

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA
TRIDIMENSIONAL TRANSIENTE DO
ESCOAMENTO GÁS-SÓLIDO EM UM REATOR
DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO EM LEITO
FLUIDIZADO**

Tese submetida à

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

para a obtenção do grau de

DOUTOR EM ENGENHARIA MECÂNICA

IVAN CARLOS GEORG

Florianópolis, junho de 2005

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA TRIDIMENSIONAL TRANSIENTE
DO ESCOAMENTO GÁS-SÓLIDO EM UM REATOR DE CRAQUEAMENTO
CATALÍTICO EM LEITO FLUIDIZADO**

Ivan Carlos Georg

ESTA TESE FOI JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE

DOUTOR EM ENGENHARIA

ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA E APROVADA EM SUA FORMA
FINAL PELO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Prof. Clovis Raimundo Maliska, Ph.D.
(orientador)

Prof. Luismar Marques Porto, Ph.D.
(co-orientador)

Prof. José Antonio Belline da Cunha Neto, Dr.
(coordenador do programa)

BANCA EXAMINADORA

Prof. Clovis Raimundo Maliska, Ph.D
(presidente)

Prof. Fernando Eduardo Milioli, Ph.D.
(relator)

Prof. Aristeu Da Silveira Neto, Dr. Ing.

Waldir Pedro Martignoni, Ph.D.

Prof. Humberto Jorge José, D.Rer.Nat.

Prof. Amir A. M. de Oliveira Jr., Ph.D.

AGRADECIMENTOS

À Agencia Nacional de Petróleo – PRH-09 pelo apoio financeiro para a realização deste trabalho.

Aos professores Clovis Raimundo Maliska e Luismar Marques Porto pela orientação e apoio constante e incondicional.

Ao Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor – SINMEC onde o presente trabalho foi realizado.

Aos colegas do programa de pós-graduação em Eng. Mecânica. Especialmente aos amigos do SINMEC.

Aos amigos Luiz Orlando Emerich, Rodrigo Surmas, Luiz Hegele, Carlos Pico e Ricardo Rezende pelas horas dispensadas em discussões sobre meu trabalho e sobre os mais variados assuntos científicos.

Aos amigos Oswaldo Micheluzzi, Virgo Micheluzzi, Alvaro Olinger, Luiz Suarez e Omar Ali-Shah, pelo apoio incondicional e infinita paciência.

Aos meus filhos, Clara Jan, Gabriel e Luisa pelo constante apoio.

A minha companheira Carla Giovana Cabral, pelo apoio constante e incondicional.

SUMÁRIO

LISTA DE TABELAS	v
SIMBOLOGIA.....	vi
RESUMO	vii
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Considerações gerais	1
1.2 Aspectos gerais da unidade de craqueamento catalítico	2
1.3 Escoamento gás-sólido em um reator FCC.....	5
1.4 Objetivos e apresentação do trabalho...	6
2 ESCOAMENTO MULTIFÁSICO GÁS-SÓLIDO	8
2.1 Introdução	8
2.2 Teoria da fluidização	10
2.2.1 Velocidade de mínima fluidização.....	13
2.2.2 Classificação de Geldart.....	15
2.3 Fluidodinâmica de leitos fluidizados	18
2.3.1 Modelagem do escoamento gás-sólido.....	20
2.3.2 Relações constitutivas explícitas para escoamento gás-sólido	29
3 FUNDAMENTOS DA TURBULÊNCIA.....	40
3.1 Aspectos fundamentais da modelagem da turbulência.....	40
3.2 Modelos de turbulência para escoamento gás-sólido	50
4 FENOMENOLOGIA DA FORMAÇÃO E DESTRUIÇÃO DE CLUSTERS EM ESCOAMENTOS GÁS-SÓLIDO	55
4.1 Introdução	55
4.2 Origem dos clusters em escoamentos gás-sólido.....	58
5 MODELO MATEMÁTICO, NUMÉRICO E ESQUEMA DE DISCRETIZAÇÃO DO SOFTWARE CFX-5.6.....	66
5.1 Introdução	66
5.2 Modelos matemáticos para escoamento gás-sólido – CFX-5.6	66

5.3 Equações discretizadas – CFX-5.6.....	70
6 RESULTADOS E DISCUSSÃO	76
6.1 Introdução	76
6.2 Descrição do caso base e caracterização qualitativa de clusters	77
6.3 Estudos de caso com comparação quantitativa e qualitativa	81
6.3.1 Apresentação de resultados: Caso 1	83
6.3.2 Apresentação de resultados: Caso 2	89
6.3.3 Apresentação de resultados: Caso 3	99
6.3.4 Apresentação de resultados: Caso 4	106
6.3.5 Apresentação de resultados: Caso 5	112
6.3.6 Apresentação de resultados: Caso 6	120
6.3.7 Apresentação de resultados: Caso 7	128
6.3.8 Apresentação de resultados: Caso 8	139
6.3.9 Apresentação de resultados: Caso 9	150
6.3.10 Apresentação de resultados: Caso 10	161
6.4 Visualização 3D de estruturas de clusters de vórtices	162
6.4.1 Estruturas de clusters, strands e bolhas de gás.....	162
6.4.2 Base teórica para identificação de vórtices	166
6.5 Discussão e análise dos resultados.....	191
6.5.1 Diferenças entre estudo numérico de Zhang e van der Heyden (2001) e a presente tese	196
6.5.2 Escalas, resultados temporais e análise espectral.....	198
6.5.2.1 Escalas	198
6.5.2.2 Resultados temporais e análise espectral	203
6.5.2.3 Estruturas intermitentes	249
6.5.2.4 Perfis transversais	264
6.6 Estudo de Caso referente ao trabalho experimental de Luo (1987) e numérico de Tsuo e Gidaspow (1990) e Cabezaz-Gómez (2003).....	265
6.6.1 Resultados de simulação para leito fluidizado do trabalho experimental de Luo (1987) – viscosidade constante	267
6.6.2 Resultados de simulação para leito fluidizado do trabalho experimental de Luo (1987) – modelo sub-malha para viscosidade do gás e do sólido.....	276
7 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	286
7.1 Considerações gerais	286

7.2 Sumário das conclusões	293
7.3 Sugestões para trabalhos futuros.....	296

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	298
APÊNDICE A - O ARRASTE NO MODELO DE DOIS FLUIDOS.....	306
APÊNDICE B – CONDIÇÃO DE CONTORNO NA PAREDE.....	311
APÊNDICE C – CARACTERIZAÇÃO DE CLUSTERS E STRANDS.....	313
APÊNDICE D – ANISOTROPIA DAS TENSÕES PARA FASE SÓLIDO	316

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Valores típicos para os números de Reynolds e Stokes (Jackson 2000)	37
Tabela 2 – Modelo matemático padrão para escoamento gás-sólido utilizado na tese.....	73
Tabela 3 – Modelos para viscosidade turbulenta da fase gás e da fase sólido.....	74
Tabela 4 – Características das partículas sólidas utilizadas nos experimentos	78
Tabela 5 – Propriedades e modelos utilizados nos estudos de caso.....	82
Tabela 6 – Propriedades e modelos utilizados nos estudos de caso dos itens 6.5.1 e 6.5.2	82
Tabela 7 – Propriedades e modelos utilizados nos estudos de caso anteriores	192
Tabela 8 – Quantidade de partículas para cada uma das resoluções de refino de malha e diâmetro de partículas	198

SÍMBOLOGIA

Alfabeto Latino:

n	Vetor normal	[m]
P	Pressão	[N/m ²]
Re	Número de Reynolds	[-]
St	Número de Stokes	[-]
G	Módulo de Elasticidade da fase sólido	[Pa]

Alfabeto Grego:

β	Função de arrasto na interface	[kg/m ³ s]
θ	Temperatura Granular	[m ² /s ²]

Índices:

g	Fase gás;
p,s	Fase sólido;

RESUMO

O escoamento gás-sólido turbulento em um leito fluidizado circulante é estudado utilizando-se modelo matemático tridimensional transiente, com refinos de malha e temporal adequados para capturar as estruturas de aglomerados de partículas (*clusters* e *strands*) encontrados na chamada meso-escala. O trabalho baseia-se na abordagem proposta por Agrawal *et al.* (2001) e Zhang e van der Heyden (2001). Aplicou-se um modelo sub-malha (**LES**) para a fase gás e sólido baseado em Smagorinsky (1963). O modelo sub-malha apresenta-se necessário devido a impossibilidade de resolver todas as escalas envolvidas no escoamento gás-sólido em um leito fluidizado turbulento. Os resultados numéricos são comparados com dados experimentais com boa aproximação para os perfis de velocidade média axial e lateral do sólido. O modelo sub-malha aplicado apresenta comportamento excelente na região próxima à parede e intermediária, com desvio na região central (diluída), sobre estimando o arraste. Este efeito, é causado pela forma de cálculo do arraste no modelo de dois fluidos utilizado para a solução do problema. Análise espectral é realizada para os estudos de caso. A região inercial foi capturada pela resolução espacial e temporal utilizada, com inclinação -5/3, indicando que o refino de malha e temporal foi adequado para a solução do problema. Realizou-se análise de estruturas intermitentes através do coeficiente de achatamento (Kurtosis) e comparado-se com resultados experimentais. A comparação mostra que a utilização do modelo sub-malha é necessária, pois este incorpora o comportamento físico esperado para um leito fluidizado turbulento, o que não ocorre quando da não utilização do modelo sub-malha. Estabeleceu-se que as estruturas de *clusters* estão associadas a alta taxa de deformação e os *strands* a estruturas de vórtices contra rotativos estirando-se. Baseado neste fato, propôs-se uma forma de caracterizar a formação e destruição de *clusters* e *strands*, com bom resultado, assim como a dimensão característica. Uma série de conclusões e recomendações para trabalhos futuros nesta linha de pesquisa são propostas, baseadas nas análises realizadas.

Palavras-chave: escoamento multifásico gás-sólido, turbulência, Leito fluidizado, clusters, modelos sub-malha, riser.

ABSTRACT

The hydrodynamics of gas-solid flow in a turbulent circulating fluidized bed are studied computationally with a transient 3D grid refinement adequate to capture the structures of agglomerates of particles (*clusters* and *strands*) which are found in the so called meso-scale. This study is based on the recent works of Agrawal *et al.* (2001) and Zhang and van der Heyden (2001) about the effects of clustering of particles and strands on flow. A sub-grid model (**LES**) is applied for the solid and gas phases. The numerical results are compared with the experimental ones with good approximation for the average axial and lateral velocities for the solid phase. The sub-grid model employed gives very good behavior at near wall and intermediate regions, with deviation in the central region (dilute), over estimating the drag. This deviation seems to be caused by the way drag is calculated by the two-fluid model. Spectral analysis is accomplished for the studied cases. The inertial region was observed by the spatial and temporal resolutions, with -5/3 slope, indicating that the refinement in space and time was adequate. The intermittent structures were analyzed and compared with experiments. This analysis revealed that the utilization of sub-grid model is important and incorporates the physical behavior expected for a turbulent fluidized bed. This behavior was not observed when no sub-grid correction was used. It was observed that *strands* are associated with tubes of counterclockwise vortices stretching and *clusters* with high shear. Based on this observation a possible way to characterize *clusters* and *strands* was proposed, with good results. Some general conclusions and recommendations are presented for future works based on the analyses presented in this work.

Keywords: Two-phase gas-solid flow, turbulence, fluidized bed, clusters, sub-grid models, riser.

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1 Considerações gerais

Em torno de 80 milhões de barris de petróleo são processados diariamente em refinarias ao redor do mundo para suprir a demanda por produtos derivados, tendo como processo chave a catálise. Uma variedade de processos é requerida para a transformação de petróleo cru em produtos finais, dentre eles o craqueamento catalítico em leito fluidizado (FCC), que é responsável por 30% da produção mundial de gasolina. O processo FCC é considerado um processo de alta rentabilidade econômica pelo fato de utilizar como carga um produto de baixo valor comercial, o gasóleo de vácuo, que, se não fosse utilizado na unidade de FCC, seria simplesmente adicionando ao óleo combustível, daí sua importância no contexto da produção mundial de gasolina automotiva, naftas, óleo diesel, gasolina de aviação, dentre outros produtos.

No contexto brasileiro este fato tem uma importância significativa, tendo em vista que a maioria do petróleo nacional produzido é pesado. Por exemplo, o petróleo produzido na bacia de Campos tem em média 22°API. Os programas PROREC (Programa Tecnológico de Otimização e Confiabilidade), PROPES (Programa Tecnológico de Óleos Pesados) e PROTER (Programa de Tecnologias Estratégicas do Refino) desenvolvidos no CENPES – Petrobrás demonstram o interesse da companhia no melhor conhecimento do processo e no processamento de óleos pesados.

O plano estratégico proposto pela Petrobrás no período de 2003 a 2007 afirma que pretende: “manter o parque de refino atualizado visando aumentar o processamento e valorizar o petróleo nacional, adequando o perfil da produção de derivados à demanda e atendendo às exigências de qualidade de mercado”, o que mostra o interesse crescente no parque de refino nacional, tendo em vista que nos próximos anos haverá um investimento da ordem de US\$ 5 bilhões no refino de petróleo, projetando uma capacidade de processamento de 200 mil barris por dia até 2008, segundo o presidente da Petrobrás.

O sucesso das operações em uma unidade FCC é um fator crítico no rendimento da maioria das refinarias. Por este e outros motivos, grupos de pesquisa nas indústrias de petróleo e na academia têm dedicado esforços no estudo dos processos que envolvem

escoamentos multifásicos tridimensionais, turbulência, reações químicas e combustão, entre outros fenômenos físico-químicos, utilizando para tal métodos de Fluido Dinâmica Computacional (**CFD**) para simulação numérica.

CFD é um corpo de conhecimento e técnicas para resolver modelos matemáticos de fluidodinâmica em computadores. As técnicas de **CFD** foram identificadas na *Technology Vision 2020, The U.S. Chemical Industry*, publicado em 1996, por cinco organizações representando a indústria química, incluindo o *AIChe*, como uma das tecnologias críticas para o desenvolvimento da indústria química. Espera-se que as técnicas de **CFD** possam auxiliar no desenvolvimento de novas tecnologias, otimização de unidades já existentes, novas rotas de processo, melhorar os aspectos energéticos de unidades e auxiliar no projeto. O melhor conhecimento do escoamento gás sólido, formação de *clusters* (aglomerados de partículas) e as relações entre *clusters* e reações químicas também é citado no documento supra citado. Em artigo recente, Joshi e Ranade (2003) apresentam comentários sobre o desenvolvimento, expectativas e o corrente *status* do desenvolvimento das técnicas de **CFD**, ressaltando a importância do direcionamento dos estudos na compreensão da influência dos *clusters* no escoamento gás-sólido e nas velocidades de reação.

Neste contexto insere-se a presente tese de doutorado, com o objetivo principal de estudar os mecanismos pelos quais essas estruturas, *clusters* (aglomerados de partículas), são formadas e destruídas, caracterizá-las e estabelecer os mecanismos fluidodinâmicos para sua existência em um reator FCC, bem como sua influência nas velocidades de reação.

1.2 Aspectos gerais da unidade de craqueamento catalítico

Escoamento gás-sólido reativo a altas velocidades é comumente encontrado em processos industriais químicos e petroquímicos. Em muitos casos as reações são extremamente rápidas e são catalisadas por sólidos. Geralmente estas reações são tipicamente conduzidas em unidades verticais (*risers*), de 10 a 40 metros de altura. Em um reator FCC o tempo de residência do sólido varia de 2 a 5 segundos. As concentrações de sólidos em um reator FCC encontram-se em torno de 20% na base do reator e 2 a 5% nas regiões próximas ao topo, variando com a condição de operação de acordo com as demandas ou exigências do mercado ou produção. Esta configuração é escolhida porque provê um bom contato entre o gás e os sólidos garantindo altas velocidades de forma a manter um tempo de residência curto, promovendo ainda uma boa transferência de energia e a possibilidade de altas conversões.

Uma unidade de FCC (Figura 1), consiste basicamente de dois equipamentos principais, o *riser* e o regenerador. O processo inicia-se com a injeção de catalisador e gasóleo na base do *riser*, em configuração variável de unidade para unidade. O catalisador ascende

verticalmente até o topo do reator onde uma série de ciclones é utilizada para separar o gás do sólido. Durante este processo as reações catalíticas de craqueamento são completadas, através do íntimo contato entre catalisador e os hidrocarbonetos. Quando da separação dos gases de reação e sólidos nos ciclones, o catalisador segue para o regenerador onde sofre um processo de combustão em um leito borbulhante, para a retirada do coque depositado no catalisador, remanescente de reações indesejáveis no interior do *riser*, sofrendo novamente separação através de outra série de ciclones, e finalmente retornando ao *riser*, já com sua atividade catalítica re-estabelecida.

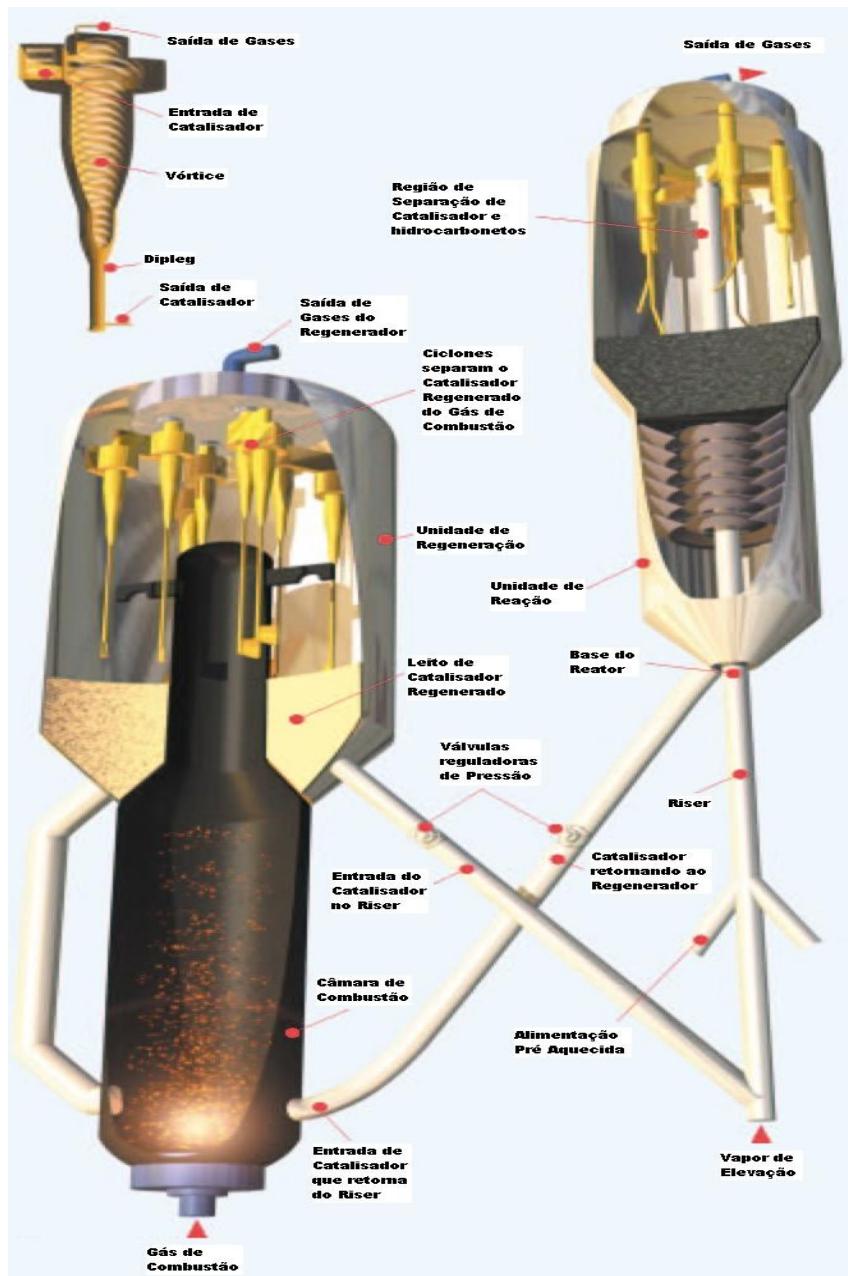


Figura 1. Esquema de uma unidade de FCC com *riser* e regenerador.

O catalisador que está retornando do regenerador tem uma temperatura em torno de 700 °C, que entrando em contato com o gasóleo, produz uma temperatura de reação em torno

de 550 a 600 °C. A vaporização e o craqueamento do gasóleo produz uma expansão. Esta expansão somada ao vapor introduzido para a atomização da alimentação faz com que o gás transporte o catalisador verticalmente em uma mistura de gasolina, diesel e gases leves. Durante o tempo de residência, os hidrocarbonetos com cadeias carbônicas grandes são transformados em hidrocarbonetos mais leves e de maior valor agregado. Ainda há a formação de coque, subproduto indesejado das reações de craqueamento, que entope os poros do catalisador, diminuindo assim sua eficiência.

O regime de escoamento encontrado em reatores FCC é caracterizado pelo alto carregamento de sólidos. Desta forma, uma grande quantidade de sólido necessita ser introduzida continuamente na base do reator, garantindo assim operações em regime pseudo-estacionário. De fato, em um reator FCC o regime estacionário não é encontrado, devido às grandes flutuações encontradas nos padrões de escoamento, em virtude da formação e destruição de estruturas de aglomerados de partículas (*clusters*).

Simular o escoamento gás sólido tem como finalidade principal a otimização do processo e o projeto de unidades industriais, assim como o entendimento das relações dos fenômenos fundamentais associados às escalas temporais e espaciais envolvidas. A natureza das interações hidrodinâmicas e químicas nas várias escalas apresentam-se como um grande desafio no que se refere aos aspectos de modelagem matemática (Anderson e Jackson 1967; Theologos *et al.* 1997; Harris *et al.* 2002). Tem havido um grande esforço na busca do entendimento dos mecanismos inerentes ao escoamento gás-sólido, contudo o estado da arte do escoamento multifásico ainda está longe do ideal, segundo Martignoni (1998), van Wachem (2000), Zhang e VanderHeyden (2001).

Os desafios são grandes no que se refere ao entendimento dos fenômenos inerentes ao escoamento multifásico reativo encontrado em um reator de craqueamento catalítico. Não bastasse as milhares de reações químicas que ocorrem em um curto espaço de tempo, difíceis de serem tratadas matematicamente, as não homogeneidades do escoamento gás-sólido contribuem para o decréscimo da eficiência do reator FCC.

Por que é tão difícil desenvolver modelos que representem estas interações nas escalas espaciais e temporais em que ocorrem? Parte das dificuldades encontra-se no fato de que as suspensões gás-sólido com altos fluxos de sólido são muito opacas para permitir medidas ópticas não intrusivas. Técnicas não intrusivas tais como capacitância, impedância e tomografia de raios gama estão ainda em desenvolvimento (Chen *et al.*, 1999). Estas técnicas ainda não tem a resolução adequada para fornecer informações pertinentes; desta forma, as técnicas de **CFD** mostram-se como ferramentas promissoras para o entendimento dos fenômenos inerentes ao escoamento multifásico gás-sólido, bem como para sua visualização.

Mesmo o tratamento das reações químicas é dificultado, no que concerne ao aspecto de modelagem, pois as centenas de milhares de reações químicas que ocorrem durante o processo de craqueamento são geralmente tratadas de forma a se considerar *lumps* de compostos (parâmetros agrupados). A utilização de *lumps* de compostos é uma prática comum na indústria e no meio acadêmico; contudo, desta forma não se tem um entendimento fundamental das reações químicas como um todo no processo, e de como estas são influenciadas pela fluidodinâmica. Infelizmente, a representação e simulação levando em conta todas as reações químicas que ocorrem em um reator FCC e as interações fluido dinâmicas é impraticável nos dias de hoje, assim a utilização de *lumps* de compostos é a alternativa preferível, e uma ferramenta possível de ser utilizada em um modelo que represente em conjunto as reações químicas e a fluidodinâmica envolvida.

1.3 Escoamento gás-sólido em um reator FCC

Os reatores de craqueamento catalítico em leito fluidizado apresentam uma distribuição de sólidos não homogênea, com regiões de alta e baixa concentração de sólidos, como apresentado esquematicamente na Figura 2. A formação de aglomerados de partículas (*clusters*), e sua influência nas taxas de reação e fluido dinâmica são de difícil abordagem matemática, pelo fato de encontrar-se campos de velocidade, tensões, cinética e distribuição de temperatura diferenciadas em cada uma das regiões do reator.

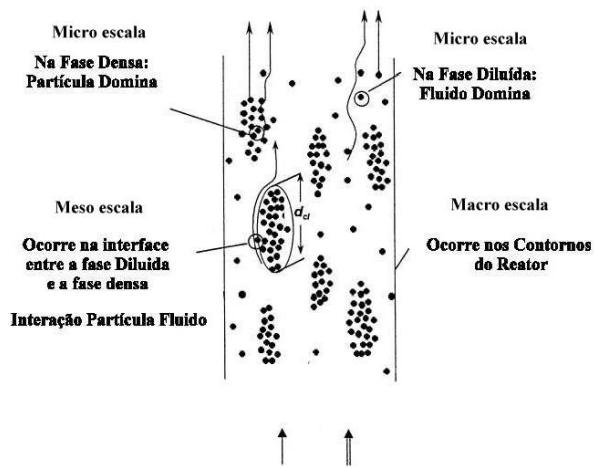


Figura 2. Esquema das escalas espaciais e não homogeneidades em um reator FCC.

Há ainda os aspectos associados às diferentes escalas espaciais e temporais em que estas estruturas denominadas *clusters* encontram-se, exigindo desta forma o estudo de escala adequado para captá-los e assim caracterizá-los.

Estas estruturas ocorrem na chamada meso-escala e tem dimensões típicas de 50 a 100 diâmetros de partícula, o que corresponde a poucos milímetros. Meso-escala significa neste

contexto, a escala entre a micro-escala, que corresponde à dimensão de uma partícula, e a macro escala, que corresponde à dimensão lateral do reator. Estas estruturas presentes na meso-escala são constantemente formadas e destruídas (Agrawal, 2000). Este processo leva a flutuações locais persistente na concentração dos sólidos e na velocidade relativa entre gás e sólidos. Em termos de média temporal, estas flutuações levam a uma distribuição não uniforme da concentração de sólidos na macro escala, por exemplo, sendo maior junto às paredes do reator, do que no centro. Esta não uniformidade gera um fluxo descendente de partículas e gás junto às paredes, podendo gerar segregação. Os padrões de segregação variam consideravelmente com a mudança de escala, segundo apontam Kunni e Levenspiell (1991), influenciando o tempo de residência das partículas, levando à recirculação de sólido, fenômeno bem conhecido em FCC's. Este fato é de importância fundamental quando da extração de dados de reatores piloto para reatores industriais. Os padrões hidrodinâmicos têm um papel fundamental no escalonamento e projeto de unidades industriais. Por este e outros motivos, há um grande interesse no melhor entendimento da origem destas estruturas, e como estas levam à segregação da macro escala.

Os aspectos ressaltados acima demonstram as dificuldades na modelagem e simulação do escoamento gás-sólido reativo no interior de um reator FCC, e o grande desafio que representa a abordagem e o entendimento dos complexos fenômenos encontrados em um processo de craqueamento catalítico em leito fluidizado.

1.4 Objetivos e apresentação do trabalho

O trabalho tem como objetivo contribuir para o esclarecimento dos mecanismos físicos responsáveis pela formação/destruição de *clusters* utilizando-se da ferramenta de simulação numérica CFX-5.6®. Neste contexto, baseado em evidências experimentais e numéricas, utilizou-se um modelo sub-malha com o intuito de descrever os mecanismos físicos associados à formação de *clusters* em leitos fluidizados turbulentos. A caracterização destas estruturas, via modelo numérico, também é um dos objetivos deste trabalho.

Desta forma, realizaram-se simulações numéricas do escoamento gás-sólido em um leito fluidizado turbulento isotérmico não reativo. Utilizou-se o modelo matemático baseado na formulação Euleriana-Euleriana, conhecido como “modelo de dois fluidos”. O trabalho subdivide-se em sete capítulos summarizados da seguinte forma:

Capítulo 1 – Introdução e apresentação sucinta do problema em questão.

Capítulo 2 – Aspectos fundamentais associados ao escoamento multifásico gás-sólido são apresentados e discutidos, ressaltando-se aspectos históricos e apresentação da modelagem matemática comumente utilizada no tratamento do problema.

Capítulo 3 – Neste capítulo são apresentados e discutidos, de forma sucinta, aspectos fundamentais associados a turbulência em escoamentos multifásicos, com ênfase no escoamento gás-sólido.

Capítulo 4 – A fenomenologia da formação e destruição de *clusters* e apresentação e discussão de aspectos importantes a abordagem utilizada no trabalho.

Capítulo 5 – Os modelos matemáticos e o esquema numérico utilizados no trabalho são apresentados.

Capítulo 6 – Neste capítulo são apresentados os resultados e análise pertinente destes é realizada, bem como discussão, comparando os resultados numéricos com dados experimentais e numéricos encontrados na literatura. São realizadas análise espectral, de estruturas intermitentes e coeficiente de achatamento de alguns estudos de caso.

Capítulo 7 – Conclusões e Recomendações.

Como trata-se de um assunto multidisciplinar, envolvendo conhecimento de áreas com diferentes abordagens, optou-se por realizar a revisão bibliográfica no decorrer da apresentação do texto.

CAPÍTULO 2

ESCOAMENTO MULTIFÁSICO GÁS SÓLIDO

Neste capítulo serão apresentados os aspectos fundamentais associados ao escoamento multifásico gás-sólido ressaltando os aspectos históricos importantes, tais como fluidização, regimes de escoamento. Apresenta-se a modelagem matemática e as abordagens comumente utilizadas para o tratamento do problema, bem como os modelos utilizados na presente tese, o tratamento das diferentes escalas associadas ao escoamento gás-sólido ressaltando os benefícios e limitações da abordagem escolhida para solução do problema.

2.1 Introdução

O reator de craqueamento catalítico apresenta-se, no que concerne à fluidodinâmica, como um sistema multifásico gás-sólido, também conhecido como leito fluidizado circulante. A complexidade do escoamento gás-sólido em um leito fluidizado tem gerado nas últimas duas décadas um intenso estudo por parte de grupos de pesquisa, ao redor do mundo, com o objetivo de desvendar a fenomenologia e entender os mecanismos físicos presentes neste tipo de escoamento, caracterizado por um comportamento não homogêneo, complexo, resultado da intensa interação partícula-partícula e fluido-partícula (Jackson, 2000), onde a distribuição de partículas está longe de ser uniforme, encontrando-se regiões de baixa e alta concentração de sólidos.

Na década de 50 a utilização de correlações empíricas para predição das propriedades do sistema era corrente, acreditando-se que estas eram suficientes para modelar os complexos fenômenos apresentados neste tipo de escoamento. O interesse em um estudo mais aprofundado referente às heterogeneidades observadas experimentalmente iniciou-se na década de 60 com o trabalho de Davidson e Harrison (1963), citado em Kunii e Levenspiel (1969). Este período é marcado pelo início do interesse em uma abordagem mais fundamental, baseada nas equações do movimento para a interação fluido-partículas. Não havia interesse em aspectos relacionados com o projeto das unidades, e sim com o entendimento dos mecanismos responsáveis pelo comportamento observado. A partir dos anos 80 houve um considerável desenvolvimento, fundamentalmente na predição da formação

de bolhas em leitos fluidizados densos, onde se pode destacar os trabalhos de Pritchett *et al.* (1978) e Gidaspow e Ettehadieh (1983). Ainda que as correlações empíricas mantenham-se como ferramentas de projeto, há, no entanto, um rápido e crescente interesse no uso de métodos chamados de Fluido Dinâmica Computacional, **CFD**.

Muitas correlações são utilizadas com sucesso na predição da performance de um reator de craqueamento catalítico com certos arranjos padrões, mas não podem ser utilizadas, por exemplo, para prever o efeito de modificações no ângulo de entrada da alimentação, ou o efeito de outros pontos de alimentação ou no arranjo da distribuição do gás na alimentação, comparando diferentes configurações. Questões como estas, a princípio, poderiam ser resolvidas utilizando códigos computacionais, desde que seja possível resolver as equações que descrevem a dinâmica do processo.

Estas equações podem ser formuladas em diferentes níveis de detalhamento. No nível mais fundamental o movimento de todo o sistema é determinado pelas equações de Newton do movimento para a translação e rotação de cada partícula, e as equações de Navier-Stokes e continuidade, sendo satisfeitas em cada ponto do fluido. Estas são acopladas por condições de não deslizamento entre o sólido e o fluido nas fronteiras do sólido, e o fluido deve ainda satisfazer a condição de não deslizamento nas paredes do domínio em estudo. Simulações neste nível de detalhamento têm sido realizadas com sucesso, contudo para um pequeno número de partículas, não representativo do problema encontrado em um reator de craqueamento catalítico.

Uma segunda descrição, em um nível de detalhamento menor, pode ser obtida substituindo-se a velocidade do fluido em cada ponto por sua média, tomada sobre um domínio grande o suficiente para conter muitas partículas, mas ainda pequeno comparado com a região ocupada por toda a mistura. A força exercida pelo fluido em cada partícula é então relacionada com a velocidade relativa da partícula ou do conjunto de partículas, usando correlações empíricas. As equações de Newton do movimento são então resolvidas para cada partícula separadamente, levando em conta as colisões diretas entre partículas. Este procedimento é referido como “*discrete particle modelling*”, resultando em uma demanda computacional menor que a necessária no primeiro nível de detalhamento. Alguns exemplos da utilização deste nível de detalhamento para solução de escoamento gás-sólido são encontrados em Tsuji *et al.* (1993) e Hoomans *et al.* (1996).

Em um terceiro nível de detalhamento a velocidade do fluido e da partícula são promediadas (processo de realizar média) sobre o domínio espacial local como apresentado anteriormente. Há então dois campos médios locais de velocidades, \mathbf{u} e \mathbf{v} , para o fluido e para a partícula respectivamente. Cada uma delas é definida para todos os pontos do espaço,

resultando em equações semelhantes às equações do movimento escritas para dois fluidos imaginários capazes de se interpenetrar, de forma que todos os pontos são ocupados simultaneamente por ambos os fluidos. Desta forma, neste nível de detalhamento, o modelo é referido como “*two fluid model*” – Modelo de dois Fluidos. Este tipo de modelo toma a forma de equações diferenciais parciais acopladas, que devem ser resolvidas numericamente. Este modelo demanda menor esforço computacional que os anteriores, contudo sofre a desvantagem de que há a necessidade de formular leis que representem os mecanismos de transferência na interface entre os “dois fluidos”, gerando assim um problema de fechamento das equações, semelhante ao encontrado na modelagem da turbulência. Estes termos, que representam a interação entre estes dois fluidos, têm importância significativa na predição neste nível de detalhamento. Contudo, não fica claro que os efeitos físicos correspondentes a estes termos seriam propriamente representados por modelos como o “*discrete particle modelling*”, porque este substitui o campo de escoamento do fluido por sua média local.

A abordagem deste trabalho encontra-se no terceiro nível de detalhamento, o chamado modelo de dois fluidos. Antes de adentrarmos nos aspectos de modelagem especificamente, iremos introduzir alguns conceitos a respeito da fenomenologia dos leitos fluidizados com o objetivo de situar o escopo do trabalho.

2.2 Teoria da fluidização

A tecnologia do craqueamento catalítico emergiu do desenvolvimento realizado com leitos fluidizados (Caloz, 2000). Quando um leito de partículas em um tubo ou coluna sofre o efeito de um gás escoando, este fluido exerce uma força (arraste) em cada uma das partículas presentes no tubo ou coluna. Na fluidização, a força gravitacional agindo sobre as partículas é compensada pelas forças de arraste exercidas sobre as partículas pelo escoamento local do fluido. Este escoamento é diferente para cada uma das partículas, fazendo assim o comportamento de cada uma das partículas único. A fluidização é provavelmente a mais importante aplicação industrial envolvendo o escoamento gás-sólido (Kunii e Levenspiel, 1969), por causa das excelentes características de transferência de calor. Muitos regimes de fluidização são possíveis de ocorrer promovendo diferentes características fluido dinâmicas e, desta forma, diferentes propriedades de transferência de quantidade de movimento, energia e massa, bem como reações químicas.

