .RES e calcular diversas quantidades.

As representações de animações dos resultados das simulações no MFIX podem ser obtidas utilizando-se o programa `animate_MFIX`.

# Capítulo 4

## Resultados

### 4.1 Introdução

Neste capítulo apresentam-se resultados da simulação numérica do escoamento hidrodinâmico gás-sólido em um leito fluidizado borbulhante, considerando dois esquemas de discretização para os termos convectivos e formulando o tensor das tensões da fase sólida através da Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares - TCEG. A difusão numérica será analisada através de um esquema de primeira ordem (FOUP - “First Order UPwind”) e por um de alta ordem (Superbee).

Neste trabalho é analisado o comportamento das principais variáveis, tais como: fração de vazio, velocidade das fases sólida e gasosa e temperatura granular. É possível, também, obter resultados para outros parâmetros com o código MFIX. O contorno da fração de vazio será responsável por prever o formato das bolhas de gás. Com a formação e ascensão de bolhas em um leito fluidizado, a correta compreensão e previsão destas bolhas, torna-se uma questão fundamental para o estudo do comportamento de leitos fluidizados borbulhantes, pois estas são responsáveis por muitas das propriedades do leito: os processos de transferência de calor e massa, por exemplo, são gravemente afetados pela formação e propagação das bolhas de gás segundo Kuipers *et al.* (1993).

### 4.2 Características do leito para as simulações numéricas

A figura 4.1 mostra a geometria, condições iniciais e de contorno do leito fluidizado borbulhante com jato central que foi utilizado nas simulações numéricas. Os dados numéricos correspondentes são especificados na tabela 4.1. As paredes laterais do leito são rígidas e impermeáveis para ambas as fases. A parte inferior é permeável para o gás e impermeável

para a fase sólida. Inicialmente, jatos de ar entram na base do leito com velocidade específica e uniforme de  $V_{mf} = 0,234\text{m/s}$ , com o intuito de manter o leito a um estado de mínima fluidização. A fração de mínima fluidização considerada é de  $\epsilon_{mf} = 0,42$ . A condição de mínima fluidização implica em um equilíbrio entre a força peso das partículas sólidas e a força de atrito exercida pela fluidização do gás sobre as partículas sólidas do leito, e portanto, nenhum movimento das partículas sólidas podem ocorrer (KUIPERS *et al.* (1993)). Após 0,13s de simulação é inserido através do jato central gás com velocidade de  $V_{gj} = 5,2\text{m/s}$ . Conforme a figura 4.1, uma área livre com mesma altura do leito é considerada para que se possa permitir a expansão do leito devido a injeção adicional de gás através do jato central. O tipo de geometria da figura 4.1 é usado para uma simulação completa bidimensional sem assumir simetria no leito.

Tabela 4.1: Dados numéricos da simulação

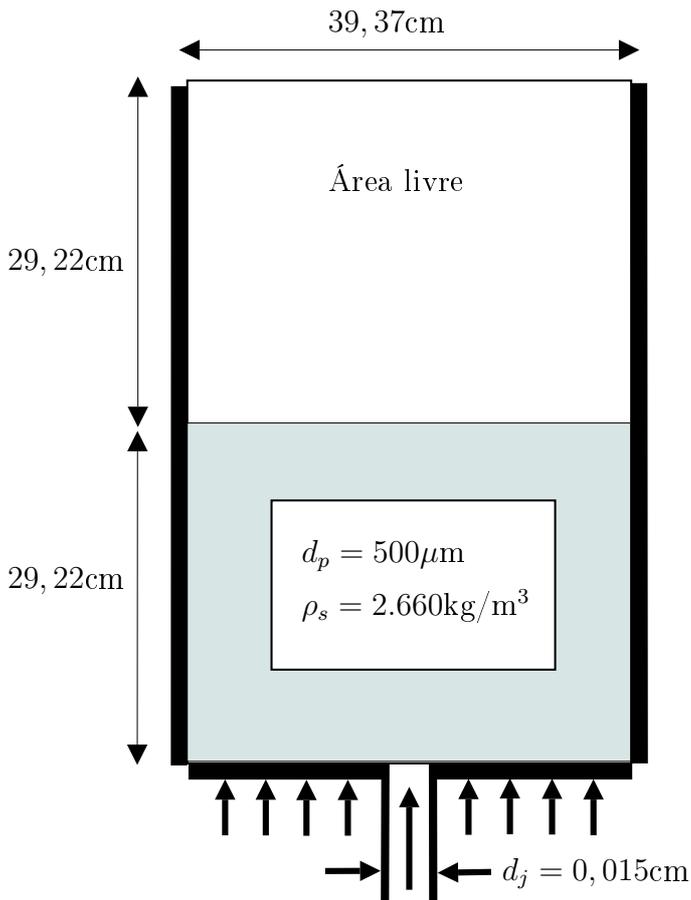
Viscosidade do gás	$\mu_g = 1,8 \times 10^{-5} \text{Pa}\cdot\text{s}$
Densidade do gás	$\rho_g = 1,2 \text{kg/m}^3$
Densidade do sólido	$\rho_s = 2.660 \text{kg/m}^3$
Diâmetro da partícula	$d_p = 500 \mu\text{m}$
Coefficiente de restituição	$e = 0,8$
Fração para mínima fluidização	$\epsilon_{mf} = 0,42$

Foram empregadas nas simulações numéricas quatro malhas computacionais distintas:

- Malha 1: (62x54) 3348 nós:  $\delta x = 0,00635\text{m}$ ,  $\delta y = 0,01082\text{m}$
- Malha 2: (124x108) 13392 nós:  $\delta x = 0,003175\text{m}$ ,  $\delta y = 0,005411\text{m}$
- Malha 3: (186x162) 30132 nós:  $\delta x = 0,002116\text{m}$ ,  $\delta y = 0,003607\text{m}$
- Malha 4: (248x216) 53568 nós:  $\delta x = 0,0015875\text{m}$ ,  $\delta y = 0,002705\text{m}$

O tempo de fluidização simulado foi de 1 segundo.

Nas simulações realizadas considerou-se a formulação algébrica para TCEG que utiliza uma equação algébrica para o cálculo da temperatura granular. A tabela 4.2 apresenta as equações empregadas nas simulações. Foi utilizado o modelo hidrodinâmico A de Gidaspow (1994). Embora os resultados das simulações que serão apresentados neste capítulo representem os testes numéricos desenvolvidos com o código, acredita-se que estes são bastante representativos. Resultados experimentais clássicos para este tipo de problema são encontrados em Gidaspow (1994) e Kuipers *et al.* (1993).

Condições iniciais:

Leito

Fração de vazio:  $\epsilon_g = 0,44$ Velocidade axial do gás:  $V_{g0} = \frac{V_{mf}}{\epsilon_g} = 0,5318\text{m/s}$ 

Área livre

Fração de vazio:  $\epsilon_g = 1$ Velocidade axial do gás:  $V_{mf} = 0,234\text{m/s}$ Condições de contorno:

Jato central

Velocidade axial do gás:  $V_{gj} = 5,2\text{m/s}$ Fração de vazio:  $\epsilon_g = 1$ 

À esquerda e à direita do jato central

Velocidade axial do gás:  $V_{mf} = 0,234\text{m/s}$ Fração de vazio:  $\epsilon_g = 1$ 

Na parede

Condição de não deslizamento:  $v_g = v_s = 0$ 

Figura 4.1: Geometria e condições iniciais e de contorno usadas na simulação considerando o sistema de coordenadas cartesianas

### 4.3 Resultados das simulações

#### 4.3.1 Comparação entre os dois esquemas de discretização para os termos convectivos

Nesta seção é descrita uma análise dos efeitos de difusão numérica devido aos dois esquemas de discretizações empregados.

A figura 4.2, mostra os resultados da fração de vazio obtidos, considerando o esquema FOUP em uma malha computacional com 124x108 células. A bolha é dada através do contorno da fração de vazio ( $\epsilon_g$ ), nos tempos:  $t = 0,36\text{s}$  (figura 4.2(a)), em instantes antes da primeira bolha atingir a superfície em  $t = 0,56\text{s}$  (figura 4.2(b)), antes da segunda bolha também atingir à superfície em  $t = 0,95\text{s}$  (figura 4.2(c)), e no tempo final  $t = 1,0\text{s}$  (figura 4.2(d)) quando a terceira bolha cresce em direção a superfície do leito. Nas simulações numéricas foram utilizadas 1.000 iterações para solução do sistema linear. Em todos os resultados de simulação, nas figuras que representam fração de vazio e temperatura granular, o eixo das abscissas refere-se a largura do leito e o eixo das ordenadas a altura do leito.

Tabela 4.2: Modelo hidrodinâmico utilizado nas simulações

Conservação da Massa para a fase  $k(k = g, s)$  :

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

Conservação da Quantidade de Movimento para a fase gás:

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

Conservação da Quantidade de Movimento para a fase sólida:

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

Tensor das tensões

$$\text{Fase gasosa: } \vec{\sigma}_k = -p_g \bar{I} + \mu_g \left[ \nabla \vec{v}_g + (\nabla \vec{v}_g)^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v}_g \bar{I} \right]$$

$$\text{Fase sólida: } \vec{\sigma}_s = \begin{cases} -p_s^p \bar{I} + \vec{\tau}_s^p & \text{se } \epsilon_g \leq \epsilon_g^* \\ -p_s^v \bar{I} + \vec{\tau}_s^v & \text{se } \epsilon_g > \epsilon_g^* \end{cases}$$

Pressão do sólido:

$$p_s^p = \epsilon_s p^* \text{ onde } p^* = \epsilon_s A (\epsilon_g^* - \epsilon_g)^n \text{ e } A = 10^{25}, n = 10$$

$$p_s^v = K_1 \epsilon_s^2 \theta$$

Viscosidade dinâmica e volumétrica do sólido:

$$\lambda_s^v = K_2 \epsilon_s \sqrt{\theta}, \quad \mu_s^v = K_3 \epsilon_s \sqrt{\theta}$$

$$\mu_s^p = \frac{v^* \sin \phi}{2\sqrt{I_{2D}}} \text{ onde:}$$

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

Temperatura Granular:

$$\theta = \left[ \frac{-(K_1 \epsilon_s + \rho_s) \text{tr}(\bar{D}_s) + \sqrt{[(K_1 \epsilon_s + \rho_s)^2 \text{tr}^2(\bar{D}_s) + 4K_4 \epsilon_s [2K_3 \text{tr}(\bar{D}_s^2) + K_2 \text{tr}^2(\bar{D}_s)]]}}{2\epsilon_s K_4} \right], \text{ onde:}$$

$$K_1 = 2(1 + e) \rho_s g_0 \text{ e } g_0 = \frac{1}{\epsilon_g} + \frac{1,5\epsilon_s}{\epsilon_g^2}$$