Os diferentes regimes de fluidização podem ser melhor representados graficamente, como na Figura 3. Gás ou líquido é forçado a escoar de forma ascendente através de um leito de partículas. Isto causa uma queda de pressão no leito, que pode ser descrita pela equação de Ergun. Quando a força gravitacional é balanceada pela força de arraste média resultado do

escoamento do gás, o estado da fluidização é chamado de fluidização mínima, definindo assim a velocidade de mínima fluidização, bem como sua fração de sólidos. Muitos sistemas industriais operam com escoamento de gás bem acima do chamado leito em fluidização mínima; pelo fato de que os sólidos fluidizados comportarem-se como um fluido, bolhas são formadas em regiões acima da velocidade mínima de fluidização. Geldart (1973), classificou as diversas dimensões de partículas encontradas nestes sistemas, conforme Figura 4, e item 2.2.2 deste Capítulo.

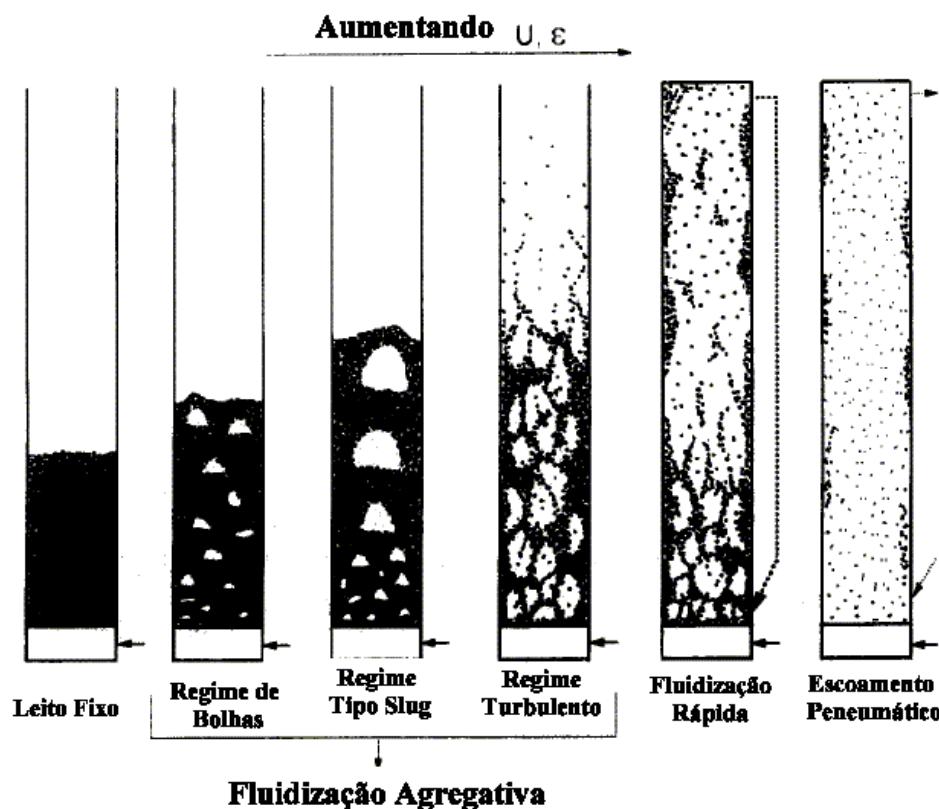


Figura 3. Representação esquemática dos regimes de escoamento em um leito fluidizado.

Adaptado de Grace, (1990).

Com partículas menores, chamadas Geldart A, há um regime intermediário entre a fluidização mínima e o estado em que as bolhas são formadas, chamado de regime de bolha retardado. A velocidade de gás onde as bolhas iniciam é chamada de velocidade de bolha mínima. As bolhas de gás determinam o comportamento do sistema fluidizado, e são responsáveis pela agitação dos sólidos e mecanismos de dispersão. Os regimes de bolhas e o chamado tipo *slug* caracterizam-se basicamente por operar em um regime denso, onde a fração volumétrica de sólidos varia de 0,4 a 0,6. O chamado regime turbulento e rápido fluidização apresenta-se nos reatores de craqueamento catalítico, caracterizado pelo arraste de

partículas para fora do domínio do reator e formação de aglomerados de partículas (*clusters*) no centro do reator e nas paredes. A ocorrência de *clusters* na região central é eventual, sendo mais proeminente junto às paredes.

O regime turbulento apresenta-se com bolhas em regime intermediário ao de bolhas, tendendo para um regime ou outro, associado a grande instabilidade destes sistemas, apresentando, como afirmado anteriormente, *clusters* e caminhos preferenciais. O regime de fluidização rápida opera em regime diluído, também apresentando *clusters* e caminhos preferenciais. Nestes regimes as partículas tendem a uma distribuição uniforme na seção transversal do reator. A concentração de partículas é usualmente alta junto as paredes do reator e menor no centro. O retorno de sólidos, com velocidades descendentes, é reportado por vários pesquisadores na região anular junto a parede.

Sob um ponto de vista fundamental, é importante entender porque e como as partículas segregam para as paredes, ou seja, dever-se-ia estimar os efeitos de escala e também estratégias de injeção na base com a finalidade de diminuir os efeitos de segregação, quando possível. Cabe ressaltar que mesmo em escala comercial, este fenômeno é observado.

Muitos aspectos físicos fundamentais ainda permanecem sem resposta no que se refere ao escoamento em leitos fluidizados. Apesar de mais de três décadas de intenso estudo na área, não está estabelecido de fato em que condições por exemplo um leito transaciona do regime tipo bolhas para turbulento, e quais são os mecanismos fundamentais que levam à formação de *clusters*. O conhecimento preciso destes aspectos tem sua importância no que se refere ao projeto e otimização de unidades pois os mesmos interferem substancialmente na performance geral do processo.

Como é possível observar com o descrito acima, o escoamento em leito fluidizado é bastante complexo, com regiões de baixa e alta concentração de sólidos. Estas regiões têm comportamentos diferenciados em relação a transferência de quantidade de movimento, energia, massa e reações químicas. Em regiões de baixa concentração de sólidos a influência das tensões do gás são pronunciadas, o livre caminho médio entre partículas é grande, desta forma o choque entre partículas é menor ou inexistente. O oposto ocorre em regiões densas. Mesmo em leitos chamados diluídos, a presença de *clusters* leva ao comportamento citado anteriormente. Com relação às reações químicas, que ocorrem na superfície do catalisador, em regiões onde há pouco contato gás-sólido, o comportamento reacional é diferente das regiões diluídas, onde o contato gás-sólido é mais pronunciado.

Assim, se alguém deseja modelar matematicamente um leito fluidizado deve levar em conta os fenômenos inerentes ao processo, e as escalas espaciais e temporais envolvidas. O fato dos fenômenos envolvidos (bolhas, *clusters*, segregação, reações químicas, etc.) estarem

ocorrendo em diferentes escalas dificulta ainda mais a abordagem matemática. O melhor seria que um dado modelo matemático pudesse resolver o problema em todas as escalas em que estes aparecem. Isto ainda não está estabelecido; contudo, existe a esperança de que o modelo de dois fluidos com o refino da malha computacional e temporal adequado seja capaz de representar e captar todas as importantes estruturas encontradas neste tipo de sistema. O assunto do presente trabalho insere-se neste contexto.

2.2.1 Velocidade de mínima fluidização

A velocidade de mínima fluidização é determinada empiricamente pela interseção da queda de pressão versus velocidade superficial e quando a força causada pela queda de pressão é igualada ao peso da coluna. Na mínima fluidização a velocidade dos sólidos é tomada como sendo a velocidade da região de empacotamento, que é nula. A fração de sólidos na mínima fluidização é determinada da altura do leito na mínima fluidização. Para partículas esféricas de dimensões uniformes é razoável esperar que a porosidade esteja perto daquela encontrada em um leito empacotado (empacotamento cúbico simples (CS), com $\varepsilon_{mf} = 1 - \pi / 6 = 0,476$). A porosidade na mínima fluidização difere consideravelmente deste valor, como afirma Gidaspow (1994).

É importante observar até que ponto as equações de conservação são capazes de predizer a velocidade de mínima fluidização. O balanço de quantidade de movimento para a mistura gás-sólido, negligenciando a aceleração e as tensões transmitidas pelas partículas toma a seguinte forma (Gidaspow, 1994)

$$-\frac{dp}{dy} = g\rho_{mis}, \quad (2.0)$$

onde a densidade da mistura, ρ_{mis} é dada por

$$\rho_{mis} = \rho_g \varepsilon + \rho_s (1 - \varepsilon). \quad (2.1)$$

Com as simplificações utilizadas, estas equações determinam a porosidade na mínima fluidização, conhecendo-se a queda de pressão. Nos cálculos de projetos a queda de pressão não é conhecida, desta forma, estas equações não são adequadas para este propósito.

Um balanço de quantidade de movimento que é adequado para estimar a velocidade de mínima fluidização é o balanço entre o empuxo e o arraste. Desconsiderando o atrito do gás com as paredes e as tensões dos sólidos transmitidas pelas partículas, o balanço pode ser escrito da seguinte forma

$$(1 - \varepsilon)(\rho_s - \rho_g)g = \frac{\beta_A}{\varepsilon}(v_g - v_s), \quad (2.2)$$

onde o coeficiente de fricção β_A foi obtido da equação de Ergun, dada por

$$\beta_A = 150 \frac{(1-\varepsilon)^2 \mu_g}{\varepsilon (d_p \phi_s)^2} + 1,75 \frac{|v_g - v_s|(1-\varepsilon)}{(\phi_s d_p)}. \quad (2.3)$$

Por definição, na mínima fluidização a velocidade do sólido, v_s é zero. Assim, as Equações (2.2) e (2.3) dão uma relação entre ε_{mf} e $U_{mf} = \varepsilon_{mf} v_{g, mf}$. Estas equações podem ser resolvidas da mesma forma para a fração de sólidos $1-\varepsilon$,

$$(1-\varepsilon) = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{\beta_A (v_g - v_s)}{\Delta \rho g}}, \quad (2.4)$$

Ou mais tradicionalmente, para a velocidade de mínima fluidização. Para partículas pequenas ou baixos números de Reynolds, ou seja, para

$$\text{Re}_{mf} = \frac{d_p U_{mf} \rho_f}{\mu} < 20, \quad (2.5)$$

substituindo o primeiro termo da equação de Ergun, Equação (2.3), na Equação (2.2) chega-se a expressão para velocidade de mínima fluidização U_{mf}

$$U_{mf} = \varepsilon_{mf} v_{mf} = \frac{d_p^2 \Delta \rho g}{150 \mu} \frac{\phi_s^2 \varepsilon_{mf}^3}{1 - \varepsilon_{mf}}. \quad (2.6)$$

De dados experimentais da porosidade na mínima fluidização versus a esfericidade, ϕ_s , (Wen e Yu, 1966) encontraram a relação aproximada

$$\frac{1 - \varepsilon_{mf}}{\phi_s^2 \varepsilon_{mf}^3} = A \cong 11. \quad (2.7)$$

A equação (2.7) substituída na equação (2.6) dá a expressão comumente utilizada para estimar a velocidade de mínima fluidização

$$U_{mf} = \frac{d_p^2 (\rho_s - \rho_f) g}{1650 \mu}, \quad \text{Re}_{mf} < 20. \quad (2.8)$$

É interessante comparar a expressão dada pela equação (2.8) com a lei de Stokes

$$v_{Stokes} = \frac{d_p^2 (\rho_s - \rho_f) g}{18 \mu}. \quad (2.9)$$

Fica claro que a velocidade de mínima fluidização é $1650/18=90$ vezes menor que a velocidade terminal de uma única partícula em um fluido. Assim, as partículas “explodem” para fora do leito, apenas acima da mínima fluidização, retornando novamente ao leito, pois sua velocidade terminal é grande para permitir que esta seja carregada para fora do leito completamente. Este fenômeno é devido ao fato de o coeficiente de fricção β_A na Equação de

Ergun (2.3) ser maior para leito empacotado do que para um leito de esferas, muito distantes umas das outras. Note que quanto maior a fração de sólidos, $(1-\varepsilon)$, maior o atrito. Esta variação da resistência com a fração de sólidos resulta no comportamento oscilatório encontrado em leitos fluidizados, segundo Gidaspow (1994). Este comportamento oscilatório é o responsável por muitas das qualidades do escoamento em leito fluidizado, tais como boa transferência de massa e energia. Quando o gás escoa através do leito acima da mínima fluidização, o leito se expande para minimizar a resistência. Como a resistência torna-se menor, as partículas não são mais suportadas pelo gás e então caem. Este processo repete-se continuamente enquanto o gás for injetado.

Para grandes números de Reynolds baseados no diâmetro da partícula, a Equação (2.2) com o coeficiente de atrito dado pela Equação de Ergun (2.3) pode ser reescrita em termos do número de Arquimedes, Ar , que é similar ao número de Grashof usado na convecção natural de calor

$$150ARe_{mf} + 1,75B{Re_{mf}}^2 = Ar, \quad (2.10)$$

onde

$$Ar = \frac{d_p^3(\rho_s - \rho_f)\rho_f g}{\mu^2}, \quad (2.11)$$

$$B = 1/\varepsilon_{mf}^3 \phi_s^3 \quad (2.12)$$

e A é dado pela Equação (2.7). A Equação (2.10) pode ser resolvida para obter o número de Reynolds de mínima fluidização, dado por

$$Re_{mf} = \sqrt{C_1^2 + C_2 A_2} - C_1, \quad (2.13)$$

onde

$$C_1=33,7 \text{ e } C_2=0,0408, \quad (2.14)$$

de acordo com Wen e Yu (1966). Para partículas grandes, o segundo termo da equação de Ergun é dominante e a velocidade de mínima fluidização pode ser expressa como

$$U_{mf}^2 = \frac{d_p(\rho_s - \rho_f)g}{24,5\rho_f}, \quad Re_{mf} > 1000. \quad (2.15)$$

A equação acima mostra que a altas pressões a velocidade de mínima fluidização é menor do que a baixas pressões por causa da alta densidade do fluido a altas pressões (Gidaspow, 1994).

2.2.2 Classificação de Geldart

O comportamento de sistemas fluidizados gás-sólido depende das propriedades das partículas sólidas em suspensão, tais como dimensão, densidade, distribuição, aspectos de

coesão etc. Geldart (1973) sugere que sólidos de dimensões uniformes podem ser classificados em quatro tipos de suspensão, caracterizados pela diferença de densidade entre a partícula e o fluido e pela dimensão média do particulado. A importância da utilização e aplicação da classificação Geldart em leitos fluidizados turbulentos e em particular no processo de craqueamento catalítico encontra-se descrita por Mastellone e Arena (1999), Kunii e Levenspiel (1997) e Knowlton *et al.* ((2005), dentre outros trabalhos. A Figura 4, apresenta o diagrama de Geldart que é válido para o ar em condições ambientais. Os quatro grupos considerados por Geldart (1973) e aceitos pela comunidade de fluidização são descritos a seguir, baseado no trabalho de Gidaspow (1994) e Kunii e Levenspiel (1997).

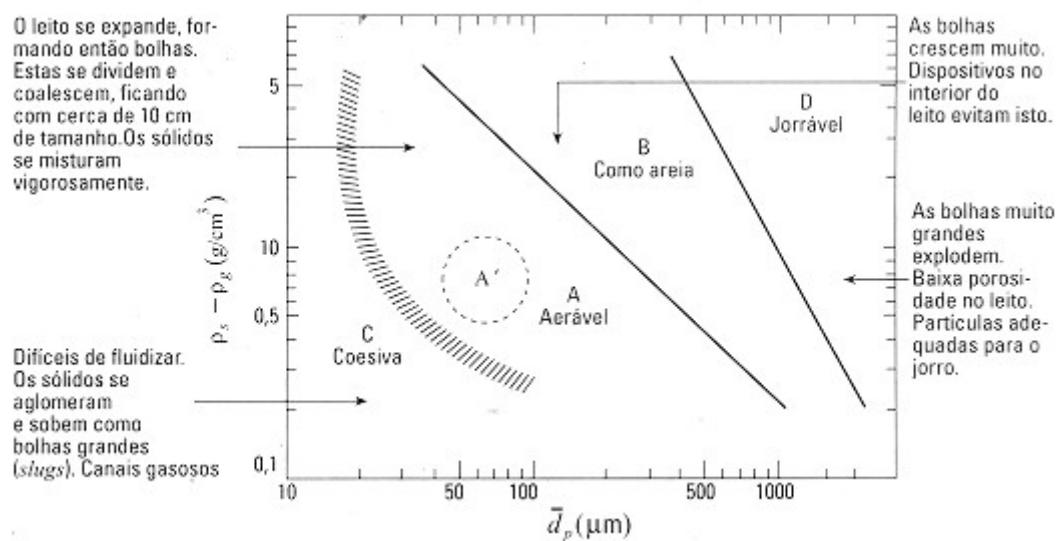


Figura 4. Diagrama de classificação para sólidos. Fonte: Kunii e Levenspiel (1997) e Levenspiel (2000).

Grupo A (aerado)

Materiais tendo um tamanho médio pequeno e densidades menores do que 1400 kg/m^3 encontram-se neste grupo. Estas suspensões expandem consideravelmente depois que a velocidade de mínima fluidização é alcançada. Não produzem bolhas até que a chamada velocidade mínima de bolha, U_{mb} , ocorra. A suspensão de sólidos utilizada no craqueamento catalítico em leito fluidizado, objeto do presente estudo, encontra-se neste grupo.

A velocidade de mínima fluidização dada por Wen e Yu (1966), é muito menor para este tipo de particulado do que a velocidade de ascensão de uma única bolha, U_B , dado pela expressão de Davidson e Harrison (1963):

$$U_B = 0,711(gD_B)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.16)$$

onde D_B é o diâmetro da bolha. Assim, nenhuma bolha com tamanho razoável irá ascender mais rápido que a velocidade intersticial de gás, $U_{mf} / \varepsilon_{mf}$ Gidaspow (1994). Bolhas que ascendem mais rápido que a velocidade intersticial são chamadas bolhas rápidas. Davidson e Harrison (1963) mostraram que estas bolhas rápidas possuem uma superfície esférica ao redor delas que se movem com a velocidade de bolha, e tem velocidade de gás nula. Desta forma, o gás incluso nesta bolha só pode deixar a bolha apenas por um lento processo de difusão molecular. As implicações para um reator catalítico é que o gás injetado é capturado no interior da bolha, diminuindo assim a eficiência global do reator. Desta forma é importante entender a hidrodinâmica da fluidização deste grupo de partículas.

Grupo B

Este grupo comprehende materiais que têm uma dimensão média de $40\mu\text{m} < d_p < 500\mu\text{m}$, e densidade na faixa de $1400 \text{ kg/m}^3 < \rho_s < 4000 \text{ kg/m}^3$. Areia está dentro desta classificação. Para este tipo de suspensão de sólidos, bolhas aparecem na faixa de mínima fluidização. À pressão atmosférica a expansão não é muito grande. Para mesmas alturas de leito e $U - U_{mf}$, as dimensões das bolhas são independentes das dimensões das partículas.

Grupo C (coesivo)

Todas as suspensões de sólidos difíceis de serem fluidizados encontram-se neste grupo. As dificuldades advêm do fato de que as forças entre partículas são muito maiores do que aquelas que o fluido pode exercer sobre as partículas.

Grupo D

Particulado deste grupo contém partículas grandes ou com densidades altas.

Um critério para distinguir entre os grupos A e B é baseado na determinação experimental da velocidade mínima de bolha. Geldart (1973) mediou esta velocidade em uma coluna de 5 cm de diâmetro. A velocidade do ar é incrementada até que a primeira bolha possa ser reconhecida claramente. Esta velocidade então é pega como velocidade mínima de bolha. Na faixa de $25\mu\text{m}$ até $250\mu\text{m}$, Geldart observa que a velocidade de bolha é proporcional à dimensão da partícula e independente da densidade na faixa entre 1 g/cm^3 até $1,5 \text{ g/cm}^3$. A equação encontrada para a velocidade mínima de bolha é

$$U_{mb} = 100d_p, \quad (2.17)$$

onde U_{mb} tem unidades de centímetros por segundo e d_p é em centímetros. A combinação desta equação com a velocidade de mínima fluidização para partículas com Reynolds baixos transforma o critério $U_{mb} / U_{mf} \geq 1$ em

$$(\rho_p - \rho_f) d_p' \leq 225, \quad (2.18)$$

onde d_p' é o diâmetro da partícula em μm . Esta equação foi graficada na Figura 4 (linha entre Geldart A e B).

A classificação apresentada acima é uma das possíveis e a mais aceita pela comunidade. Contudo uma série de incertezas referentes a complexa fluidodinâmica de sistemas fluidizados impediu o estabelecimento de uma classificação universal. Na verdade, em um reator FCC é possível observar a presença dos vários regimes de fluidização num mesmo instante em diferentes regiões do reator, o que dificulta em muito o estabelecimento de correlações com a finalidade de caracterizar tais sistemas.

2.3 Fluidodinâmica de leitos fluidizados

A habilidade de melhorar a performance de leitos fluidizados existentes e o projeto de reatores em leito fluidizado depende em muito da possibilidade de melhor entender a fluidodinâmica destes sistemas. As dificuldades no projeto consistem de forma geral em um problema de escalonamento. Muitas equações que descrevem o comportamento de leitos fluidizados são empíricas e determinadas em condições de laboratório, dando assim uma grande incerteza na capacidade destas de predizer o correto comportamento de leitos fluidizados industriais. De fato, tais modelos empíricos são incapazes de serem preeditivos, dependendo em maior ou menor escala das condições experimentais.

O fato de que os leitos fluidizados são sistemas caóticos determinísticos (van den Bleek e Schouten, 1993), permitem realizar a caracterização via métodos não lineares. Utilizando técnicas de análise não linear baseadas na entropia de Kolmogorov, existe a possibilidade de se determinar a forma do comportamento fluidodinâmico de leitos fluidizados. Shouten *et al.* (1996), baseados nesta abordagem, propuseram escalonamento de um leito fluidizado; contudo, em um passo anterior, há a necessidade do conhecimento detalhado da fluidodinâmica, com o objetivo de entender como, quando e onde aplicar o mencionado método.

Técnicas de fluidodinâmica computacional (**CFD**) podem ser utilizadas para a predição do comportamento fluidodinâmico de muitos sistemas, necessário para o escalonamento, projeto e otimização. Para o escoamento monofásico estas técnicas têm sido utilizadas com sucesso (Anderson 1995; Maliska 2004). Contudo para o escoamento

multifásico ainda há um longo caminho a ser trilhado, sobretudo pela complexidade física e matemática necessária para a descrição de tais sistemas. Para escoamento gás-sólido tem sido utilizado o modelo Euleriano, que trata o gás e o sólido como duas fases contínuas. Resultados utilizando este método são muito promissores, mostrando a capacidade do modelo de predizer o comportamento de escoamentos densos em geometrias reais (Maliska *et al.*, 2003). Todavia, o método requer uma estatística complexa para traduzir o comportamento de muitas partículas em um único *continuum*. Por isto tem sido utilizado em conjunto com a abordagem Euleriana a Teoria Cinética Granular (**TCG**).

A **TCG** tem sido utilizada com sucesso por muitos autores nos últimos anos, obtendo-se resultados muito similares à abordagem Lagrangeana. De fato, no cerne da **TCG** encontram-se as premissas dos métodos Lagrangeanos. A diferença entre estes métodos emerge quando a escala da média na **TCG** excede a escala do fenômeno físico, influenciando seu comportamento, como ressalta van Wachem (2000). Quando a escala da média é tomada maior que o tamanho dos menores *clusters*, uma discrepância entre a física e a teoria cinética pode ocorrer. Esta é a razão para a falha da **TCG** no que concerne à descrição de suspensões de partículas do tipo Geldart A. Para tanto, é necessário utilizar uma malha computacional refinada o suficiente para que se tenha apenas poucos diâmetros de partículas, obtendo-se assim resultados sensíveis ao modelo da **TCG**, o que não tem sido realizado até o momento, a não ser pelos trabalhos de Agrawal (2000), Agrawal *et al.* (2001), Zhang *et al.* (2001), Ibsen (2002) e Georg *et al.* (2003).

Muitas das simulações publicadas para leitos fluidizados utilizam uma série de variantes da **TCG**, com a finalidade de levar em conta os efeitos de colisão partícula-partícula (Zhang *et al.*, 2001). De fato, a **TCG** é mais apropriada quando aplicada a sistemas granulares onde a inércia do particulado é maior comparada aos efeitos do fluido intersticial. Para estes casos, as propriedades gerais do escoamento são dominadas por colisões entre as partículas. Para leitos fluidizados, entretanto, o fluido intersticial tem uma importância fundamental e pode modificar substancialmente as interações partícula-partícula. Neste caso, a aplicação direta da **TCG** é questionável (Zhang *et al.*, 2001). Agrawal (2000) demonstra que a contribuição das tensões efetivas obtidas a partir da **TCG** são desprezíveis, mostrando que os efeitos das estruturas da meso escala ou *clusters* de partículas, gerados basicamente pelo efeito de não linearidades presentes nesta escala, têm importância dominante.

A questão que emerge é: quando os efeitos associados à interação partícula-partícula tornam-se importantes? Antes que seja possível responder a esta importante questão, é necessário compreender de forma mais profunda o comportamento fluidodinâmico, sem a inclusão de qualquer efeito de interação do particulado, estabelecendo assim, de que forma a

fluidodinâmica pode ser responsável pelo aparecimento das instabilidades citadas, e se apenas um modelo baseado nesta premissa seria capaz de representar os fenômenos inerentes ao escoamento gás-sólido. Cabe ressaltar que a sofisticação de um dado modelo *per se* não o capacita a melhor descrever um dado fenômeno físico, tão pouco seu melhor entendimento, ainda mais quando questões fundamentais ainda não foram respondidas, como é o caso do escoamento gás sólido, conforme veremos mais adiante.

É nesse contexto que se insere o presente trabalho, onde utiliza-se o modelo Euleriano, sem a utilização da TCG, com a finalidade principal de melhor compreender os fenômenos inerentes ao escoamento gás-sólido em um leito fluidizado, estabelecendo possíveis relações entre a fluidodinâmica e fenômenos associados à meso-escala.

Nos itens a seguir serão apresentados os métodos e modelos da abordagem Euleriana para o escoamento gás sólido, aspectos associados à turbulência, e o contexto da formação de *clusters* e caminhos preferenciais associados a esta abordagem.

2.3.1 Modelagem do escoamento gás-sólido

A descrição completa do movimento de partículas sólidas escoando em um fluido é conseguida, em princípio, resolvendo-se as equações de Navier-Stokes para o movimento do fluido e as equações da quantidade de movimento linear e angular pra cada uma das partículas, com a primeira sendo acoplada à segunda pelas condições na interface fluido-partícula. Isto é possível de realizar nos dias de hoje apenas para um pequeno número de partículas, não representativo de casos reais. Ao mesmo tempo, a solução completa poderá fornecer o valor da força exercida pelo sistema em cada ponto do contorno, mas para propósitos práticos, apenas a força total experimentada por áreas relativamente grandes é importante (Jackson, 2000).

Pelas razões anteriores, tem havido grande interesse na comunidade científica em derivar equações médias das variáveis físicas, que irão prover as informações relevantes, filtrando os detalhes “menos importantes”. Um grande número de pesquisadores tem se dedicado a tal derivação. Para citar alguns, Slaterry (1967), Anderson e Jackson (1967), Whitaker (1969), Drew (1971 e 1983), Zhang e Prosperetti (1994 e 1997), Jackson (1997), entre outros. Cabe ressaltar que Slaterry (1967), Whitaker (1969) e Anderson e Jackson (1967) desenvolveram o método de médias volumétricas independentemente, sendo que os dois primeiros autores para meios porosos e os dois últimos para escoamento gás-sólido em leito fluidizado.

A idéia é usar a definição matemática formal de variáveis locais médias para transformar as equações pontuais de Navier-Stokes do fluido e as equações de Newton do

movimento das partículas em equações do *continuum*, através de um processo de média, representando assim equações da quantidade de movimento médias para o fluido e sólido. Esta transformação gera uma série de novos termos, decorrentes do processo de média, que necessitam ser modelados matematicamente ou explicitados com apporte de dados experimentais.

Alguns autores utilizaram-se de médias locais espaciais tomadas sobre regiões menores comparadas às escalas macroscópicas de interesse, outros tomaram médias em cada ponto do espaço sobre um determinado evento (média das possíveis realizações, conhecida na comunidade como média *ensemble*) do sistema macroscópico equivalente. O processo de média é em si mesmo um processo formal; contudo, gera quantidades médias em número maior do que equações e, consequentemente, requer equações adicionais, o chamado problema de fechamento. Será apresentado aqui o método e as equações obtidas através da média espacial local, apresentada por Jackson (1997) e Jackson (2000), sendo considerado o conjunto de equações decorrentes mais adequado para descrever o escoamento gás-sólido, de acordo com van Wachem *et al.* (2001), Agrawal *et al.* (2001), Glasser *et al.* (1998), Dasgupta *et al.* (1998), entre outros.

Média local

A idéia básica geral é transformar as variáveis mecânicas pontuais, tais como a velocidade do fluido, pressão, ou velocidade do sólido em um ponto específico, em variáveis médias locais, realizando a média das variáveis pontuais sobre regiões que contém um número representativo de partículas, mas ainda pequeno comparado com a escala das variações macroscópicas ponto a ponto no sistema de interesse. A idéia de variáveis médias locais é bem familiar no campo da física teórica.

A média local espacial é definida em termos de uma função peso $g(r)$, que é uma função que decresce monotonicamente com a distância radial, r , do ponto em questão, cuja integral normalizada sobre todo o espaço de interesse é dada por

$$4\pi \int_0^{\infty} g(r)r^2 dr = 1. \quad (2.19)$$

Por exemplo, podemos ter:

$$g(r) = \begin{cases} 3/4\pi l_0^3 & \text{para } r \leq l_0, \\ 0 & \text{para } r > l_0, \end{cases} \quad (2.20)$$

onde l_0 é uma constante com dimensões de comprimento. Esta forma de função peso é dita como definição de média espacial rígida. Para nossos propósitos é mais conveniente assumir g diferenciável e definir seu raio, l , conforme Jackson (2000):

$$\int_0^l g(r)r^2 dr = \int_l^\infty g(r)r^2 dr. \quad (2.21)$$

As variáveis pontuais variam rapidamente no espaço e no tempo, por causa do complicado caminho individual das partículas. Desta forma as linhas de corrente do fluido são distorcidas pelo fato do fluido ter que passar entre e ao redor das partículas. Assim, espera-se que a média local em uma região contendo muitas partículas suavize estas flutuações. Deste modo as variáveis médias locais que aparecem nas equações do *continuum* são comparativamente bem comportadas. Além disso, as propriedades da função peso definidas acima garantem que as operações de cálculo vetorial possam ser realizadas sobre as variáveis médias locais, e manipulações matemáticas como diferenciação e integração também são válidas.

O valor médio, na posição \mathbf{x} e tempo t , de qualquer função pontual f da posição e do tempo é então definida como

$$\langle f \rangle(\mathbf{x}, t) = \int_V f(\mathbf{y}, t) g(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) dV_y, \quad (2.22)$$

onde o domínio de integração é todo o sistema. Disto observa-se que $\langle f \rangle$ depende em particular da forma escolhida para a função peso. Esta dependência vai ficando gradativamente menor quanto maior a razão entre a menor escala macroscópica e o tamanho da partícula, quando o raio da função peso é escolhido adequadamente. Se o raio da partícula é a e a escala macroscópica L , pode-se esperar que o valor da média será insensível ao raio de g . Quando $a \ll l \ll L$, garantindo assim uma separação de escalas entre o problema macroscópico e o movimento detalhado da escala associada a uma única partícula. Sem esta forma de separação os resultados da média local começam a ser dependentes da função peso.

Segundo Anderson e Jackson (1967), se as variações espaciais das propriedades no ponto podem ser decorrentes da soma das contribuições na escala do espaço entre as partículas e com as dimensões do sistema completo, os valores locais médios serão insensíveis ao raio ou à forma detalhada da função peso, desde que o raio seja maior comparado com o espaço entre as partículas e pequeno comparado com a escala das variações macroscópicas de um ponto a outro do sistema. É apenas neste caso que as variáveis médias locais podem ter significado físico.

Esta noção tem uma importância fundamental na definição do refino da malha computacional, pois a malha deve ter dimensões tais que não violem a condição de continuidade, ou seja, a malha computacional não pode ser da mesma ordem de grandeza do diâmetro de uma partícula, pois as equações médias locais não estão escritas para captar as variações detalhadas decorrentes da presença de uma única partícula e sim de um conjunto de partículas¹.

Em adição à média global introduzida acima, pode-se definir médias associadas com cada uma das fases separadamente, como segue:

1) Média da fase fluido

A fração volumétrica, ou fração do espaço ocupada pelo fluido, nas vizinhanças do ponto \mathbf{x} é definida por:

$$\varepsilon(\mathbf{x}) = \int_{V_f} g(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) dV_y, \quad (2.23)$$

onde V_f indica aquela parte de todo o sistema ocupado pelo fluido. A dependência temporal não será exibida explicitamente, apenas quando for necessário para dirimir possível confusão.

A média da fase fluido $\langle f \rangle^f$, da propriedade pontual f é definida como

$$\varepsilon(\mathbf{x}) \langle f \rangle^f(\mathbf{x}) = \int_{V_f} f(\mathbf{y}) g(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) dV_y. \quad (2.24)$$

Assim, as variáveis médias locais são funções suaves da posição, definidas em todos os pontos do espaço, e as correspondentes variáveis pontuais são definidas apenas nos pontos instantaneamente ocupados por uma ou outra das fases. Desta forma as variáveis médias locais podem ser manipuladas e diferenciadas como escalares, vetores ou tensores definidos sobre toda a região ocupada pelo sistema.

O processo de média assim definido não comuta com as diferenciações no espaço ou tempo, mas expressões para as derivadas médias são obtidas como mostram Anderson e Jackson (1967)

¹ Como exemplo, se tivermos um reator com 20 cm de diâmetro e uma partícula com 75 μm, que corresponde a 0,0075 cm, a dimensão mínima do volume não poderá conter menos de 10 partículas, para que se tenha um número representativo de partículas. Contudo o volume da referida partícula é de $2,21 \times 10^{-7}$ cm³; assim, o menor volume da malha não pode ultrapassar $2,21 \times 10^{-6}$ cm³. Supondo que 10 partículas seja uma quantidade representativa. Desta forma, se a malha for estruturada, o cubo terá que ter a aresta de $1,3 \times 10^{-2}$ cm de dimensão mínima para não violar a hipótese do *continuum*. Isto só é verdade considerando que as partículas estão colocadas uma ao lado da outra.

Interessante notar que, na maioria dos casos de escoamento gás-sólido as partículas têm dimensão menor que as menores escalas de Kolmogorov. Isto sugere que as partículas, quando em contato com um vórtice na região de dissipação, tendem a seguir o seu caminho permanecendo no seu interior até o tempo de vida do vórtice presente na escala dissipativa. Estes aspectos serão discutidos com maior profundidade no Capítulo 3.

$$\varepsilon(\mathbf{x}) \left\langle \frac{\partial f}{\partial x_k} \right\rangle^f = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\varepsilon(\mathbf{x}) \langle f \rangle^f(\mathbf{x}) \right] - \sum_P \int_{S_p} f(\mathbf{y}) n_k(\mathbf{y}) g(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) dS_y \quad (2.25)$$

e

$$\varepsilon(\mathbf{x}) \left\langle \frac{\partial f}{\partial t} \right\rangle^f = \frac{\partial}{\partial t} \left[\varepsilon(\mathbf{x}) \langle f \rangle^f(\mathbf{x}) \right] + \sum_P \int_{S_p} f(\mathbf{y}) n_k(\mathbf{y}) u_k(\mathbf{y}) g(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) dS_y. \quad (2.26)$$

As integrais são tomadas sobre a superfície S_p da partícula p e o somatório é sobre todas as partículas; n_k é o k -ésimo componente da normal à superfície da partícula e u_k é o k -ésimo componente da velocidade pontual. Cada uma das relações são válidas desde que a distância \mathbf{x} do ponto mais próximo do contorno do sistema seja maior que o raio da função peso.

2) Média da fase sólido

A média na fase sólido é análoga a da fase fluida, mas o domínio de integração é a região deslocada que compreende o interior de todas as partículas. Assim a fração volumétrica dos sólidos é definida por

$$\phi(\mathbf{x}) = \sum_P \int_{V_p} g(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) dV_y, \quad (2.27)$$

onde V_p é o interior da partícula p , e a média da fase sólido, $\langle f \rangle^s$, da propriedade pontual f é dada por:

$$\phi(\mathbf{x}) \langle f \rangle^s(\mathbf{x}) = \sum_P \int_{V_p} f(\mathbf{y}) g(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) dV_y. \quad (2.28)$$

As derivadas temporais e espaciais são análogas as Equações (2.25) e (2.26). A média global denotada pela Equação (2.23) com a média das fases por

$$\langle f \rangle = \varepsilon \langle f \rangle^f + \phi \langle f \rangle^s \quad (2.29)$$

e a média das massas, $\langle f \rangle^m$, definido por

$$\bar{\rho} \langle f \rangle^m = \rho_f \varepsilon \langle f \rangle^f + \rho_s \phi \langle f \rangle^s, \quad (2.30)$$

onde $\bar{\rho} = \rho_f \varepsilon + \rho_s \phi$ e ρ_f e ρ_s são as densidades do fluido e do sólido, respectivamente.

3) Média da fase partícula

Por simplicidade, a atenção até o momento se deu em relação a partículas rígidas, esféricas e idênticas de raio a . Desta forma, para especificar completamente o movimento do sólido é necessário apenas a velocidade do centro de cada partícula, em conjunto com a

velocidade angular. Como consequência, as equações dinâmicas reduzem-se a uma equação de quantidade de movimento para o movimento de centro de massa e uma equação para o momento angular, e apenas a força resultante e a quantidade de movimento resultante da tensão exercida na superfície da partícula, não necessitando das distribuições de tensões dentro das partículas. Por causa deste fato, é conveniente usar médias formadas das propriedades das partículas (Anderson e Jackson, 1967), preferivelmente à média da fase sólida definida pela Equação (2.28). Assim, define-se o número $n(\mathbf{x})$ de partículas por unidade de volume na posição \mathbf{x} por

$$n(\mathbf{x}) = \sum_p g(|\mathbf{x} - \mathbf{x}^p|) \quad (2.31)$$

onde \mathbf{x}^p é a posição do centro da partícula p num determinado tempo. Assim, se f_p é qualquer propriedade da partícula p como um todo, por exemplo a velocidade do centro de massa, a média da fase partícula de f é definida por

$$\langle f \rangle^p(\mathbf{x}) = \sum_p f^p g(|\mathbf{x} - \mathbf{x}^p|) \quad (2.32)$$

De forma análoga a Equação (2.26), tem-se

$$n(\mathbf{x}) \left\langle \frac{\partial f}{\partial t} \right\rangle^p (\mathbf{x}) = \frac{\partial}{\partial t} [n(\mathbf{x}) \langle f \rangle^p(\mathbf{x})] + \frac{\partial}{\partial x_k} \sum_p f^p u_k^p g(|\mathbf{x} - \mathbf{x}^p|), \quad (2.33)$$

onde u_k^p é o k -ésimo componente da velocidade do centro da partícula p .

O procedimento acima descrito, pode agora ser aplicado às equações do movimento, inicialmente com a equação da conservação da massa. Assumindo fluido incompressível, a equação da conservação da massa nos dá $\partial u_k / \partial x_k = 0$. Fazendo $f \equiv u_k$ em (2.25) e $f \equiv 1$ em (2.26), adicionando e usando a equação da continuidade encontra-se

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\varepsilon \langle u_k \rangle^f) = 0, \quad (2.34)$$

que é a equação da continuidade média local para o fluido. Similarmente para a fase sólido

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\phi \langle u_k \rangle^s) = 0. \quad (2.35)$$

Em termos da média da fase partícula o resultado correspondente resulta na conservação do número total de partículas. Fazendo $f \equiv 1$ em (2.33) chega-se a

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (n \langle u_k \rangle^s) = 0. \quad (2.36)$$

A equação da conservação da quantidade de movimento linear no ponto para o fluido é

$$\rho_f \left[\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y_k} (u_i u_k) \right] = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial y_k} + \rho_f g_i, \quad (2.37)$$

onde σ_{ik} e g_i são os componentes do tensor tensão e a força da gravidade, respectivamente. Assim, multiplicando ambos os lados por $g(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|)$, integrando sobre V_f , usando (2.26) com $f \equiv u_i$ e (2.26) com $f \equiv u_i u_k$ no lado esquerdo, e usando (2.26) com $f \equiv \sigma_{ik}$ no lado direito, obtém-se a seguinte expressão

$$\begin{aligned} & \rho_f \left[\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \langle u_i \rangle^f) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\varepsilon \langle u_i u_k \rangle^f) \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial x_k} (\varepsilon \langle \sigma_{ik} \rangle^f) - \sum_P \int_{S_p} \sigma_{ik}(\mathbf{y}) n_k(\mathbf{y}) g(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) dS_y + \rho_f \varepsilon g_i, \end{aligned} \quad (2.38)$$

que é o balanço de quantidade de movimento médio para a fase fluido. Note que esta equação não está fechada, pois não está expressa inteiramente em termos de quantidades médias definidas anteriormente, mas contém uma soma de integrais das forças de tensão exercidas pelo fluido sobre a superfície de cada uma das partículas, com a força em cada um dos elementos de superfície pesados pelo valor da função peso g naquele elemento. Neste caso é necessário considerar o movimento do centro de massa e rotação em torno do centro de massa. Este reage às forças de tensão exercidas sobre a superfície da partícula pelo fluido, e por outras partículas com as quais está em contato. Assim, a equação da quantidade de movimento para a partícula p é:

$$\rho_f v u_i^p = \int_{S_p} \sigma_{ik}(\mathbf{y}) n_k(\mathbf{y}) dS_y + \sum_{q \neq p} f_i^{pq} + \rho_s v g_i, \quad (2.39)$$

onde v é o volume da partícula e \mathbf{u}^p a velocidade do centro de massa. As áreas de contato entre a partícula em questão e o contato com as vizinhanças são assumidos como sendo pequenas frações da área superficial total e são idealizados a pontos; assim, f_i^{pq} é o i -ésimo componente da força exercida pela partícula q sobre a partícula p em seus pontos de contato. Como o somatório estende-se sobre todas as outras partículas q , as forças de contato anulam-se, para todas, exceto para aquelas poucas partículas em contato com p . Da mesma forma a integral da tração exercida pelo fluido pode ser estendida sobre toda superfície de p , sendo que o contato sólido-sólido é confinado a uns poucos pontos isolados. Esta integral representa a força resultante exercida sobre a partícula p pelo fluido, e esta pode ser então escrita como f_i^{pf} de maneira consistente com a notação para as forças de contato sólido-sólido (Jackson, 2000). Multiplicando a equação (2.39) por $g(|\mathbf{x} - \mathbf{x}^p|)$, somando sobre p , e utilizando a

equação (2.33) obtém-se a equação da quantidade de movimento média para a fase partícula, dada por

$$\rho_s v \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(n \langle u_i \rangle^P \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(n \langle u_i u_k \rangle^P \right) \right] = n \langle f_i^f \rangle^P + n \langle f_i^S \rangle^P + \rho_f v n g_i, \quad (2.40)$$

onde

$$n \langle f_i^f \rangle^P = \sum_P g \left(\left| \mathbf{x} - \mathbf{x}^P \right| \right) \int_{S_p} \sigma_{ik}(\mathbf{y}) n_k(\mathbf{y}) dS_y \quad (2.41)$$

e

$$n \langle f_i^S \rangle^P = \sum_P g \left(\left| \mathbf{x} - \mathbf{x}^P \right| \right) \sum_{q \neq p} f_i^{pq}. \quad (2.42)$$

As Equações (2.41) e (2.42) representam as médias da fase partícula, resultado das forças exercidas sobre as partículas pelo fluido e por outras partículas respectivamente.

O termo dado pela Equação (2.41), que aparece no lado direito da equação do movimento da partícula, Equação (2.40), é diferente da soma que aparece no lado direito da equação para o fluido, Equação (2.38), violando assim a terceira lei de Newton. Segundo Jackson (2000), estes termos deveriam ser iguais. Este paradoxo pode ser resolvido pela expansão da função peso g , sobre a superfície da partícula p , aplicando uma expansão em série de Taylor ao redor do centro da partícula. Desta forma, Jackson (1997) mostra que as Equações (2.40) e (2.38) ficam reduzidas à seguinte forma

$$\rho_f \varepsilon \frac{D_f \langle u_i \rangle^f}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left\{ \varepsilon \langle \sigma_{ik} \rangle^f + n \langle S_{ik}^f \rangle^P - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_l} \left(n \langle S_{ikl}^f \rangle^P \right) - \rho_f \varepsilon \langle \dot{u}_i \dot{u}_k \rangle^f \right\} - n \langle f_i^f \rangle^P + \rho_f \varepsilon g_i \quad (2.43)$$

e

$$\rho_s \phi \frac{D_p \langle u_i \rangle^P}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left\{ n \langle S_{ik}^S \rangle^P - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_l} \left(n \langle S_{ikl}^S \rangle^P \right) - \rho_f \phi \langle \dot{u}_i \dot{u}_k \rangle^P \right\} + n \langle f_i^f \rangle^P + \rho_s \phi g_i \quad (2.44)$$

onde

$$n \langle S_{ik}^f \rangle^P(\mathbf{x}) = a \sum g \left(\left| \mathbf{x} - \mathbf{x}^P \right| \right) \int t_i n_k dS,$$

$$n \langle S_{ikl}^f \rangle^P(\mathbf{x}) = a^2 \sum g \left(\left| \mathbf{x} - \mathbf{x}^P \right| \right) \int t_i n_k n_l dS,$$

$$n \langle S_{ik}^S \rangle^P(\mathbf{x}) = a \sum g \left(\left| \mathbf{x} - \mathbf{x}^P \right| \right) \sum f_i^{pq} n_k^{pq},$$

$$n \langle S_{ikl}^S \rangle^P (\mathbf{x}) = a^2 \sum g \left| \mathbf{x} - \mathbf{x}^P \right| \sum_{q \neq p} f_i^{pq} n_k^{pq} n_l^{pq},$$

onde $t_i = \sigma_{ia} n_a$ é a tensão exercida pelo fluido sobre a superfície da partícula. Tem-se ainda que

$$\frac{D_f}{Dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \langle u_k \rangle^f \frac{\partial}{\partial x_k}, \quad \frac{D_P}{Dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \langle u_k \rangle^P \frac{\partial}{\partial x_k}$$

e

$$\langle \dot{u}_i \dot{u}_k \rangle^f \equiv \left\langle \left(u_i - \langle u_i \rangle^f \right) \left(u_k - \langle u_k \rangle^f \right) \right\rangle^f;$$

$$\langle \dot{u}_i \dot{u}_k \rangle^P \equiv \left\langle \left(u_i^P - \langle u_i \rangle^P \right) \left(u_k^P - \langle u_k \rangle^P \right) \right\rangle^P.$$

Segundo Jackson (2000), este é o ponto mais distante que se pode chegar através do processo formal de média local. Qualquer combinação linear independente das equações (2.43), (2.44) e o balanço do momento angular não apresentado aqui (ver Jackson 2000 e Jackson 1997), servirão igualmente para solução do problema. As equações da quantidade de movimento médias locais (2.43) e (2.44) podem ser escritas da seguinte forma (Jackson 2000)

$$\rho_f \epsilon \frac{D_f \langle u_i \rangle^f}{Dt} = \frac{\partial S_{ik}^f}{\partial x_k} - n \langle f_i^f \rangle^P + \rho_f \epsilon g_i \quad (2.45)$$

$$\rho_f \phi \frac{D_P \langle u_i \rangle^P}{Dt} = \frac{\partial S_{ik}^P}{\partial x_k} + n \langle f_i^f \rangle^P + \rho_s \phi g_i, \quad (2.46)$$

onde S_{ik}^f e S_{ik}^P são os tensores tensão efetivos associados a fase fluido e partícula respectivamente. O processo de média relatou estes tensores aos detalhes das interações entre o fluido e as partículas e entre partícula-partícula, mas fazendo assim, é possível observar as dificuldades encontradas em fechar as equações em termos de variáveis médias.

Note que as forças resultantes da tração do fluido são tratadas diferentemente na fase fluido e na fase sólido. Na fase sólido, apenas a força resultante agindo sobre o centro da partícula é relevante; a distribuição das tensões dentro de cada partícula não é necessário para determinar seu movimento. Na Equação (2.46) para a fase sólido, as forças resultantes devido a ação da tração do fluido agem em toda a superfície das partículas e são calculadas antes e então realizada a média com relação ao centro das partículas. Na fase fluido as forças de tensão em cada elemento de interação fluido-partícula são calculadas e então realizada a média na superfície do elemento.

As equações (2.45) e (2.46), introduzindo uma modificação conveniente na notação, $\mathbf{u} = \langle \mathbf{u} \rangle^f$; $\mathbf{v} = \langle \mathbf{u} \rangle^P$; $\mathbf{f} = \langle \mathbf{f}^f \rangle^P$, podem ser escritas da seguinte forma

$$\rho_f \varepsilon \frac{D_f \mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot \mathbf{S}^f - n\mathbf{f} + \rho_f \varepsilon \mathbf{g} \quad (2.47)$$

e

$$\rho_s \phi \frac{D_f \mathbf{v}}{Dt} = \nabla \cdot \mathbf{S}^P + n\mathbf{f} + \rho_s \phi \mathbf{g}, \quad (2.48)$$

onde $n\mathbf{f}$ representa o valor médio da força resultante exercida pelo fluido sobre a partícula. As Equações (2.47) e (2.48) são as equações médias da quantidade de movimento que em conjunto com as equações da continuidade, Equações (2.34) e (2.35), são conhecidas como modelo de dois fluidos, apresentadas pioneiramente por Anderson e Jackson (1967). Este conjunto de equações não está completo, restando explicitar a forma do tensor tensão e as forças de interface, $n\mathbf{f}$, sendo estes representados por relações constitutivas, devendo seguir alguns princípios que serão abordados e discutidos no item a seguir.

Estes termos determinam a forma em que a transferência de quantidade de movimento se dá na interface fluido-partícula, apresentando-se como termos de importância maior por esta razão. De fato a equação da quantidade de movimento para uma única fase, equação de Navier-Stokes, tem como similar o tensor tensão, que é responsável por explicitar como a quantidade de movimento é passada da escala molecular para a escala descrita por esta equação, ou seja, um conjunto representativo de moléculas, onde a hipótese do *continuum* é válida. Assim, o tensor tensão é uma relação constitutiva onde informações importantes advindas do movimento molecular devem estar explicitadas através de um modelo coerente com o fenômeno físico. Assim, o tensor tensão é o termo que carrega uma responsabilidade extrema no que concerne a melhor representação da fluidodinâmica de um dado problema. Da mesma forma, as forças de interface e o tensor tensão no modelo de dois fluidos.

2.3.2 Relações constitutivas explícitas para escoamento gás sólido

As Equações (2.47) e (2.48), necessitam da descrição dos termos de interface sólido-gás, bem como a descrição adequada das tensões e pressões em cada uma das fases. Estas equações estão apresentadas de forma genérica, faltando explicitar cada um dos termos citados acima. Assim, considere novamente essas equações

$$\rho_f \varepsilon \frac{D_f \mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot \mathbf{S}^f - n\mathbf{f} + \rho_f \varepsilon \mathbf{g} \quad (2.47')$$

e

$$\rho_s \phi \frac{D_f \mathbf{v}}{Dt} = \nabla \cdot \mathbf{S}^P + n\mathbf{f} + \rho_s \phi \mathbf{g}, \quad (2.48')$$

onde \mathbf{S}^f e \mathbf{S}^P são os tensores tensão efetivos associados com o fluido e o sólido, respectivamente.

As forças de interação fluido-partícula, representadas pelo termo $n\mathbf{f}$ incluem a força de arraste, massa virtual e sustentação (*lift*), Figura 5. Há um acordo geral na literatura, que os termos dependentes da concentração de sólidos e da velocidade relativa $\mathbf{v} - \mathbf{u}$ têm a maior contribuição, seguidos pelos termos dependendo da concentração e da aceleração relativa e em terceiro grau de importância os termos representando as forças normais à direção de $\mathbf{v} - \mathbf{u}$. Estas forças são relativas às forças de interação fluido-partícula, citadas acima. Forças como Faxen e Basset são geralmente desprezadas em escoamentos gás sólido, segundo Jackson (2000). Desta forma pode-se escrever

$$n\mathbf{f} = f_D + f_V + f_L \quad (2.49)$$

A força de arraste f_D age na direção da velocidade relativa $\mathbf{v} - \mathbf{u}$ (ver Figura 5), e tem a forma geral representada por

$$f_D = (\mathbf{v} - \mathbf{u})F(\phi, |\mathbf{v} - \mathbf{u}|) \quad (2.50)$$

Onde a forma da função escalar F deve ser determinada e irá depender das dimensões da partícula e de sua forma, bem como das propriedades do fluido. Observações experimentais mostram a relação de f_D com a velocidade de sedimentação \mathbf{v} , de uma dispersão de partículas em um fluido de interesse e sua concentração, medida pela fração volumétrica.

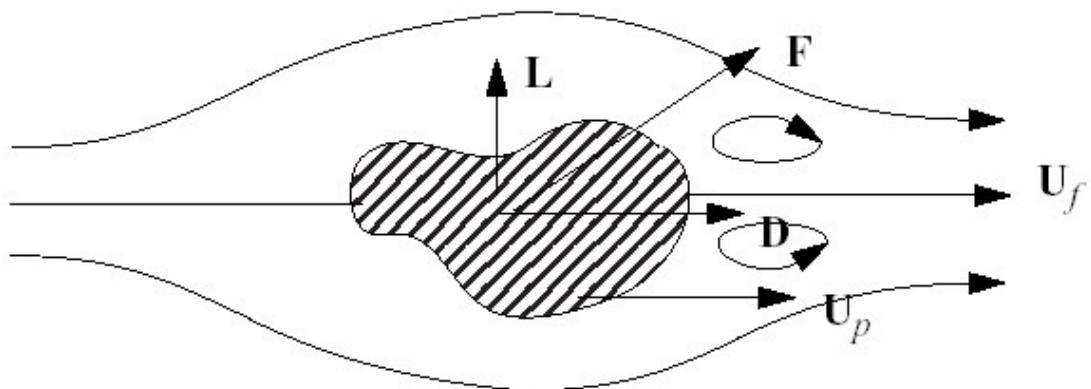


Figura 5. Esquema de uma partícula em um fluido movendo-se experimentando forças normais e tensões viscosas, onde \mathbf{D} representa o arraste em oposição a direção de \mathbf{U} e \mathbf{L} representa a força de sustentação, perpendicular a \mathbf{U} . \mathbf{U}_p é a velocidade da partícula e \mathbf{U}_f a velocidade do Fluido. Fonte: (Burns, 2003).

Richardson e Zaki (1954) encontraram experimentalmente relações para uma suspensão uniforme de partículas esféricas de extensão infinita de acordo com a seguinte equação

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_t \varepsilon^n, \quad (2.51)$$

onde

$$n = \begin{cases} 4,65 & \text{para } \text{Re}_t < 0,2, \\ 4,35 \text{Re}_t^{-0,03} & \text{para } 0,2 < \text{Re}_t < 1, \\ 4,45 \text{Re}_t^{-0,1} & \text{para } 1 < \text{Re}_t < 500, \\ 2,39 & \text{para } 500 < \text{Re}_t, \end{cases} \quad (2.52)$$

onde $\text{Re}_t = 2\rho_f r \mathbf{v}_t / \mu$, é o número de Reynolds para uma partícula isolada caindo com uma velocidade terminal, \mathbf{v}_t , em um fluido. Richardson e Zaki (1954), segundo Jackson (2000), investigaram a influência do diâmetro do aparato experimental, e as correlações estão embutidas no valor do parâmetro n .

A força de arraste pode ser escrita em função do coeficiente de arraste (Burns 2003), assumindo a seguinte forma

$$f_D = \frac{1}{2} C_D \rho_f A_p |\mathbf{v} - \mathbf{u}|(\mathbf{v} - \mathbf{u}), \quad (2.53)$$

onde A_p é a área projetada da partícula na direção do escoamento. Schiller-Naumann apresentam uma expressão para C_D para partículas esféricas em concentrações diluídas

$$C_D = \max\left(\frac{24}{\text{Re}_p} \left(1 + 0,15 \text{Re}_p^{0,687}\right), 0,44\right), \quad (2.54)$$

onde

$$\text{Re}_p = \frac{|\mathbf{u} - \mathbf{v}| d_p \rho_f}{\mu_f}. \quad (2.55)$$

O arraste total exercido por unidade de volume sobre a fase contínua fica

$$f_D = n \mathbf{f}_D = \frac{3}{4} \frac{C_D}{d_p} \phi \rho_f |\mathbf{v} - \mathbf{u}|(\mathbf{v} - \mathbf{u}). \quad (2.56)$$

Wen e Yu (1966) refinaram a correlação de Richardson e Zaki (1954), válida para frações volumétricas acima de 0,2, com a seguinte relação para o coeficiente de arraste

$$C_D = \varepsilon^{-1,65} \min\left(\frac{24}{\text{Re}} \left(1 + 0,15 \text{Re}^{0,687}\right), 0,44\right), \quad (2.57)$$

onde $\text{Re} = \varepsilon \text{Re}_\infty$.

Para altas concentrações de partículas, Gidaspow (1994) usa a equação de Ergun:

$$C_D = 150 \frac{\phi^2 \mu_f}{\varepsilon d_p^2} + 1,75 \frac{\phi \rho_f |\mathbf{v} - \mathbf{u}|}{d_p}, \quad (2.58)$$

para $\phi > 0,2$ e a equação (2.57) para $\phi < 0,2$.

A correlação mais utilizada na literatura é a de Richardson e Zaki (1954) que apresenta resultados muito próximos dos experimentais, segundo Agrawal *et al.* (2001). Contudo, alguns autores utilizam a conhecida equação de Ergun, como citado acima. A única das correlações acima citadas que leva em conta a esfericidade é a equação de Ergun. Observações pertinentes sobre os modelos para a força de arraste podem ser encontradas no trabalho de Enwald *et al.* (1996), Jackson (2000) e van Wachem (2000).

Para a força massa virtual f_V , Zang e Prosperetti (1994) apresentam equacionamento para um fluido invíscido no limite de baixas concentrações de partícula

$$f_V = \frac{1}{2} \rho_f \phi \left(\frac{D_f \mathbf{u}}{Dt} - \frac{D_p \mathbf{v}}{Dt} \right). \quad (2.59)$$

Esta expressão viola o princípio de invariância galileana. Se quisermos garantir a invariância galileana a Equação (2.59) deve ser escrita da seguinte forma

$$f_V = \frac{1}{2} \rho_f \phi \left(\frac{D_f \mathbf{v}}{Dt} - \frac{D_p \mathbf{u}}{Dt} \right). \quad (2.60)$$

Contudo, a Equação (2.59) quando usada em conjunto com a força de sustentação, mantém o princípio de invariância segundo Jackson (2000). Assim, para altas concentrações de partículas a Equação (2.59) toma a seguinte forma

$$f_V = C_V(\phi) \rho_f \phi \left(\frac{D_f \mathbf{u}}{Dt} - \frac{D_p \mathbf{v}}{Dt} \right), \quad (2.61)$$

onde C_V é o coeficiente de massa virtual, dependente da concentração pela seguinte relação

$$C_V(\phi) = \frac{1}{2} + \frac{3}{2} \phi. \quad (2.62)$$

Para a força de sustentação, f_L , tem-se a seguinte expressão

$$f_L = C_L(\phi) \rho_f \phi (\nabla \times \mathbf{u}) \times (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \quad (2.63)$$

com $C_L \rightarrow \frac{1}{2}$ quando $\phi \rightarrow 0$.

A soma de f_V e f_L , mas não cada um individualmente, é invariante galileano se $C_V = C_L$. De fato, se alguém deseja utilizar a forma não objetiva descrita acima, deve utilizá-las em conjunto, garantindo assim a objetividade, se e somente se $C_V = C_L = 1/2$.

Geralmente a força de massa virtual e a de sustentação são desprezadas em simulações de escoamento gás-sólido, por considerar seus efeitos mínimos frente a importância da gravidade e do arraste em escoamentos em leito fluidizado.

Como apresentado acima, as forças de interação fluido-partícula, $n\mathbf{f}$, são comumente representadas como a soma de três termos. Para o primeiro termo, a força de arraste, há um corpo substancial de evidências experimentais que forma uma base muito boa para expressões empíricas. A forma algébrica do segundo termo, massa virtual, está bem estabelecida. O terceiro termo, a força de sustentação, normal à velocidade relativa, tem forma algébrica ainda incerta, pelo fato desta força depender da forma da partícula e adquirir formas diferentes para casos inviscidos e de baixo Reynolds (Jackson, 2000). Uma excelente publicação, Massoudi (2002), discute as várias formas da força de sustentação encontradas na literatura e realiza uma ótima análise sob o ponto de vista da objetividade das relações.

Em escoamentos onde há velocidade relativa muito grande entre as fases, ou altos gradientes de velocidade no fluido, a força de sustentação começa a ter uma grande importância; contudo, na maioria dos textos estudados a importância desta força ainda está por ser estabelecida, no que concerne ao escoamento gás-sólido em leitos fluidizados.

Para partículas rígidas em um fluido Newtoniano incompressível o tensor tensão para o fluido Newtoniano-Stokesiano isotrópico, \mathbf{S}^f , e para a fase sólido, \mathbf{S}^P , pode ser avaliado da seguinte forma (Jackson 2000)

$$\mathbf{S}^f = -p^f \mathbf{I} + \mu^f \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] \quad (2.64)$$

e

$$\mathbf{S}^P = -p^P \mathbf{I} + \mu^P \left[\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} \right]. \quad (2.65)$$

A equação (2.64) é a forma do tensor tensão para a fase fluido, a conhecida relação tensão-deformação. Uma relação semelhante poderia ser utilizada para representar as tensões na fase sólido (Equação 2.65), pois no modelo de dois fluidos, o sólido é um pseudo fluido, contudo, desta forma haveria a necessidade de explicitar como a “pressão” do sólido e a viscosidade do sólido comportam-se, se quisermos manter a relação tensão-deformação para o equacionamento das tensões do sólido.

A descrição adequada destas forças, representando as interações entre o fluido e as partículas, e aquelas que representam as forças de contato entre partículas e sua importância relativa, depende do valor médio do número de Stokes, $St = \rho_s r v_1 / \mu$, onde v_1 é a velocidade relativa de aproximação de um par de partículas. Se St é grande comparado com $\ln(r/l_f)$,

onde l_f é o livre caminho médio para as moléculas do fluido, então as forças de contato entre partículas dominam as interações. No outro extremo, as forças fluido-partícula dominam. Neste caso o filme de fluido entre as partículas é forte o suficiente para impedir o choque entre partículas; as interações entre o fluido e as partículas dominam os mecanismos de transferência. Fica claro que grandes números de Stokes são encontrados com maior freqüência para partículas densas em um gás, sendo que o número de Stokes pode ser pequeno para partículas de densidade moderada em um líquido viscoso. O número de Reynolds para o movimento relativo do fluido e partículas também é importante. Este pode ser definido como $Re = \rho_f r v_2 / \mu$, onde v_2 é a velocidade média relativa das partículas e fluido. Se Re é pequeno comparado com a unidade, então a inércia associada com o movimento do fluido ao redor e entre as partículas pode ser desprezada.

Quando o número de Stokes é grande as partículas podem interagir por colisão direta. Portanto, espera-se que o tensor tensão da fase sólida, \mathbf{S}^P , tenha importância maior na dinâmica do escoamento. Este tensor representa a transmissão tanto por contato como por transferência de quantidade de movimento associada a flutuações nas velocidades das partículas ao redor de sua média local. Este mecanismo é o mesmo que se apresenta na transmissão de tensões em um material granular (partículas sem o fluido presente), para as quais as equações do movimento são conhecidas para certas circunstâncias (Lun *et al.* 1984; Gidaspow 1994; Gennes 1998).

No caso de um material granular, o balanço de quantidade de movimento para a fase partícula contém uma pressão efetiva e uma viscosidade efetiva, análoga à pressão e à viscosidade de um gás. Para um gás estes dependem da temperatura, que deve ser determinada por uma equação de balanço de energia. Da mesma forma, para um material granular, uma “temperatura de partícula” deve ser definida e esta influencia a pressão efetiva e a viscosidade efetiva que aparecem no termo \mathbf{S}^P , análogo a Equação (2.65) acima. Portanto, necessita-se de uma equação suplementar do balanço de energia para a “temperatura granular” das flutuações das velocidades das partículas. Esta equação difere de um balanço de energia para moléculas de gás apenas pela inclusão de um termo representando as perdas de energia em colisões inelásticas. Para o caso de leitos fluidizados, há um fluido preenchendo o espaço entre as partículas, assim outros termos devem ser acrescentados ao balanço de “temperatura granular” representando forças de interação fluido-partícula, a geração de flutuações nas velocidades das partículas resultante de forças exercidas sobre as partículas pelo fluido, e a resistência viscosa do fluido resultante do movimento das partículas.

Relações constitutivas para as tensões da fase sólida baseadas na teoria cinética para gases densos (Chapman e Cowling, 1939) foram derivadas por Lun *et al.* (1984), levando em conta a natureza das colisões inelásticas das partículas. Assim, a temperatura granular é definida como uma média das flutuações das velocidades das partículas

$$\Theta = \frac{1}{3} \left\langle \mathbf{v}_s^2 \right\rangle. \quad (2.66)$$

Como as tensões da fase sólida dependem da magnitude das flutuações das velocidades das partículas, como ressaltado anteriormente, um balanço de energia granular associado a essas flutuações é requerido para suplementar os balanços de quantidade de movimento e massa, tendo como resultado uma equação de transporte para a temperatura granular Θ , dado por

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_s \Theta) + \nabla \cdot (\phi \rho_s \Theta \mathbf{v}_s) \right] = (-\nabla P_s \mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}_s) : \nabla \mathbf{v}_s - \nabla \cdot (k_s \nabla \Theta) - \gamma_s - J_s. \quad (2.67)$$

O primeiro termo do lado direito representa a criação de energia flutuante devido ao cisalhamento na fase partícula, o segundo é o termo de difusão da flutuação de energia por gradientes em Θ ; γ_s representa a dissipação devida a colisões inelásticas partícula-partícula, e o último termo é a dissipação ou criação da energia granular, resultado do trabalho das forças de flutuação exercidas pelo gás devido ao efeito da flutuação da velocidade das partículas. Alguns autores (Syamlal *et al.* 1993 e Boemer *et al.* 1995), assumem que a energia granular está em regime estacionário e é dissipada localmente, desprezando os termos convectivos e difusivos, simplificando a Equação (2.52) para uma equação algébrica com a seguinte forma segundo van Wachem (2000)

$$0 = (-\nabla P_s \mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}_s) : \nabla \mathbf{v}_s - \gamma_s. \quad (2.68)$$

Estas simplificações são razoáveis, pois os termos de geração e dissipação dominam em escoamentos densos. A pressão dos sólidos representa as forças normais da fase sólida devido interações partícula-partícula. Há um consenso geral na forma do equacionamento da pressão dos sólidos, que é dado por Lun *et al.* (1984):

$$P_s = \rho_s \phi \Theta [1 + 2(1+e)g_0 \phi] = \rho_s \phi \Theta + 2g_0 \rho_s \phi^2 \Theta (1+e) \quad (2.69)$$

O primeiro termo é a contribuição cinética na pressão do sólido, que é semelhante a equação para um gás ideal, e o segundo a contribuição devido às colisões, semelhante à constante de volume da equação de van der Waals, modificada pelo coeficiente de restituição e . O termo cinético do tensor tensão representa fisicamente a quantidade de movimento transferida para o sistema pelas partículas movendo-se através de uma camada imaginária cisalhante no escoamento (van Wachem *et al.*, 2001), e a parte devido às colisões do tensor

tensão denota a transferência de quantidade de movimento por colisões diretas. Na Equação (2.69), g_0 é a função distribuição radial no contato, que é interpretada como a distância entre esferas e é dado por, Gidaspow (1994)

$$g_0 = \left[1 - \left(\frac{\phi}{\phi_{\max}} \right)^{1/3} \right]^{-1}. \quad (2.70)$$

onde ϕ_{\max} é o máximo empacotamento possível, 0,637, ou para esferas, $\phi_{\max} = \pi/3\sqrt{2} = 0,7405$. O coeficiente de restituição, e , representa o quanto inelástico são os choques entre partículas. Note que a pressão do sólido depende do quadrado da fração de sólido no termo devido às colisões.

A viscosidade cinemática descreve a resistência da suspensão de partículas contra a compressão. Novamente, o modelo mais aceito na literatura técnica pesquisada para a viscosidade cinemática da fase sólida é dada por Lun *et al.* (1984) como

$$\lambda_s = \frac{4}{3} \phi^2 \rho_s d_s g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\Theta}{\pi}}. \quad (2.71)$$

Para a viscosidade cisalhante dos sólidos há vários modelos na literatura. O modelo de Gidaspow (1994), Equação (2.72), não leva em conta a natureza inelástica das partículas na contribuição das tensões totais, segundo Lun *et al.* (1984); contudo, definem o livre caminho médio de acordo com as características do sistema em estudo. Isto é oposto à teoria de Lun *et al.* (1984) que permite o livre caminho médio tender ao infinito, e as viscosidades dos sólidos tendem ao infinito quando a fração volumétrica de sólidos tende a zero. De qualquer forma, mesmo restringindo o livre caminho médio, a viscosidade cisalhante corretamente tende a zero quando a fração volumétrica de sólidos aproxima-se de zero (Hrenya e Sinclair, 1997). Segundo van Wachem (2000), a descrição exata das tensões da fase sólida não influencia as previsões para leito fluidizado tipo bolhas e *sluging*, concluindo que a magnitude dos termos de gravidade e arraste são dominantes e que as tensões da fase sólida predita pela teoria cinética tem importância menor. Agrawal *et al.* (2001) realizando estudo na meso-escala, chega a mesma conclusão.

$$\mu_s = \frac{5\rho_p d_p \sqrt{\pi\Theta}}{48(1+e)g_0} \left[1 + \frac{4}{5}(1+e)g_0\phi \right]^2 + \frac{4}{5}\phi^2 \rho_p d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\Theta}{\pi}}. \quad (2.72)$$

Há uma série de modelos para a viscosidade cinemática. Os mais importantes e aceitos pela literatura estão arrolados em van Wachem (2000) e Cabezas-Gómez (2003).

A validade de cada uma destas relações constitutivas apresentadas acima fica confinada a uma certa faixa de números de Reynolds e Stokes. Para que se tenha uma idéia

com relação à ordem de grandeza associada com estes adimensionais, apresentam-se, na Tabela 1, valores típicos para suspensões gás sólido, fluidizados com o ar a condições ambientes, para três diâmetros de partículas.

Os valores são apresentados para Re e St para leitos densos $\varepsilon=0,5$, e no caso limite diluído, $\varepsilon \rightarrow 1$. A tabela mostra ainda os valores para $\ln(r/l_f)$, observando-se que os números de Stokes para a faixa de partículas apresentados é muito maior que $\ln(r/l_f)$ para todos os casos, mostrando assim que as colisões entre partículas não irá influenciar de forma significativa sobre as tensões de sólido, S^P . Ou seja, para sermos mais explícitos, nestas condições a utilização da teoria cinética granular não seria necessária. O número de Reynolds é pequeno, para a menor partícula, o suficiente para justificar neste caso, por exemplo, que o efeito da inércia do movimento do gás relativo ao das partículas seja pequeno. Desta forma é possível escrever o tensor tensão para o sólido de forma similar à Equação (2.65).

Tabela 1. Valores típicos para os números de Reynolds e Stokes (Jackson 2000).

D	Fração de vazios ε	
	0,5	1,0
$50 \mu m$	$Re=0,045$ $St=74,3$ $\ln(r/l_f)=5,52$	$Re=0,50$ $St=832$ $\ln(r/l_f)=5,52$
$200 \mu m$	$Re=2,75$ $St=4587$ $\ln(r/l_f)=6,9$	$Re=22,1$ $St=36796$ $\ln(r/l_f)=6,9$
1 mm	$Re=130$ $St=217,211$ $\ln(r/l_f)=8,5$	$Re=417$ $St=694,555$ $\ln(r/l_f)=8,5$

Em contraste com a situação para as forças de interação fluido-partícula, há poucas evidências experimentais que possam representar diretamente os tensores S^P e S^f . Para enfatizar, nem todas as técnicas experimentais para estudar a reologia de fluidos são capazes de serem utilizadas em suspensões fluidizadas. Um exemplo deste fato encontra-se na técnica de uma esfera caindo, que poderá gerar regiões de defluidização do material adjacente à esfera, que tem uma influência considerável nos resultados experimentais (Jackson 2000).