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

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

$$K_4 = \frac{12(1-e^2) \rho_g g_0}{d_p \sqrt{\pi}}$$

Função de arrasto na Interface:

$$\beta = \frac{3}{4} \frac{C_{D_s}}{V_{r_s}^2} \frac{|\vec{v}_g - \vec{v}_s|}{d_p} \epsilon_g \epsilon_s$$

$$C_{D_s} = \left( 0,63 + 4,8 \sqrt{\frac{V_{r_s}}{Re_s}} \right)^2$$

$$Re_s = \frac{\epsilon_g \rho_g |\vec{v}_g - \vec{v}_s| d_p}{\mu_g}$$

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

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

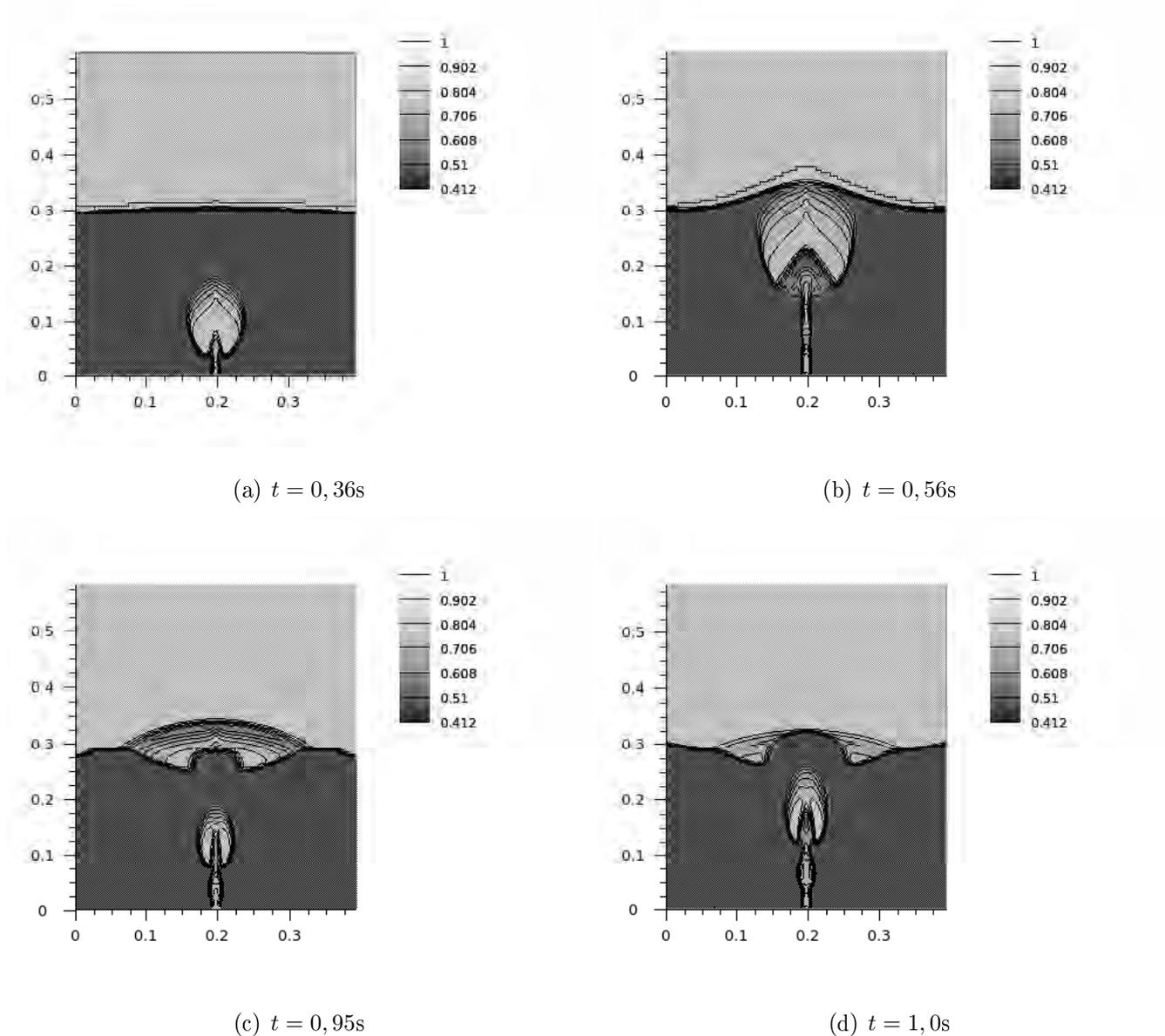


Figura 4.2: Contorno da fração de vazio ( $\epsilon_g$ ), para o esquema FOUP

Note que as bolhas obtidas quando utilizou-se o esquema FOUP nas simulações, apresentam formas alongadas e pontiagudas. No entanto, o formato das bolhas, bem como seu crescimento através do leito estão de acordo com resultados encontrados em estudos anteriores, tais como: Bouillard, Gidaspow e Lyczkowski (1991) e Guenther e Syamlal (2001). A figura 4.3 mostra os resultados de simulação de Bouillard, Gidaspow e Lyczkowski (1991), esses autores utilizaram o código fonte FLUFIX, que forneceu bolhas com formatos pontiagudos. A figura 4.4 mostra os resultados de simulação numérica de Guenther e Syamlal (2001), esses autores utilizaram o código fonte MFIX e o esquema FOUP para discretização dos termos convectivos das equações de conservação, no entanto, os resultados também apontam bolhas com formatos alongados e pontiagudos. Nota-se nos resultados de simulação de Guenther e Syamlal (2001) que o crescimento da bolha através do leito é mais lento do que os resultados

obtidos nas simulações deste trabalho, sendo que um dos prováveis fatores deve-se ao fato dos autores considerarem apenas a fração de vazio  $\epsilon_g = 0,7$  para plotagem do contorno das bolhas.

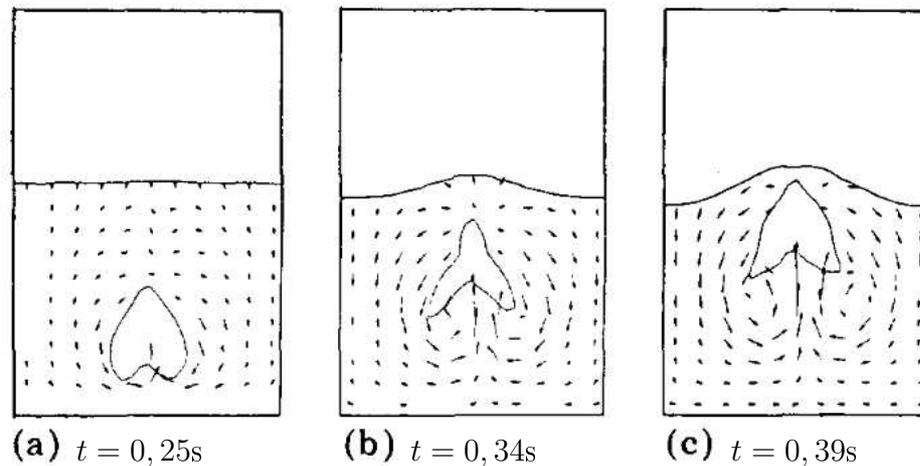


Figura 4.3: Contorno da fração de vazio ( $\epsilon_g$ ) (Bouillard, Gidaspow e Lyczowski (1991))

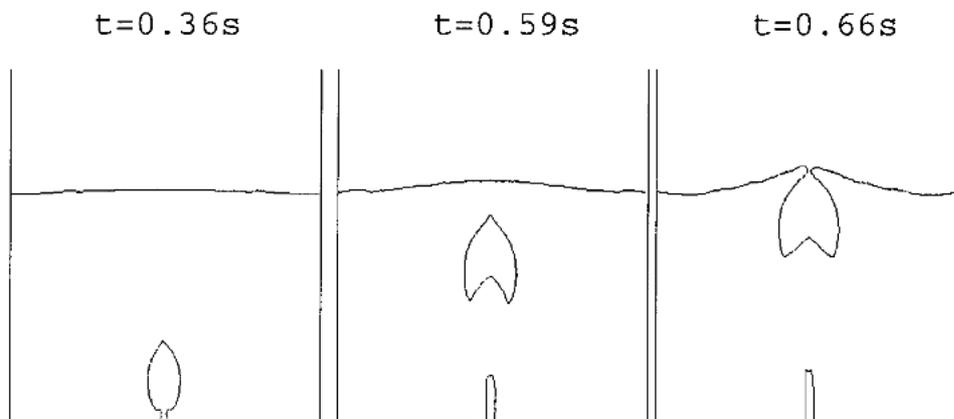


Figura 4.4: Contorno da fração de vazio ( $\epsilon_g$ ), utilizando o esquema FOUP (Guenther e Syamlal (2001))

A figura 4.5 mostra os resultados obtidos através de um esquema de alta ordem: o Superbee, usando a mesma malha computacional e o mesmo número de iterações. Os resultados são dados em  $t = 0,36s$  (figura 4.5(a)),  $t = 0,59s$  (figura 4.5(b)), antes da bolha atingir a superfície em  $t = 0,79s$  (figura 4.5(c)), e em  $t = 1,0s$  (figura 4.5(d)) quando a segunda bolha cresce em direção a superfície. Em cada um destes casos, uma bolha com forma mais arredondada se desprende e cresce através do leito.

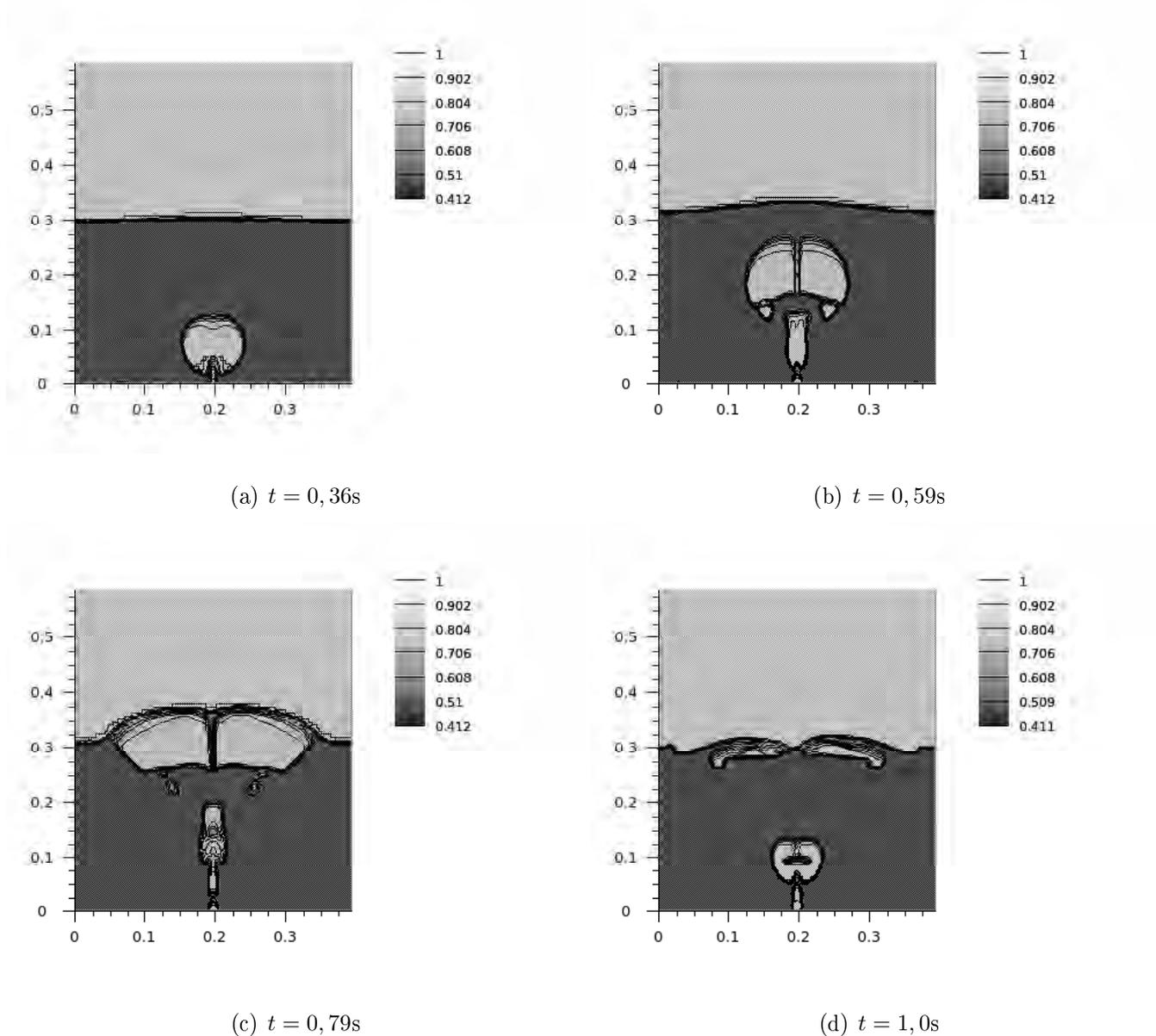


Figura 4.5: Contorno da fração de vazio ( $\epsilon_g$ ), para o esquema Superbee

A figura 4.6, apresenta os resultados de simulação numérica de Guenther e Syamlal (2001), quando esses utilizaram o esquema Superbee para discretização dos termos convectivos das equações de conservação e obtiveram bolhas com formatos mais arredondados.

Tanto nos resultados obtidos neste trabalho, quanto os resultados de Guenther e Syamlal (2001), o esquema Superbee mostrou-se mais adequado, por capturar um formato mais arredondado para a bolha.