Qualquer método que introduza no leito superfícies sólidas com orientação outra que a vertical, deve ser desqualificado.

Segundo Jackson (2000), há uma dificuldade na interpretação dos resultados pelo fato de que em um leito fluidizado a suspensão não é uniforme. Instabilidades em leitos fluidizados gasosos freqüentemente aparecem imediatamente após este encontrar-se em estado de fluidização, gerando assim bolhas com baixa concentração de sólidos em toda a extensão do leito. Os valores medidos de viscosidade efetiva são muito grandes. O transporte de quantidade de movimento por partículas movimentando-se lateralmente, fenômeno de segregação, pelo efeito da passagem de bolhas irá contribuir para a medida das tensões, sendo diferente de regiões onde não há fluidização efetiva. Há ainda uma dificuldade em decidir como a medida de tensões pode ser separada em \mathbf{S}^P e \mathbf{S}^f , ou seja, qual é a contribuição efetiva de cada uma das tensões. Por exemplo, para leitos fluidizados densos é natural atribuir as medidas das tensões a \mathbf{S}^P .

Pelos fatos acima descritos e as incertezas decorrentes, muitas das aplicações existentes da teoria têm sido baseadas em hipóteses muito simples das representações dos tensores tensão. Muito freqüentemente tem-se utilizado a forma Newtoniana, com \mathbf{S}^f relacionado com o campo médio de velocidades do fluido e \mathbf{S}^P com o campo médio das velocidades do sólido (Equações (2.64) e (2.65)).

As relações descritas pelas Equações (2.64) e (2.65) pressupõem que o tensor é uma função linear da taxa de deformação. O que é importante salientar é que esta relação é um modelo, uma aproximação, seja para os escoamentos multifásicos, ou para o escoamento de uma única fase, pois pode-se escrever o tensor, garantindo objetividade, como uma relação linear, função de outras variáveis, não apenas da taxa de deformação.

Em altas concentrações de sólidos a Equação (2.64) não é adequada para a fase fluido. Dada a não uniformidade do campo de tensões para \mathbf{u} , a força experimentada pelo elemento de fluido irá ser diferente dependendo de como as partículas nas vizinhanças irão se comportar, podendo estar paradas ou em movimento como efeito do movimento do fluido. A representação adequada do termo \mathbf{S}^f , representando a influência dos gradientes na fase partícula e na velocidade do fluido, mantém-se indeterminada mesmo para baixas concentrações de partículas. Mesmo assim a utilização das equações acima apresentadas tem obtido sucesso no tratamento de muitos problemas, como é possível observar nos trabalhos de van Wachem (2000), Zhang e VanderHeyden (2001), Ibsen *et al.* (2001) e Ibsen (2002).

Para altas concentrações de partículas, novamente a Equação (2.65), não representa adequadamente \mathbf{S}^P . A maioria das partículas em tal situação são forçadas a manter contato

com mais de uma vizinhança simultaneamente e interagir por forças normais e tangenciais entre partículas. Desta forma, o conjunto das partículas forma uma estrutura com tensão adicional (Jackson 2000). Tensões deste tipo têm importância significativa em leitos fluidizados densos, especialmente para partículas encontradas nos reatores de craqueamento catalítico, porque estas são particularmente importantes na transição do leito empacotado para o leito fluidizado. Desta forma fica claro, com o exposto acima, que há grandes incertezas com relação às relações constitutivas e a importância de um estudo fundamental de tais relações.

Neste capítulo foram apresentados aspectos associados a modelagem matemática baseada no modelo de dois fluidos e o problema da descrição dos termos associados às forças de interface e à forma do tensor tensão. Ressaltou-se a limitação da utilização da **TCG** no que diz respeito a representação das tensões baseado nas conclusões apresentadas por Agrawal (2000). No capítulo que se segue serão abordados aspectos associados ao tratamento da modelagem da turbulência em escoamentos gás-sólido.

Desta forma, o tensor tensão é uma relação constitutiva onde informações importantes advindas do movimento molecular devem estar explicitadas através de um modelo coerente com o fenômeno físico. Assim, o tensor tensão é o termo que carrega uma responsabilidade extrema no que concerne a melhor representação da fluidodinâmica de um dado problema. Da mesma forma, as forças de interface e o tensor tensão no modelo de dois fluidos.

CAPÍTULO 3

FUNDAMENTOS DA TURBULÊNCIA

O presente capítulo tratará dos aspectos fundamentais associados à turbulência em escoamentos multifásicos gás-sólido. As escalas da turbulência associadas ao escoamento gás-sólido e sua relevância no presente trabalho, são tratadas de acordo com a abordagem normalmente utilizada na literatura científica. Apresentam-se os modelos de turbulência comumente utilizados na literatura com uma breve discussão.

3.1 Aspectos fundamentais da modelagem da turbulência

Avanços significativos têm sido realizados nas últimas décadas na modelagem do escoamento gás-sólido. Numerosos códigos comerciais estão disponíveis e tem sido utilizados de variadas formas com a finalidade de auxiliar o projeto de unidades. A viabilidade do uso destes códigos depende intimamente da validade dos modelos de turbulência. Em geral, os modelos estão restritos a uma limitada faixa de condições de escoamento. As incertezas dos modelos de turbulência são muito grandes, mesmo em escoamentos monofásicos. Para escoamentos multifásicos estas se multiplicam.

Os efeitos da fase dispersa, sólidos ou bolhas, na turbulência da fase contínua, gás ou líquido, são referidos como modificação turbulenta, ou modulação turbulenta².

Tradicionalmente, para a derivação da equação da energia turbulenta para uma fase, representa-se a velocidade em um ponto como $u_i = \bar{u}_i + u'_i$, onde a barra indica a média no tempo e a linha o valor da flutuação. Substituindo esta equação nas equações de Navier-Stokes, realizando a média no tempo e subtraindo a equação média da equação de Navier-Stokes, tem-se uma equação para as flutuações da velocidade. Esta equação é então multiplicada pela flutuação da velocidade chegando-se assim a uma expressão para a energia turbulenta, k . Segundo Crowe e Wang (2000), este procedimento usado para uma única fase

² Estudo detalhado e de grande importância a respeito da modulação turbulenta pode ser encontrado nos seguintes artigos: Crowe *et al.* (1988), Gore e Crowe (1989), Elghobashi e Truesdell (1993), Eaton e Fessler (1994), Crowe e Wang (2000), Crowe (2000), Zhang e Reese (2001), Sarma *et al.* (2004).

não pode ser realizada para escoamentos multifásicos. A razão recai no fato de que as velocidades que aparecem nas equações não são valores locais (pontuais), mas sim valores médios locais, como apresentado no item 2.3.1, do Capítulo 2. Tomar a flutuação de uma propriedade média não tem significado com relação a turbulência (Crowe e Wang, 2000). Uma forma de resolver este problema é iniciar o procedimento com a equação da energia mecânica. Com este procedimento Crowe e Wang (2000) mostram o aparecimento de dois novos termos: um termo é chamado de geração por arraste da partícula, representando a conversão da energia cinética no fluido em energia turbulenta do trabalho realizado pelas forças de arraste sobre o fluido; o outro termo é o termo de redistribuição, que representa a transferência de energia cinética entre as fases. O termo de dissipação é o mesmo para a equação de uma fase. Mas a presença das partículas pode agora alterar os gradientes locais no fluido e afetar a taxa de dissipação. Assim, a escala de Kolmogorov não seria mais a menor escala da turbulência, segundo Crowe e Wang (2000).

Crowe (2000) demonstra como as equações derivadas da forma descrita anteriormente, resultam em valores incorretos para as taxas de dissipação, novamente concluindo que o problema aparece quando valores médios locais são tomados como locais e, mais ainda, quando as equações são tratadas como se representassem uma única fase com um termo local de acoplamento.

Zang e Reese (2001), estudando o modelo proposto por Crowe (2000) concluem que o modelo de Crowe pode predizer razoavelmente bem a modulação turbulenta da fase gás resultante da presença de partículas; contudo, o modelo é sensível ao coeficiente de restituição, ou seja, o choque inelástico entre partículas teria importância significativa.

É fato experimental conhecido que na presença de partículas a turbulência da fase gasosa é atenuada, sendo este efeito mais pronunciado quando de escoamentos gás-sólido densos (Crowe, 2000).

O trabalho da equipe de Crowe é importante, mas ainda está longe de ser resolvido o problema da “turbulência” em escoamentos gás-sólido, tanto por incertezas experimentais como por “má” aplicação das equações médias locais representadas pelo modelo de dois fluidos.

A seguir serão introduzidos alguns aspectos fundamentais do escoamento turbulento gás-sólido, com o intuito de consubstanciar algumas das conclusões que o presente trabalho apresentará com relação a este assunto nos capítulos subsequentes.

Conceitos básicos e terminologia

Dispersão turbulenta de partículas é geralmente o termo usado para descrever o fenômeno de transporte de partículas com o intuito de diferenciar os mecanismos de turbulência da fase contínua.

Em um escoamento chamado laminar o fluido move-se de uma forma ordenada e suave, cujo movimento é translacional. Quando a energia potencial (usualmente o gradiente de pressão) impõe sobre um escoamento laminar excede certo valor, o máximo permitido para que a maioria da massa escoe de forma translacional, o fenômeno da turbulência inicia-se. Em um escoamento turbulento, as forças dissipativas, dependentes da viscosidade do fluido, têm uma importância chave na redistribuição da energia mecânica em energia translacional e rotacional. A relevância do efeito da rotação do movimento do fluido sobre uma pequena partícula introduzida no escoamento é que a partícula irá descrever uma trajetória maior do que se a mesma partícula se encontrasse em um escoamento laminar, em um dado domínio geométrico (Shirolkar *et al.*, 1996). De forma a compreender melhor o transporte turbulento de partículas, serão apresentados alguns conceitos importantes relacionados com escoamentos turbulentos, tais como vorticidade, a presença de estruturas rotativas conhecidas com vórtices, e o mecanismo de decaimento da turbulência.

A vorticidade é uma propriedade local, e é definida como duas vezes a taxa de rotação média local de duas linhas perpendiculares seguindo um elemento de fluido. Desta forma, a vorticidade do movimento de um fluido é a medida da rotação sem deformação. Fisicamente, vorticidade é gerada através do processo de estiramento de vórtices, o que é um mecanismo puramente tridimensional (Silveira-Neto, 2002). Os escoamentos turbulentos são caracterizados por altos níveis de vorticidade, quando comparados aos escoamentos laminares, e por causa deste aumento da vorticidade, pequenas partículas são carregadas por vórtices. Um vórtice é mais uma idéia conceitual do que uma definição física, usada para referir-se a estruturas rotativas observadas em escoamentos turbulentos. Normalmente os escoamentos turbulentos contêm vórtices com várias dimensões, cada uma tendo quantidades diferentes de energia cinética rotacional. Estes vórtices são formados como resultado da ação das forças dissipativas sobre as estruturas geradas pelo aumento da energia cinética rotacional.

A vorticidade em escoamentos turbulentos não é apenas advectada, mas é também aumentada pelo mecanismo chamado estiramento de vórtice, “*vortex stretching*”. Através deste mecanismo, as estruturas encontradas nas grandes escalas quebram-se em menores. Este fenômeno leva ao conhecido mecanismo de decaimento da turbulência. Os grandes vórtices, que têm alta inércia, não podem responder rapidamente as forças viscósas então quebram-se em vórtices menores. Esta cascata de energia continua até que as forças viscósas tornam-se

dominantes, como apresentado esquematicamente na Figura 6³. Portanto, em cada escoamento turbulento há um limite mínimo para o tamanho das menores estruturas.

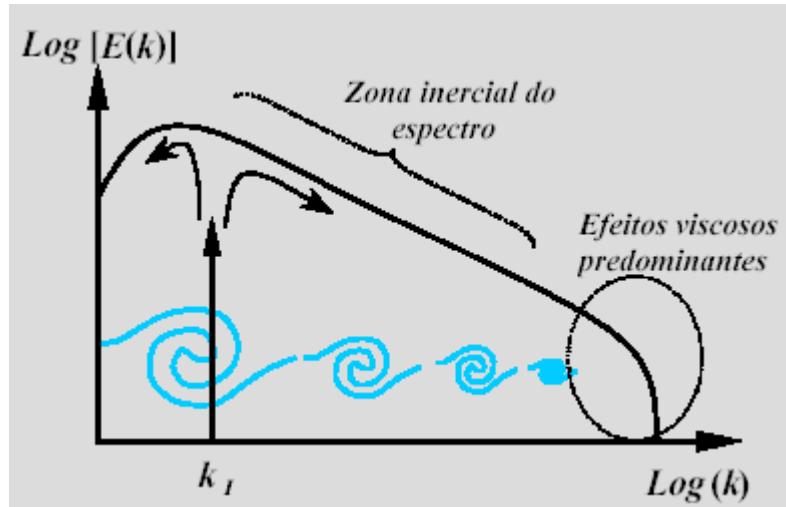


Figura 6. Espectro de energia cinética turbulenta, número de onda k_I de injeção de energia, zona inercial e transferência direta e inversa de energia. Fonte: (Silveira-Neto, 2002).

Cada um dos vórtices tem um comprimento e uma escala de tempo característicos, ou seja, o comprimento de um determinado vórtice, ou dimensão característica, é equivalente à dimensão física de uma estrutura rotativa, e o intervalo de tempo que esta estrutura sobrevive é seu tempo característico.

A interação entre vórtices turbulentos e pequenas partículas é referido como dispersão turbulenta particulada, por causa do efeito dispersivo sobre as partículas. A Figura 7 mostra diferentes vórtices com diferentes dimensões, assim como partículas com diferentes dimensões. Desta forma fica claro que partículas maiores irão interagir de forma diferente que as menores. Partículas com dimensão muito menor que um determinado vórtice tendem a seguir a trajetória deste, geralmente não influenciando em seu tempo característico ou mecanismos dissipativos. Ou seja, as partículas mantém-se no interior do vórtice até que este

³ No espectro apresentado na Figura 6, tem-se a distribuição de energia sobre as estruturas turbinhonares de diferentes escalas. As maiores estruturas, com menores números de onda, são portadoras de maior quantidade de energia. Quanto maior o número de onda, menor é a estrutura turbinhonar e menor a quantidade de energia transportada por ela (Silveira-Neto, 2002). As zonas características representadas na figura são a zona inercial, caracterizada por um processo de transferência não linear de energia entre as diferentes escalas, e a zona dissipativa. À medida que o número de onda aumenta, ou seja, o tamanho das estruturas turbinhas diminui, o número de Reynolds local diminui também e o processo de dissipaçāo viscosa começa a predominar sobre os efeitos não lineares.

se dissipe. Contudo, quando um vórtice entra em contato com uma partícula da mesma ordem de grandeza, a tendência será a dissipação da estrutura do vórtice, destruindo-o, aumentando assim os efeitos dissipativos. O tamanho da partícula em relação a um determinado tamanho característico de vórtice é um parâmetro importante no estabelecimento da inter-relação vórtice-partícula e vice-versa. O transporte de partículas pelos vórtices depende ainda da densidade das partículas e das propriedades da energia cinética. A compreensão detalhada da natureza das interações vórtice-partícula é importante para a modelagem da dispersão turbulenta particulada (Shirolkar *et al.*, 1996).

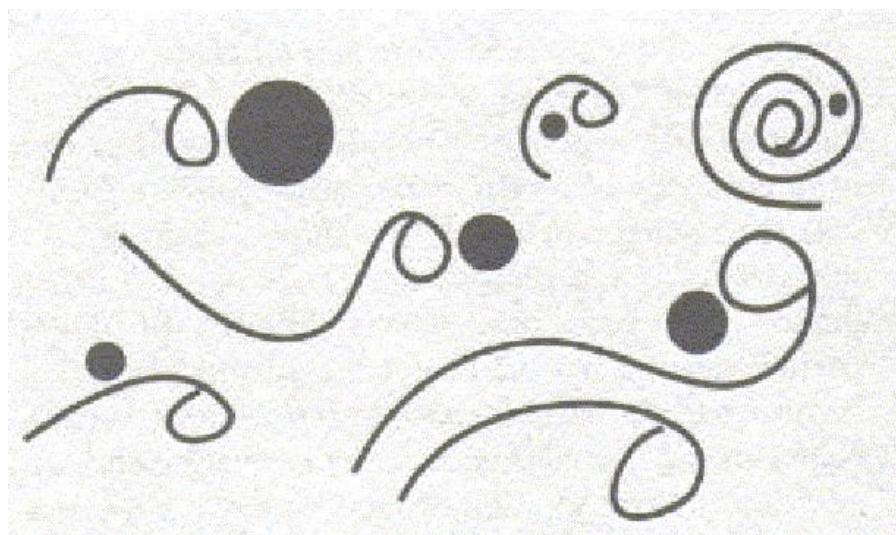


Figura 7. Interação partícula – vórtice em escoamentos turbulentos. Reproduzido de Shirolkar *et al.* (1996).

Em escoamentos turbulentos existe uma dificuldade em definir as condições de regime estacionário por causa da natureza transitória da turbulência. É interessante observar que termos como: “regime estacionário”, “homogêneo”, ou “fenômeno contínuo”, freqüentemente utilizados na literatura, são relacionados à resolução temporal e espacial associada a um observador. Por exemplo, um recipiente pressurizado aparece como estando em estado estacionário aos olhos humanos, sendo que as variações que ocorrem em todo domínio físico em questão são pequenas o suficiente para não serem notadas. Contudo, no caso de escoamentos turbulentos, as escalas dos eventos da turbulência são perceptíveis pela escala de resolução dos olhos humanos (Shirolkar *et al.*, 1996). O procedimento comumente utilizado para superar os problemas associados as escalas espaciais e temporais quando da solução numérica de Navier-Stokes, é utilizar equações médias. Desta forma resolvem-se os campos médios das propriedades associados a uma freqüência de corte, representados pelas equações médias.

O procedimento convencional de realizar a média temporal é conhecido como média de Reynolds. Outro procedimento é a média ponderada pela massa, chamada de média de *Favre*. Para escoamentos onde a densidade varia, incluindo escoamentos reativos, a média de *Favre* é preferível à média temporal. Geralmente nos experimentos envolvendo escoamento multifásico reativo, estimam-se as concentrações de particulado ou de espécies químicas utilizando uma média ponderada na massa, ao invés da média temporal das concentrações.

Apesar do escoamento turbulento parecer visualmente como um fenômeno randômico, de fato é um processo determinístico e macroscópico segundo Shirolkar *et al.* (1996). A utilização de variáveis randômicas na modelagem das flutuações turbulentas é na verdade parte do modelo matemático, o qual estima o grau de incerteza para um dado evento estudado. É muito comum, por exemplo, modelar as flutuações da velocidade como uma variável randômica com uma distribuição Gaussiana. Sendo que as flutuações tem média nula, isto é suficiente para estimar o desvio padrão, (grau de incerteza), para as flutuações da velocidade de um modelo de turbulência com a finalidade de construir uma função probabilidade das flutuações da velocidade. A limitação deste método é que apenas um número finito de tempo e escalas espaciais existem em um dado escoamento turbulento. Assim, ao contrário da teoria cinética molecular, onde os métodos estatísticos provaram sua eficácia, as escalas da turbulência não são infinitesimais quando comparadas ao comprimento característico do sistema em questão.

Mecanismos de transferência em escoamentos turbulentos

O aumento das quantidades escalares em escoamentos turbulentos é um fenômeno convectivo associado à ação do estiramento dos vórtices. Dependendo da natureza do escalar, por exemplo, temperatura, ou concentração de espécies, um outro fenômeno ocorre devido a difusão do escalar. Deve-se notar que o processo de difusão é um fenômeno microscópico que depende dos detalhes dos mecanismos moleculares e é virtualmente independente da ação de estiramento dos vórtices turbulentos. Como afirmado anteriormente, o transporte de um escalar em escoamentos turbulentos é aumentado quando comparado ao transporte de um escalar em escoamentos laminares por causa da advecção destes escalares associado ao movimento dos vórtices. A difusão molecular, quando presente, irá apenas suavizar as flutuações espaciais destas quantidades escalares. No caso de pequenas partículas sólidas, como em um reator FCC, onde geralmente a partícula tem uma dimensão menor que as menores escalas de Kolmogorov, o processo de mistura ocorre apenas por um processo advectivo. Com base neste entendimento do fenômeno físico que ocorre em escoamentos

turbulentos, o termo “difusão turbulenta de partículas” é inapropriado e não pode ser utilizado para descrever a “dispersão turbulenta de partículas” (Shirolkar *et al.*, 1996).

Termos como “difusão turbulenta” são empregados associados a hipóteses envolvendo modelos de turbulência. Em muitos destes modelos, por exemplo $k-\varepsilon$, a mistura convectiva associada às flutuações de velocidade são colocadas juntas com a difusão molecular, e modeladas como um único termo usando a analogia de Stokes (hipótese de Boussinesq). Os termos relacionados à difusão de quantidades turbulentas, que não tem nada a ver com difusão turbulenta de partículas, também incluem contribuições da difusão da pressão, efeitos viscosos e termos de correlação tripla.

Escalas de comprimento e de tempo

Em escoamentos turbulentos a máxima escala espacial, isto é, a máxima escala de um vórtice, conhecido como escala de comprimento integral, L , é determinada pela dimensão característica do problema em questão. A dissipação viscosa da energia contida em um vórtice aumenta quando o tamanho do vórtice decresce. A menor dimensão de um vórtice em um escoamento turbulento é chamada de escala de comprimento de Kolmogorov, η , e a escala de tempo associada com este vórtice é chamada de escala de tempo de Kolmogorov, τ , dadas pelas seguintes equações

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (3.0)$$

e

$$\tau = \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2}, \quad (3.1)$$

onde ν é a viscosidade cinemática turbulenta, e ε é a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta. As micro escalas e macro escalas são relacionadas da seguinte forma

$$\frac{L_2}{L_1} \sim \text{Re}_1^{-3/4}, \quad \frac{u_2}{u_1} \sim \text{Re}_1^{-1/4}, \quad \frac{t_2}{t_1} \sim \text{Re}_1^{-1/2}, \quad (3.2)$$

onde Re_1 é o número de Reynolds baseado na macro escala, dado por

$$\text{Re}_1 = \frac{u_1 L_1}{\nu}. \quad (3.3)$$

A Equação (3.2) mostra que com o aumento de Re_1 , estruturas menores e mais complexas são formadas. u_1, L_1 e t_1 são a velocidade, o comprimento e o tempo característico dos maiores vórtices, e u_2, L_2 e t_2 a velocidade, o comprimento e o tempo característico das menores escalas da turbulência, tendo o número de Reynolds definido como

$$\text{Re}_2 = \frac{u_2 L_2}{\nu}, \quad (3.4)$$

ou seja, região onde apenas as forças dissipativas agem de forma a transformar energia mecânica em energia interna.

De forma sucinta, a turbulência é uma manifestação macroscópica e tridimensional das forças de inércia e de fricção causadas pelo aumento da vorticidade e da tensão, causado pela partição da energia mecânica em energias rotacionais e translacionais. A influência da turbulência em partículas pequenas é um fenômeno convectivo (Shiolkar *et al.*, 1996), que leva a uma aparente distribuição randômica das partículas através do campo de escoamento. Uma das consequências mais evidentes disso é o aumento da trajetória das partículas em escoamentos turbulentos quando comparado ao laminar. Este é a manifestação de um fenômeno chamado de dispersão turbulenta de partículas.

3.2 Interação fluido-partícula

Por causa do movimento de vórtices com diferentes dimensões e escalas de tempo presentes nos escoamentos turbulentos, é importante entender como se dá a interação entre um vórtice e uma partícula (a Figura 7 dá uma idéia geral sobre este aspecto). A dimensão da partícula relativa às escalas da turbulência é um parâmetro importante na determinação do movimento do particulado. É conveniente classificar as partículas de forma geral em duas categorias, baseado em sua dimensão característica, o diâmetro, em relação às menores escalas de Kolmogorov. Uma partícula é referida como pequena se seu diâmetro é menor que as menores escalas de Kolmogorov, e como média se o diâmetro da partícula é da ordem de grandeza das menores escalas, segundo Shiolkar *et al.* (1996). Grandes partículas são definidas com relação às maiores escalas, e na prática não são encontradas aplicações para este caso e por isto não serão discutidas, a não ser aquilo que se refira aos *clusters*, pois estes referem-se, no mínimo, em sua grande maioria a escalas comparadas às menores escalas da turbulência. Na maioria dos casos associados com escoamento gás-sólido reativo, as partículas são menores que as menores escalas de Kolmogorov.

Quando pequenas partículas sólidas são introduzidas em um escoamento turbulento, sendo menores que as menores escalas da turbulência, estas irão residir dentro de um vórtice na escala dissipativa (altas freqüências), por um tempo que será o tempo de vida deste vórtice, ou o tempo para encontrar outro vórtice. Como para casos práticos a escala de Kolmogorov é muito maior que o livre caminho médio molecular do fluido, é razoável assumir que o fluido no interior de um vórtice comporta-se como um contínuo. Em modelos turbulentos, tais como $k - \varepsilon$, as propriedades de um vórtice são assumidos constantes e uniformes em seu tempo de

vida. Portanto é comum assumir que se uma partícula está no interior de um vórtice ela irá “ver” um campo uniforme de velocidades durante sua residência no interior deste. Se a partícula é densa, ou seja, $\rho_p > \rho_f$ (exemplo de escoamentos gás-sólido), a força inercial na interface fluido-partícula irá amortecer as flutuações destas velocidades comparadas com as flutuações observadas no fluido. Em outras palavras, **uma partícula densa irá ter flutuações de velocidade menores quando comparado aquelas do fluido. Esta redução das flutuações da velocidade das partículas é conhecido como efeito inercial, e é caracterizado por uma escala de tempo chamada tempo de relaxação da partícula**⁴. O tempo de relaxação da partícula é definido como a velocidade de resposta da aceleração relativa da partícula, dada por

$$\tau_p = \frac{24\rho_p d_p^2}{18\mu_f C_D \text{Re}_p}, \quad (3.5)$$

onde C_D é o coeficiente de arraste. Uma expressão para Re_p aceita para escoamentos gás-sólido diluídos é dada pela Equação 2.55, reprezentada aqui pra facilitar a leitura do texto

$$\text{Re}_p = \frac{|\mathbf{u} - \mathbf{v}| d_p \rho_f}{\mu_f}, \quad (2.55')$$

e C_D é dado pela Equação (2.54)

$$C_D = \max\left(\frac{24}{\text{Re}_p} \left(1 + 0,15 \text{Re}_p^{0,687}\right), 0,44\right). \quad (2.54')$$

No escoamento turbulento o tempo de vida dos grandes vórtices é, em geral, maior que para os menores vórtices. É interessante notar o efeito do aumento da inércia de uma partícula pequena, cujo tempo de relaxação é menor que a escala de tempo associada com todos os vórtices presentes no escoamento. Esta hipótese de que a partícula tem um tempo de relaxação menor comparado a todas as escalas de tempo do fluido implica que o tempo que uma partícula leva para responder às modificações em seus arredores (como saltar de um vórtice a outro) é menor quando comparado com o tempo do vórtice em que a partícula encontra-se. Para esta partícula é óbvio que um dos efeitos do aumento de sua inércia é a diminuição da flutuação da velocidade na interface fluido-partícula.

⁴ Cabe ressaltar que na hipótese de uma partícula densa estabelecer-se no interior de um vórtice, deve-se ter em mente que o vórtice tem uma energia cinética própria. Se a partícula densa estiver no interior de um vórtice, as flutuações associadas a esta partícula serão menores quando comparadas ao vórtice, pois seu tempo de resposta é menor, induzindo assim a uma relaxação das flutuações de velocidade do fluido (vórtice). Neste caso há uma inter-relação explícita entre o movimento do sólido e do fluido, levando a flutuações menores no sólido e a uma dissipação da energia do vórtice maior do que se não houvesse partícula alguma.

Outro efeito inercial interessante é que o intervalo de tempo no qual a velocidade da partícula correlaciona-se com sua velocidade inicial, aumenta com o aumento de sua inércia. Neste exemplo, a velocidade inicial da partícula no interior de um determinado vórtice pode ser visto como a velocidade anterior a sua migração para outro vórtice. A velocidade final da partícula com inércia maior no vórtice anterior, irá ter uma grande influência na velocidade da mesma partícula no vórtice atual. Em outras palavras, é muito mais difícil modificar a trajetória ou velocidade de uma partícula que tem alta inércia do que uma que tenha baixa inércia. A correlação do intervalo de tempo descrita acima é conhecida como escala de tempo integral, ou escala de tempo Lagrangeana da partícula τ_{pL} . Esta escala de tempo integral é o tempo que uma partícula mantém sua velocidade inercial antes da ocorrência de uma “colisão” turbulenta (efeito resultante da turbulência) modificando assim sua velocidade (Venkatram, 1988).

Assim, quando a inércia de uma partícula é aumentada, no caso de uma partícula pequena que tem um tempo de relaxação menor que todas as escalas de tempo do fluido, a velocidade de flutuação da partícula diminui e ao mesmo tempo aumenta a escala de tempo integral da partícula. Este efeito do aumento da inércia da partícula não dá informação a respeito do grau de dispersão turbulenta, pois o grau de dispersão é determinado pelo produto do quadrado da flutuação da velocidade e da escala de tempo integral para a partícula.

Quando uma partícula média interage com um vórtice menor ou do mesmo tamanho, este pode ser completamente dissipado ou sua estrutura modificada, dependendo da natureza do impacto. Assim como no caso de partículas pequenas, uma partícula média densa é menos sensível as flutuações turbulentas, por causa da força de inércia na interface fluido-partícula (Shirolkar *et al.*, 1996).

Com as importantes informações acima discutidas, pode-se afirmar que as estruturas turbinhonares coerentes, tais como vórtices, são responsáveis pela formação e destruição de aglomerados de partículas (*clusters* e *strands*). Assim, a seguir será apresentada de forma específica, os aspectos associados a esta afirmação no que se refere ao problema em questão, contudo, apenas no Capítulo 4 serão discutidas as implicações.

Cluster e *strands* são observados em escoamentos gás-sólido e líquido-sólido quando há uma grande diferença de densidades. Partículas densas não são capazes de seguir as linhas de corrente do fluido, assim uma partícula não permanece necessariamente em um dado elemento de fluido. Para entender como isto pode levar à formação de *clusters*, considere dois tipos de escoamento bi-dimensionais ilustrados na Figura 8. A Figura 8 b mostra uma partícula movendo-se próximo a um vórtice bi-dimensional. A partícula não pode seguir as linhas curvas e espirais distantes do centro do vórtice.

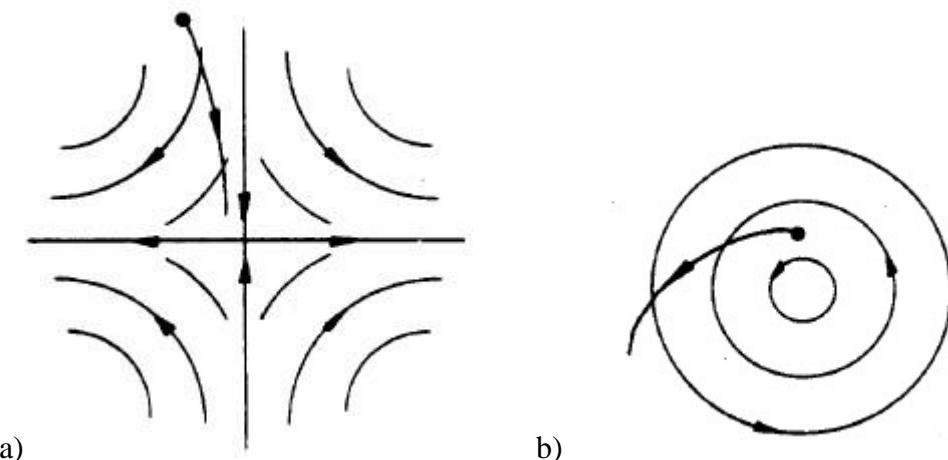


Figura 8. Interação de uma partícula com um escoamento bi-dimensional simples (Eaton e Fessler, 1994).

Assim, espera-se que o centro de um vórtice seja uma região com baixa concentração de partículas, expectativa esta que foi confirmada por vários experimentos (Eaton e Fessler, 1994). A Figura 8 a mostra uma região de convergência. Esta região é caracterizada por alta taxa de deformação e baixa vorticidade. Quando uma partícula entra nesta região ela experimenta linhas de corrente curvas se cruzando, neste caso espera-se encontrar altas concentrações de partículas na região central, sendo esta expectativa também confirmada experimentalmente. Obviamente, a situação real é muito mais complexa que a descrita acima. As estruturas coerentes evoluem no tempo, e muitos escoamentos reais são tridimensionais.

3.2 Modelos de turbulência para escoamento gás-sólido

Os métodos populares utilizados para representar os mecanismos de turbulência são: (1) formulações algébricas, teoria de mistura, e (2) modelos de turbulência que usam duas ou três equações, tais como $k-\varepsilon$, ou $k-\omega$, etc. Como visto anteriormente estes modelos não são adequados para a representação da turbulência na presença de particulados, necessitando modificações, como apontado por Crowe (2000).

A preferência nos últimos anos na comunidade associada a escoamento gás sólido está na utilização de simulação de grandes escalas (**LES**) e simulação numérica direta (**DNS**). Esta preferência não é fortuita, pois devido a que na maioria das aplicações de escoamentos gás-sólido o particulado tem dimensão menor que as menores escalas de Kolmogorov, como ressaltado anteriormente, há a necessidade de que os campos de velocidades e concentração sejam bem resolvidos. Além disso, o fato da maioria dos pesquisadores utilizarem a formulação Euleriana, que é uma formulação que já incorpora o comportamento médio local,

neste caso fazendo mais sentido no que concerne a modelagem da turbulência, a utilização de **DNS** ou de modelos sub malha através de **LES**, quando da utilização da formulação Euleriana.

A formulação **LES** utiliza-se da idéia de resolver a turbulência através de um refino da malha computacional e temporal suficiente para captar as estruturas na Zona inercial apresentada na Figura 6, e modelar os efeitos das escalas dissipativas através de um modelo sub malha, resolvendo assim as maiores escalas e modelando-se a interação entre as escalas resolvidas e as não resolvidas.

Smagorinsky (1963), utilizando das idéias de decomposição das escalas de Reynolds, propôs uma nova filosofia de modelagem, na qual a separação em um campo médio e nas respectivas flutuações não é mais utilizada, mas sim a separação das altas e das baixas freqüências, utilizando-se de um processo de filtragem. O comprimento característico do filtro, que determina a freqüência de corte, é baseado no tamanho da malha de discretização. Em **LES**, as estruturas turbulentas transportadoras de energia e quantidade de movimento são resolvidas diretamente da solução das equações filtradas, enquanto que as menores estruturas são modeladas (Silveira-Neto, 2002). Considerando que as menores estruturas tendem a ser mais homogêneas e isotrópicas e menos afetadas pelas condições de contorno, espera-se que os modelos advindos sejam mais universais e independentes dos diferentes tipos de escoamentos quando comparados com as formulações clássicas, nas quais o conceito de média é utilizado.

Considere a equação de movimento para escoamentos incompressíveis dada por

$$\left[\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i u_j) \right] = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right]. \quad (3.6)$$

As variáveis nesta equação são separadas em uma parte dita de grandes escalas $\bar{f}(\mathbf{x}, t)$ e outra parte chamada sub malha $f'(\mathbf{x}, t)$ da seguinte forma

$$f(\mathbf{x}, t) = \bar{f}(\mathbf{x}, t) + f'(\mathbf{x}, t). \quad (3.7)$$

A parte filtrada é dada por

$$\bar{f}(\mathbf{x}, t) = \int_D f(\mathbf{x}', t) G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}', \quad (3.8)$$

onde a função filtro é definida de diversas formas, entre as quais, uma das mais utilizadas, é a função filtro por volume, dada por

$$G(x) = \begin{cases} 1/\Delta^3 & \text{se } |x| \leq \Delta/2 \\ 0 & \text{se } |x| > \Delta/2 \end{cases}, \quad (3.9)$$

onde Δ é o tamanho característico do filtro, o qual caracteriza a freqüência de corte da filtragem, (observe a semelhança com a equação (2.20) referente a função peso $g(r)$). Em particular, se Δ for tomado como o tamanho da malha, o processo de filtragem se confunde com a filtragem imposta pela discretização, uma vez que no interior de um volume de discretização todas as variáveis são mantidas constantes.