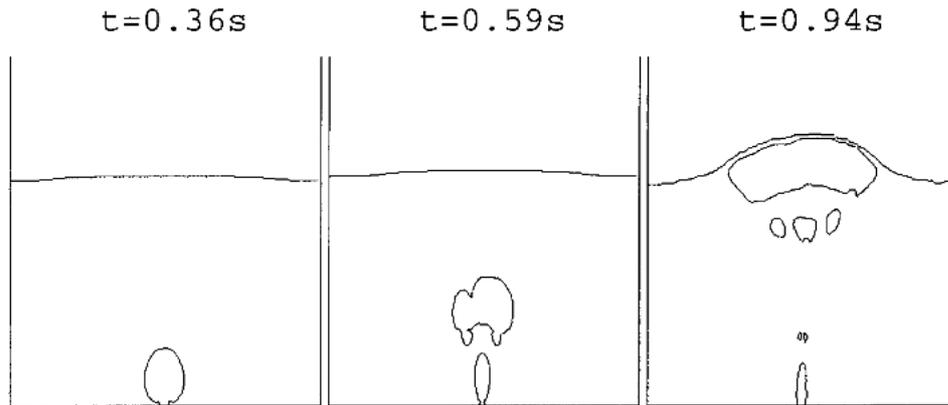


Figura 4.6: Contorno da fração de vazio ( $\epsilon_g$ ), utilizando o esquema Superbee (Guenther e Syamlal (2001))

Os diferentes formatos de bolhas apresentados nas figuras 4.2 e 4.5, são atribuídas às diferentes quantidades de difusão numérica introduzidas pela discretização dos termos convectivos.

A razão para a forma pontiaguda da bolha pode ser deduzida a partir dos perfis de velocidades da fase sólida mostrados na figura 4.7.

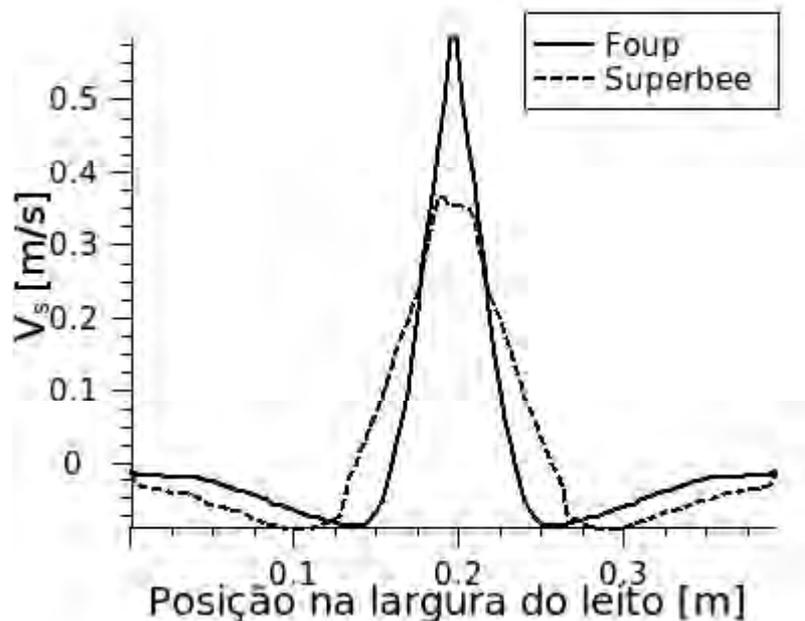


Figura 4.7: Perfis radiais médio no tempo da velocidade, para a fase sólida 0,15 metros acima da entrada do leito

Os perfis de velocidades são “parabólicos” devido à difusão numérica nas equações da conservação da quantidade de movimento, já esperada pela discretização dos termos de

convecção. O esquema menos difusivo, Superbee apresenta um perfil mais achatado que o FOUP. O perfil parabólico da velocidade dado pelo FOUP, produz uma maior convecção no centro do jato, assim a fração volumétrica do sólido é levada mais distante do centro e o contorno da fração de vazio torna-se pontiagudo. Inversamente o perfil mais achatado da velocidade dado pelo Superbee, apresenta resultados mais arredondados para o contorno da fração de vazio. Segundo Guenther e Syamlal (2001), a forma pontiaguda dada pelo contorno da fração de vazio é determinada pelo esquema de discretização utilizado para as equações da conservação da quantidade de movimento e não pelos esquemas de discretização utilizados para resolver as equações da conservação da massa.

Guenther e Syamlal (2001) verificaram se a forma pontiaguda ou arredondada da bolha foi completamente determinada pelo esquema de discretização utilizado na equação da conservação da quantidade de movimento da fase sólida. Para isso, utilizaram o esquema Superbee para a discretização da equação da conservação da quantidade de movimento da fase sólida e o FOUP para discretização das outras equações (continuidade para a fase gasosa e sólida e quantidade de movimento para a fase gasosa), no resultado encontraram bolhas com formas arredondadas. Quando inverteram, utilizando FOUP para equação da conservação da quantidade de movimento da fase sólida e Superbee para as outras equações, o resultado encontrado foram bolhas com formas alongadas e pontiagudas. Estes autores, concluem que a difusão numérica na equação da conservação da quantidade de movimento da fase sólida determina o formato das bolhas.

Ainda sobre os perfis de velocidades, as figuras 4.8, 4.9 e 4.10, mostram os perfis radiais médio no tempo (média temporal de 0 a 1s) da velocidade axial das fases sólidas e gasosa, para 0,05; 0,20 e 0,29 metros acima da entrada do leito, respectivamente. São considerados os dois esquemas de discretização: FOUP e Superbee.

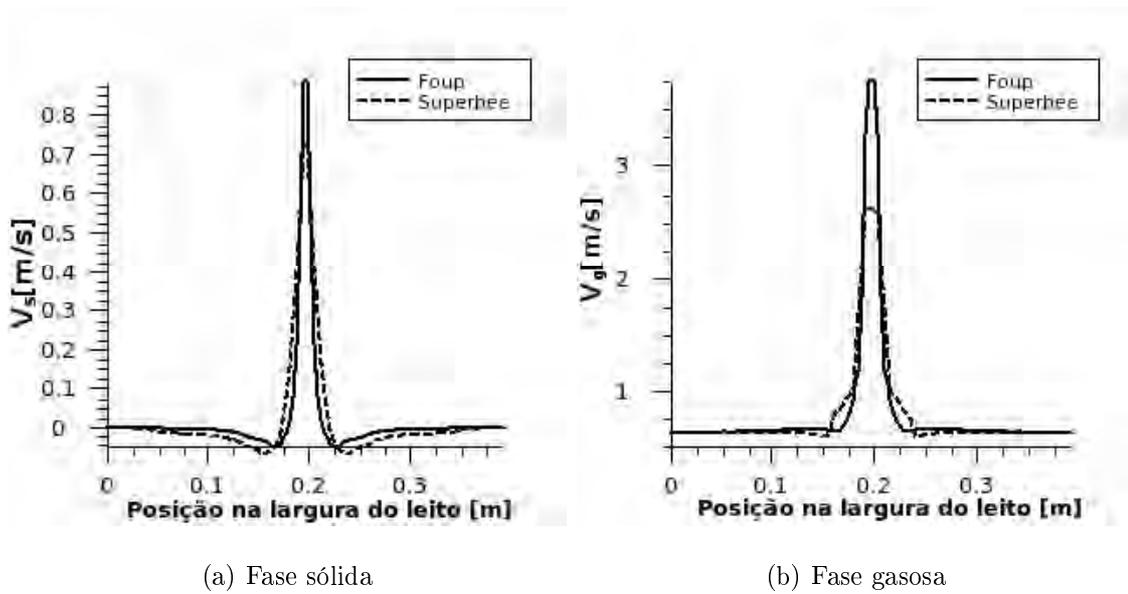


Figura 4.8: Velocidade axial média no tempo, 0,05 metros acima da entrada do leito para os esquemas FOUP e Superbee

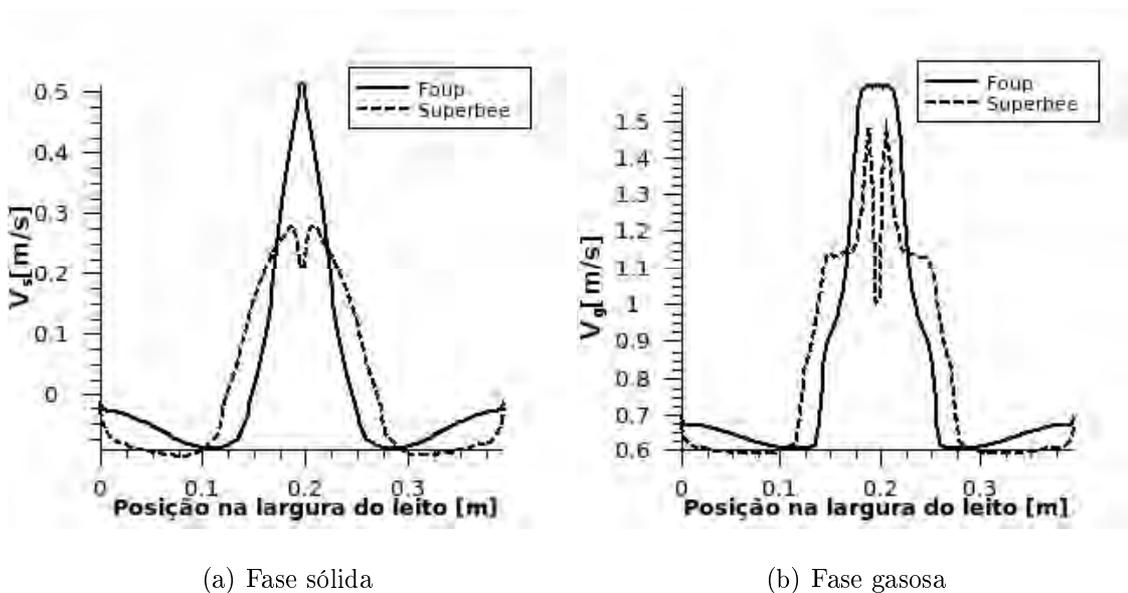


Figura 4.9: Velocidade axial média no tempo, 0,20 metros acima da entrada do leito para os esquemas FOUP e Superbee

Observa-se nas figuras 4.8, 4.9 e 4.10 que os perfis de velocidade, da fase gasosa atingem valores bem mais altos do que os perfis da fase sólida. Entretanto, esse aumento da velocidade está fisicamente correto, pois a fase sólida é muito mais densa que a gasosa.

Além disso, devido a força de arrasto ser a única contribuição das forças de interação considerada na interface, a fase sólida exerce um efeito de inércia sobre a fase gasosa, forçando o perfil axial da velocidade do gás ( $v_g$ ) a ter o mesmo comportamento do perfil axial da velocidade do sólido ( $v_s$ ).

Embora na figura 4.9, os perfis da fase sólida pareçam destoarem dos perfis da fase gasosa, isso se deve a instabilidade do leito devido a formação das bolhas, tais perfis voltam a ter um comportamento qualitativamente semelhantes em outras alturas do leito, o que fica evidente na figura 4.10.

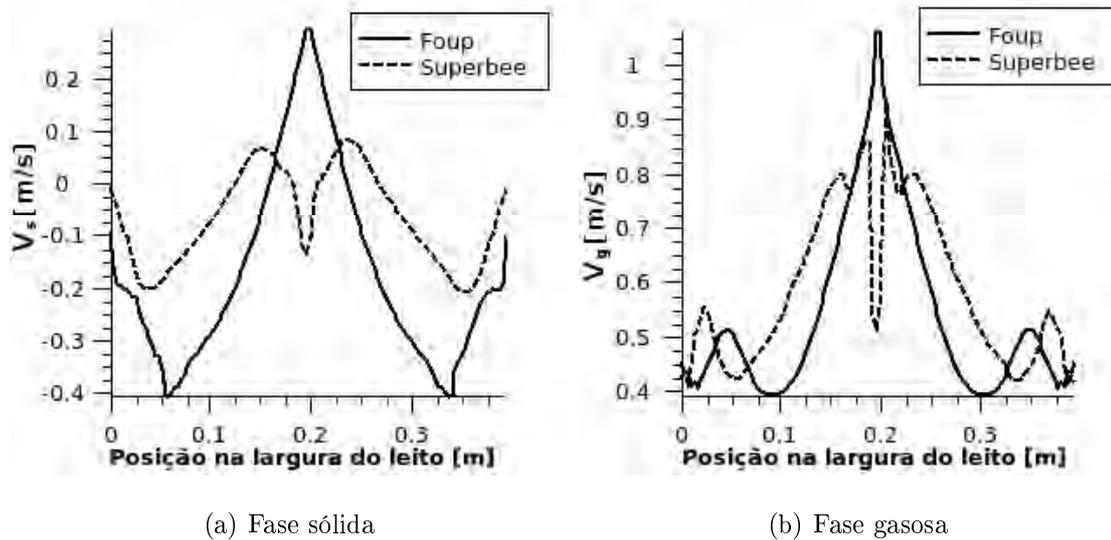


Figura 4.10: Velocidade axial média no tempo, 0,29 metros acima da entrada do leito para os esquemas FOUP e Superbee

Outra variável que poder ser analisada na comparação dos esquemas de discretização FOUP e Superbee é a temperatura granular  $\theta$  ( $m^2/s^2$ ). Para seu computo, foi utilizada uma expressão algébrica, proposta por Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), Eq.2.22. Essa expressão assume que a energia granular é dissipada localmente, negligenciando os efeitos de convecção/difusão e admitindo somente os termos de geração e de dissipação de energia granular. Segundo van Wachen *et al.* (1998) esta expressão 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. Este regime é típico de um LFB, onde a maior parte da energia granular é dissipada localmente. A figura 4.11 mostra o contorno da temperatura granular ( $\theta$ ) para os dois esquemas de discretização no instante  $t = 0,36s$ .