Em função do processo de filtragem descrito acima, as propriedades clássicas da decomposição não são mais verificadas, ou seja

$$\begin{cases} \overline{\overline{u_i u_j}} \neq 0 \\ \overline{\overline{u_i}} = \overline{u_i} \end{cases}. \quad (3.10)$$

Aplicando-se o processo de filtragem à equação da quantidade de movimento, Equação (3.6) obtém-se a seguinte equação

$$\left[\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_i u_j}) \right] = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right]. \quad (3.11)$$

Nota-se que os termos não lineares se apresentam na forma de dois produtos filtrados, o que torna impossível a solução; desta forma, faz-se necessário decompor as escalas, utilizando a Equação (3.7), o que modificará apenas o termo não linear ou de transporte advectivo. Desta forma tem-se

$$\overline{\overline{u_i u_j}} = (\overline{\overline{u_i}} + \overline{\dot{u}_i})(\overline{\overline{u_j}} + \overline{\dot{u}_j}) = \overline{\overline{\overline{u_i u_j}}} + \overline{\overline{\dot{u}_i \dot{u}_j}} + \overline{\overline{\dot{u}_i u_j}} + \overline{\overline{u_i \dot{u}_j}}. \quad (3.12)$$

Observa-se que o processo de decomposição ainda não resolve o problema colocado, pois os últimos membros da Equação (3.12) continuam dependendo de dois produtos filtrados. De forma a expressar estes termos em função do produto das variáveis filtradas, utiliza-se um tensor e um fluxo turbulento adicionais (Silveira-Neto, 2002), definidos da seguinte forma

$$L_{ij} = \overline{\overline{\overline{u_i u_j}}} - \overline{\overline{u_i}} \overline{\overline{u_j}}. \quad (3.13)$$

Substituindo-se a Equação (3.13) na (3.12) obtém-se:

$$\overline{\overline{u_i u_j}} = \overline{\overline{u_i}} \overline{\overline{u_j}} + \overline{\overline{\dot{u}_i \dot{u}_j}} + \overline{\overline{\dot{u}_i u_j}} + \overline{\overline{u_i \dot{u}_j}} + L_{ij}. \quad (3.14)$$

Estes termos estão escritos em função do produto das variáveis filtradas e de alguns tensores e fluxos adicionais identificados a seguir (Silveira-Neto, 2002)

$$\left\{ \begin{array}{ll} \tau_{ij} = \overline{\overline{\dot{u}_i \dot{u}_j}} & \text{Tensor de Reynolds sub-malha} \\ C_{ij} = \overline{\overline{\dot{u}_i u_j}} + \overline{\overline{u_i \dot{u}_j}} & \text{Tensor Cruzado} \\ L_{ij} = \overline{\overline{\overline{u_i u_j}}} - \overline{\overline{u_i}} \overline{\overline{u_j}} & \text{Tensor de Leonard} \end{array} \right\} \quad (3.15)$$

Substituindo-se estes resultados na Equação 3.11 obtém-se a equação filtrada com a seguinte forma

$$\left[\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{u}_i \bar{u}_j \right) \right] = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) - (\tau_{ij} + C_{ij} + L_{ij}) \right]. \quad (3.16)$$

Boussinesq propôs expressar o tensor de Reynolds sub-malha em função da taxa de deformação gerada pelo campo de velocidade filtrado e da energia cinética turbulenta, como segue

$$\tau_{ij} = -\nu_t \left[\left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} k \delta_{ij} \right]. \quad (3.17)$$

Os tensores de Leonard e cruzado podem ser desprezados quando esquemas de transporte advectivo de até segunda ordem são utilizados (Silveira-Neto, 2002). Isto é, a inclusão ou não destes tensores depende da ordem de precisão do esquema de discretização do transporte advectivo.

A viscosidade turbulenta ν_t pode ser calculada por diferentes modelos. O modelo sub-malha de Smagorinsky (1963) baseia-se na hipótese de equilíbrio local para as pequenas escalas, ou seja, que a produção de tensões turbulentas sub-malha seja igual a dissipação

$$\mathcal{P} = \varepsilon, \quad (3.18)$$

onde a produção pode ser escrita em função da taxa de cizalhamento do campo filtrado e a dissipação pode ser escrita em função da escala de velocidade e do comprimento característico sub-malha

$$\mathcal{P} = -\bar{u}'_i \bar{u}'_j S_{ij} = 2\nu_t S_{ij} S_{ij}, \quad (3.19)$$

$$\varepsilon = -c_1 \overline{(\bar{u}'_i \bar{u}'_j)^{3/2}} / \ell. \quad (3.20)$$

Observa-se que $-\bar{u}'_i \bar{u}'_j$, na Equação (3.19) contém apenas a parte anisotrópica do tensor de Reynolds sub-malha. Na última equação, ℓ é a escala de comprimento sub-malha e $\overline{(\bar{u}'_i \bar{u}'_j)^{1/2}}$ a escala de velocidade. Supõe-se que a viscosidade turbulenta sub-malha seja proporcional a estas duas escalas, conforme a seguinte equação

$$\nu_t = c_1 \ell \overline{(\bar{u}'_i \bar{u}'_j)^{1/2}}. \quad (3.21)$$

Desta forma pode-se expressar a viscosidade turbulenta em função da taxa de deformação e da escala de comprimento, da seguinte forma

$$\nu_t = (c_s \ell)^2 \sqrt{2S_{ij} S_{ij}}. \quad (3.22)$$

O comprimento característico ℓ é calculado em função da malha de discretização. A constante de Smagorinsky $c_s = 0,18$ foi determinada analiticamente por Lilly (1967) para turbulência homogênea e isotrópica. O valor desta constante é adaptado conforme o tipo de escoamento que se está realizando (Silveira-Neto, 2002).

O modelo de Smagorinsky pode ser reescrito da seguinte forma

$$\tau_{ij} = -2[\bar{L}(\bar{\Delta})]^2 [2S_{mn} S_{mn}]^{1/2} S_{ij}. \quad (3.23)$$

onde $\bar{\Delta} = (\Delta_1 \Delta_2 \Delta_3)$ e $L(\bar{\Delta})$ dependem do grau de anisotropia ou irregularidade da malha utilizada. Se a malha é completamente regular tem-se então que

$$\bar{L}(\bar{\Delta}) = c_s \Delta, \quad (3.24)$$

sendo $\Delta = \Delta x_1 = \Delta x_2 = \Delta x_3$.

Para fracas anisotropias tem-se que

$$\bar{L}(\bar{\Delta}) = c_s \Delta_{eq}, \quad (3.25)$$

$$\Delta_{eq} = (\Delta_1 \Delta_2 \Delta_3)^{1/3}. \quad (3.26)$$

O desenvolvimento de um modelo sub-malha no caso do modelo de dois fluidos para a equação da quantidade de movimento para o sólido, assim como para o gás, segue os mesmos passos descritos acima. Agrawal (2000) demonstra a importância de um modelo sub-malha, tendo em vista a impossibilidade de realizar-se refino de malha que seja da mesma ordem da dimensão característica da partícula, região na qual o modelo de dois fluidos não é válido. É portanto natural que se pense em representar os efeitos da escala dissipativa através de um modelo sub-malha.

O presente trabalho utilizou-se da abordagem **LES** para a modelagem da viscosidade turbulenta da fase gás e sólido, para alguns estudos de caso que são apresentados e discutidos no Capítulo 6. A referida modelagem segue os passos descritos acima e utiliza-se de um modelo similar ao de Smagorinsky (1963). O modelo encontra-se descrito no Capítulo 5 do presente trabalho.

Neste capítulo foram vistos o tratamento geral que se dá à turbulência no que diz respeito ao escoamento gás-sólido, e algumas indicativas dos fenômenos responsáveis pela formação de aglomerados. No capítulo que se segue serão apresentados em detalhe os fenômenos físicos associados a formação de *clusters*, e seu “estado da arte”. Será apresentada ainda a metodologia utilizada neste trabalho de tese para caracterizar e modelar a formação e destruição de *clusters*.

CAPÍTULO 4

FENOMENOLOGIA DA FORMAÇÃO E DESTRUIÇÃO DE CLUSTERS EM ESCOAMENTOS GÁS-SÓLIDO

O presente capítulo apresenta a fenomenologia da formação e destruição de *clusters*. Os aspectos físicos serão ressaltados no que concerne aos estudos anteriores, bem como sob o ponto de vista do autor do presente trabalho. Diferentes abordagens serão apresentadas e discutidas para caracterização dessas estruturas, finalizando com a abordagem utilizada neste trabalho.

4.1 Introdução

Trabalhos recentes têm apontado para a importância fundamental do conhecimento da influencia dos chamados *clusters*, aglomerados de partículas, (ver por exemplo Wylie *et al.*, 2000 e Glasser *et al.*, 1998), nos padrões de escoamento em leitos fluidizados. As não uniformidades descritas sucintamente nos capítulos anteriores podem introduzir no escoamento das partículas caminhos preferenciais, bem como o retorno destas, que usualmente ocorre junto às paredes do reator de craqueamento catalítico.

A Figura 9 apresenta as dimensões características das escalas envolvidas em um escoamento gás-sólido em um leito fluidizado. A macro-escala confunde-se com as dimensões do reator, geralmente a dimensão radial, com dimensão da ordem de centímetros para metro. A meso-escala, representada na Figura 9 é a região onde encontram-se os *clusters* e *strands*, com dimensões típicas variando da ordem de milímetros para centímetros. Fica claro que a meso-escala (Figura 9) encontra-se na escala entre a micro-escala, que corresponde à dimensão de uma partícula e a macro-escala.

Os caminhos preferenciais e a formação de *clusters* de partículas ocorrem na chamada meso-escala, influenciando significativamente os padrões de escoamento. As estruturas formadas nesta escala têm uma ordem de grandeza de 10 a 50 diâmetros de partículas e foram objeto de estudo de vários autores, que serão apontados no decorrer da apresentação do texto.

Quando um leito de partículas em um tubo ou coluna ascendente sofre o efeito de um gás escoando, este fluido exerce uma força (arraste) em cada uma das partículas presentes no

tubo ou coluna. Na fluidização, a força gravitacional agindo sobre as partículas é compensada pelas forças de arraste exercidas sobre as partículas pelo escoamento local do fluido. O escoamento local do fluido é diferente para cada uma das partículas, fazendo assim o comportamento de cada uma das partículas único.

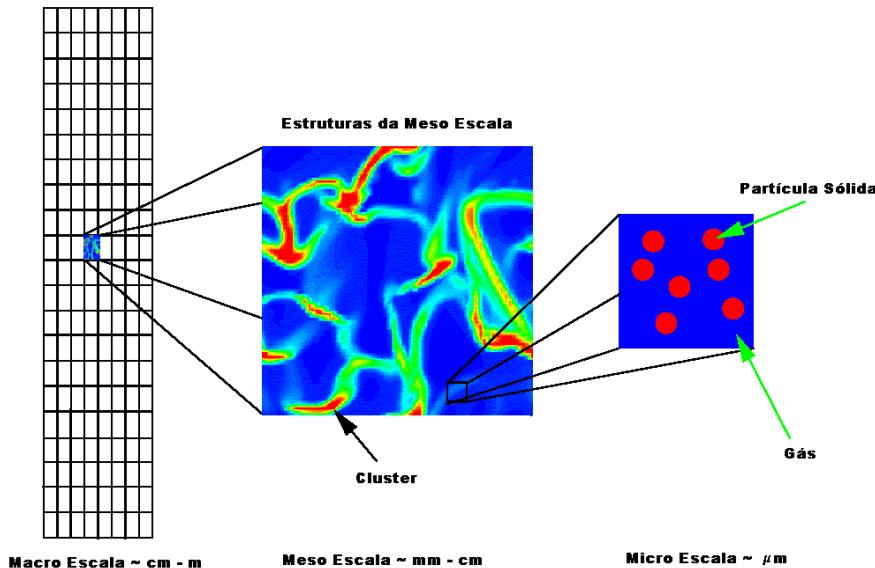


Figura 9. Dimensões características apresentadas na macro, meso e micro escalas no contexto de um leito fluidizado. Adaptado de Agrawal (2000).

Diferentes regimes de fluidização são possíveis de ocorrer, promovendo diferentes características fluidodinâmicas, e desta forma diferentes propriedades e mecanismos de transferência. Quando a força gravitacional é balanceada pela força de arraste média resultado do escoamento do gás, o estado de fluidização é chamado de fluidização mínima. A velocidade de gás onde as bolhas iniciam é chamada de velocidade de bolha mínima. As bolhas de gás determinam o comportamento do sistema fluidizado, e são responsáveis pela agitação dos sólidos. Os chamados regime turbulento e de rápida fluidização são encontrados em reatores FCC, como apresentado no Capítulo 2.

O regime turbulento apresenta-se com bolhas em regime intermediário ao de bolhas, tendendo para um regime ou outro associado à grande instabilidade destes sistemas, apresentando a formação de *clusters* e caminhos preferenciais.

Com o descrito acima é possível observar que o escoamento em leito fluidizado apresenta-se complexo, com regiões de baixa e/ou alta concentração de sólidos. Estas regiões têm comportamentos diferenciados em relação as propriedades de transporte bem como reações químicas. Em regiões de baixa concentração de partículas a influência das tensões do gás é pronunciada, e o livre caminho médio entre as partículas é grande; desta forma, o

choque entre partículas tem uma probabilidade menor de ocorrer. O oposto ocorre em regiões densas. Mesmo em leitos chamados diluídos, a presença de *clusters* leva ao comportamento anteriormente citado. As reações químicas dão-se também de forma diferente em cada uma das regiões. Em regiões diluídas há um maior contato gás sólido; em regiões de aglomerados o contato é pobre.

Embora as forças de atração entre partículas possam dar origem a aglomerados de partículas finas, isto não parece ser o fator dominante para a formação de *clusters* nas condições encontradas em reatores FCC (Agrawal *et al.*, 2000). Escoamento gás-sólido com altas velocidades como em FCC's, apresentam flutuações persistentes, *clusters* e caminhos preferenciais. Quando um fluido intersticial está presente, o amortecimento da flutuação do movimento das partículas resultante da presença deste fluido aumenta a tendência para formar *clusters*. Segundo Agrawal *et al.* (2001), estruturas não uniformes aparecem como resultado de instabilidades locais, e a presença das paredes não é requerida para a formação dessas estruturas. Assim, pode-se dizer, que os *clusters* estão provavelmente associados com o movimento relativo entre o gás e as partículas, a dissipação da energia flutuante das partículas por colisões inelásticas e ao amortecimento viscoso (Agrawal *et al.*, 2001). Se a afirmação acima reflete de fato a física do problema, necessita-se incorporar de alguma forma o efeito das colisões inelásticas no “modelo de dois fluidos”. Muitos autores tomam o afirmado acima como verdadeiro e utilizam em conjunto com o modelo de dois fluidos uma equação de transporte para a flutuação da velocidade dos sólidos, a chamada Teoria Cinética Granular (**TCG**) (Gidaspow, 1994). Se o efeito é apenas decorrente da fluidodinâmica, então não haveria necessidade de utilizar a **TCG**. Segundo van Wachem (2000) e Agrawal *et al.* (2001), o refino de malha necessário para que os resultados sejam sensíveis à **TCG**, deve ser da ordem de poucos diâmetros de partículas, o que infelizmente não tem sido realizado, devido ao alto custo computacional. O problema deve-se à diferença de escalas entre a **TCG** e o “modelo de dois fluidos”.

As estruturas na meso-escala são constantemente formadas e destruídas. Este processo leva a flutuações locais persistentes na concentração dos sólidos e na velocidade relativa entre o gás e os sólidos. Se pensarmos em termos de média temporal, estas flutuações levam a uma distribuição não uniforme na distribuição da concentração de sólidos na macro-escala, (e.g. junto as paredes do reator maior que no centro). Esta não uniformidade gera fluxo descendente de partículas e gás junto às paredes. O fenômeno de segregação influencia o tempo de residência das partículas e leva à recirculação de partículas, fenômeno bem

conhecido em FCC's. Estes efeitos são importantes na predição de escoamentos gás-sólido reativos, bem como nos não-reativos, contribuindo para a formação de coque em FCC's.

4.2 Origem dos *clusters* em escoamentos gás-sólido

O regime de escoamento predominante em um reator FCC é o turbulento. Alguns autores, Anderson & Jackson (1968), Anderson, Sundaresan e Jackson (1995), Glasser *et al.* (1997), Jackson (2000) e Sundaresan (2003), investigaram as estruturas tais como formação de bolhas e *clusters* sob o ponto de vista da teoria da estabilidade, indicando que estas estruturas seriam na verdade instabilidades induzidas por não homogeneidades. Esses autores realizaram estudo utilizando as equações apresentadas no Capítulo 2, o modelo de dois fluidos, através de análise de estabilidade.

Glasser *et al.* (1998) estenderam a análise de estabilidade levando em conta todos os regimes encontrados em escoamentos gás-sólido. Encontraram para cada valor de fração de sólidos que o estado de fluidização uniforme é mais instável a ondas caminhando verticalmente, não tendo nenhuma estrutura horizontal. A perda de estabilidade destas ondas verticais para perturbações transversas dão origem a ondas tendo uma estrutura lateral da mesma forma, não importando se o leito é denso ou diluído. A estrutura das soluções tem não uniformidades laterais e verticais nos campos de velocidade e de fração de sólidos. A transição do regime de bolhas para o de *clusters* se dá suavemente. Este trabalho apresentou como conclusão que bolhas no regime denso e *clusters* em sistemas diluídos formam-se pelo mesmo mecanismo, e que as equações do modelo de dois fluidos com leis constitutivas simples são capazes de representar a formação destas estruturas. Estas estruturas apareceriam por causa de interações entre a inércia associada com a fase partícula, gravidade e força de arraste. Fisicamente, esta rota particular de formação de *clusters* estaria associada a velocidade relativa entre as partículas e o gás (Glasser *et al.*, 1998).

Geralmente em regiões próximas de altas concentrações de partículas, encontram-se regiões com baixa concentração, criando assim um caminho de baixa resistência para as partículas “caírem” sob o efeito da gravidade e o gás ascender rapidamente através da constrição ocorrida pela presença de um afunilamento.

O trabalho de Glasser *et al.* (1998) é importante, pois aponta para a capacidade do modelo de dois fluidos, sem a utilização da teoria cinética, de representar todos os regimes de escoamento encontrados em leitos fluidizados e suas estruturas características, tais como bolhas, *strands*, *clusters*, etc, decorrentes apenas de efeitos fluido dinâmicos, como comentado anteriormente.

Wylie e Koch (2000) realizaram estudo sobre a formação de *clusters* argumentando que estas estruturas seriam advindas de efeitos associados às tensões viscosas no gás. Desta forma a formação de *clusters* estaria associada a um mecanismo dissipativo. De fato, na presença de interações fluidodinâmicas entre as partículas, a dissipação viscosa é maior quando as partículas estão próximas umas das outras, gerando assim um “congelamento” das partículas, causando o aparecimento de aglomerados. Este fenômeno é eminentemente local, como afirmam Wylie e Koch (2000).

Partículas com número de Stokes suficientemente grande não são afetadas pelas tensões viscosas. Estas transladam com pouca perda de energia entre uma colisão e outra, como resultado as partículas tendem a uma configuração de distribuição de velocidades Maxwelliana. Quando o número de Stokes decresce, as partículas são afetadas pelas tensões viscosas e são possíveis dois mecanismos de formação de *clusters* segundo Wylie e Koch (2000): na escala microscópica, ou seja, na ordem de grandeza de partículas individuais, a formação de *clusters* ocorreria segundo interações fluidodinâmicas de pequenos grupos de partículas. Se uma partícula encontra-se na região próxima de uma ou mais partículas, ela experimentará um aumento do arraste viscoso, existindo assim a possibilidade desta partícula ser arrastada com maior freqüência do que se estivesse isolada; na escala macroscópica, a dependência estaria na taxa da dissipação viscosa. A energia será dissipada mais rapidamente em regiões de alta fração volumétrica levando a um decréscimo da velocidade de flutuação das partículas e pressão nestas regiões. Isto levará a um escoamento que irá aumentar a fração de sólidos. As instabilidades macroscópicas e microscópicas são similares. A questão é se a descrição no *continuum* é válida na escala em que a formação de *clusters* ocorre.

Na formulação do modelo de dois fluidos fica proibitivo sua utilização quando o volume elementar é da ordem de uma partícula, pois as hipóteses associadas a este modelo não levam em conta as flutuações associadas a uma partícula. Além disto, na escala de uma partícula, quando esta aproxima-se de outra, o filme ao redor das partículas diminui, podendo chegar a uma dimensão, no momento do choque, menor que o livre caminho médio, impossibilitando a utilização da hipótese do *continuum*.

Quanto a utilização da TCG associada a formação de *clusters*, Tan *et al.* (1995), McNamara e Young (1996) Nott *et al.* (1999) mostraram que a formação de *clusters* não é revelada pela utilização dessa teoria.

Outro mecanismo para explicar a formação de *clusters* está associado aos mecanismos de turbulência e à formação de vórtices como apresentado sucintamente no Capítulo 3, item 3.2. O efeito da presença de uma partícula em um escoamento tende a deformar as linhas de

corrente do fluido. Quando um aglomerado de partículas encontra-se em uma determinada região, espera-se que a taxa de deformação sofrida pelo fluido seja maior em comparação quando não há partícula, ou seja, deve existir uma relação entre a fração de sólidos e a taxa de deformação. Locais onde há alta taxa de deformação são locais de baixa vorticidade. Por isto espera-se que as partículas aglomerem-se na região externa de um vórtice, onde as taxas de deformação são maiores, deixando o centro do vórtice praticamente sem a presença de partículas, ou diminuída. O presente trabalho demonstra este efeito no Capítulo 6, qualitativa e quantitativamente.

Se uma partícula tem dimensão menor que as menores escalas de Kolmogorov, ou seja, a partícula tem dimensão característica menor que as escalas dissipativas, esta partícula sofre apenas efeitos difusivos. Quando esta partícula encontra um vórtice, a tendência será seguir o caminho do vórtice. Agora, imagine que há outras partículas e estas entram em contato com este vórtice. As partículas começam a aglomerar no interior do vórtice, até que a dimensão característica do *cluster* chegue na ordem de grandeza ou acima da ordem de grandeza do vórtice. Quando o *cluster* tem dimensão característica maior que o vórtice, este se “quebra”, ou dissipia sua energia, destruindo o vórtice e o aglomerado de partículas. Os tempos de formação e destruição estão assim associados ao tempo característico de um determinado vórtice, e obviamente associados à probabilidade de choque com outros vórtices. De qualquer forma este mecanismo não invalida o que já foi afirmado anteriormente, apenas que apresenta uma nova forma de caracterizar a formação e destruição de *clusters*, associado as taxas de deformação e aos tempos de meia vida dos vórtices. Importante observar que este fenômeno é local. Este mecanismo de formação de aglomerados associado aos vórtices é chamado na literatura especializada como “concentração preferencial” (Eaton e Fessler, 1994). Os estudos numéricos associados com a chamada concentração preferencial, em sua maioria, foram realizados utilizando simulação numérica direta (Eaton e Fessler, 1994; Yang e Lei, 1998; Fessler e Eaton, 1999; Ahmed e Elghobashi, 2000).

Como as partículas tendem a modificar a turbulência da fase contínua, os trabalhos que se referem a concentração preferencial e a modulação da turbulência se confundem, haja vista que os *clusters* são aglomerados de partículas e, é natural pensar que estes aglomerados modifiquem sensivelmente a estrutura turbulenta. Neste contexto o trabalho de Eaton e Fessler (1994) apresenta uma extensa revisão bibliográfica sobre os métodos numéricos e experimentais utilizados para o estudo dos mecanismos que levam a concentração preferencial de partículas. Yang e Lei (1998) discutem a necessidade da utilização da

simulação direta para captar estas estruturas e demonstram que a utilização da metodologia **LES** é suficiente para tanto.

Ahmed e Elghobashi (2000), usando **DNS**, demonstraram que o aparecimento dessas estruturas está associado ao fenômeno de estiramento de tubos de vórtices longitudinais. Os *clusters* em sua maioria, no que se refere aos escoamentos em leito fluidizado, apresentam-se com forma esférica ou bandas densas e estiras na direção vertical, chamadas de “*strands*”. Na apresentação dos resultados (Capítulo 6) mostraremos a presença de *strands* alongados, provavelmente decorrentes do fenômeno de estiramento de vórtices⁵. Estas estruturas de vórtices longitudinais decorre do emparelhamento de estruturas turbilhonianas contra-rotativas, no caso do escoamento gás-sólido. Pelo fato de que em um leito fluidizado a velocidade vertical é de algumas ordens de grandeza maior do que a horizontal, a tendência destes vórtices emparelhados é estirarem-se na direção vertical, como apresentado esquematicamente na Figura 10. O gás escoando através das partículas tende a acelerar quando da diminuição da área efetiva para escoar. Estas estruturas longitudinais têm diâmetro da ordem de grandeza das escalas de Kolmogorov, e na direção vertical da ordem de grandeza da escala de Taylor até as maiores escalas.

Quando uma estrutura coerente, um vórtice, encontra uma contração, a tendência é que a vorticidade seja amplificada, conservando assim a quantidade de movimento angular. Se o elemento de fluido é estirado então sua área da seção e momento de inércia tornam-se menores. O componente angular da velocidade na direção do estiramento deve aumentar de forma a conservar a quantidade de movimento angular (Tennekes e Lumley, 1987). O estiramento de vórtices geralmente envolve uma mudança de escala, como representando esquematicamente na Figura 11.

É importante ressaltar aqui que a transferência de energia das grandes escalas para as menores, conduzida pelo estiramento de vórtices, dá-se através de mecanismos específicos, que serão descritos a seguir.

Quando a vorticidade encontra-se em um campo deformado ela é estirada. Com base na conservação do momento angular, espera-se que a vorticidade na direção da taxa de deformação positiva seja amplificada, enquanto na direção oposta (taxa de deformação negativa) a vorticidade será atenuada. O estiramento de vórtices envolve troca de energia,

⁵ Os resultados apresentados no Capítulo 6 mostram que a presença de estruturas alongadas denominadas *strands*, estão associadas ao fenômeno de estiramento de vórtices. Os resultados mostram que na região externa de vórtices contra-rotativos encontram-se associadas estruturas de aglomerados estirados na direção vertical.

pelo fato que a taxa de deformação realiza trabalho sobre os vórtices que são estirados segundo Tennekes e Lumley (1987).

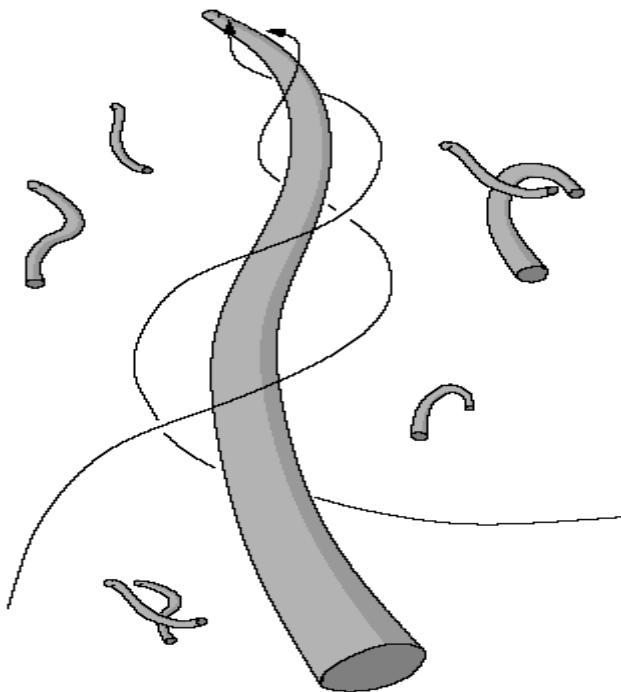


Figura 10. Porção de um fluido sendo estirado e comprimido quando a velocidade aumenta, gerando uma ou muitas estruturas coerentes de filamentos de alta vorticidade e baixa dissipação; as setas representam esquematicamente trajetórias de partículas na região externa dos vórtices.

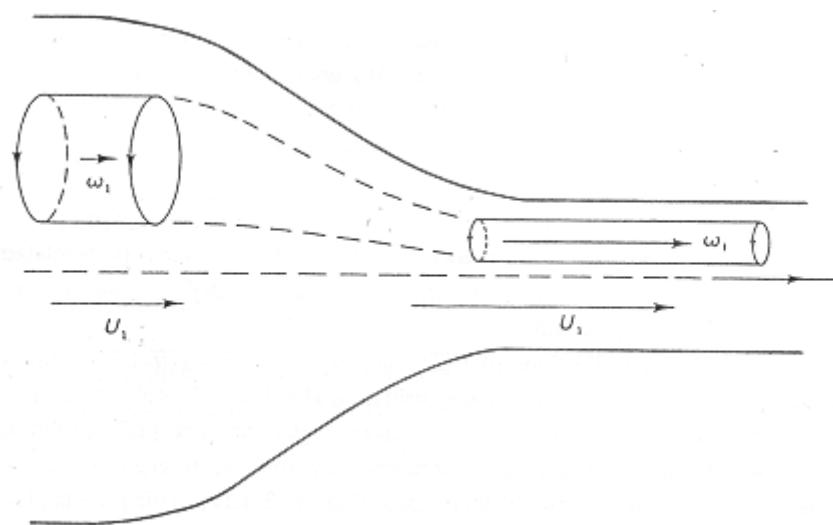


Figura 11. Estiramento de vórtice em uma contração. Como há um aumento de velocidade da esquerda para a direita, o componente da vorticidade w_1 é amplificado para satisfazer a conservação da quantidade de movimento angular. Fonte (Tennekes e Lumley, 1987).

É de consenso na literatura (Ahmed e Elghobashi, 2000) que regiões de altas taxas de produção de turbulência são comprimidas entre tubos de vórtices longitudinais contrarotativos. Quanto maior a vorticidade dos tubos de vórtices longitudinais, maior a taxa de produção. As partículas sólidas modificam o alinhamento do vetor vorticidade com o eixo dos tubos de vórtice longitudinal. Aumentando o alinhamento entre o vetor vorticidade e o eixo dos tubos de vórtices longitudinais, a vorticidade é aumentada, o que causa aumento nas taxas de produção segundo Ahmed e Elghobashi (2000).

Quando partículas com diâmetro relativamente pequeno encontram-se em um escoamento turbulento, estas criam gradientes de velocidade locais. Esta geração de gradientes locais pode ser representada esquematicamente pela Figura 12. A figura mostra partículas movendo-se com uma velocidade uniforme em uma certa direção quando encontram um determinado vórtice. Se a velocidade dos sólidos for maior que a do fluido, o arraste entre os sólidos e o fluido irá aumentar a velocidade do fluido que estava se movendo na mesma direção das partículas. O fluido que movia-se em direção oposta as partículas irá experimentar um redução da velocidade. O efeito deste tipo de interação é a criação de gradientes de velocidade, como pode-se observar na Figura 12.

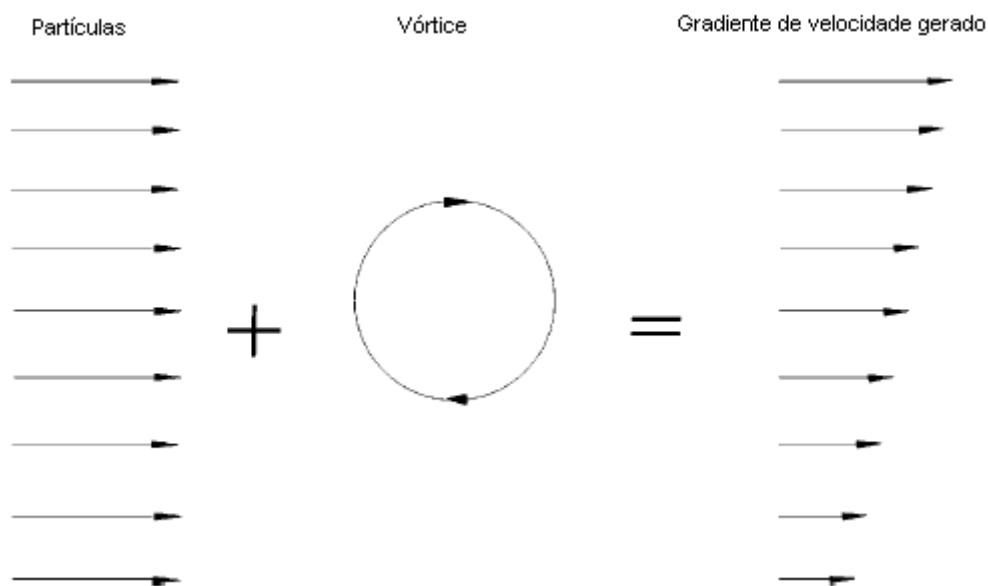


Figura 12. Gradiente de velocidade local gerado pela interação de partículas com um vórtice (Ferrante e Elghobashi, 2003).

De outra forma, se as partículas movimentam-se com velocidade menor que a do fluido, estas irão reduzir a velocidade do fluido em todo domínio de atuação. Os elementos de fluido que estavam movimentando-se na mesma direção das partículas irão experimentar uma

menor redução de sua velocidade do que os elementos de fluido que se moviam na direção oposta a das partículas, criando assim gradientes de velocidades locais. Esta geração de gradientes locais de velocidade leva a um aumento na magnitude da taxa de deformação local, aumentando assim a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta.

Quando partículas grandes, que têm um tempo de resposta maior que o tempo característico associado à escala de Kolmogorov, interagem com um vórtice espera-se que as partículas não respondam prontamente às flutuações de velocidade do fluido. Pequenas partículas mantêm-se no interior das estruturas turbinholares e grandes são ejetadas. Assim, partículas grandes, ou *clusters*, mantêm sua energia cinética por maior tempo que o fluido. Como os *clusters* interagem com um vórtice? A Figura 13 apresenta esquematicamente o arraste sofrido pelo gás quando um grupo de partículas interage com um vórtice. A força de arraste da partícula é proporcional a velocidade relativa. Assim, o efeito desta interação é a geração de arraste no fluido. Isto significa que *clusters* interagindo com um vórtice girando na direção horária, criam um torque em sentido anti-horário no fluido, o que reduz a vorticidade. Sendo assim, os *clusters* reduzem o tempo de meia vida dos vórtices (Ferrante e Elghobashi, 2003).

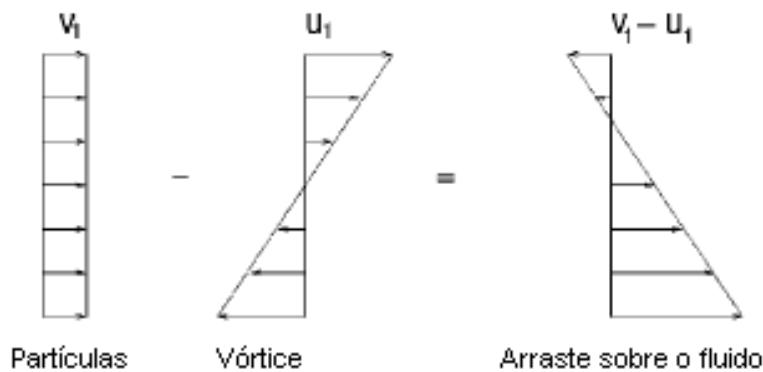


Figura 13. Representação da interação do arraste entre grandes partículas e vórtice (Ferrante e Elghobashi, 2003).

Assim, resumindo o exposto acima tem-se que: partículas pequenas mantêm-se nos vórtices, com suas trajetórias alinhadas com as trajetórias dos elementos de fluido, mas com inércia maior. Desta forma as estruturas turbinholares mantêm sua vorticidade inicial por um tempo maior. *Clusters* de partículas, escapam das estruturas turbinholares. O arraste da partícula cria um torque no fluido, contrário à rotação do vórtice, aumentando a taxa de decaimento de vorticidade. Assim, a energia cinética turbulenta diminui.

Fica claro pelo exposto neste capítulo a necessidade de resolver os campos de velocidade e fração de sólidos adequadamente, para que se possa captar as estruturas turbinhôares e formação de *clusters* e *strands*. No que se refere ao modelo de dois fluidos, utilizado na presente tese, há a necessidade de um refino da malha computacional na escala em que estas estruturas ocorrem. Contudo, no que concerne a solução de problemas práticos, a utilização desta metodologia torna-se proibitiva, devido ao grande refino da malha espacial e temporal necessário. Neste caso pode-se utilizar a abordagem da simulação de grandes escalas, **LES**, incluindo o efeito da meso-escala, formação de *clusters* e *strands*, no modelo físico a utilizar (Agrawal, 2000; Agrawal *et al.*, 2001).