Nas regiões densas do leito, taxas elevadas de concentração do particulado causam dissipação de energia pseudotérmica, o que faz a temperatura granular atingir o limite mínimo. A temperatura máxima é atingida na região da bolha e perto da injeção de gás, onde a forte aceleração gera energia pseudotérmica. (BOEMER, QI E RENZ (1997)).

Na superfície do leito, onde os gradientes de velocidade são mais altos e a fração volumétrica do sólido é menor, a temperatura granular também é mais elevada em razão da desordem na superfície.

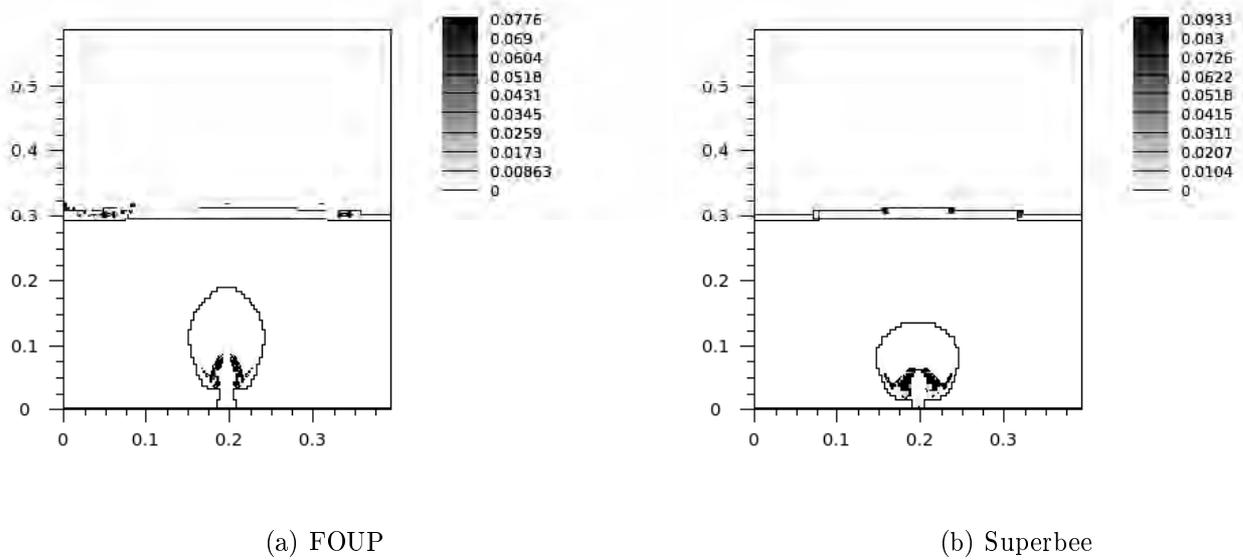
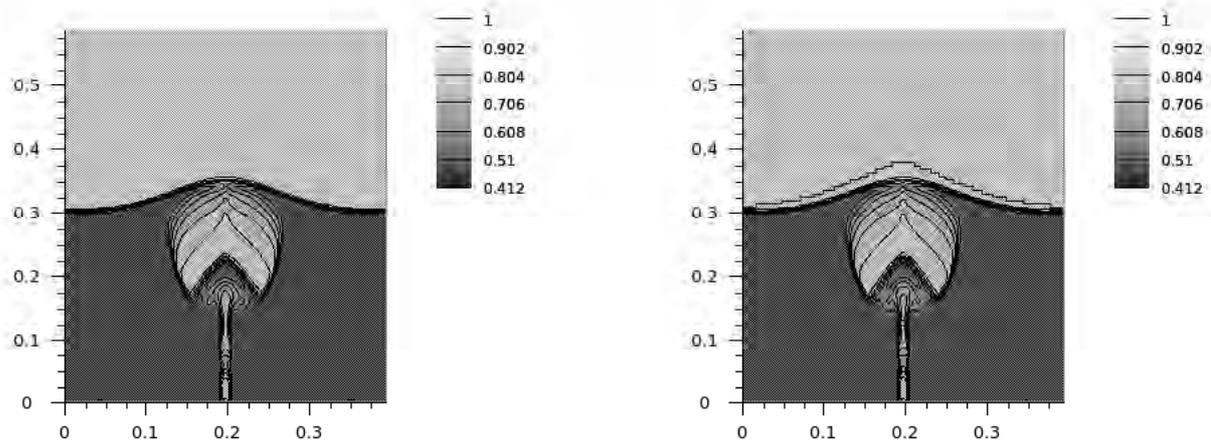


Figura 4.11: Contorno da temperatura granular ( $\theta$ ), em  $t=0,36s$ .

Os resultados de simulação, mostrados na figura 4.11, estão de acordo com os dados da literatura, que limita a temperatura granular no intervalo:  $10^{-5} < \theta < 0,1 \text{ m}^2/\text{s}^2$ , no caso dos leitos fluidizados borbulhantes.

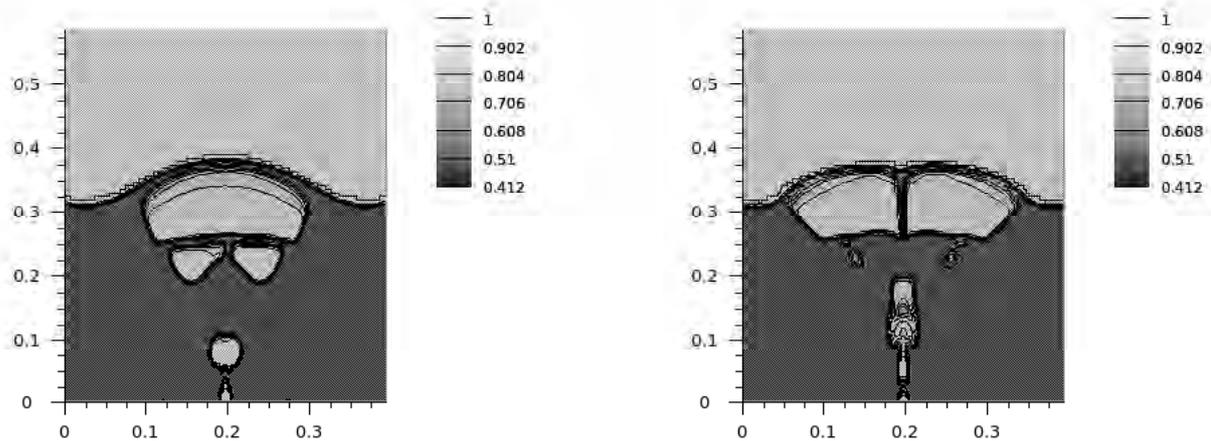
No computo da temperatura granular, nas simulações numéricas realizadas neste trabalho, encontrou-se alguns resultados sem significado físico próximos ao jato. Acredita-se que tenha ocorrido uma interpolação de valores nestes pontos, pois nestas regiões o jato atinge a temperatura máxima. Para a plotagem da figura 4.11, estes valores foram retirados, por não comprometerem o contorno da temperatura granular ( $\theta$ ), apenas destoavam com os dados da literatura que limitam  $\theta$ .

O número de iterações utilizado para resolver o sistema linear de equações também pode influenciar os resultados das simulações. Foram realizadas simulações considerando 200 e 1.000 iterações. A figura 4.12 apresenta o contorno da fração de vazio utilizando o esquema FOUP e considerando 200 iterações (figura 4.12(a)) e 1.000 iterações (figura 4.12(b)) e a figura 4.13 utiliza o esquema Superbee e ilustra os resultados quando considera-se 200 iterações (figura 4.13(a)) e quando considera-se 1.000 iterações (figura 4.13(b)). Todas as bolhas foram plotadas no instante em que atingem a superfície do leito.



(a) 200 iterações

(b) 1.000 iterações

Figura 4.12: Fração de vazio ( $\epsilon_g$ ) utilizando o esquema FOUF

(a) 200 iterações

(b) 1.000 iterações

Figura 4.13: Fração de vazio ( $\epsilon_g$ ) utilizando o esquema Superbee

Observa-se, principalmente, nas simulações que utilizam o esquema Superbee a influência do número de iterações utilizados na resolução das equações lineares. A figura 4.13(b) mostra uma bolha com uma forma mais física do que a figura 4.13(a) que ilustra a simulação em que foram consideradas 200 iterações.

O fato do número de iterações não apresentarem diferenças quantitativas quando utilizou-se o esquema FOUF (figura 4.12) pode estar relacionado a alta difusividade deste esquema, atribuindo à ele um dos principais fatores numéricos que influenciam as simulações numéricas.

### 4.3.2 Considerações sobre a influência da malha computacional nos resultados de simulação

Nesta seção é discutida a influência nos resultados de simulação quando empregam-se diferentes tamanhos de malhas computacionais. Foi utilizado o esquema Superbee para a discretização dos termos convectivos. Na simulações foram realizadas 200 iterações para a solução das equações lineares. O tempo de simulação foi de 1 segundo.

As figuras 4.14, 4.15 e 4.16 mostram nos tempos  $t = 0,36s$ ,  $t = 0,59s$  e quando a primeira bolha atinge a superfície, respectivamente, o contorno da fração de vazio ( $\epsilon_g$ ) para as quatro malhas distintas: malha 1 (62x54), malha 2 (124x108), malha 3 (186x162) e malha 4 (248x216).

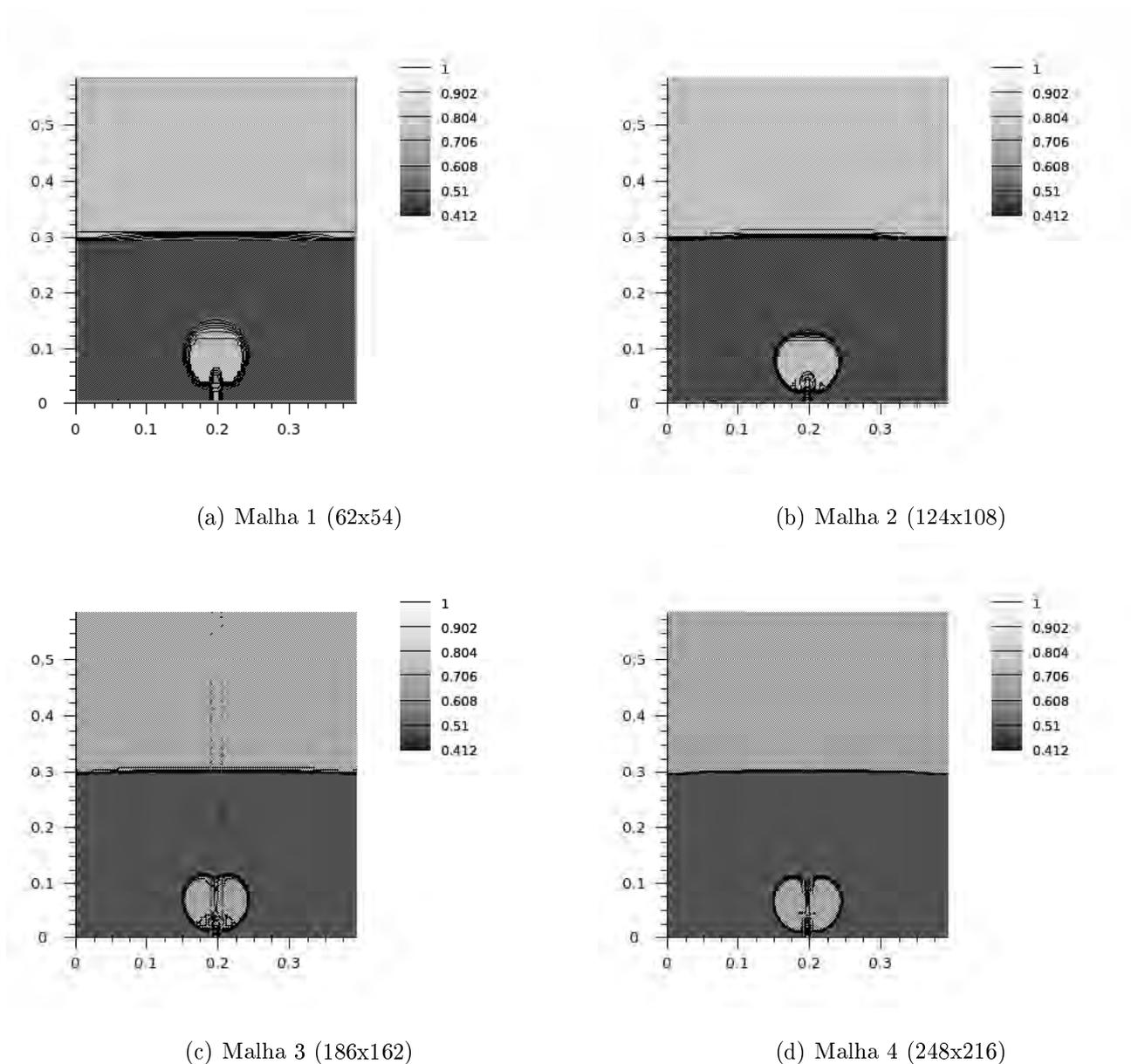


Figura 4.14: Fração de vazio ( $\epsilon_g$ ), em  $t = 0,36s$

Nestas figuras, observar-se-á a influência da malha computacional nos resultados obtidos. As simulação que utilizaram as malhas 3 e 4 apresentam pequenos desvios entre si e grandes desvios em relação à malha 2 e principalmente à malha 1.

Nota-se, em  $t = 0,36s$ , que apesar dos resultados de simulação captarem qualitativamente o mesmo comportamento, as diferenças quantitativas são grandes. Nas figuras 4.15 e 4.16, evidencia-se a influência do tamanho da malha computacional sobre o comportamento do escoamento. Segundo Guenther e Syamlal (2001), existe uma grande dificuldade em comparar resultados mais tarde, devido à natureza caótica dos leitos fluidizados e da instabilidade da superfície da bolha.

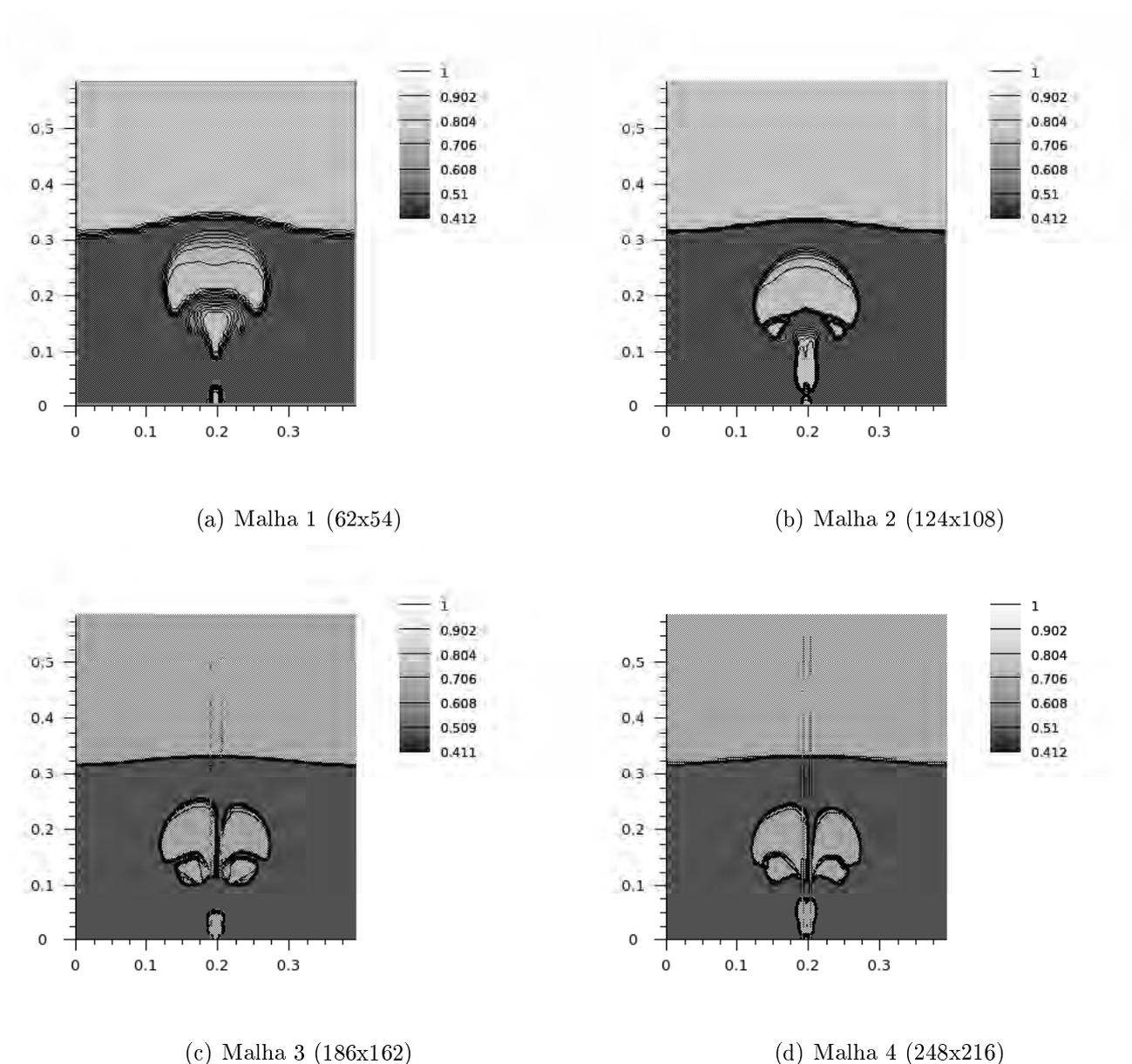


Figura 4.15: Fração de vazío ( $\epsilon_g$ ), em  $t = 0,59s$

As figuras 4.15(c), 4.15(d), 4.16(c), e 4.16(d), mostram que somente para as duas malhas mais finas, a solução é mais independente de malhas. Nelas, os contornos da fração

de vazio ( $\epsilon_g$ ) apresentam características qualitativas e quantitativas semelhantes para ambas as malhas.

Como mencionado, na figura 4.16 foram plotadas os contornos da fração de vazio ( $\epsilon_g$ ), instantes antes deste atingir a superfície do leito. Para malha 1, o tempo que a bolha levou para percorrer o leito foi de  $t = 0,72s$ , para malha 2, o tempo foi de  $t = 0,73s$ ; malha 3,  $t = 0,77s$ , e para malha 4, o tempo foi de  $t = 0,80s$ . Mais uma vez, nota-se a influência da malha computacional nos resultados de simulação, sendo que as maiores diferenças ocorrem quando comparamos as malhas 1 e 2 com as malhas 3 e 4.

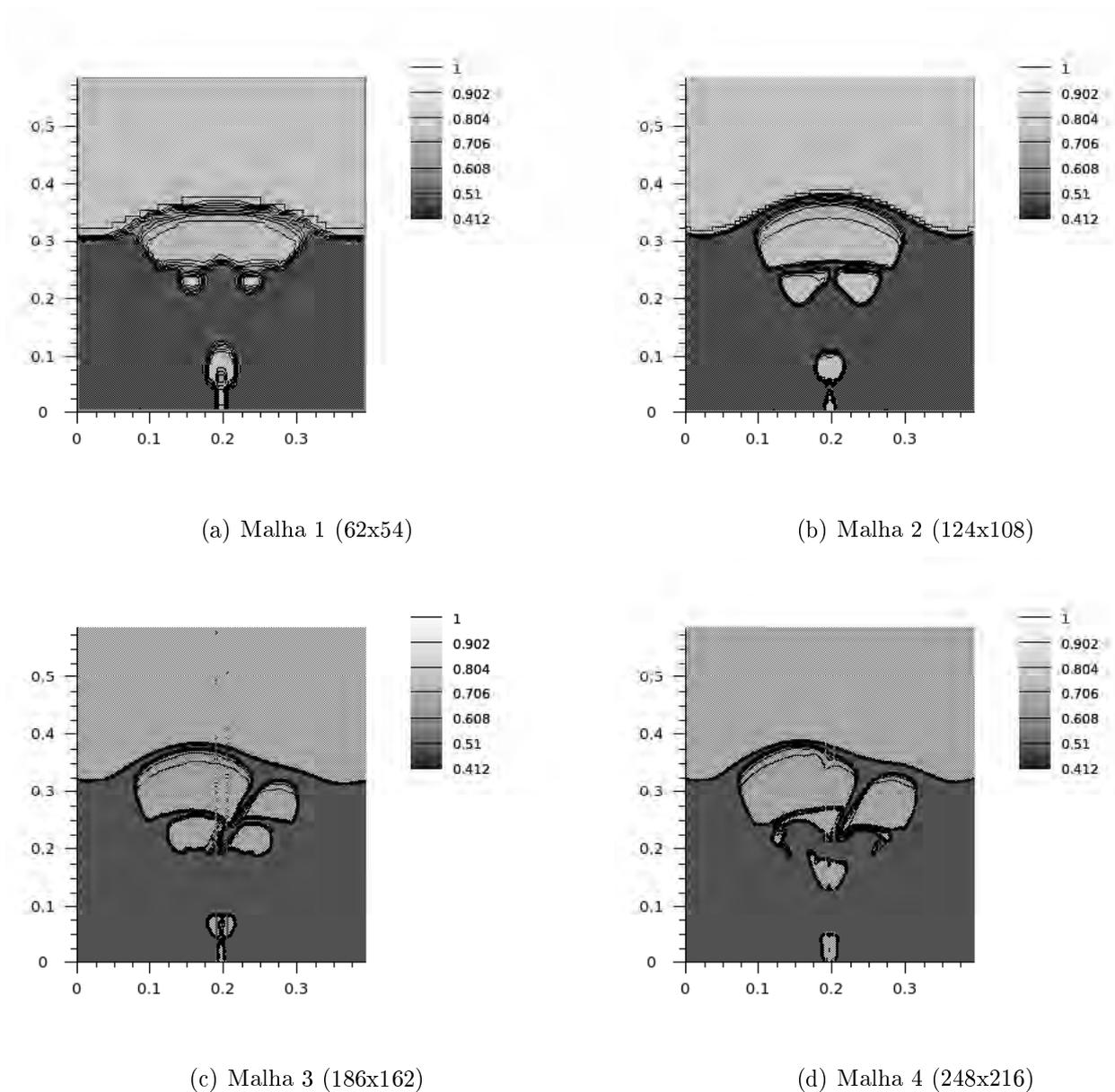


Figura 4.16: Fração de vazio ( $\epsilon_g$ ), instantes antes de atingir à superfície do leito

As malhas 3 e 4, mostram-se mais adequada, principalmente por captar assimetria na bolha, de acordo com os dados experimentais de Kuipers *et al.* (1993), mostrados na figura 4.17. Nos resultados experimentais de Kuipers *et al.* (1993), considera-se um leito com 0,57m