Assim, a viscosidade efetiva em simulações de grandes escalas depende da dimensão da malha computacional e da taxa de deformação da macro-escala, com a finalidade de captar processos presentes na escala dissipativa (Smagorinsky, 1963). Desta forma, é natural esperar, quando se trata do escoamento multifásico gás-sólido, que as tensões efetivas e as forças de interação na interface dependam das taxas de deformação da macro escala na fase partícula e gás (Agrawal *et al.*, 2001). Esta abordagem mencionada por Agrawal *et al.* (2001) foi a utilizada em alguns estudos de caso na presente tese, seguindo as indicações apresentadas por Agrawal (2000), contudo utilizando-se de modelo baseado em Smagorinsky (1963).

Neste capítulo foram apresentadas e discutidas as rotas mais aceitas na literatura para a formação de *clusters*. Apresentou-se os mecanismos formadores de *clusters* e *strands*, mais aceita na literatura pesquisada. As relações das estruturas turbinhôares com a formação e destruição de *clusters* e *strands* foram apresentadas e são utilizadas no presente trabalho como ferramentas de análise e caracterização dessas estruturas.

No capítulo que se segue, serão apresentados os modelos utilizados na presente tese e uma descrição do software de simulação numérica CFX-5.6[®], seus modelos e métodos de solução de problemas associados a escoamentos multifásicos gás-sólido.

CAPÍTULO 5

MODELO MATEMÁTICO, NUMÉRICO E ESQUEMA DE DISCRETIZAÇÃO DO SOFTWARE CFX-5.6[®]

Neste capítulo são apresentados os modelos matemáticos para escoamento multifásico gás-sólido utilizados na tese e a estratégia numérica. Apresenta-se ainda uma descrição da abordagem numérica presente no software de simulação CFX-5.6[®] e os modelos implementados pelo autor deste trabalho⁶.

5.1 Introdução

O software de simulação numérica CFX-5.6[®] utiliza a Metodologia de Volumes Finitos baseados em Elementos (EbFVM) (Maliska, 2004), para a solução de problemas de mecânica dos fluidos e transferência de calor. O software utiliza malhas não estruturadas, tetraédricas, hexaédricas, piramidais e prismáticas. Além de resolver as equações de Navier-Stokes, o software possui uma enorme quantidade de modelos para diferentes aplicações, desde modelos turbulentos a modelos em meios porosos, combustão, escoamentos multifásicos, entre outros, permitindo a inclusão de novos modelos ou modificação dos já implementados, utilizando-se de rotinas em linguagem Fortran. Desta forma, permite o teste de diferentes modelos matemáticos em diferentes geometrias, podendo-se assim, realizar estudo paramétrico.

Nos itens que se seguem serão apresentados os modelos utilizados na presente tese, os implementados, a estratégia numérica aplicada, e a forma de discretização encontrada no CFX-5.6[®].

⁶ Os Objetivos do presente trabalho referem-se ao entendimento e análise dos fenômenos associados ao escoamento gás-sólido, por este motivo utiliza-se uma ferramenta computacional para tal. Não é objeto da presente tese desenvolver um código computacional para solução de problemas fluidodinâmicos multifásicos, o que despenderia um tempo considerável.

5.2 Modelos matemáticos para escoamento gás sólido – CFX-5.6®

Os modelos encontrados no CFX-5.6® para solução do escoamento gás sólido, são baseados no modelo Euleriano–Euleriano apresentado no Capítulo 2, item 2.3.1, com algumas modificações que serão apontadas no decorrer do texto. A notação utilizada neste capítulo seguirá a notação genérica sugerida no manual do CFX-5.6® e utilizada por Drew (1983) e Burns (2003). O processo de média utilizado para a derivação das equações é baseado na média *ensemble* apresentada por Drew (1983), por considerar-se a mais geral do ponto de vista teórico (Burns, 2003).

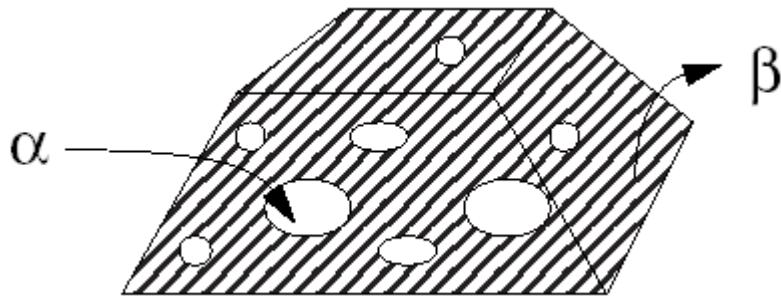


Figura 14. Volume elementar para cada uma das fases, α e β .

Considera-se a hipótese do contínuo interpenetrado, como apresentado no Capítulo 2. As fases estão misturadas em uma escala maior do que a molecular, mas menor que a escala que se deseja resolver. Desta forma, assume-se que cada fase está presente em cada volume de controle com sua respectiva fração r_α , igual ao volume ocupado por cada uma das fases, como apresentado na Figura 14. Tem-se desta forma que V_c é o volume da célula, $\alpha = r_\alpha V_c$ representa o volume ocupado pela fase α e $\beta = r_\beta V_c$, o volume ocupado pela fase β . Assim, saindo da equação de transporte para um escalar Φ genérico, e aplicando o processo de média e o teorema de Gauss, chega-se a equação de transporte multifásico para um escalar genérico dada por

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_\alpha \rho_\alpha \Phi_\alpha) + \operatorname{div}(r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha \Phi_\alpha - r_\alpha \Gamma_\alpha \nabla \Phi_\alpha) = r_\alpha S_\alpha + T_\alpha. \quad (5.0)$$

O termo extra, T_α , é associado a transferência de massa na interface e deve ser modelado empiricamente. Note que a Equação (5.0) é similar à equação do balanço de massa para uma fase, com exceção do termo de interface. O primeiro termo do lado direito da Equação (5.0) representa o termo fonte. O primeiro termo à esquerda representa o acúmulo, o

segundo e terceiro o transporte advectivo e difusivo respectivamente. A equação para a quantidade de movimento, aplicando o mesmo procedimento toma a seguinte forma

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha^i) + \frac{\partial}{\partial x^j}(r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha^j U_\alpha^i) = -r_\alpha \frac{\partial P_\alpha}{\partial x^i} + \frac{\partial}{\partial x^j}(r_\alpha (\tau_{t\alpha}^{ij} + \tau_{\alpha}^{ij})) + r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{g} + \mathbf{M}_\alpha, \quad (5.1)$$

onde $\tau_{t\alpha}^{ij}$ representa as tensões turbulentas, τ_α^{ij} as tensões viscosas, e \mathbf{M}_α as forças interfaciais. As forças interfaciais podem ser modeladas para o caso de um leito fluidizado como devidas ao arraste, dada por

$$\mathbf{M}_\alpha = \sum_\beta c_{\alpha\beta}^{(d)} (U_\beta^i - U_\alpha^i), \quad (5.2)$$

onde $c_{\alpha\beta}^{(d)}$ é o coeficiente de arraste na interface. A equação da continuidade toma a seguinte forma

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_\alpha \rho_\alpha) + \operatorname{div}(r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{U}_\alpha) = \sum_{\beta=1}^{N_p} (\Gamma_{\alpha\beta} - \Gamma_{\beta\alpha}), \quad (5.3)$$

onde $\sum_{\beta=1}^{N_p} (\Gamma_{\alpha\beta} - \Gamma_{\beta\alpha})$ é o fluxo de massa por unidade de volume entre as fases, $\Gamma_{\alpha\beta}$ é o fluxo

de massa por unidade de volume da fase β para fase α e N_p é o número de fases.

Contando o número de variáveis e o número de equações incompressíveis, N_p , e assumindo que todos os campos são distintos tem-se $5N_p$ variáveis tal que:

$$(U_\alpha, V_\alpha, W_\alpha, P_\alpha, r_\alpha), 1 \leq \alpha \leq N_p. \quad (5.4)$$

Na equação (5.1) necessita-se especificar a pressão em cada uma das fases e os termos de interface. Considerando o modelo A, as pressões em ambas as fases são iguais, não necessitando qualquer modelo para a pressão do sólido, $P_f = P_p$. O modelo A é conveniente numericamente, pois facilita a solução por métodos segregados, contudo as equações resultantes não são hiperbólicas, podendo gerar resultados não consistentes fisicamente, Gidaspow (1994).

O modelo B o gradiente de pressão está incluído de forma completa apenas na equação da quantidade de movimento para a fase gás, e a função arrasto é modificada para satisfazer o princípio de Archimedes e a relação de mínima fluidização modificando os termos de força de campo da seguinte forma:

$$\rho_\alpha g - \nabla P_\alpha \quad \text{para fase contínua}, \quad (5.5)$$

e

$$r_\beta (\rho_\beta - \rho_\alpha) g \quad \text{para fase dispersa}. \quad (5.6)$$

Este modelo é preferido por muitos autores por ter a vantagem de garantir a hiperbolidez das equações. Quando do uso do modelo B, o coeficiente de arraste deve ser modificado para que se obtenha a queda de pressão correta em escoamentos gás sólido modificando a Equação (5.2) da seguinte forma segundo Burns (2003)

$$c_{\alpha\beta}^{(d)}|_B = \left(c_{\alpha\beta}^{(d)}\right)_A / r_\alpha, \quad \alpha \Rightarrow \text{fase contínua.} \quad (5.7)$$

O arraste para uma partícula correlacionada em termos do coeficiente de arraste é:

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} C_D \rho_f A_p |\mathbf{U}_f - \mathbf{U}_p| (\mathbf{U}_f - \mathbf{U}_p) \quad (5.8)$$

Desta forma, para que a Equação (5.8) possa ser aplicada às equações Eulerianas descritas acima, necessita-se relacionar $c_{\alpha\beta}^{(d)}$ com C_D . O arraste exercido por uma única partícula sobre a fase continua é descrita pela equação

$$\mathbf{D}_p = \frac{1}{2} C_D \rho_\alpha A_p |\mathbf{U}_\beta - \mathbf{U}_\alpha| (\mathbf{U}_\beta - \mathbf{U}_\alpha) \quad (5.9)$$

e o arraste total exercido por unidade de volume sobre a fase contínua

$$\mathbf{D}_{\alpha\beta} = n_p \mathbf{D}_p = \frac{3}{4} \frac{C_D}{d_p} r_\beta \rho_\alpha |\mathbf{U}_\beta - \mathbf{U}_\alpha| (\mathbf{U}_\beta - \mathbf{U}_\alpha) \quad (5.10)$$

Comparando com $\mathbf{D}_{\alpha\beta} = c_{\alpha\beta}^{(d)} (\mathbf{U}_\beta - \mathbf{U}_\alpha)$, obtém-se finalmente a equação para o coeficiente de arraste para escoamentos gás sólido

$$c_{\alpha\beta}^{(d)} = \frac{3}{4} \frac{C_D}{d_p} r_\beta \rho_\alpha |\mathbf{U}_\beta - \mathbf{U}_\alpha|. \quad (5.11)$$

As correlações para C_D , são baseadas no trabalho de Richardson e Zaki (1954), como apresentado no Capítulo 2. Wen e Yu (1966) melhoraram a correlação dando como resultado

$$C_D = \alpha_c^{-1.65} \min\left(\frac{24}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.687}), 0.44\right), \quad (5.12)$$

tendo bons resultados para fração de gás da ordem de 0,2 (Burns, 2003). Para suspensões densas a correlação mais utilizada é a de Ergun

$$c_{\alpha\beta} = 150 \frac{\alpha_d^2 \mu_c}{\alpha_c d_p^2} + 1,75 \frac{\alpha_c \rho_c |\mathbf{U}_c - \mathbf{U}_d|}{d_p}. \quad (5.13)$$

Gidaspow (1994) utiliza a correlação descrita pela Equação (5.12) para suspensões diluídas, $\alpha_d < 0,2$ e a Equação 5.14 para suspensões densas, $\alpha_d > 0,2$.

A pressão da fase sólida pode ser calculada introduzindo uma equação para a pressão em função da fração de sólidos como descrito em Gidaspow (1994), contudo necessita-se de

modificação na expressão da quantidade de movimento para a fase sólido, o que produz a seguinte equação

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_s \rho_s U_s^i) + \frac{\partial}{\partial x^j} (r_s \rho_s U_s^j U_s^i) = -r_s \frac{\partial P_f}{\partial x^i} + \frac{\partial P_s}{\partial x^i} + \frac{\partial}{\partial x^j} (r_s \tau_s^{ij}) + r_s \rho_s \mathbf{g} + \mathbf{M}_s, \quad (5.14)$$

com a pressão de sólidos modelada empiricamente por

$$\nabla P_s = G(r_s) \nabla r_s, \quad G(r_s) = \frac{\partial P_s}{\partial r_s}. \quad (5.15)$$

O módulo de elasticidade generalizado, $G(r_s)$, é modelado por

$$G(r_s) = G_0 \exp(-c(r_s - r_{\max})), \quad (5.16)$$

onde r_{\max} é o parâmetro de máxima compactação, assumindo valores entre 0,38 a 0,637, c é o módulo de compactação, variando de 20 a 600, e G_0 o módulo de elasticidade de referência, assumindo o valor de 1 Pa. Este conjunto de equações, quando usado com a Equação (5.13), resulta em muito bons resultados para leitos fluidizados borbulhantes, (Burns 2003). A Equação (5.15) tem como função afastar as partículas, quando estas aproximam-se do máximo de compactação, que é o que se presume ocorrer fisicamente.

Nos itens que se seguem serão apresentados os modelos utilizados na presente tese, os implementados, a estratégia numérica aplicada e a forma de discretização encontrada no CFX-5.6®.

5.3 Equações discretizadas – CFX-5.6®

As equações de balanço de massa e quantidade de movimento, ou quais sejam necessárias, necessitam ser discretizadas, para que possam ser resolvidas. A discretização do domínio espacial no método de volumes finitos é realizada utilizando-se uma malha, de forma que as propriedades sejam conservadas.

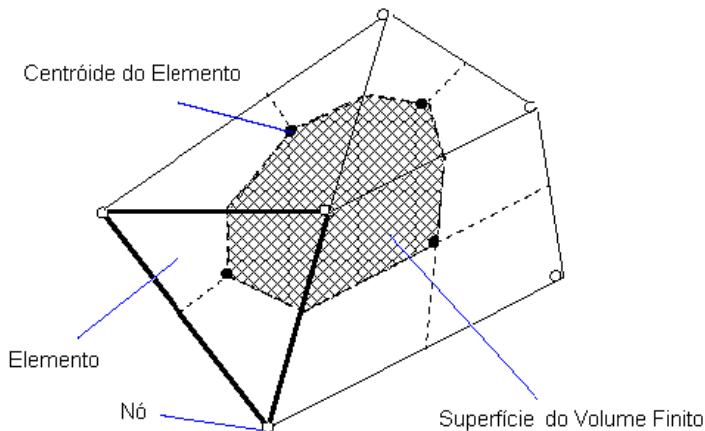


Figura 15. Superfície de um volume finito.

A Figura 15 apresenta o volume de controle elementar e os sub-volumes de controle para o método EbFVM. As variáveis são armazenadas nos vértices dos elementos e cada um dos elementos é sub-dividido em sub-volumes de controle, um para cada vértice, ligando o centróide do elemento com os centróides das faces dos elementos. Os volumes de controle são construídos ao redor dos vértices como uniões de sub-volumes de controle.

Desta forma, considere um elemento da malha como mostrado na Figura 16. Os fluxos das superfícies devem ser representados de forma discreta nos pontos de integração. Os pontos de integração, ip_n , (ip_1, ip_2, ip_3), estão localizados no centro de cada segmento de superfície em um elemento tridimensional ao redor de um volume finito. Assim, a forma discreta das equações de movimento para escoamento gás-sólido, assumindo as densidades constantes e regime permanente para facilitar a exposição, toma a seguinte forma

$$\frac{\rho_\alpha V_i}{\delta t} \left((r_\alpha U_\alpha^k)_i^{n+1} - (r_\alpha U_\alpha^k)_i^n \right) + (\mathbf{A}_\alpha^k)_{ij} (U_\alpha^k)_j^{n+1} = -r_{\alpha,ip}^{n+1} \sum_{ip} (PA^k)_{ip}^{n+1} + V_i \sum_\beta c_{\alpha\beta}^{n+1} (U_\beta^k - U_\alpha^k)_i^{n+1}. \quad (5.17)$$

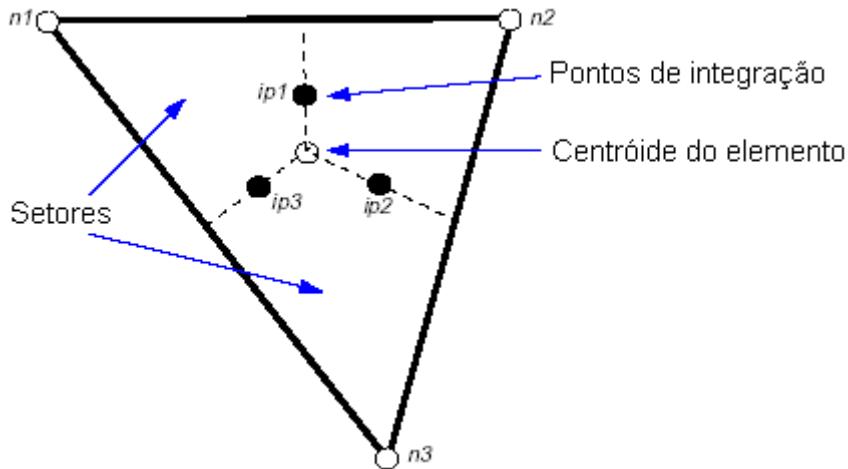


Figura 16. Elemento isolado da malha.

\mathbf{A}_α^k é a matriz difusão-advecção para os componentes de velocidade U_α^k . A forma linearizada da equação (5.18) tem a seguinte forma:

$$\frac{r_\alpha^n \rho_\alpha V_i}{\delta t} \left((U_\alpha^k)_i^{n+1} - (U_\alpha^k)_i^n \right) + (\mathbf{A}_\alpha^k)_{ij} (U_\alpha^k)_j^{n+1} = -r_{\alpha,i}^n \sum_{ip} (P_{ip} A_{ip}^k)_{ip}^{n+1} + V_i \sum_\beta c_{\alpha\beta}^n (U_\beta^k - U_\alpha^k)_i^{n+1} \quad (5.18)$$

A velocidade no termo de derivada temporal, o termo de difusão e advecção, e os termos de arraste na interface são tratados implicitamente, incluindo a pressão no termo de gradiente de pressão, garantindo desta forma a diagonal dominante. A equação da continuidade é escrita da seguinte forma

$$\frac{r_\alpha^n V_i}{\delta t} \left((r_{\alpha i}^{n+1}) - (r_{\alpha i}^n) \right) + \sum_{ip} \rho_\alpha (r_{\alpha,ip} U_{\alpha,ip} \cdot \mathbf{A}_{ip})^{n+1} = 0, \quad (5.19)$$

sendo uma equação de advecção pura para a fração de sólidos, necessitando integração nos pontos para então fechar as equações. As velocidades nos pontos de integração são encontradas utilizando-se interpolação Rhie-Chow, que relaciona as velocidades nos pontos de integração, ip, a média aritmética dos campos de velocidade, mais um termo de redistribuição de pressão descrito pela equação

$$(U_{\alpha,ip} - \overline{U_{\alpha,ip}^k}) = d_{\alpha,ip} \left(\left(\overline{\frac{\partial P}{\partial x}} \right) - \left(\frac{\partial P}{\partial x} \right) \right)_{ip}. \quad (5.20)$$

A equação (5.20) foi derivada resolvendo equações de quantidade de movimento aproximadas nos pontos de integração, ip's (Burns, 2003). A matriz gerada para duas fases é apresentada na Figura 17.

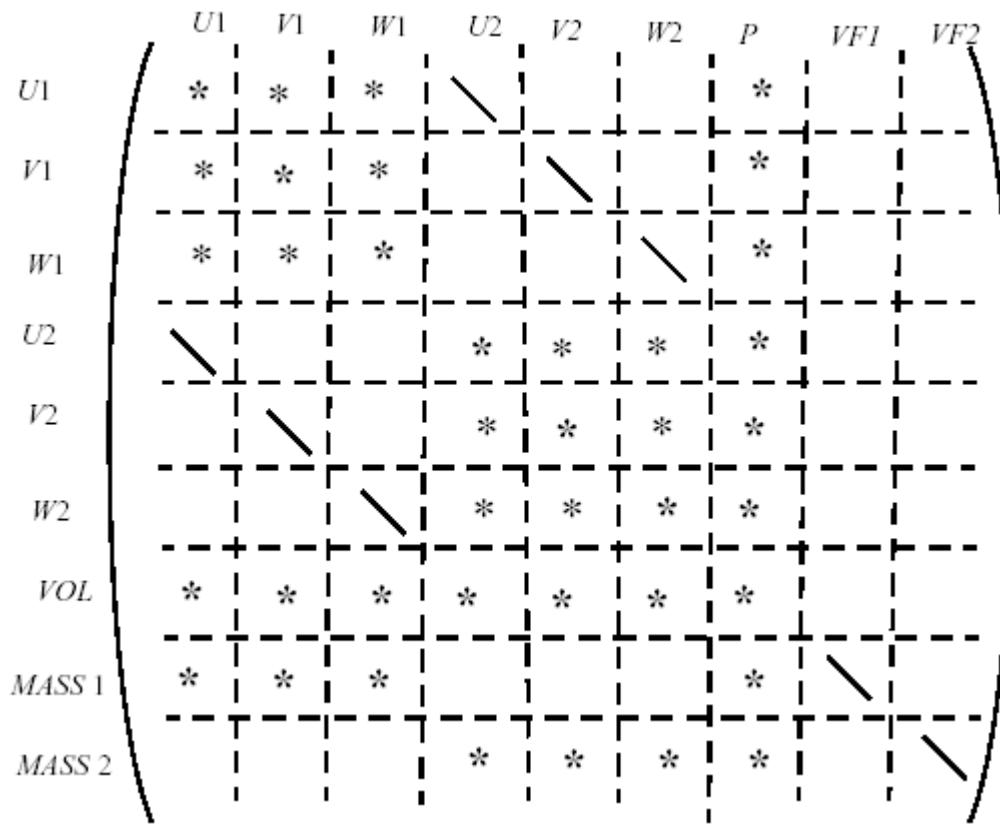


Figura 17. Matriz para duas fases onde (*) significa o vizinho mais próximo acoplamento da matriz esparsa (opcional) e (\) representa a matriz esparsa diagonalmente acoplada.

Tabela 2. Modelo matemático padrão para escoamento gás sólido utilizado na tese.

Equações da continuidade
$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \phi_g) + \nabla \cdot (\rho_g \phi_g \mathbf{U}_g) = 0$
$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s \phi_s) + \nabla \cdot (\rho_s \phi_s \mathbf{U}_s) = 0$
Equações da quantidade de movimento
$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \phi_g \mathbf{U}_g) + \nabla \cdot (\rho_g \phi_g \mathbf{U}_g \mathbf{U}_g) = -\nabla P_g + \nabla \cdot [\boldsymbol{\tau}_g] + \phi_g \rho_g \mathbf{g} + \beta(\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_g)$
$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s \phi_s \mathbf{U}_s) + \nabla \cdot (\rho_s \phi_s \mathbf{U}_s \mathbf{U}_s) = -\nabla P_s + \nabla \cdot [\boldsymbol{\tau}_s] + \phi_s \rho_s \mathbf{g} + \beta(\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_s)$
Tensões
$[\boldsymbol{\tau}_g] = \mu_{g,e} \phi_g [\nabla \mathbf{U}_g + \nabla \mathbf{U}_g^T] - \frac{2}{3} \mu_{g,e} \phi_g [\nabla \cdot \mathbf{U}_g] \bar{\mathbf{I}}$
$[\boldsymbol{\tau}_s] = \mu_{s,e} \phi_s [\nabla \mathbf{U}_s + \nabla \mathbf{U}_s^T] - \frac{2}{3} \mu_{s,e} \phi_s [\nabla \cdot \mathbf{U}_s] \bar{\mathbf{I}}$
Pressão da fase sólida (Gidaspow, 1994)
$\nabla P_s = G(\phi_s) \nabla \phi_s, \quad G(r_s) = \frac{\partial P_s}{\partial \phi_s}, \quad G(\phi_s) = G_0 \exp(-c(\phi_s - \phi_{\max})),$
$\phi_{\max} = 0,637, \quad G_0 = 1 \text{ Pa}, \quad c = 600$
Coeficiente de arraste na interface gás-sólido (Gidaspow. 1994)
$\beta_{g,s} = \frac{3}{4} C_D \frac{\rho_g \phi_s \mathbf{U}_g - \mathbf{U}_s }{d_p} \phi_g^{-1,65}, \quad \phi_g \geq 0,8$
$\beta_{g,s} = \frac{3}{4} C_D \frac{150 \phi_s^2 \mu_g}{d_p^2 \phi_g} + 1,75 \frac{\rho_g \phi_s \mathbf{U}_g - \mathbf{U}_s }{\phi_g d_p}, \quad \phi_g < 0,8$
$C_D = \frac{24}{Re} (1 + 0,15 Re^{0,687}) \quad Re < 1000, \quad C_D = 0,44 \quad Re \geq 1000.$
$Re = \frac{\rho_g \phi_g \mathbf{U}_g - \mathbf{U}_s d_p}{\mu_g}$

Desta forma gerando um sistema 9x9, onde as duas últimas equações, uma para cada uma das frações de fase são desacopladas, produzindo assim um sistema 7x7 para as velocidades e a pressão. O problema de desacoplar as equações para as frações de cada uma

das fases, gera um problema de conservação. A seguir apresentam-se as equações base, em forma de tabela, utilizadas na presente tese.

O modelo apresentado na Tabela 2 é o modelo padrão, onde a viscosidade de ambas as fases é mantida constante. Alguns estudos de caso, utilizaram modelo sub-malha para a viscosidade da fase gás e modelo para viscosidade do sólido proposto por Huilin e Gidaspow (2003).

Outros estudos de caso apresentam modelo sub-malha, aplicado pelo autor da presente tese, para a fase sólido. Estes modelos serão apresentados abaixo, na Tabela 3. As condições de contorno serão apresentadas nos itens associados a cada um dos estudos de caso no capítulo que se segue.

Tabela 3. Modelos para viscosidade turbulenta da fase gás e da fase sólido.

Modelo viscosidade sólido, Huilin e Gidaspow (2003)
$\mu_{s,e} = 0,165\phi_s^{1/3}g_0, \quad g_0 = \left[1 - \left(\frac{\phi_s}{\phi_{\max}} \right)^{1/3} \right]^{-1} \quad (\text{T3.1 a,b})$
Utilizado em conjunto com modelo sub-malha proposto por Smagorinsky (1963) :
$\mu_{g,e} = \mu_g + \rho_g (0,1\Delta)^2 (\boldsymbol{\tau}_g \cdot \boldsymbol{\tau}_g)^{1/2}, \quad \Delta = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3} \quad (\text{T3.2 a,b})$
Modelagem sub-malha sugerida pelo autor da presente tese
Viscosidade do gás, segue o modelo de sub-malha proposto por Smagorinsky (1963):
$\mu_{g,e} = \mu_g + \rho_g (0,1\Delta)^2 (\boldsymbol{\tau}_g \cdot \boldsymbol{\tau}_g)^{1/2}, \quad \Delta = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3} \quad (\text{T3.3 a,b})$
Modelo sub-malha para viscosidade fase sólido:
$\mu_{s,e} = \mu_s + \rho_s (0,1\Delta)^2 (\boldsymbol{\tau}_s \cdot \boldsymbol{\tau}_s)^{1/2}, \quad \Delta = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3} \quad (\text{T3.4 a,b})$

Nota-se que o modelo sub-malha proposto para a fase sólido pelo presente autor, segue o mesmo conceito proposto por Smagorinsky (1963). Esta forma de modelar a viscosidade do sólido para o modelo de dois fluidos, não foi apresentada na literatura até o momento⁷. A fundamentação física para o modelo em questão está baseada na mesma fundamentação associada ao modelo de Smagorinsky (1963) apresentada no Capítulo 3 e 4.

⁷ Observação importante, pois há muitos trabalhos que podem ser encontrados na literatura associados ao escoamento gás-sólido, onde um modelo sub-malha foi utilizado para descrever os mecanismos turbulentos da fase gás, como em Ibsen (2003) e Gidaspow (2003). Contudo, não existe até o momento do desenvolvimento do presente trabalho, qualquer trabalho que tenha modelado e simulado um modelo sub-malha, baseado em Smagorinsky (1963), para a fase sólido no modelo de dois fluidos (modelo Euleriano-Euleriano).

O modelo descrito na Tabela 3, para a viscosidade do sólido, traz para escala de discretização da malha as informações filtradas pelo modelo de dois fluidos e que não foram modeladas no que diz respeito à viscosidade. Vale lembrar que o modelo de dois fluidos advém de um processo de média, aparecendo termos que devem ser modelados. Um deles é a forma do tensor tensão. O modelo apresentado apenas sugere a modelação da viscosidade turbulenta para a fase sólido, seguindo o modelo tradicional de Smagorinsky, trazendo assim para a escala do modelo de dois fluidos, informações associadas a flutuação das velocidades das partículas, utilizando exatamente a mesma analogia utilizada para modelar a turbulência da fase contínua. Agrawal (2000) sugere este tipo de abordagem aqui utilizada, com apenas uma diferença. Agrawal (2000) sugere que sejam acrescentados além do modelo para viscosidade, um modelo sub-malha para o termo de arraste. Esta sugestão não foi seguida, pois entendemos que o arraste utilizado no modelo de dois fluidos é um modelo com base experimental, e realizado para uma esfera num meio fluido infinito, e a correção associada a turbulência já encontra-se na correlação. Ainda mais, o termo de arraste aparece como um modelo de fechamento do modelo de dois fluidos, da mesma forma que a viscosidade turbulenta aparece como modelo de fechamento para turbulência, incorporando assim a influencia “filtrada”, no termo de arraste, não necessitando de ajuste para tal.

Outro aspecto importante a ser ressaltado refere-se a utilização do modelo tradicional de Smagorinsky para a fase sólido. Agrawal (2000) em seu estudo numérico encontra que a viscosidade da fase sólido relaciona-se inversamente com a taxa de deformação, enquanto o modelo utilizado no presente trabalho utiliza-se da dependência direta. O principal objetivo neste caso é observar a performance do modelo sub-malha em prever o comportamento fluido dinâmico do escoamento gás-sólido, bem como apontar suas deficiências.

Em todas as simulações realizadas e apresentadas no Capítulo 6 utilizou-se como critério de convergência o valor do resíduo máximo. O resíduo máximo para as velocidades e para o balanço de massa foi estipulado com o valor de 1×10^{-6} . A exceção do primeiro estudo de caso, todos foram resolvidos em paralelo em três Itanium Workstation ZX 2000 com 2 gigabytes de RAM, 900 MHZ com processador de 64 bits. O tempo de processamento variou de 2 a 3 meses para cada um dos estudos de caso.

Neste capítulo foram apresentadas as equações discretas utilizadas no CFX-5.6®, que utiliza a metodologia de Volumes Finitos baseados em Elementos (EbFVM) (Maliska, 2004). Os modelos utilizados na presente tese os desenvolvidos e implementados apresentam-se na Tabela 2 e 3. O modelo padrão foi utilizado com viscosidades constantes, tanto para o gás como para o sólido, salvo nos casos onde estiver indicado. No capítulo a seguir apresentam-se os resultados e estudos de caso, bem como discussão pertinente.

CAPÍTULO 6

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo são apresentados resultados para escoamento gás-sólido em um leito fluidizado, comparando-os com dados experimentais da literatura, discutindo os fenômenos físicos relevantes associados à formação e destruição de *clusters* e outros importantes aspectos.

6.1 Introdução

Uma série de trabalhos utilizando o modelo de dois fluidos para resolver o escoamento gás-sólido em um leito fluidizado foram apresentados na última década (Ver, por exemplo, Gidaspow (1994), Jackson (2000), van Wachem (2000), Agrawal (2000), Agrawal *et al.* (2001), e Cabezaz-Gómez (2003), dentre outros). As abordagens de modelagem são variadas, sendo que a maioria dos autores utiliza-se da Teoria Cinética Granular (**TCG**) para representar o escoamento gás-sólido em um leito fluidizado. Infelizmente a maioria dos autores não realiza refino de malha adequado para que a **TCG** possa influenciar nos resultados (van Wachem, 2000), pois a presença de *clusters* influencia sobremaneira os resultados. Segundo van Wachem (2000), a malha computacional deveria conter alguns poucos diâmetros de partículas para se obter resultados sensíveis, quando da utilização da **TCG**.

Nos itens que se seguem serão apresentados resultados de estudo numérico utilizando a abordagem proposta por Agrawal (2000), Agrawal *et al.* (2001) e Zhang e VanderHeyden (2001). A abordagem proposta primeiramente por Agrawal (2000), refere-se a simulação de uma pequena região de um leito fluidizado, realizando refino de malha computacional adequado para captar as estruturas encontradas na chamada meso-escala, *clusters* e *strands*, discutidas anteriormente. Agrawal (2000) realizou extenso estudo de sensibilidade, utilizando o modelo apresentado na Tabela 2, em conjunto com a teoria cinética granular. A alta resolução utilizada no que se refere ao refino da malha permitiu a Agrawal (2000) estabelecer que a utilização do modelo da **TCG** não representa qualquer modificação significativa nos resultados. Vale lembrar que a resolução de malha utilizada por Agrawal (2000), contempla

de 10 a 2 partículas (0,016 cm de resolução espacial) para cada volume elementar, tendo em vista que este autor realizou refino em uma pequena região do reator. Outra conclusão que esse trabalho revela é o incremento das viscosidades efetivas de ambas as fases e das tensões normais na partícula, quando trabalha-se na escala representada pelo refino de malha utilizado. Demonstra a necessidade de desenvolver um modelo sub-malha que leve em conta as instabilidades encontradas nesta escala. Finalmente conclui que não há a necessidade da utilização da **TCG** quando da utilização de malhas grosseiras, sendo que, neste caso, estas não são capazes de captar os efeitos da meso-escala.

Zhang e van der Heyden (2001), seguindo as indicações apresentadas por Agrawal (2000), realizaram estudo numérico utilizando modelo fluidodinâmico simplificado, mas com refino de malha suficiente para captar as estruturas encontradas na meso-escala. Estes autores não utilizaram nenhum modelo de turbulência, tão pouco o modelo da **TCG**. Compararam os resultados de suas simulações com o trabalho experimental de van den Moortel *et al.* (1998), com razoável concordância com os resultados experimentais.

Na seqüência apresentaremos estudos de caso utilizando a metodologia sugerida pelos citados autores, tomando como caso base o trabalho experimental de van den Moortel *et al.* (1998) e a resolução da malha computacional apresentada por Zhang e van der Heyden (2001).

6.2 Descrição do caso base e caracterização qualitativa de *clusters*

Este primeiro estudo de caso tem como objetivo principal, observar a capacidade do modelo de dois fluidos de captar as estruturas encontradas na meso-escala, e caracterizá-las qualitativamente através do software Imago®.

O reator utilizado nas simulações é similar ao utilizado para os experimentos de van den Moortel *et al.* (1998), apresentando uma seção quadrada de 20x20 cm² e com altura de 200 cm. van den Moortel *et al.* (1998) utilizaram partículas com um diâmetro médio de 120 µm, com desvio padrão de 20 µm, sendo que os parâmetros característicos são apresentados na Tabela 4. O regime de escoamento é turbulento, com $Re_f = 14600$, para uma velocidade superficial de entrada de gás de 1 m/s. Os autores reportam a presença de *clusters*. A técnica de experimentação utilizada é o Velocímetro Laser Doppler. Os resultados apresentados em maior número pelos citados autores, são para o centro da coluna a 1 metro de altura.

Neste primeiro estudo de caso não preocupou-se em comparar os resultados quantitativamente. O objetivo principal é a apresentação qualitativa de resultados, no que concerne à capacidade de captar *clusters*. O software utilizado neste caso foi o CFX-4.3,

utilizando a viscosidade do gás constante, e modelo apresentado na Tabela 2. Contudo utilizou-se a **TCG** implementada no CFX-4.3, apresentada no Capítulo 2. Sendo assim a viscosidade do sólido e pressão dos sólidos são corrigidas utilizando o modelo de **TCG**, onde assume-se que a energia granular está em estado estacionário e é dissipada localmente, negligenciando os termos difusivos e advectivos (van Wachem, 2000).