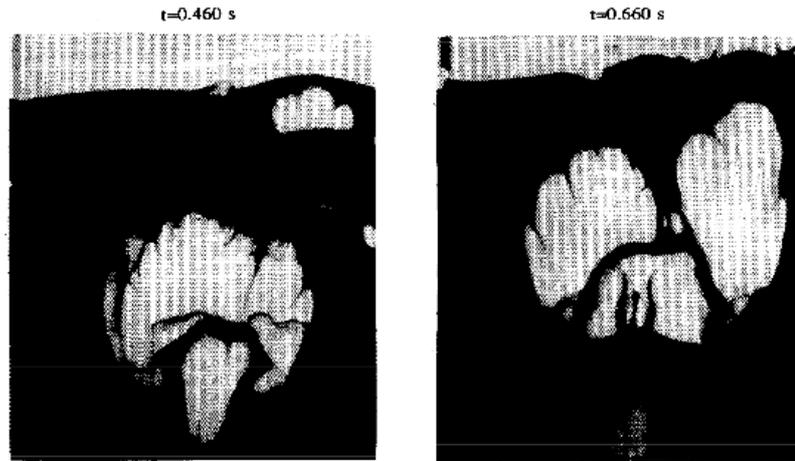
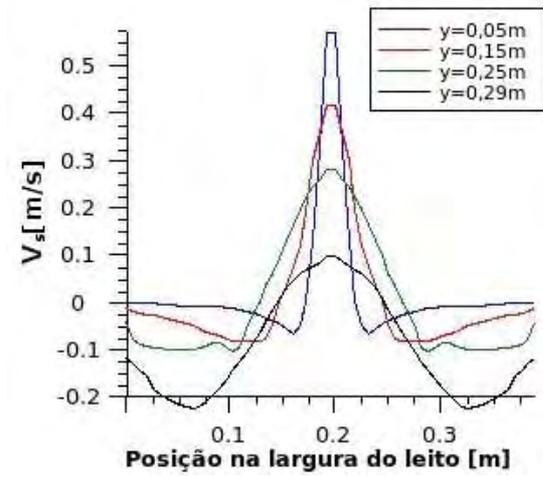


Figura 4.17: Dados experimentais de Kuipers *et al.* (1993)

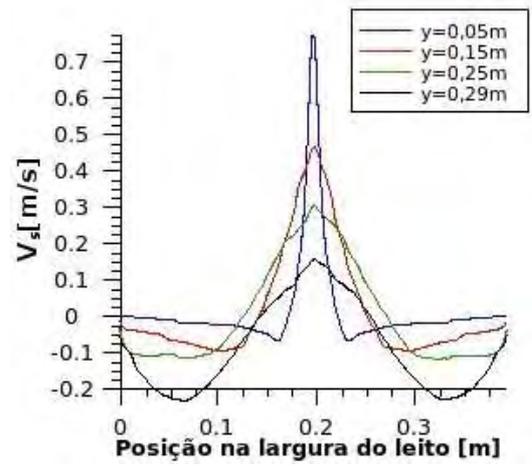
de largura por 1m de altura. As partículas tem diâmetro uniforme de  $500\mu\text{m}$  e densidade de  $2.660\text{Kg}/\text{m}^3$ . A velocidade de mínima fluidização é de  $0,25\text{m}/\text{s}$  e a velocidade do jato central  $10\text{m}/\text{s}$ . Guenther e Syamlal (2001) também obtiveram assimetrias nos resultados de simulação, conforme pode-se verificar na figura 4.6.

A figura 4.18, mostra o perfil radial médio no tempo da velocidade axial da fase sólida, em  $0,05\text{m}$ ,  $0,15\text{m}$ ,  $0,25\text{m}$ ,  $0,29\text{m}$  acima da entrada do leito. Nessa figura são considerados os quatro tamanhos de malhas.

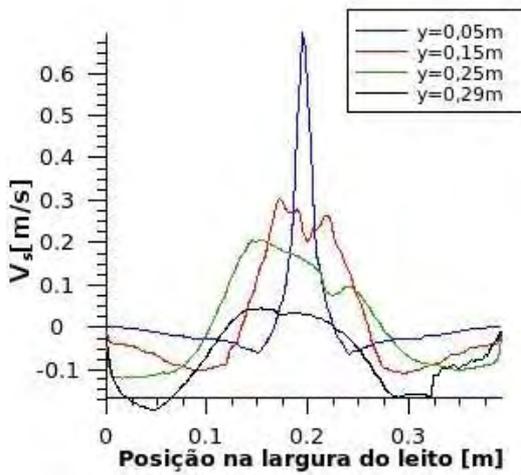
Os perfis de velocidade mostrados na figura 4.18 revelam que a velocidade máxima acontece onde se encontra o jato central, as partículas são elevadas pelo jato de gás e depois começam a perder movimento devido ao atrito. Nota-se, em todas as malhas, que em  $0,05\text{m}$  acima da entrada do leito o perfil é mais acentuado, e à medida que a distância da base do leito aumenta, o perfil de velocidade diminui. Ainda na figura 4.18, constata-se que o perfis de velocidade para as malhas mais grossas (figuras 4.18(a) e 4.18(b)) são notoriamente mais simétricos em relação as malhas mais finas (figuras 4.18(c) e 4.18(d)). Isso ocorre, devido as malhas mais grossas não terem resolução suficiente para predizer o adequado movimento das partículas sólidas.



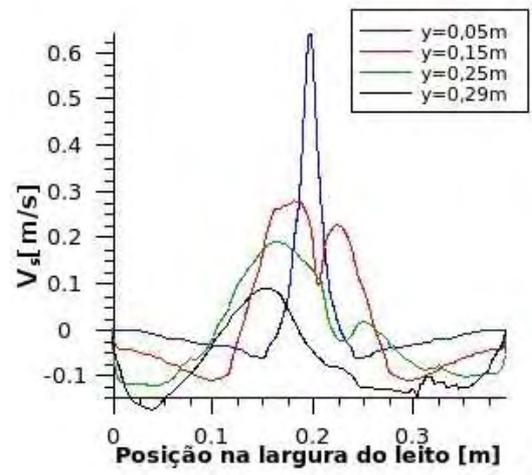
(a) Malha 1 (62x54)



(b) Malha 2 (124x108)



(c) Malha 3 (186x162)



(d) Malha 4 (248x216)

Figura 4.18: Velocidade axial média no tempo, para a fase sólida, em várias alturas do leito, para as quatro malhas distintas

Embora, a malha mais fina (Malha 4) utilizada nas simulações tenha dezesseis vezes mais células (53.568 células) contra (3.348 células) da malha mais grossa, não podemos afirmar que os resultados obtidos independem do tamanho da malha. Nas simulações numéricas realizadas neste trabalho, a Malha 3 já apresentou resultados adequados baseados nas simulações numéricas de Guenther e Syamlal (2001) (figura 4.6) e nos resultados experimentais de Kuipers *et al.* (1993) (figura 4.17), porém análises sobre a quantificação numérica de incertezas em malhas refinadas devem ser estudadas, para confirmar esse resultado. Uma maneira de analisar estas incertezas numéricas seria utilizar a Extrapolação de Richardson de Richardson (1927) *apud* Roache (1994) para avaliar o erro entre as malhas, porém para aplicação deste método é necessário que os resultados converjam monotonicamente. A figura 4.19 mostram o perfil da velocidade do sólido em duas situações distintas: (a) velocidade axial da fase sólida com variação no tempo de 0 segundos até o instante em que a primeira bolha atinge a superfície do leito a 0,29m acima da entrada do leito e (b) velocidade axial da fase sólida com variação no tempo de 0s a  $t = 1$ s, na posição do leito  $x = 0,19$ m e  $y = 0,29$ m. Esses gráficos apresentam uma monotonicidade principalmente entre as malhas 3 e 4, porém uma nova simulação utilizando uma malha com 310x270 células comprovaria tal monotonicidade.

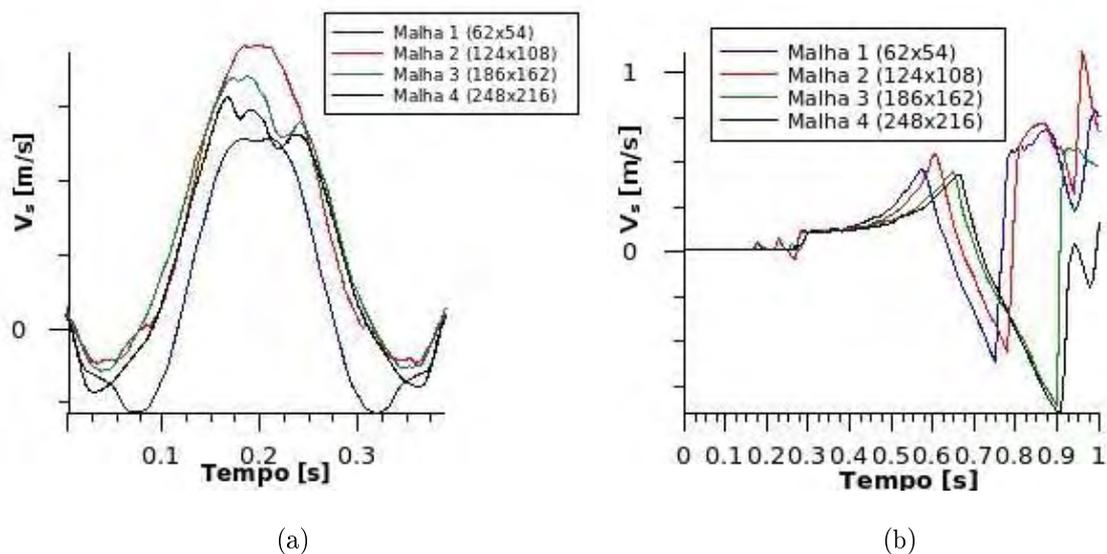


Figura 4.19: Velocidade axial da fase sólida ( $V_s$ )

A tabela 4.3 contabiliza o tempo de processamento (CPU) utilizado nas simulações numéricas. Dentre os parâmetros que influenciaram o tempo de processamento, destacam-se: o número de iterações utilizados na solução do sistema linear, a malha computacional e o esquema de discretização. Nota-se que nas simulações que utilizaram 1.000 iterações na solução do sistema linear o tempo de processamento foi bem maior. As simulações que utilizaram o esquema FOUP apresentam um custo computacional menor, porém conforme os

Tabela 4.3: Tempo de processamento (CPU) utilizado nas simulações

Esquemas	$t = 0s-0, 13s$	$t = 0, 13s-1, 0s$	$t = 0s-1, 0s$
FOUP 200 iterações	$t = 24.264s$	$t = 82.127s$	$t = 106.391s$
Superbee 200 iterações; Malha 1	$t = 608s$	$t = 1.089s$	$t = 1.697s$
Superbee 200 iterações; Malha 2	$t = 19.153s$	$t = 173.662s$	$t = 192.815s$
Superbee 200 iterações; Malha 3	$t = 69.795s$	$t = 320.559s$	$t = 390.354s$
Superbee 200 iterações; Malha 4	$t = 211.371s$	$t = 1.256.129s$	$t = 1.467.500s$
FOUP 1.000 iterações	$t = 64.427s$	$t = 102.603s$	$t = 167.030s$
Superbee 1.000 iterações	$t = 67.708s$	$t = 346.209s$	$t = 413.917s$

resultados apresentados nesse capítulo, tal esquema introduz forte difusão numérica, de forma que os resultados mostram-se inadequados.

# Capítulo 5

## Conclusões e recomendações

Neste trabalho, investigou-se dois aspectos relevantes relacionados a simulação numérica de escoamentos gás-sólido em leito fluidizado borbulhante: a influência da difusão numérica presente no esquema de discretização de primeira ordem, e a dependência do tamanho da malha computacional. Neste capítulo apresenta-se uma síntese dos tópicos já analisados e também as conclusões e recomendações para futuros trabalhos.

### 5.1 Considerações gerais

O modelo de duas fases separadas utilizado no presente estudo foi obtido considerando o procedimento médio de Euler, como mostrado em Enwald, Peirano e Almstedt, (1996), e que foi resumido no capítulo 2. Neste procedimento utiliza-se o operador médio estatístico de Euler para obter as equações médias para cada uma das fases, assim como na formulação das equações de fechamento, especificamente nas equações de transferência entre as fases. No entanto, devido a hidrodinâmica do escoamento bifásico gás-sólido ser bastante complexa, foram adotadas várias hipóteses simplificativas na realização do presente trabalho: considerou-se o escoamento isotérmico e sem reações químicas para ambas as fases. A fase sólida foi caracterizada por um diâmetro médio de particulado  $d_p$ , e a força de arrasto foi a única força de interação entre as fases considerada na modelagem da transferência de quantidade de movimento na interface. Outra grande simplificação do modelo apresentado no capítulo 2 foi a não consideração dos efeitos de turbulência tanto para a fase sólida quanto para a fase gasosa.

No estudo teórico realizado no capítulo 3, destaca-se a importância das técnicas numéricas de solução. Apresentou-se as aproximações “upwind” para o tratamento dos termos convectivos, e discutiu-se o conceito de variáveis normalizadas de Leonard (1979) e as condições

necessárias e suficientes para a estabilidade. Constatou-se que uma alternativa ao emprego do esquema de primeira ordem para o termo convectivo seria a utilização dos esquemas TVD, que fornecem resultados com ordem de precisão maiores do que 1, e com redução das oscilações numéricas espúrias, comuns quando se utilizam esquemas de alta ordem. Discutiu-se detalhes sobre o algoritmo de solução e em especial destacou-se as condições de contorno, equação para a correção da pressão do fluido, equação para a correção da fração de volume da fase sólida e a eliminação parcial do acoplamento na interface.