A resolução de malha espacial utilizada foi de $0,645 \times 0,645 \times 1,33 \text{ cm}^3$, o passo de tempo utilizado foi de 1×10^{-4} segundos, resolvendo o transiente real. As simulações foram realizadas para este caso até 0,9 segundos de tempo real. Importante ressaltar que a resolução da malha computacional utilizada neste primeiro caso é exatamente a mesma resolução utilizada por Zhang e van der Heyden (2001); no entanto, estes autores não utilizaram a **TCG**, como mencionado anteriormente.

Tabela 4. Características das partículas sólidas utilizadas nos experimentos.

\bar{d}_p (μm)	σ_{d_p} (μm)	U_g (m/s)	U_t (m/s)	ρ_s (kg/m^3)	U_{mf} (m/s)
120	20	1	0,71	2400	0,0667

As principais diferenças entre este primeiro estudo de caso e o trabalho experimental de van den Moortel *et al.* (1998), referem-se à dimensão da partícula, e a geometria do reator. Neste estudo de caso utilizou-se partículas de 75 μm e geometria circular, com o mesmo diâmetro hidráulico experimental.

Neste caso em particular estas diferenças não são significativas, pois o objetivo é apenas um estudo qualitativo. As diferenças em relação ao estudo numérico de Zhang e van der Heyden (2001), referem-se as mesmas citadas anteriormente, com uma diferença significativa nas condições de contorno. Zhang e van der Heyden (2001) utilizaram condição nas paredes do reator de escorregamento livre para a fase sólida e sem escorregamento para a fase gás, e impuseram igualdade de fluxo de sólido na entrada e saída do reator. Neste estudo de caso utilizou-se a condição de parede sem escorregamento para ambas as fases (Ver Apêndice B), e não foi imposta a condição de igualdade de fluxo. Deixamos a saída com condição de pressão, comumente utilizada pela comunidade.

Os resultados para este caso são apresentados na Figura 18, onde é possível observar a formação de aglomerados de partículas, região com tonalidade violeta, definido aqui como o valor da fração de sólidos próxima à da compactação máxima, 0,63.

Nesta figura é possível observar a formação de estruturas alongadas com alta concentração de partículas, gerando um “encapsulamento” do gás (região de tonalidade azul).

O *cluster* geralmente está presente em conjunto ou envolto por uma região de gás onde há circulação de sólidos. Neste caso a área para passagem do gás diminui; assim, o gás aumenta sua velocidade forçando os sólidos a escoarem na direção da parede, gerando recirculação de sólidos, fenômeno conhecido como segregação. Parte do sólido de um aglomerado é carregada com o gás gerando assim uma diminuição do volume local de *clusters* até este desaparecer daquele local e ser novamente formado em outro. Outro aspecto qualitativo interessante é a presença de estruturas rotativas, onde observa-se o centro do “vórtice” desprovido de partículas, ou com uma fração de sólidos muito baixa, como sugerido nos Capítulos 3 e 4.

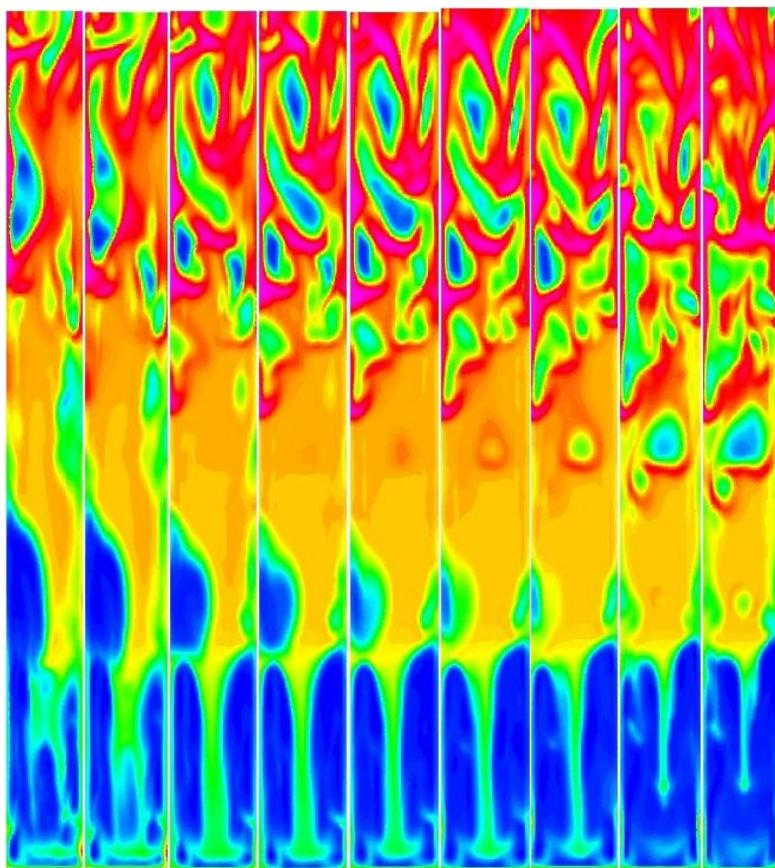


Figura 18. Fração de sólidos instantânea (0,9 s) – corte longitudinal central (figura central) e cortes com espaçamento a partir do centro de 1 cm do centro. Tonalidade azulada representa gás e violeta o máximo de compactação (*clusters*).

Observa-se ainda que o escoamento não está plenamente desenvolvido, pois ainda não completou nenhum ciclo, tendo em vista que o reator tem altura de 2 m e o gás entra a 1 m/s e os resultados apresentados na Figura 18 são para 0,9 segundos; contudo, é possível observar características marcantes no que se refere aos fenômenos encontrados em um leito fluidizado.

A comparação qualitativa apresentada na Figura 19, corrobora os resultados experimentais de Kuroki e Horio (1994) (geometria cilíndrica), onde estes autores reportam

dimensão característica de *cluster* em torno de 10 mm. Lackermeier *et al.* (2001), utilizando técnica semelhante à reportada por Kuroki e Horio (1994), reportam dimensões características variando de 19 a 85 mm e velocidades de sólido superiores à velocidade superficial de entrada no reator.

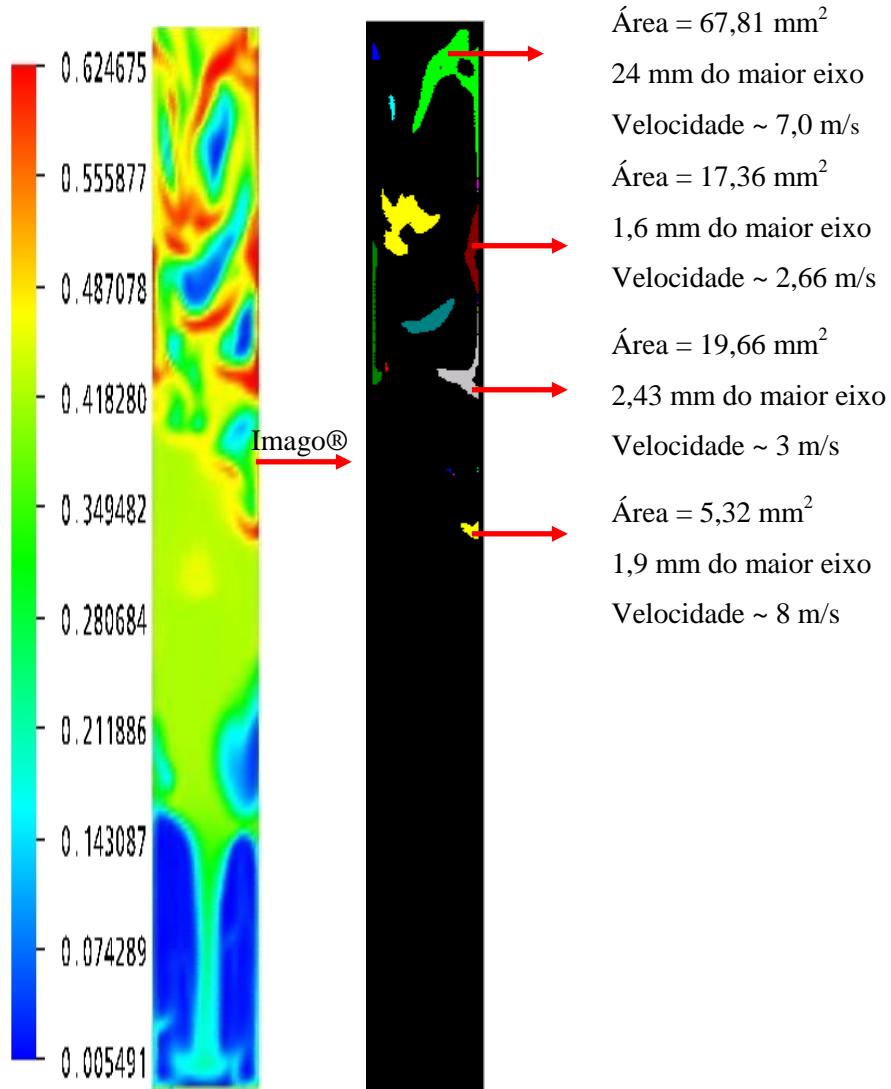


Figura 19. Área e maior dimensão dos *clusters* caracterizadas preliminarmente utilizando Imago®, na região central do reator no tempo 0,9 segundos. As diferentes cores, na última figura, após a binarização da imagem, representam diferentes *clusters*. A escala a esquerda são valores de fração de sólido.

As velocidades instantâneas de sólidos deste trabalho são maiores que a velocidade superficial do gás na entrada como é possível observar nos resultados apresentados na Figura 19. As comparações qualitativas indicam que o modelo proposto, resolvido com o refino temporal e espacial descritos é capaz de representar qualitativamente as estruturas encontradas na meso-escala, *clusters* e caminhos preferenciais.

As condições experimentais utilizadas por Kuroki e Horio (1994) são muito semelhantes às utilizadas no presente estudo de caso, inclusive quanto ao diâmetro da

partícula de 75 μm . A boa concordância qualitativa é importante pois indica que os fenômenos fundamentais associados ao escoamento gás-sólido podem ser captados pelo conjunto de equações do modelo de dois fluidos, quando este é resolvido nas escalas espacial e temporal adequadas.

O software de análise de imagens, Imago[®], mostrou-se bastante útil, prestando-se para análise das dimensões características dos *clusters*. Contudo, a análise deveria ser tridimensional, pois a natureza destas estruturas é tridimensional, mas o software não está capacitado para fazer análise tridimensional. Como temos imagens de cada uma das seções longitudinais, poderia ser realizada uma reconstrução para observar as dimensões características; todavia este tipo de análise torna-se bastante moroso, dificultando assim de realizar tal análise, deixando este trabalho para projetos subsequentes. Ressalta-se, no entanto, a grande importância dada a caracterização de *clusters* na *Technology Vision 2020: The Chemical Industry*, publicado em 1996 e a impossibilidade de realizá-la através de experimentos nos dias de hoje.

6.3 Estudos de caso com comparação quantitativa e qualitativa

No item anterior apresentou-se resultados qualitativos de um primeiro estudo de caso utilizando a TCG para representar a interação entre as partículas. Neste item serão apresentados os estudos de caso associados ao item anterior, contudo são apresentadas comparações com os dados experimentais de van den Moortel *et al.* (1998) e numéricos de Zhang e van der Heyden (2001) e Ibsen (2002). No sub-item discussão serão discutidos aspectos importantes associados aos resultados apresentados e apresentação de análise espectral dos resultados numéricos. As Tabelas 5 e 6 sumarizam os estudos de caso apresentados neste capítulo de forma a facilitar a leitura do texto. Os resultados apresentados a seguir, desde o item 6.3.1 até 6.3.8 referem-se a simulações com diferentes refinamentos de malha e classificações de partícula⁸.

⁸ As observações com relação ao arraste referem-se apenas ao fato de que o arrasto é função também da resolução da malha. O Apêndice A mostra que o arraste no modelo de dois fluidos não é calculado corretamente em regiões diluídas. Agrawal (2000) mostra com seus resultados numéricos que o arraste é função da resolução da malha. Desta forma, as observações realizadas com relação ao arraste estão baseadas apenas em observações associadas aos resultados numéricos da presente tese. Ou seja, resultados são comparados com diferentes diâmetros de partícula e refino de malha o que leva a modificação no arraste observável nos resultados apresentados, mesmo que este não tenha sido objeto de estudo paramétrico o mesmo varia com a resolução da malha computacional e com o diâmetro da partícula sendo este efeito observável nos resultados apresentados.

Tabela 5. Propriedades e modelos utilizados nos estudos de caso.

	dp [μm]	ρ_s	μ_s [kg/ms]	μ_g [kg/ms]	Geometria	C.P	Refino
Experimental	120	2400	-	$1,7 \times 10^{-5}$	B.Q	-	160000
Ibsen (2002)	120	2400	TCG	LES	B.Q	No slip	160000
Ibsen (2002)	120	2400	-	$1,5 \times 10^{-5}$	B.Q	Free slip	160000
Zhang (2001)	120	2400	-	$1,5 \times 10^{-5}$	B.Q	Free slip	160000
Caso 1	75	1250	0,0185	$1,7 \times 10^{-5}$	B.C	No slip	160000
Caso 2	75	1250	0,0185	$1,7 \times 10^{-5}$	B.C	No slip	409600
Caso 3	120	2400	0,0185	$1,7 \times 10^{-5}$	B.C	No slip	160000
Caso 4	120	2400	C.E	LES	B.C	No slip	160000
Caso 5	120	2400	LES	LES	B.C	No slip	160000
Caso 6	75	1250	LES	LES	B.C	No slip	409600
Caso 7	120	2400	0,0185	$1,7 \times 10^{-5}$	B.Q	No slip	160000
Caso 8	120	2400	LES	LES	B.Q	No slip	160000
Caso 9	120	1250	0,0185	$1,7 \times 10^{-5}$	B.Q	No slip	160000
Caso 10	120	1250	LES	LES	B.Q	No slip	160000

C.P – Condição de contorno na parede; B.Q – Base Quadrada; B.C – Base Cilíndrica; C.E – Correlação empírica para viscosidade do sólido proposta por Huilin e Gidaspow (2003), descrita na Tabela 3, Capítulo 5. A densidade da fase gás foi mantida constante para todos os estudos de caso com valor de $1,2 \text{ kg/m}^3$.

Tabela 6. Propriedades e modelos utilizados nos estudos de caso dos itens 6.5.1 e 6.5.2.

	dp [μm]	ρ_s	μ_s [kg/ms]	μ_g [kg/ms]	Geometria	C.P	Refino
Experimental	520	2620	0,509	$1,75 \times 10^{-5}$	B.C	-	-
Tsuo e Gidaspow(1990)	520	2620	0,509	$1,75 \times 10^{-5}$	B.C – 2D	Free slip	720
Tsuji <i>et al.</i> (1998)	520	2620	-	$1,5 \times 10^{-5}$	B.C – 2D	Free slip	4000
Cabezaz-Gómez (2003)	520	2620	0,509	$1,5 \times 10^{-5}$	B.C – 2D	Free slip	900 e 6534
Item 6.5.1	520	2620	0,509	$1,5 \times 10^{-5}$	B.C – 3D	No Slip	153600
Item 6.5.2	520	2620	LES	LES		No Slip	153600

C.P – Condição de contorno na parede; B.Q – Base Quadrada; B.C – Base Cilíndrica; A densidade da fase gás foi mantida constante para todos os estudos de caso com valor de $1,2 \text{ kg/m}^3$.

6.3.1 Apresentação de resultados: Caso 1

Neste subitem apresenta-se os resultados utilizando-se malha computacional com resolução de $0,625 \times 0,625 \times 1,33 \text{ cm}^3$, geometria cilíndrica tridimensional, como apresentado na Figura 20, com 160.000 volumes. O diâmetro de partícula utilizado nas simulações é de 75 μm a densidade utilizada nas simulações foi de 1250 kg/m^3 , com velocidade superficial do gás de 1 m/s. Inicialmente a coluna está com fração de sólidos de 0,4. O passo de tempo utilizado foi de 1×10^{-3} segundos, e a simulação transcorreu até 10 segundos de tempo real. Utilizou-se o modelo padrão apresentado na Tabela 2, com viscosidade constante para ambas as fases. Para a viscosidade do sólido manteve-se o valor de 0,0185 kg/ms, e para o gás, adotou-se o valor de $1,725 \times 10^{-5}$ kg/ms.

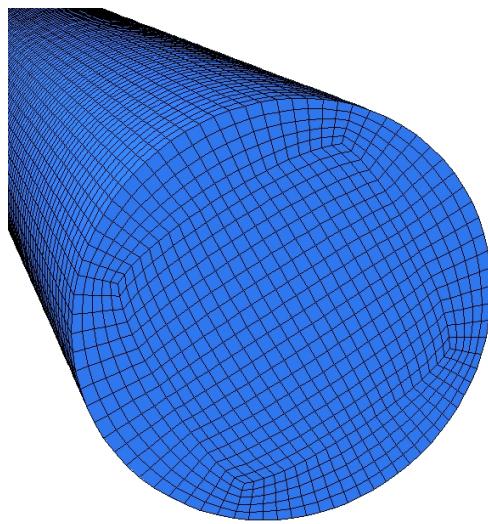


Figura 20. Vista lateral da estrutura da malha computacional utilizada.

A Figura 21 apresenta a evolução temporal do campo de fração de sólidos no centro da coluna, plano XZ, a partir do início da simulação. Inicia-se com a coluna preenchida com sólidos, tendo uma fração de 0,4. Injeta-se na base da coluna uma suspensão de sólidos com perfil de velocidade uniforme. O fluxo de sólidos foi prescrito na entrada com o mesmo valor experimental, $0,21 \text{ kg/m}^2\text{s}$.

No início os sólidos presentes no interior do *riser* são forçados a escoar na direção vertical. Uma onda estratificada de fração de sólidos ascende até perder estabilidade, quando inicia-se a descida de sólido pelas paredes. O gás procura passar através das estruturas gerando regiões com baixa concentração de sólidos. O sólido descendo pelas paredes, encontra uma região onde há equilíbrio entre as forças de arraste e gravitacionais, formando um persistente aglomerado de partículas, que pode ser identificado com um *cluster*, no tempo de 0,87 segundos (Figura 21). Observa-se ainda que na região próxima a parede, onde há

formação de um filme de sólidos, justamente ao lado desta estrutura, encontra-se uma região de relativa baixa concentração de sólidos, representada na figura pela tonalidade azul escuro.

Este “bolsão” de gás, sempre encontrado próximo a uma região de alta concentração de partículas, está em recirculação. O gás encontrando uma região de alta concentração, quando da sua ascendência, arrasta uma parte dos sólidos presentes nesta região formando tiras alongadas, visíveis a partir de 0,87 segundos na Figura 21.

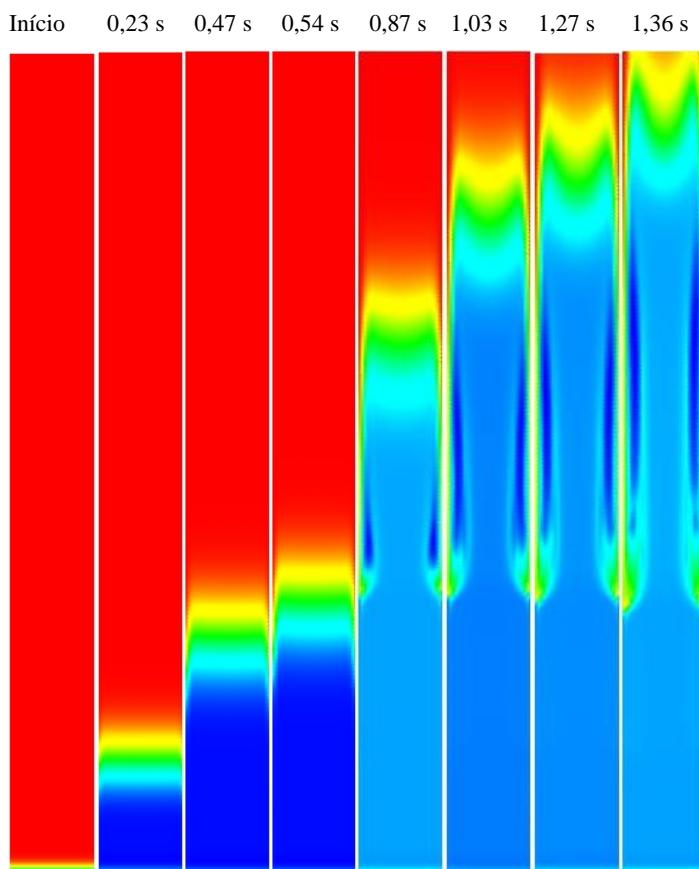


Figura 21. Evolução do campo de fração de sólido no centro da coluna plano, XZ. Da esquerda para direita: 0, 0,23, 0,47, 0,54, 0,87, 1,03, 1,27, 1,36 segundos. Tonalidade avermelhada corresponde a fração de sólidos 0,4 e azul mais escuro 0,1.

A Figura 22 apresenta a velocidade lateral de gás na direção X, para o tempo de 1,27 e 1,36 segundos, correspondente à penúltima e à última figura apresentadas na Figura 21, da esquerda para direita. Observa-se que na região onde há a formação de aglomerados coexistem dois vórtices contra-rotativos e dois vórtices alongados contra-rotativos acima destes. A Figura 22 ainda apresenta a componente da vorticidade na direção perpendicular ao plano XZ, onde é possível observar os vórtices contra rotativos próximos a regiões de alta concentração de sólidos, e tubos alongados na região próxima a estruturas conhecidas como *strands*, como mencionado anteriormente.

Com a passagem do tempo de 1,27 para 1,36 segundos, observa-se um estiramento das estruturas alongadas. As figuras apresentadas são muito representativas dos fenômenos discutidos no Capítulo 4, onde pode-se observar que estes formam-se ainda no início do escoamento, gerando estruturas de aglomerados produzidas pelas estruturas turbinholares existentes neste tipo de escoamento.

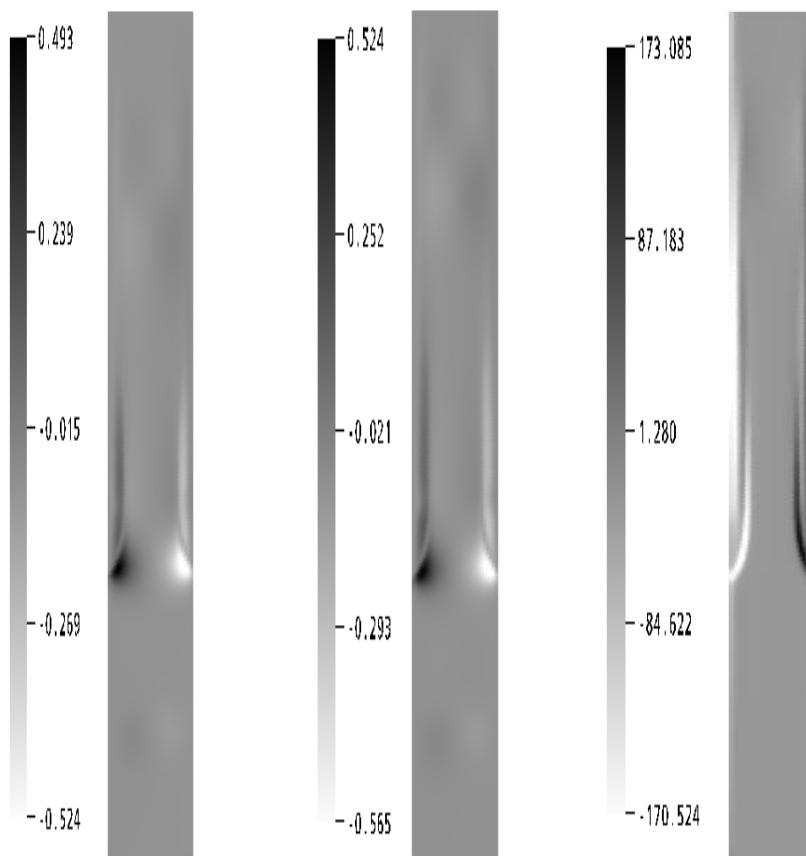


Figura 22. Da esquerda para a direita: campos de velocidade lateral de gás (m/s), para tempos 1.27 e 1.36 segundos, (ver figura 21), e componente da vorticidade (1/s) perpendicular ao plano XZ, para tempo 1.36 segundos.

Nos resultados apresentados nas figuras anteriores, observam-se eventos locais, contudo em pequena quantidade. O escoamento mantém-se simétrico, sem observar-se instabilidades no centro do reator, onde a velocidade do gás é grande, pelo fato deste ter que passar por uma contração gerada pela formação de aglomerados na região da parede. Mais à frente será apresentada comparação com malha mais refinada, onde será possível observar o aparecimento de estruturas mais complexas, não captadas pela presente resolução.

As Figuras 23 e 24 apresentam os campos de fração de sólido, por um período variando de 1,93 a 4,04 segundos. Observa-se que a região de entrada mantém-se homogênea, sem a formação de estruturas coerentes. A partir de 2,22 segundos as estruturas começam a

tornar-se não homogêneas, tanto no plano XZ (Figura 23) como no plano YZ (Figura 24), evidenciando uma grande quantidade de sólidos descendo pela parede. Observa-se a formação de estruturas alongadas na direção vertical e bolhas de gás rodeadas por sólidos. O padrão de escoamento deixa de ser simétrico apresentando grande não homogeneidade. Observe que os aglomerados de partículas não mantém-se apenas na região próxima à parede, podendo ser encontrados em todas as regiões do reator, como pode ser evidenciado na Figura 25, com exceção da região próxima à entrada.

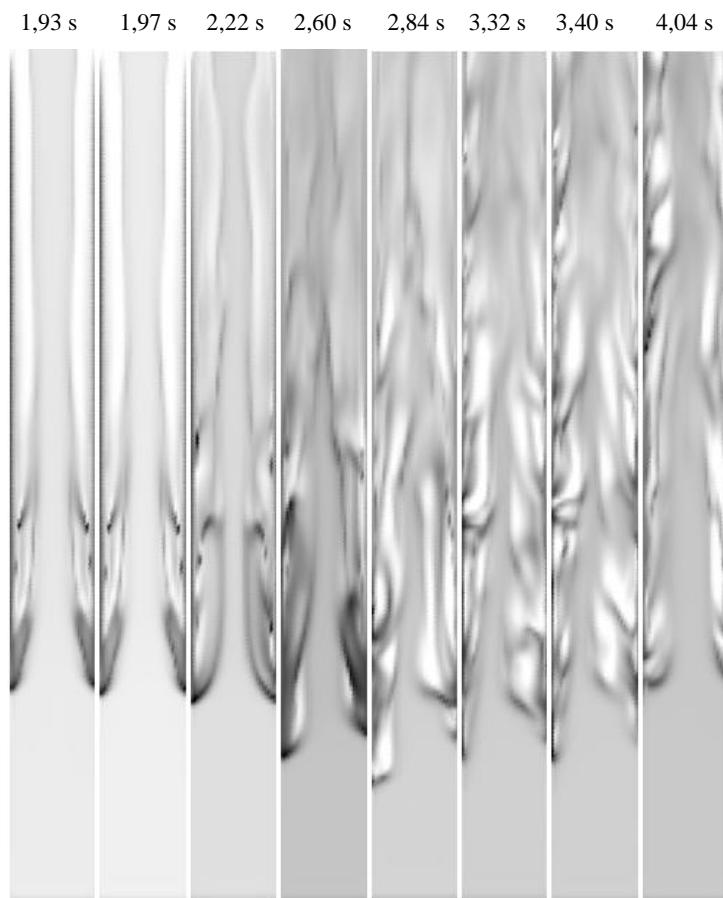


Figura 23. Evolução do campo de fração de sólido no centro da coluna, plano XZ. Da esquerda para direita: 1,93, 1,97, 2,22, 2,60, 2,84, 3,32, 3,40, 4,04 segundos (Tons de cinza invertidos). A tonalidade tendendo para o negro representa maior concentração de sólidos e tonalidade tendendo para o branco representa baixa concentração de sólidos. As frações de sólido variam de 0,5 a 0,04.

A Figura 25 apresenta o campo de fração de sólidos distribuído em cortes a partir do centro com incremento e decremento de 1 cm, para traz e para frente do corte na região central, para o tempo de 4,04 segundos. Evidencia-se que as estruturas alongadas mantêm-se em todas as regiões do *riser*, e é possível observar o efeito do tipo “*snake*”, onde há uma

flutuação lateral, efeito bastante conhecido e esperado no comportamento fluidodinâmico de um reator de craqueamento catalítico.

Interessante notar, como mencionado nos Capítulos 3 e 4, que o refino de malha utilizado neste primeiro estudo de caso apresenta qualitativamente, praticamente todos os fenômenos discutidos nos capítulos mencionados. Desta forma, apresenta-se aqui o perfil de fração de sólidos e taxa de deformação de forma a demonstrar que os sólidos tendem a aglomerar-se em regiões de alta taxa de deformação.

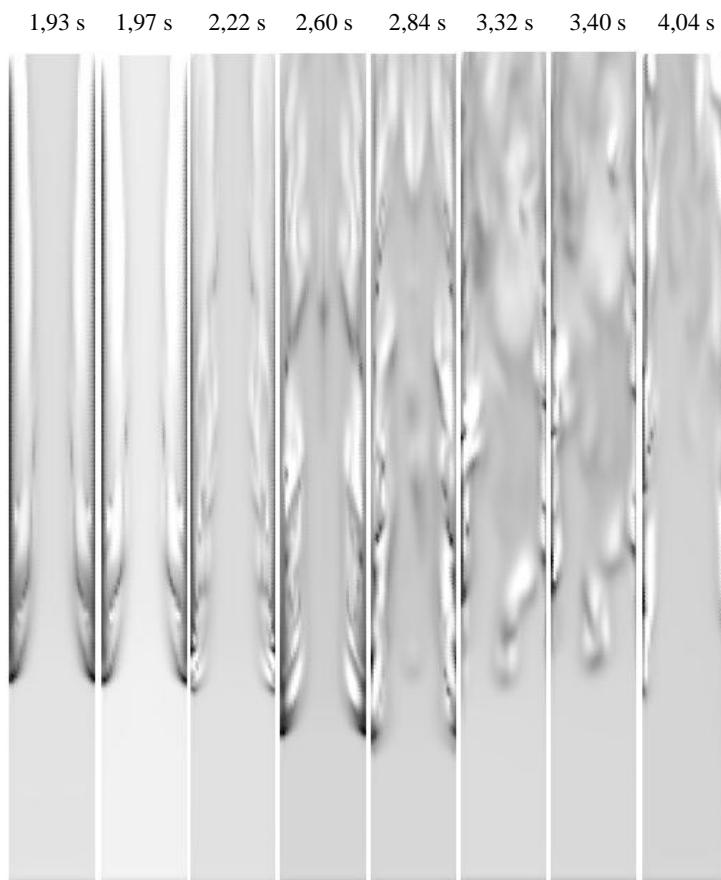


Figura 24. Evolução do campo de fração de sólido no centro da coluna, plano YZ. Da esquerda para direita: 1,93, 1,97, 2,22, 2,60, 2,84, 3,32, 3,40, 4,04 segundos (Tons de cinza invertidos). A tonalidade tendendo para o negro representa maior concentração de sólidos e tonalidade tendendo para o branco representa baixa concentração de sólidos. As frações de sólido variam de 0,5 a 0,04.

Apresenta-se na Figura 26 o resultado para um tempo de 7,28 segundos, no plano XZ, a 1 metro de altura da entrada do *riser*. É possível observar que onde a fração de sólido é constante, a taxa de deformação mantém-se constante e com um valor mínimo. Quando há um

aumento, por menor que seja, na fração de sólidos, observa-se que a taxa de deformação aumenta. Quando a fração de sólidos diminui há uma diminuição da taxa de deformação.

Assim, em regiões com alta taxa de deformação espera-se encontrar formações de *clusters*, e em regiões de baixa taxa de deformação, ou seja, alta vorticidade, espera-se encontrar bolhas. Mas é possível observar pela Figura 26 que a segunda assertiva não se confirma (nesta figura), pois quando não há variação na fração de sólidos, região com fração constante, a taxa de deformação é baixa, e não há bolha de gás associada. Este aspecto é um pouco mais complexo e será apresentado e discutido mais a frente, revelando a presença de estruturas alongadas de vórtices contra-rotativos, mencionados anteriormente (Ver, por exemplo, a Figura 22, onde tem-se uma indicação qualitativa da presença destas estruturas).

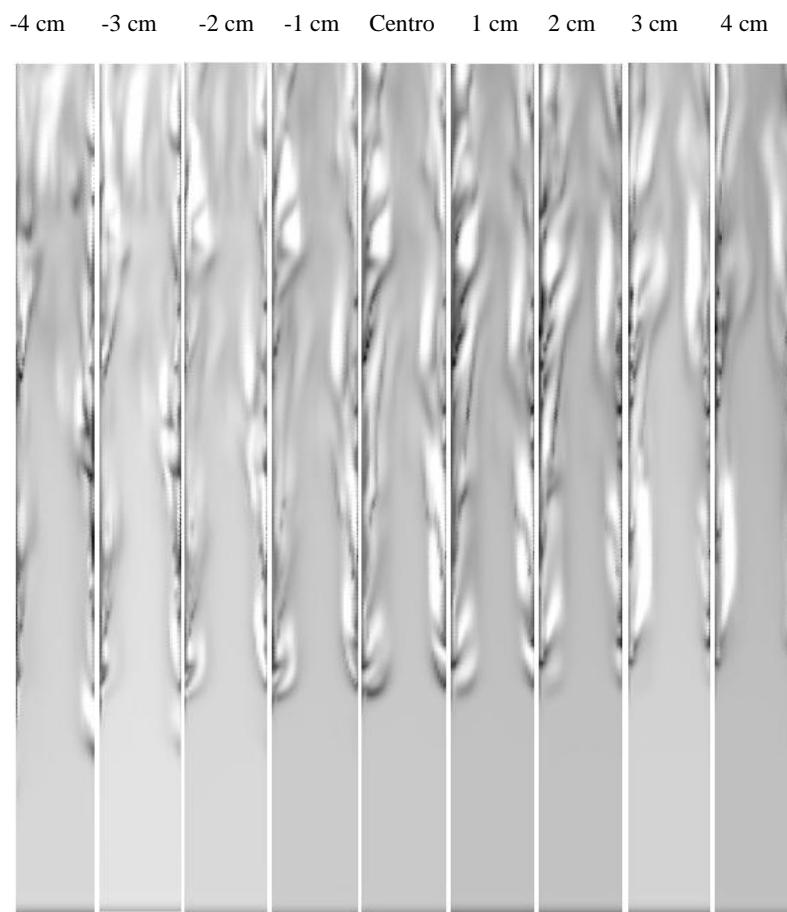


Figura 25. Fração de sólidos instantânea (4,04 s) – corte longitudinal central, plano XZ, (figura central) e cortes com espaçamento a partir do centro de 1 cm do centro.

O resultado apresentado na Figura 26 sugere que há uma relação quase linear da variação de fração de sólidos com a taxa de deformação (onde há *clusters* tem-se alta taxa de deformação), para o refino de malha utilizado. O tensor tensão tem um significado físico muito importante. Ele é responsável, por trazer as informações da escala microscópica para a

escala macroscópica, aparecendo nos modelos como parte de uma lei constitutiva. Ou seja, o tensor tensão traz informações importantes das escalas moleculares para o nível do contínuo. Assim, fica bastante claro que a utilização de um modelo sub-malha irá trazer informações das regiões não resolvidas pelo modelo de dois fluidos, que devem ser acrescidas, ou no termo de arraste ou na forma do tensor tensão, como sugerido por Agrawal (2000) e Agrawal *et al.* (2001).

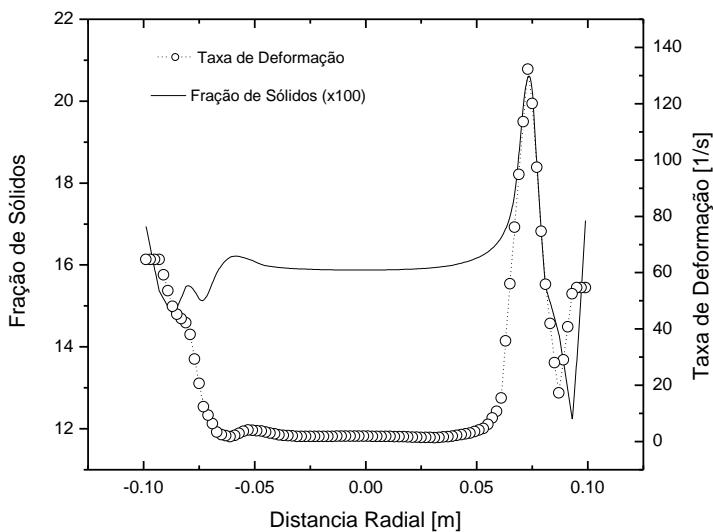


Figura 26. Perfis de Taxa de deformação e fração de sólidos no plano XZ, a uma altura de 1 metro de distância da região de entrada, para o tempo de 7,28 segundos.