O desempenho dos esquemas analisados no capítulo 3, bem como influência do tamanho da malha computacional foram investigados no capítulo 4. Dos estudos desenvolvidos com o código MFIX seis simulações foram realizadas: a primeira utilizando um esquema de primeira ordem, a segunda utilizando um esquema de alta ordem, e finalmente quatro simulações utilizando esquema de alta ordem, porém com diferentes tamanhos de malhas computacionais.

## 5.2 Conclusões

Considerando-se as análises desenvolvidas ao longo do presente trabalho, pode-se formular as seguintes conclusões:

- É preciso ter cuidado em relação a discretização dos termos convectivos, em escoamentos dominados por convecção tais como os leitos fluidizados gás-sólido. Para determinar os efeitos de difusão numérica, utilizou-se as bolhas que se formaram no leito como uma métrica para a comparação dos esquemas de discretização. O método de primeira ordem FOUP mostrou-se altamente difusivo, enquanto que o método de alta ordem Superbee permitiu obter resultados de melhor qualidade, baseados no resultados experimentais de Kuipers *et al.* (1993).
- O esquema FOUP somente deve ser usado em malhas bem finas, mas é necessário estudar a viabilidade em termos do custo computacional. Quando isso não é possível, recomenda-se o uso do esquema Superbee em malhas mais grossas evitando-se os efeitos de difusão numérica da aplicação do esquema FOUP nessas malhas.
- É preciso uma atenção especial em relação aos métodos de alta ordem, pois estes tendem a produzir oscilações numéricas próximos à altos gradientes, neste trabalho, contornou-se este problema através da aplicação de um limitador de fluxo, descrito em detalhes no capítulo 3.

- Os efeitos de difusão numérica diminuíram com o aumento do número de iterações (de 200 para 1.000) utilizados para resolver o sistema de equações lineares quando utilizou-se o esquema Superbee. Esse fato não foi tão evidente para o esquema FOUP, provavelmente por este ter sido utilizado em uma malha grossa já incorporando difusão numérica.
- Os resultados da simulação numérica de escoamento gás-sólido mostraram-se bastante dependentes do tamanho da malha. Apesar de terem sido obtidos resultados de simulação em quatro malhas computacionais distintas, ainda são necessárias investigações adicionais sobre o refinamento de malhas. Entre as quatro malhas consideradas, as duas malhas mais finas convergiram monotonicamente apresentando resultados bem próximos. A malha com 186x162 células utilizando o esquema Superbee para discretização dos termos convectivos e com 200 iterações para solução do sistema de equações lineares apresenta resultados adequados sem a necessidade de refinamentos.
- Em resultados com convergência monotônica, pode-se realizar extrapolação de Richardson nas malhas, em pontos específicos do leito, para: avaliação de erros, comprovação de independência de malhas, e obtenção de resultados para malhas mais finas sem a necessidade de simulação numérica.

### 5.3 Recomendações para futuros trabalhos

A seguir, sugerem-se algumas recomendações para o desenvolvimento de futuras pesquisas na área com base nos resultados obtidos durante a realização deste estudo:

- Estudar detalhadamente o procedimento numérico com a finalidade de avaliar erros de origem numérica e testar novos esquemas de discretização.
- Estudos sobre a quantificação de incertezas em malhas refinadas poderiam comprovar a independência de malhas nos resultados de simulação que consideraram as duas malhas mais finas. Este estudo pode ser combinado com um estudo paramétrico da influência que os diferentes esquemas de discretização exercem sobre os resultados, considerando que o tamanho da malhas está ligado ao efeito do esquema de discretização.
- Implementação de modelos de turbulência em ambas as fases, ou apenas para uma das fases para a comparação de resultados de simulação e investigação da turbulência no escoamento.

- Simulação do escoamento considerando várias fases sólidas com o intuito de estudar segregação e obter resultados de simulação mais próximos de condições reais.
- Simulações tridimensionais devem ser consideradas para estabelecer mais criteriosamente as respectivas conclusões sobre esses estudos.
- Análise sobre a frequência e diâmetro das bolhas podem ser estudados.
- Estudo de novo modelo de formulação Euleriana-Lagrangeana, como por exemplo o método DEM (Discrete Element Method) que permite uma análise individual das partículas através das interações partícula-partícula e partícula-parede.

# Referências Bibliográficas

- [Agrawal *et al.* (2001)] Agrawal, K.; Loezos, P. N.; Syamlal, M.; Sundaresan, S. The role of meso-scale structures in rapid gas-solid flows. *Journal of Fluid Mechanics*, v.445, p.151-185, 2001.
- [Alves, Oliveira e Pinho (2003)] Alves, M. A.; Oliveira, P. J.; Pinho, F. T. A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection. *International Journal for Numerical Methods in Fluid*, v.41, p.47-75, 2003.
- [Anderson e Jackson (1967)] Anderson, T.; Jackson, R. A fluid mechanical description of fluidized beds. *Ind. Eng. Chem. Fund.*, v.6, n.4, p.527-534, 1967.
- [Boemer *et al.* (1995)] Boemer, A.; Qi, H.; Renz, U.; Vasquez, S.; Boysan, F. Eulerian computation of fluidized hydrodynamics - a comparison of physical models. *In: Proc. 13 th Int. Conf. On Fluidized Bed Combustion*, v.2, p.775-787, 1995.
- [Boemer, Qi e Renz (1997)] Boemer, A.; Qi, H.; Renz, U. Eulerian simulation of bubble formation at a jet in a two-dimensional fluidized bed. *International Journal Multiphase Flow*, v.23, n.5, p.927-944, 1997.
- [Bouillard, Gidaspow e Lyczkowski (1991)] 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 (1999)] Cabezas-Gómez, L. *Um estudo da modelagem matemática e simulação numérica de escoamentos bifásicos gás-sólidos*. Dissertação de mestrado, Escola de Engenharia de São Carlos, USP, São Carlos, Brasil, 1999.
- [Cabezas-Gómez (2003)] Cabezas-Gómez, L. *Modelagem matemática e simulação numérica de escoamentos bifásicos gás-sólido em colunas de leito fluidizado circulante*. Tese de Doutorado, Escola de Engenharia de São Carlos, USP, São Carlos, Brasil, 2003.

- [Chapman e Cowling (1960)] Chapman, S.; Cowling, T. G. *The mathematical theory of non-uniform gases*. 2nd Ed. Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 1960.
- [Collins (1965)] Collins, R. An extension of Davidson's theory of bubbles in fluidised beds. *Chemical Engineering Science*, v.20, p.747-755, 1965.
- [Courant, Isaacson e Reeves (1952)] Courant, R.; Isaacson, E.; Reeves, M. On the solution of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, v.5, p.243-255, 1952.
- [Crowe (2000)] Crowe, C.T. On models for turbulence modulation in fluid-particle flows. *International Journal of Multiphase Flow*, v.26, p.719-727.
- [Davidson (1961)] Davidson, J. Symposium on fluidization-discussion. *Trans. Inst. Chem. Eng*, v.39, p.230-232, 1961.
- [Delhaye e Achard (1976)] 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 e Achard (1977)] Delhaye, J. M.; Achard, J. L. On the use of averaging operators in two-phase flow modeling. *Thermal and hydraulic aspects of nuclear reactor safety, 1: Light water reactors*. ASME Winter meeting, 1977.
- [Ding e Gidaspow (1990)] Ding, J.; Gidaspow, D. A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow. *AIChE Journal*, v.36, p.523-538, 1990.
- [Drew (1983)] Drew, D. A. Mathematical modeling of two-phase flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v.15, p.261-291.
- [Du *et al.* (2006)] 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, Peirano e Almstedt, (1996)] Enwald, H.; Peirano, E.; Almstedt, A. Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. *International Journal of Multiphase Flow*, v.22, p.21-66, 1996.
- [Ferreira (2001)] Ferreira, V. G. *Análise e implementação de esquemas de convecção e modelos de turbulência para simulação de escoamentos incompressíveis envolvendo superfícies*

- livres*. Ph.D. Thesis, Department of Computer Science and Statistics, USP, São Carlos Brazil, 2001.
- [Ferziger e Peric (1999)] Ferziger, J. H.; Peric, M. Computational Methods for Fluid Dynamics. *Springer-Verlag*, Second edition, New York, 1999.
- [Garside e Al-Dibouni (1977)] Garside, J.; Al-Dibouni, M. R. Velocity-voidage relationship for fluidization and sedimentation. *IEEC Proc. Des. Dev.*, v.16, p.206-214, 1977.
- [Gaskell e Lau (1988)] Gaskell, P. H.; Lau, A. K. C. Curvature-Compensated Convective Transport: SMART, a new boundedness preserving transport algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v.8, p.617-641, 1988.
- [Gidaspow e Ettehadieh (1983)] Gidaspow, D.; Ettehadieh, B. Fluidization in two dimensional beds with a jet 2. Hydrodynamics modeling. *Ind. Eng. Chem. Fund.*, v.22, p.193-201, 1983.
- [Gidaspow (1994)] Gidaspow, D. *Multiphase Flow and Fluidization*. Academic Press. London, 1994.
- [Goldschmidt, Kuipers e Van Swaaij, (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.
- [Guenther e Syamlal (2001)] 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.
- [Harlow e Amsden (1975)] Harlow, F. H.; Amsden, A. A. Numerical calculation of multiphase fluid flow. *Journal of Computational Physics*, v.17, p.19-52, 1975.
- [Harten (1984)] Harten, A. On a class of high resolution total-variation stable finite-difference schemes. *SIAM Journal in Numerical Analysis*, v.21, n.1, p.1-23, 1984.
- [Ishii (1975)] Ishii, M. *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow*. Eyrolles. Paris, 1975.
- [Ishii e Mishima (1984)] Ishii, M.; Mishima, K. Two-fluid model and hydrodynamic constitutive relations. *Nuclear Engineering and Design*, v.82, p.107-126, 1984.

- [Jackson (1963)] 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 (1987)] 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 e Cowin (1979)] 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 e Savage (1983)] 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.
- [Kaibara, Ferreira e Navarro (2004)] Kaibara, M. K.; Ferreira, V. G.; Navarro, H. A. Upwinding finite-difference schemes for convection dominated problems. Part I: Theoretical Results. *Notas ICMC-USP São Carlos*, 2004.
- [Kuipers *et al.* (1993)] Kuipers, J.; van Duin, K.; van Beckum, F.; van Swaaij, W. Computer simulation of the hydrodynamics of a two-dimensional gas-fluidized bed. *Computers Chem. Eng.*, v.17, n.8, p.839-858, 1993.
- [Leonard (1979)] Leonard, B. P. A stable and accurate convective modeling procedure based on quadratic upstream interpolations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v.19, p.59-98, 1979.
- [Leonard (1987)] Leonard, B. P. SHARP simulation of discontinuities in highly convective steady flow. *NASA Technical Memorandum 100240*, ICOMP-87-9, 1987.
- [Leonard, (1988)] Leonard, B. P. Simple high-accuracy resolutions program for convective modeling of discontinuities. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v.8, p.1291-1318, 1988.
- [Leonard e Mokhtari (1990)] Leonard, B. P.; Mokhtari, S. Beyond First-Order Upwinding: The Ultra-Sharp Alternative for Non-Oscillatory Steady-State Simulation of Convection. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v.30, p.729-766, 1990.
- [Leonard (1991)] Leonard, B. P. The ULTIMATE conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v.88, p.17-74, 1991.

- [Lu *et al.* (2004)] 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, Savage e Jeffrey (1984)] 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 e Ahmadi (1998)] 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, 1998.
- [Murray (1965)] 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 (1980)] Patankar, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere. New York, 1980.
- [Peirano e Leckner (1998)] 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.
- [Price, Varga e Warren (1966)] Price, H. S.; Varga, R. S.; Warren, J. E. Applications of oscillation matrices to diffusion-correction equations. *Journal of Mathematical Physics*, v.45, p.301-311, 1966.
- [Pritchett, Blake e Garg (1978)] 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.
- [Raithby (1976)] Raithby, G. D. Skew upstream differencing schemes for problems involving fluid flow. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v.9, p.153-164, 1976.
- [Richardson (1927)] Richardson, L. F. The deferred approach to the limit. *Transactions of the Royal Society of London, Series A*, v.226, p.299-361.
- [Roache (1994)] Roache, P. J. Perspective: A method for uniform reporting of grid refinement studies. *Journal of Fluid Engineering*, v.116, p.405-413, 1994.

- [Sanyal e Cesmebasi, (1994)] 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 (1983)] Savage, S. B. Granular flow at High Shear Rates. In: MEYER, R.E., ed. *Theory of Dispersed Multiphase Flow*. New York, Academic Press, p.339-358, 1983.
- [Schaeffer (1987)] Schaeffer, D.G. Instability in the evolution equations describing incompressible granular flow. *Journal Differential Equations*, v.66, p.19-50, 1987.
- [Silva (2006)] 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 e Jackson (1989)] 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.
- [Song *et al.* (2000)] Song, B.; Liu, G. R.; Lam, K. Y.; Amano, R. S. On a higher-order discretization scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluid*, v.32, p.881-897, 2000.
- [Spalding (1972)] Spalding, D. B. A novel finite-difference formulation for differential expressions involving both first and second derivatives. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v.4, p.551-559, 1972.
- [Spalding (1980)] Spalding, D. B. Numerical computation of multi-phase fluid flow and heat transfer. *Recent Advances in Numerical Methods in Fluids*, C. Taylor et al., eds, Pineridge Press, 1980.
- [Stewart (1968)] Stewart, P. Isolated bubbles in fluidised beds-theory and experiment. *Tran. Inst. Chem. Eng.*, v.46, p.60-68, 1968.
- [Sweby (1984)] Sweby, P. K. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservative laws. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, v.21, p.995-1011, 1984.
- [Syamlal e O'Brien (1988)] 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 e O'Brien (1989)] Syamlal, M.; O'Brien, T. Computer simulations of bubbles in a fluidized bed. *AIChE Symp. Ser. Fluidization. Fluid Particle Syst.: Fundam. Appl.*, v.85, p.22-31, 1989.
- [Syamlal, Rogers e O'Brien (1993)] Syamlal, M.; Rogers, W.; O'Brien, T. MFIx documentation: theory guide. Technical Note. DOE/METC-95/1013, 1993.
- [Syamlal (1998)] Syamlal, M. MFIx Documentation: Numerical Technique, EG and G technical report, DE-AC21-95M31346, 1998.
- [Tadmor (1988)] Tadmor, E. Convenient total variation diminishing conditions for nonlinear difference schemes. *SIAM Journal in Numerical Analysis*, v.25, n.5, p.1002-1014, 1988.
- [Therdthianwong (1994)] Therdthianwong, A. Hydrodynamic and SO<sub>2</sub> sorption in a circulating fluidized bed. Tese de Doutorado, Illinois Institute of Technology, Chicago, 1994.
- [Tuzun *et al.* (1982)] 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 Leer (1979)] van Leer, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method. *Journal of Computational Physics*, v.32, p.101-136, 1979.
- [van Wachen *et al.* (1998)] 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.
- [Varonos e Bergeles (1998)] Varonos, A.; Bergeles, G. Development and assessment of a variable-order nonoscillatory scheme for convection term discretization. *International Journal for Numerical Methods in Fluid*, v.26, p.1-16, 1998.
- [White (1991)] White, F. *Viscous fluid flow*. Mc- Graw Hill, 2nd ed., 1991.
- [Zhu e Leschziner (1988)] Zhu, J.; Leschziner, M. A. A local oscillation-damping algorithm for higher-order convection schemes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v.67, p.355-366, 1988.

# Apêndice A

## Teoremas

### A.1 Teorema de Leibniz

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

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

### A.2 Teorema de Gauss-Ostragradskii

- Função escalar (tensor de ordem zero)

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

- Função vetorial (tensor de primeira ordem)

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

- Função tensorial (tensor de segunda ordem)

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

# Apêndice B

## "Convection Boundedness Criterion" (CBC)

A solução numérica obtida pela discretização do termo de convecção utilizando um esquema limitado nunca transporá os valores máximo e mínimo inerentemente determinados pelo processo físico. Se a solução numérica apresenta super ou subestimativa, elas sempre ocorrerão onde uma inclinação excessiva do gradiente das variáveis dependentes existir. A ausência de saltos em um esquema numérico pode ser definida como a não geração de oscilações não físicas em regiões com inclinação elevada do gradiente. A ausência de saltos é de imensa importância a fim de manter os resultados numéricos razoáveis.

Gaskell e Lau (1988), proporam um critério denominado "Convection Boundedness Criterion- CBC com a finalidade de garantir que um esquema de convecção possua a característica de ausência de saltos. Esse critério é principalmente aplicado a escoamentos incompressíveis. Formalmente, o critério CBC afirma que se  $\tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_f(\tilde{\phi}_U)$  é uma função contínua ou contínua por partes, então  $\tilde{\phi}_f$  possui a característica de ausência de saltos se as seguintes condições forem satisfeitas:

- $\tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_f(\tilde{\phi}_U) = \tilde{\phi}_U$  para  $\tilde{\phi}_U \leq 0$
- $\tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_f(\tilde{\phi}_U) = \tilde{\phi}_U$  para  $\tilde{\phi}_U \geq 1$
- $\tilde{\phi}_U \leq \tilde{\phi}_f(\tilde{\phi}_U) \leq 1$  para  $0 \leq \tilde{\phi}_U \leq 1$

A correspondente região no diagrama de variável normalizada é ilustrada na figura.

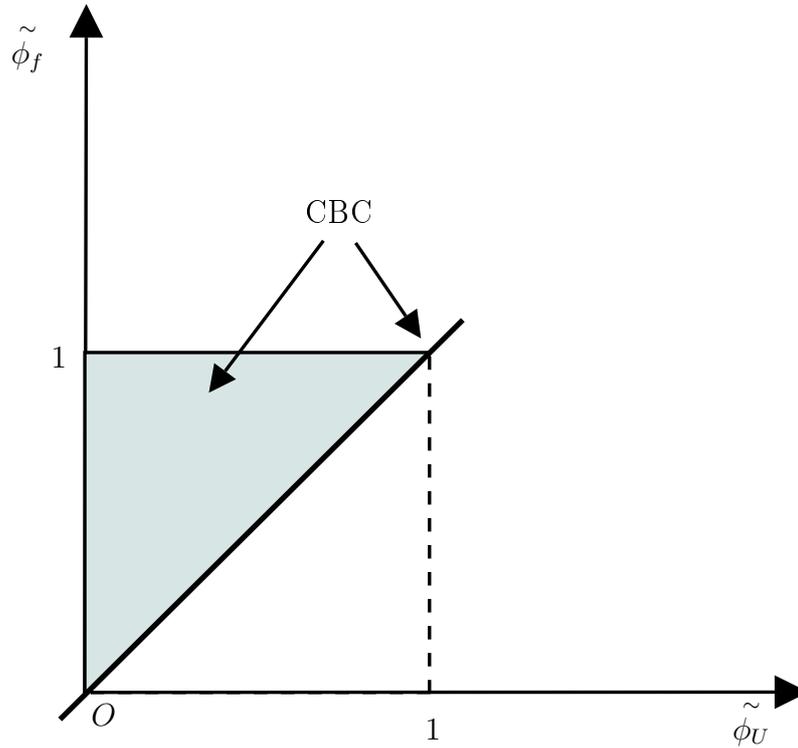


Figura B.1: Representação do diagrama CBC em variáveis normalizadas.

## B.1 Critério de Harten

Considere uma equação na forma:

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n + C_{i+\frac{1}{2}} (\phi_{i+1}^n - \phi_i^n) - D_{i-\frac{1}{2}} (\phi_i^n - \phi_{i-1}^n) \quad (\text{B.1})$$

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

Se os coeficientes em (B.1) satisfazem as seguintes desigualdades para todo  $i$ ,

$$\begin{aligned} C_{i+\frac{1}{2}} &\geq 0; \\ D_{i+\frac{1}{2}} &\geq 0; \\ C_{i+\frac{1}{2}} + D_{i+\frac{1}{2}} &\leq 1 \end{aligned}$$

então o esquema é TVD.

**Demonstração:** Tem-se que:

$$\begin{aligned} \phi_{i+1}^{n+1} - \phi_i^{n+1} &= \phi_{i+1}^n + C_{i+\frac{3}{2}} (\phi_{i+2}^n - \phi_{i+1}^n) - D_{i+\frac{1}{2}} (\phi_{i+1}^n - \phi_i^n) \\ &= \phi_i^n - C_{i+\frac{1}{2}} (\phi_{i+1}^n - \phi_i^n) + D_{i-\frac{1}{2}} (\phi_i^n - \phi_{i-1}^n) \\ &= C_{i+\frac{3}{2}} (\phi_{i+2}^n - \phi_{i+1}^n) + (1 - C_{i+\frac{1}{2}} - D_{i+\frac{1}{2}}) (\phi_{i+1}^n - \phi_i^n) + \\ &\quad + D_{i-\frac{1}{2}} (\phi_i^n - \phi_{i-1}^n) \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Por hipótese todos os coeficientes no lado direito de (B.2) são positivos. Portanto:

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

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

$$TV(\phi^{n+1}) = \sum_i |\phi_{i+1}^{n+1} - \phi_i^{n+1}| \leq \sum_i |\phi_{i+1}^n - \phi_i^n| = TV(\phi^n) \blacksquare \quad (\text{B.3})$$

**Teorema B.1** *Suponha que a função  $\varphi$  satisfaça:*

$$\begin{cases} \varphi(r) = 0, & \text{se } r \leq 0 \\ 0 \leq \varphi(r) \leq \min\{2, 2r\}, & \text{se } r > 0 \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

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

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

$$C_{i+\frac{1}{2}} \quad (\text{B.5})$$

$$D_{i-\frac{1}{2}} = \nu + \frac{1}{2}\nu(1-\nu) \left( \frac{\varphi_{i+\frac{1}{2}}}{r_{i-\frac{1}{2}}} - \varphi_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (\text{B.6})$$

Sob as condições expressas em (B.4), deve-se checar a restrição  $0 \leq D_{i-\frac{1}{2}} \leq 1$ . Note que neste caso,  $\phi_i^n$  permanece entre  $\phi_{i-1}^n$  e  $\phi_i^n$ , o que ilustra a propriedade "upwind" do esquema. Suponha primeiro que:

$$\left| \frac{\varphi(r)}{r} - \varphi(s) \right| \leq \phi, \quad (\text{B.7})$$

para todo  $r, s$  e algum  $\phi = \phi(\nu)$ . Desde que,  $0 < \nu < 1$ , tem-se de (B.5), (B.6) e (B.7):

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

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

$$\phi \leq \min \left\{ \frac{2}{\nu}, \frac{2}{1-\nu} \right\} \implies 0 \leq D_{i-\frac{1}{2}} \leq 1 \quad (\text{B.8})$$

Desde que  $\nu \in (0, 1)$ , deve-se ter  $\phi \leq 2$ . É claro de (B.5) e (B.6), que para  $\nu = 0$  ou  $\nu = 1$  o critério de Harten é satisfeito.

Em seguida, assumindo  $\varphi(r) = 0$  para  $r \leq 0$ , a equação (B.7) será satisfeita com  $\phi = 2$ , se  $r > 0$  então  $0 \leq \varphi(r) \leq 2r$  e  $\varphi(r) \leq 2$ , o que origina (B.4)  $\blacksquare$

A condição (B.4) significa que o gráfico de  $\varphi$  deve permanecer na região da figura.

**Observação:** O teorema B.1 é válido no caso geral  $|\nu| \leq 1$ .

## B.2 Exemplos de limitadores

### 1. Limitador de Sweby

$$\varphi_s(r) = \max\{0, \min(Sr, 1), \min(r, S)\} \quad (\text{B.9})$$

em que  $S$  é um parâmetro no intervalo  $[1, 2]$ . A função  $\varphi_s$  é monótona, crescente e simétrica, isto é:

$$\frac{\varphi_s(r)}{r} = \varphi_s\left(\frac{1}{r}\right) \quad (\text{B.10})$$

### 2. Limitadores de Roe

Para  $S = 1$  em (B.9), obtém-se o limitador Minmod e para  $S = 2$ , obtém-se o limitador altamente compressivo Superbee.

### 3. Limitador de Van Leer

A técnica descrita em Van Leer (1974), conduz ao limitador

$$\varphi(r) = \frac{r + |r|}{1 + |r|} = \begin{cases} 0 & \text{se } r \leq 0 \\ \frac{2r}{1+r} & \text{se } r \geq 0 \end{cases} \quad (\text{B.11})$$