Os resultados apresentados neste sub-item mostram-se bastante promissores. Fenômenos encontrados em escoamentos gás-sólido são representados de forma qualitativa, tais como a formação de aglomerados de partículas e o comportamento do tipo “*snake*”, como mencionado anteriormente. A seguir, serão apresentados resultados numéricos com uma malha computacional mais refinada.

6.3.2 Apresentação de resultados: Caso 2

Neste sub-item apresenta-se os resultados numéricos utilizando-se malha computacional com resolução de $0,625 \times 0,625 \times 0,5 \text{ cm}^3$, geometria cilíndrica tridimensional, com 409.600 volumes. O diâmetro de partícula utilizado nas simulações é de 75 μm com a mesma densidade do caso anterior e a velocidade superficial do gás na entrada é 1 m/s. Inicialmente a coluna está com fração de sólidos de 0,4. O passo de tempo utilizado foi de 1×10^{-3} segundos, e a simulação transcorreu até 10 segundos de tempo real. Mantém-se as

mesmas condições numéricas apresentadas no sub-item anterior. A viscosidade de ambas as fases é mantida constante como no estudo de Caso 1, assumindo os mesmos valores.

O principal objetivo neste estudo de caso é confirmar a relação entre a taxa de deformação e a fração de sólidos, observar o comportamento dos resultados quando comparados com os resultados numéricos obtidos para o Caso 1. Note-se que na direção vertical a malha foi refinada, em relação ao caso anterior; na direção radial, manteve-se a mesma resolução. A Figura 27 apresenta a evolução temporal do campo de fração de sólidos do início das simulações.

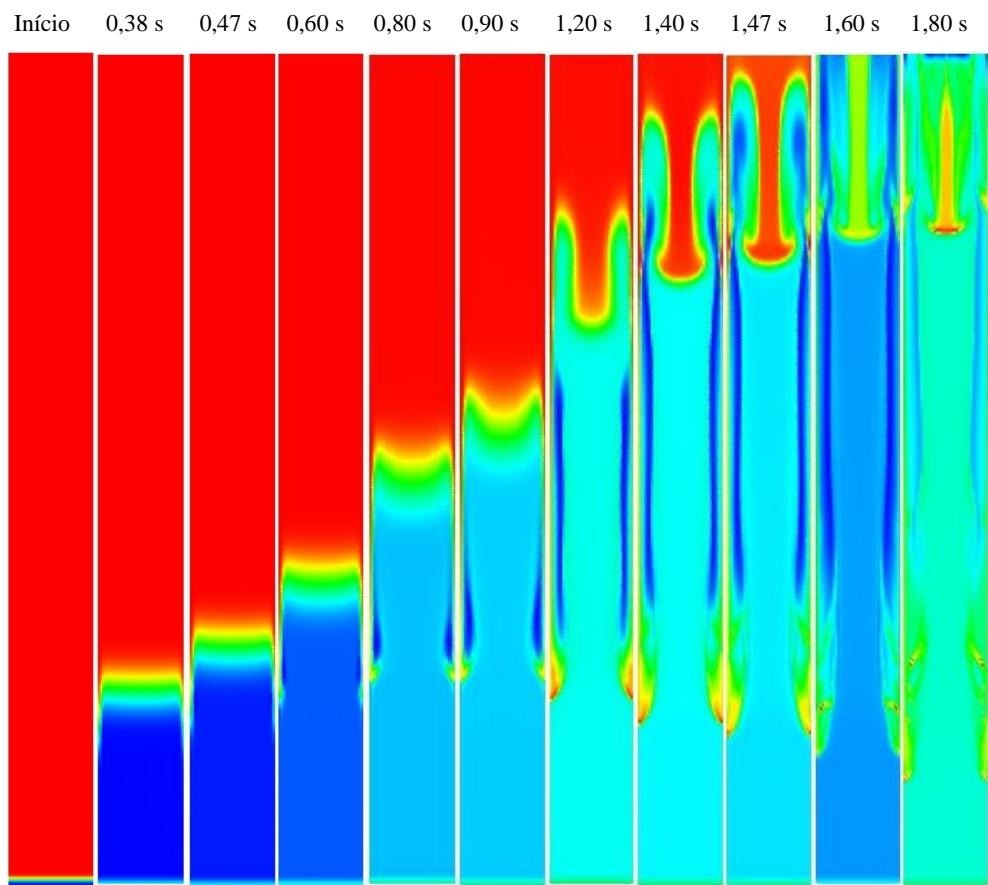


Figura 27. Evolução do campo de fração de sólido no centro da coluna plano, XZ. Da esquerda para direita: 0, 0,38, 0,47, 0,60, 0,80, 0,90, 1,20, 1,40, 1,47, 1,60, 1,80 segundos. A tonalidade avermelhada corresponde à fração de sólidos 0,4 e azul mais escuro 0,05.

Observa-se que a partir de 0,8 segundos o perfil torna-se inflexional na região central do leito, gerando caminho preferencial do gás, causado pelo acúmulo de sólido na região superior do leito. Evidencia-se a formação de um grande aglomerado de partículas na região superior, a partir de 0,9 segundos. Note-se que a formação desta estrutura não foi evidenciada na solução para a malha mais grosseira. Outro aspecto importante é que os *clusters* que se formam na região junto a parede descem até uma região mais próxima da base do leito,

quando comparado aos resultados da malha mais grosseira. Os vórtices contra rotativos próximos a região da parede, mantêm-se de forma similar a encontrada com a malha mais grosseira. Fica claro que a malha com maior refino, capta estruturas que não são encontradas para os resultados da malha mais grosseira, mesmo para os tempos iniciais de simulação, como os apresentados na Figura 27.

Mesmo com a formação destas estruturas o perfil de fração de sólidos mantém-se simétrico; há contudo a formação de um grande aglomerado de sólidos na região superior do leito e na região inferior próxima à parede. Para passar por estas estruturas o gás toma caminhos preferenciais, e arrasta uma porção de sólidos presentes nestas regiões de alta concentração de sólidos.

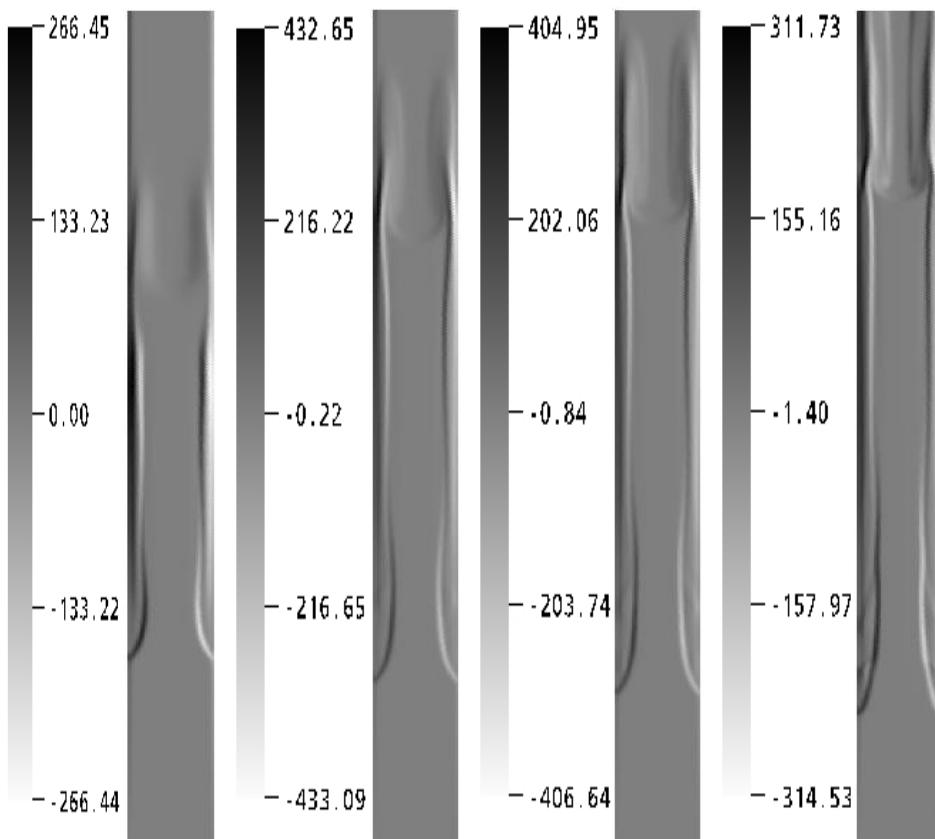


Figura 28. Componente da vorticidade ($1/s$) perpendicular ao plano XZ, Da esquerda para direita: 1,20, 1,40, 1,47 e 1,60 segundos.

A Figura 28 apresenta o campo de vorticidade para os tempos a partir de 1,20 segundos até 1,60 segundos. Observa-se a formação de vórtices com estrutura alongada e contra rotativos, próximo às paredes do reator. Estes vórtices estão localizados na região onde há baixa concentração de partículas. Na região onde há alta concentração de sólidos a vorticidade é baixa. Os valores de vorticidade são substancialmente altos sendo que, com o

passar do tempo, os vórtices vão se estirando na direção axial, carregando consigo uma porção de sólidos que mantêm-se nas regiões externas destes. Este comportamento, sugerido nos capítulos anteriores, pode ser melhor apreciado observando-se a Figura 29, onde apresenta-se os campos de fração de sólido comparados com os campos da componente da vorticidade perpendicular ao plano XZ, para diferentes tempos.

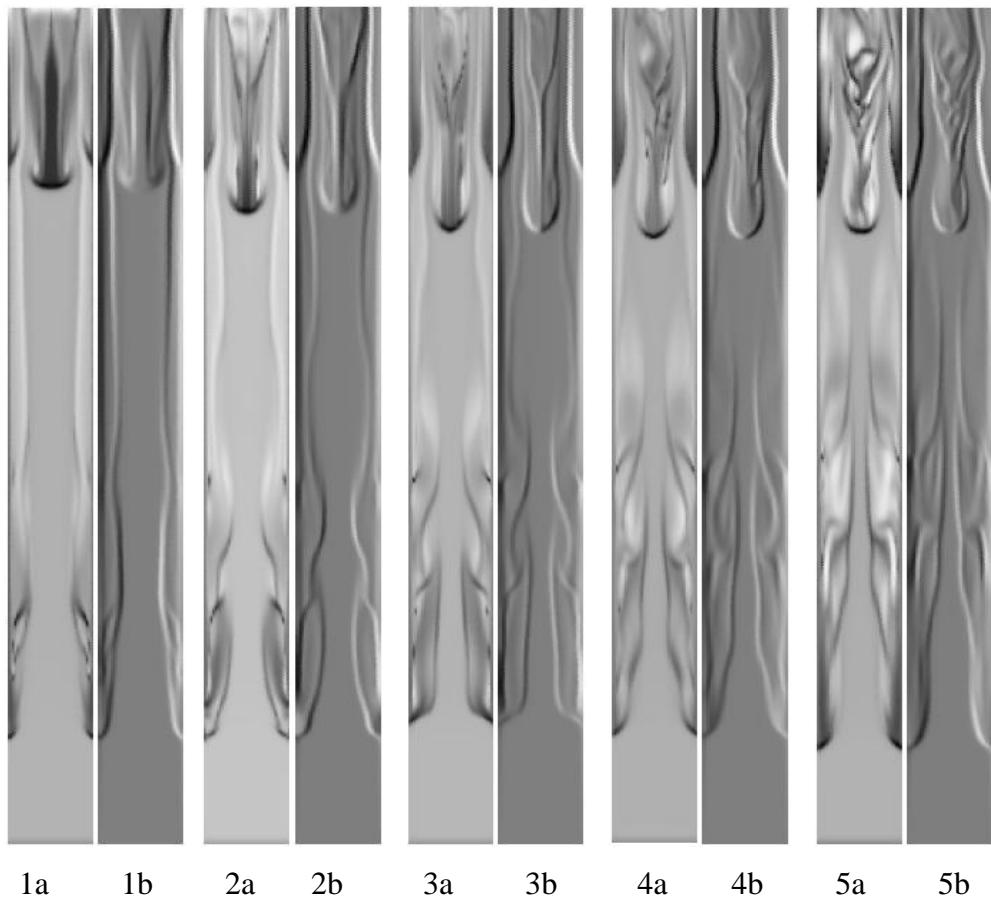


Figura 29. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade ($1/s$) perpendicular ao plano XZ. 1a, 2a, 3a, 4a, 5a, fração de sólidos para 1,80, 2,00, 2,10, 2,20 e 2,30 segundos respectivamente. 1b, 2b, 3b, 4b, 5b, componente da vorticidade ($1/s$), no plano XZ, para os mesmos tempos, respectivamente.

Observa-se, que com o passar do tempo as estruturas turbinhonianas aumentam em número. Os perfis colocados lado a lado, de fração de sólidos e vorticidade, assemelham-se de maneira impressionante, para todos os tempos e em praticamente todas as regiões (Figura 29). Importante poder observar que na maioria dos locais onde há alta concentração de sólidos, a

componente da vorticidade é baixa⁹. A presença de estruturas alongadas contra rotativas relacionando-se com de *clusters* alongados, ou *strands*, é evidente. Até uma certa distância da base do reator, as estruturas turbinholares mostram-se coerentes, para os tempos apresentados. Contudo, para o tempo de 2,30 segundos, observa-se que na região superior, onde encontra-se o grande aglomerado, formam-se estruturas com maior heterogeneidades. Observa-se que estas estruturas não foram captadas pela malha mais grosseira.

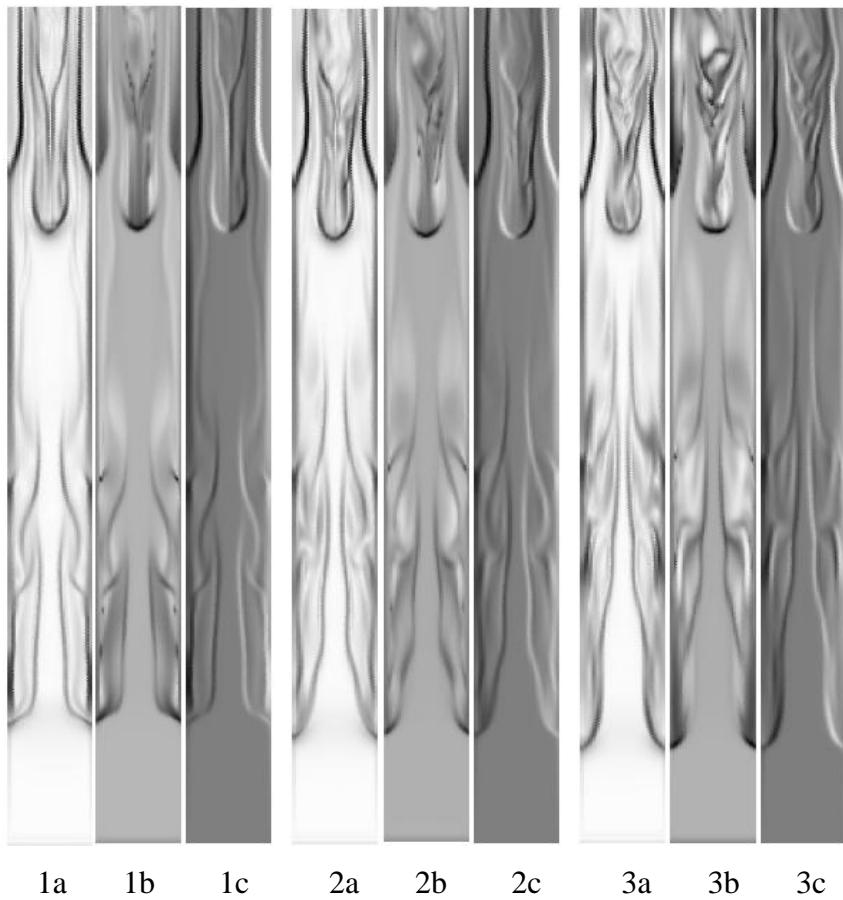


Figura 30. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s) perpendicular ao plano XZ. 1a, 2a, 3a - taxa de deformação (1/s) para 2,10, 2,20 e 2,30 segundos respectivamente. 1b, 2b, 3b – Fração de sólidos; 1c, 2c, 3c - componente da vorticidade (1/s), no plano XZ, respectivamente. Tonalidade mais para o negro indica tensão máxima, e tonalidade para branco indica tensão praticamente nula.

⁹ Importante ressaltar que na Figura 29, as vorticidades altas estão representadas por tonalidade negra e branca, e fração de sólidos alta, tonalidade negra e baixa fração de sólidos tonalidade branca, mantendo o mesmo padrão para as figuras apresentadas anteriormente e que serão apresentadas a frente.

A Figura 30 apresenta a comparação dos campos taxas de deformação com os campos de fração de sólidos e vorticidade para os tempos de 2,10, 2,20 e 2,30 segundos. É possível notar que a taxa de deformação é praticamente nula (tonalidade branca) em regiões onde a fração de sólidos é constante, nas mesmas regiões onde a vorticidade assume um valor intermediário, entre o máximo e o mínimo. Onde há um aumento da fração de sólidos há um aumento significativo da taxa de deformação, chegando a um máximo de 293 (1/s), para os resultados apresentados na Figura 30. Este comportamento foi apresentado no sub-item anterior e é confirmado novamente para os resultados para uma malha mais refinada. A Figura 30 apresenta resultados para o início das simulações, sendo assim necessita-se saber se este comportamento mantém-se para tempos maiores e em todas as regiões do leito fluidizado em estudo. Os resultados apontam para os mecanismos físicos apresentados, de formação e destruição de *clusters*, nos Capítulos 3 e 4¹⁰.

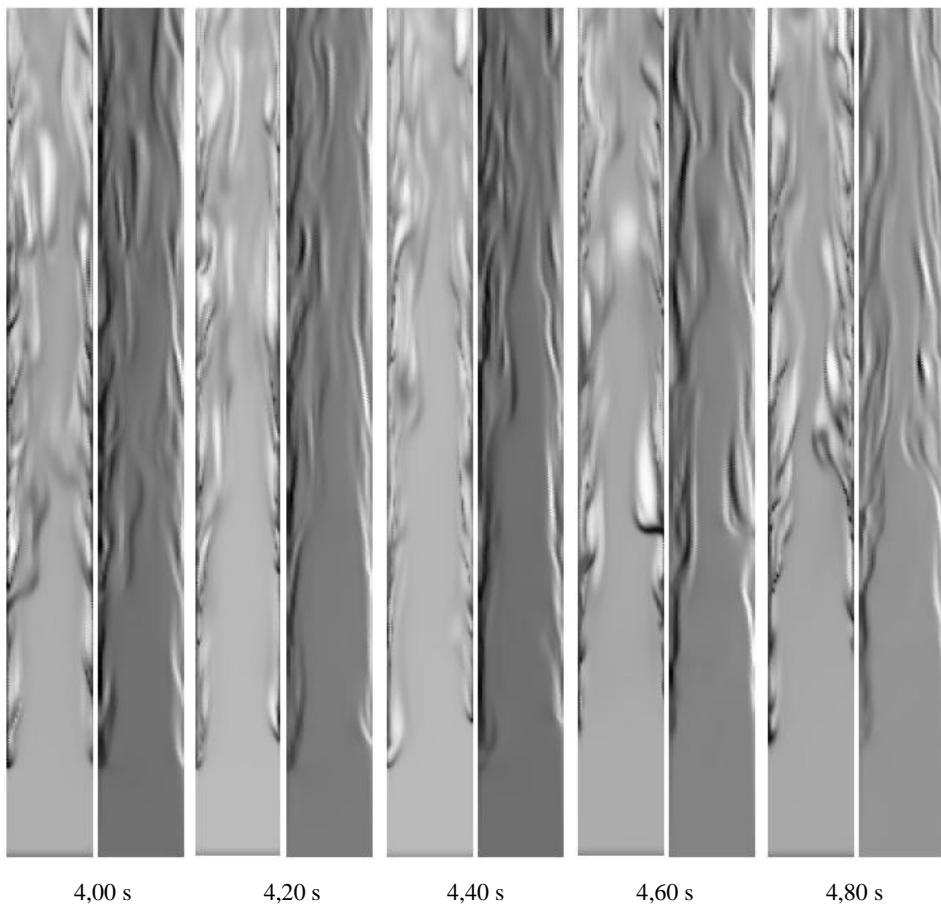


Figura 31. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s), respectivamente, perpendicular ao plano XZ.

¹⁰ Importante observar que tanto a vorticidade como a taxa de deformação tem unidades de freqüência, podendo assim serem utilizados como parâmetros de formação e destruição de *clusters*.

Desta forma, apresentam-se resultados para vários tempos de simulação com o objetivo principal de demonstrar que o comportamento citado acima mantém-se para tempos maiores. A Figura 31 apresenta os campos de fração de sólidos e vorticidade no plano XZ para valores de tempos variando de 4 segundos até 4,8 segundos. Os perfis mostram que o comportamento observado anteriormente se mantém. Observa-se que aumentam as estruturas turbinhoares com o passar do tempo. Surgem *clusters* não apenas na região próxima a parede, com estruturas alongadas na vertical conhecidas na literatura como *strands*. O escoamento deixa de ser simétrico, aparecendo não homogeneidades no centro da coluna.

O campo de fração de sólidos para o tempo de 4,6 segundos, apresenta algumas estruturas densas deslocando-se na direção horizontal, chegando bem próximo do centro da coluna. Evidencia-se que esta estrutura mais densa está na região mais externa de uma bolha. Para o tempo de 4,6 segundos, detalhe da região (Ver Figura 32) observa-se o campo de vorticidades, onde na região supra citada há dois vórtices contra rotativos e uma região de baixa vorticidade. No detalhe da Figura 32 pode-se reconhecer que estruturas densas encontram-se próximas a estruturas diluídas e a presença de tubos rotativos é notória. Estas estruturas são responsáveis por transportar energia das maiores escalas para as menores escalas através do mecanismo de estiramento de vórtices. Os campos de fração de sólido e vorticidade, na seqüência temporal dos resultados, Figura 33, apresentam-se mais complexos com o passar do tempo.

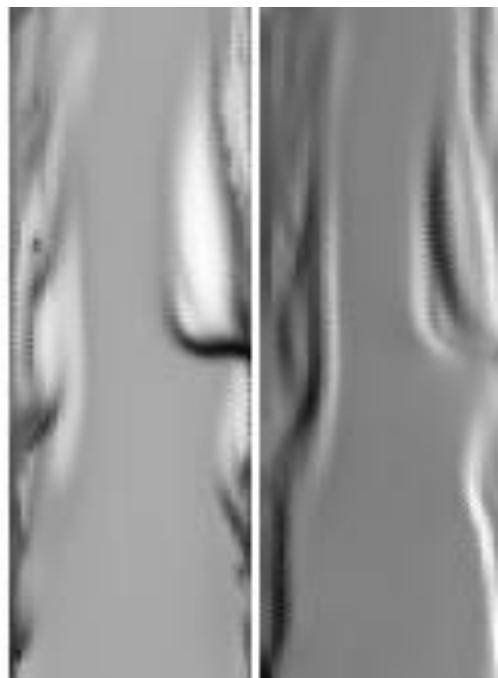


Figura 32. Detalhe da Figura 31 para o tempo de 4,6 segundos. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s), respectivamente, perpendicular ao plano XZ.

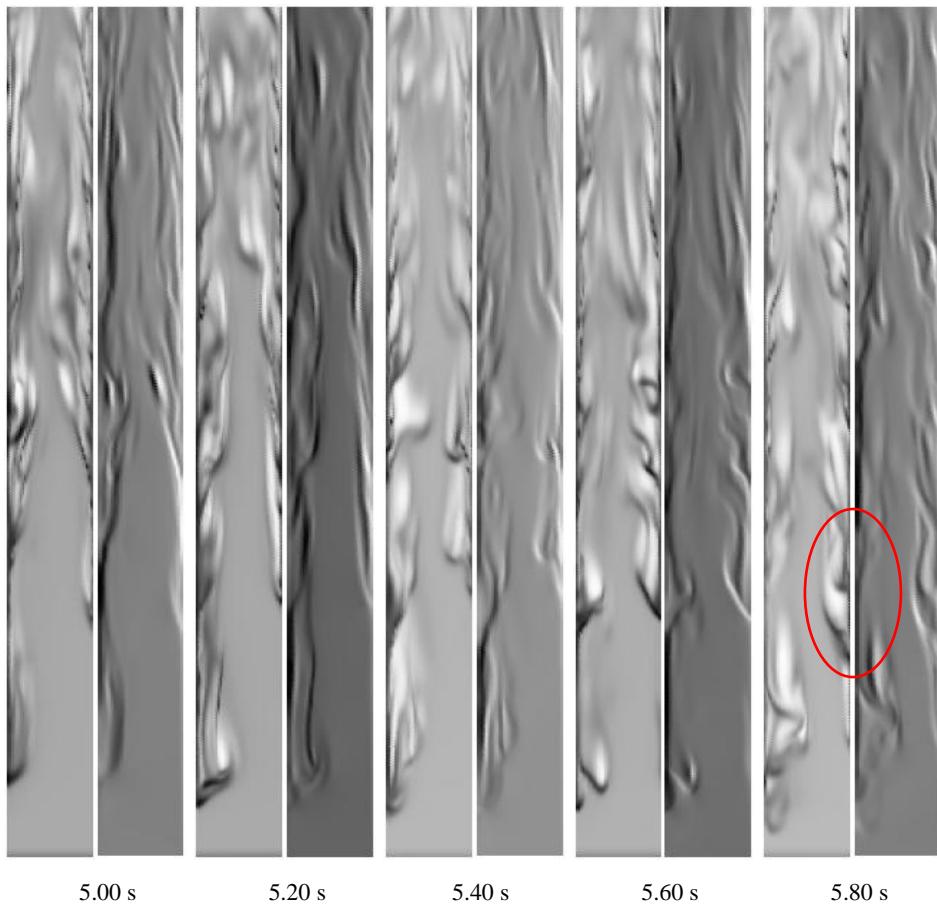


Figura 33. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade ($1/s$), respectivamente, perpendicular ao plano XZ. Círculo é uma ampliação apresentada na Figura 34.

Os campos de fração de sólido, para estes resultados em malha mais refinada, apresentam formação de *clusters* em regiões bem próximas à base do leito, aspecto não revelado pelas simulações com malha mais grosseira, Caso 1.

O detalhe apontado na Figura 33 e apresentado na Figura 34 revela o campo vetorial de velocidade do gás na região onde há uma série de vórtices contra rotativos e estruturas tubulares. Observa-se que a alta vorticidade não é causada por uma região de alto cizalhamento, como poder-se-ia pensar, e sim pela presença de estruturas rotativas muito próximas da parede do reator.

Fica evidente que nas regiões de alta vorticidade (claras e escuras) da figura que representa a vorticidade na região superior direita próxima à parede (Figura 34) deve-se a dois vórtices contra-rotativos emparelhados.

Com os resultados apresentados acima, pode-se afirmar com segurança que o afirmado no sub-item anterior, com relação às relações entre a fração de sólidos e taxa de deformação mantém-se com a malha refinada, ou seja, regiões onde há alta taxa de deformação

encontram-se altas frações de sólido (*clusters*). As estruturas alongadas conhecidas como *strands* mantém-se e estão associadas a vórtices contra-rotativos alongados.

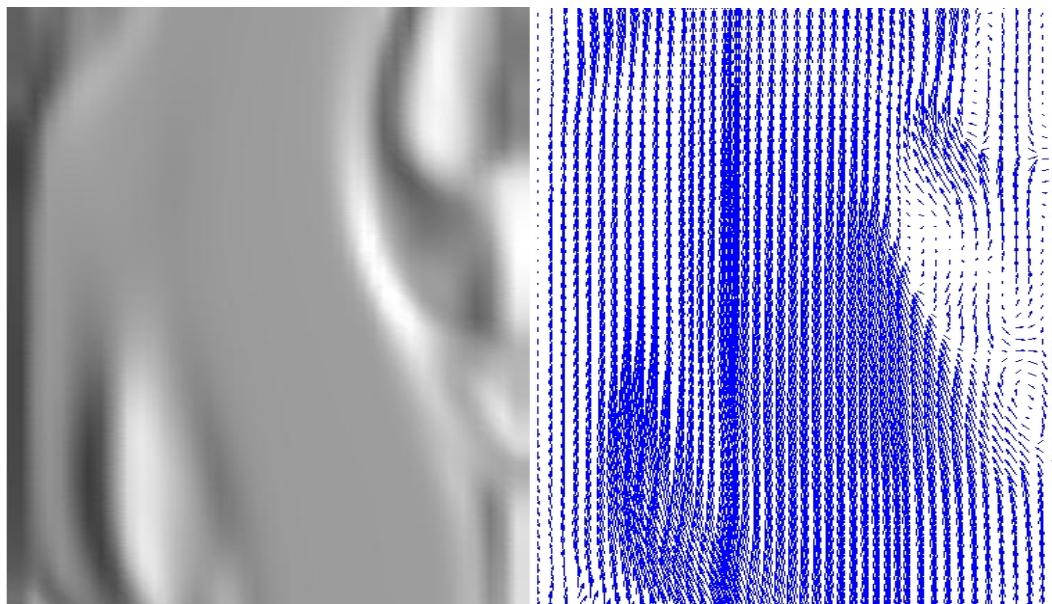


Figura 34. Detalhe da Figura 33, para 5,80 segundos. Componente da vorticidade (1/s) perpendicular ao plano XZ, e campo vetorial da velocidade do gás.

Lembrando que os resultados apresentados são para partículas com diâmetro de 75 μm e que não foi utilizado nenhum modelo de turbulência para resolver este caso específico, mostrando que mesmo em um regime turbulento o modelo de dois fluidos é capaz de representar adequadamente os fenômenos encontrados no escoamento gás-sólido em um leito fluidizado turbulento. Mais à frente serão apresentados resultados para partículas com 120 μm , onde poder-se-á confirmar se este comportamento se mantém.

Os resultados quantitativos foram realizados obtendo-se a média a partir do ponto onde o pseudo regime estacionário estabeleceu-se. Segundo Zhang e van der Heyden (2001), este pseudo regime estacionário deu-se, em 5,3 segundos do início das simulações. Nossos resultados apresentam o início do pseudo regime estacionário para este caso em 1.6 segundos após o início da simulação. Seguindo o tempo estimado por Zhang e van der Heyden (2001), decidiu-se realizar a média de acordo com o obtido por estes autores, e exatamente o mesmo período de tempo para média, que foi de 4,3 segundos. Ou seja, os resultados médios são obtidos realizando-se a média a partir de 5,3 segundos até 9,6 segundos para os resultados que se referem ao Caso 1.

Desta forma, os resultados médios apresentados, para efeito de comparação, seguem o sugerido por Zhang e van der Heyden (2001), onde foi realizada a média de *Favre*, mesma média utilizada nos experimentos, representada pelas equações a seguir

$$\bar{\phi}_k = \frac{\sum \phi_k \Delta t}{\sum \Delta t}, \quad (6.1)$$

$$\bar{u}_{i,k} = \frac{\sum \phi_k u_{i,k} \Delta t}{\sum \phi_k \Delta t}. \quad (6.2)$$

A Figura 35 compara os resultados numéricos obtidos para o Caso 1 e o presente Caso 2. O desvio padrão para os resultados numéricos da malha mais refinada é de 0,43 m/s. Para os resultados da Figura 35, no que concerne à malha refinada, realizou-se média de *Favre* num intervalo de 8,24 segundos. Lembrando que o valor do intervalo da média sugerido por Zhang e van der Heyden (2001) foi de 4,3 segundos, observa-se que os resultados apresentam-se simétricos, quando aumenta-se o período da realização da média, com assimetria na região central mais diluída.

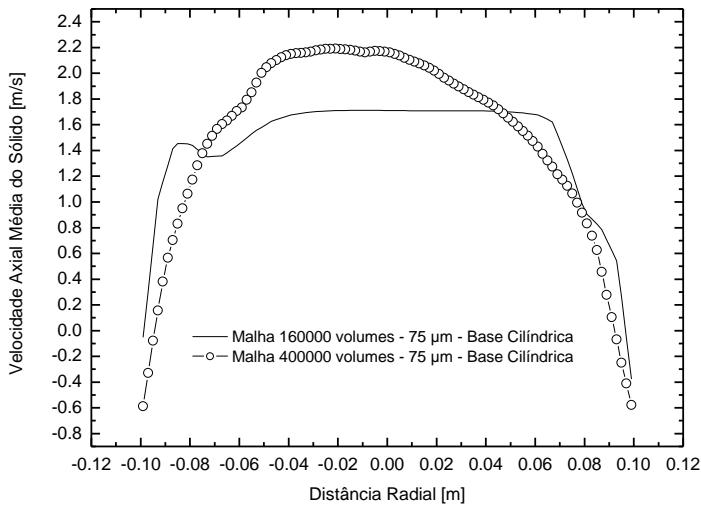


Figura 35. Comparaçao dos resultados médios para as malhas de 160000 (Caso 1) e 400000 volumes (Caso 2).

Ainda observa-se na Figura 35 que com o refino de malha o arraste aumenta na região central do reator. O comportamento junto à parede e na região intermediária ao centro e parede (0,08 metros) do reator é muito semelhante para ambos os casos, com velocidades médias de partículas descendo junto a parede maiores para o Caso 2 em relação ao encontrado para o Caso 1. Importante observar que para o Caso 2 a malha computacional foi refinada apenas na direção axial. Realizamos estudos de caso com partículas de 120μm, que serão apresentados nos sub-itens a seguir.

6.3.3 Apresentação de resultados: Caso 3

Este estudo de caso apresenta resultados utilizando diâmetro da partícula de 120 μm , exatamente a média da distribuição de partículas reportada por van den Moortel *et al.* (1998) e densidade de 2400 kg/m^3 , com o objetivo de verificar os efeitos do aumento do diâmetro da partícula nos padrões de escoamento. Neste estudo de caso utilizou-se a malha grosseira cilíndrica com 160000 volumes, sem a utilização de modelo de turbulência. Foram mantidas as mesmas condições de contorno apresentadas nos casos anteriores.

O aumento do diâmetro das partículas representa um pseudo refino de malha (ver Apêndice A), pois em um elemento de volume encontram-se menos partículas quando compara-se o mesmo refino de malha; desta forma, espera-se que os gradientes devam aumentar, e que detalhes captados pela malha de 400000 volumes apareçam neste estudo de caso, no entanto não evidenciadas no Caso 1.

Desta forma apresentam-se os resultados para o início do escoamento na Figura 36, como apresentados anteriormente para os estudos de Caso 1 e 2. Observa-se que os perfis de fração de sólidos até o tempo de 0,9 segundos são os mesmos apresentados nos casos anteriores, especialmente para a malha mais refinada. A partir de 0,9 segundos não evidencia-se a formação da estrutura densa na região superior do leito, como apresentado na Figura 27, para o caso da malha refinada, que inicia-se a 1,2 segundos.

Os perfis são bastante semelhantes aos resultados do Caso 1, contudo observa-se a formação de um vórtice na região superior, não presente nos resultados do Caso 1, e uma região com densidade maior próxima à base do reator. Evidencia-se a formação de aglomerado na região junto à parede de forma similar aos casos anteriores, mas com menor volume que os presentes nos resultados para a malha refinada (Caso 2). De forma geral, os perfis dos Casos 1, 2 e 3, apresentam a formação de uma bolha de gás ascendente de forma alongada, evidenciando dois vórtices contra-rotativos.

Apresenta-se a seguir os campos de fração de sólido e vorticidade no plano XZ com tons de cinza a partir de 1,80 segundos (Figura 37). A tonalidade tendendo para o branco representa região rica em gás, e tendendo para o negro região de alta concentração de partículas. Observa-se que a partir de 1.80 segundos aparece, na região superior do leito, uma estrutura densa semelhante à encontrada nos resultados da malha refinada.

O sólido, agora mais denso (nos Casos 1 e 2 a densidade era de 1250 kg/m^3), tende a descer vigorosamente pelas paredes do reator, encontrando-se formação de *clusters* bem próximo à base do reator, e zonas de grande circulação nesta região, o que não ocorreu nos

casos anteriores, a não ser no Caso 2 (malha refinada) para tempos maiores que os apresentados na Figura 37.

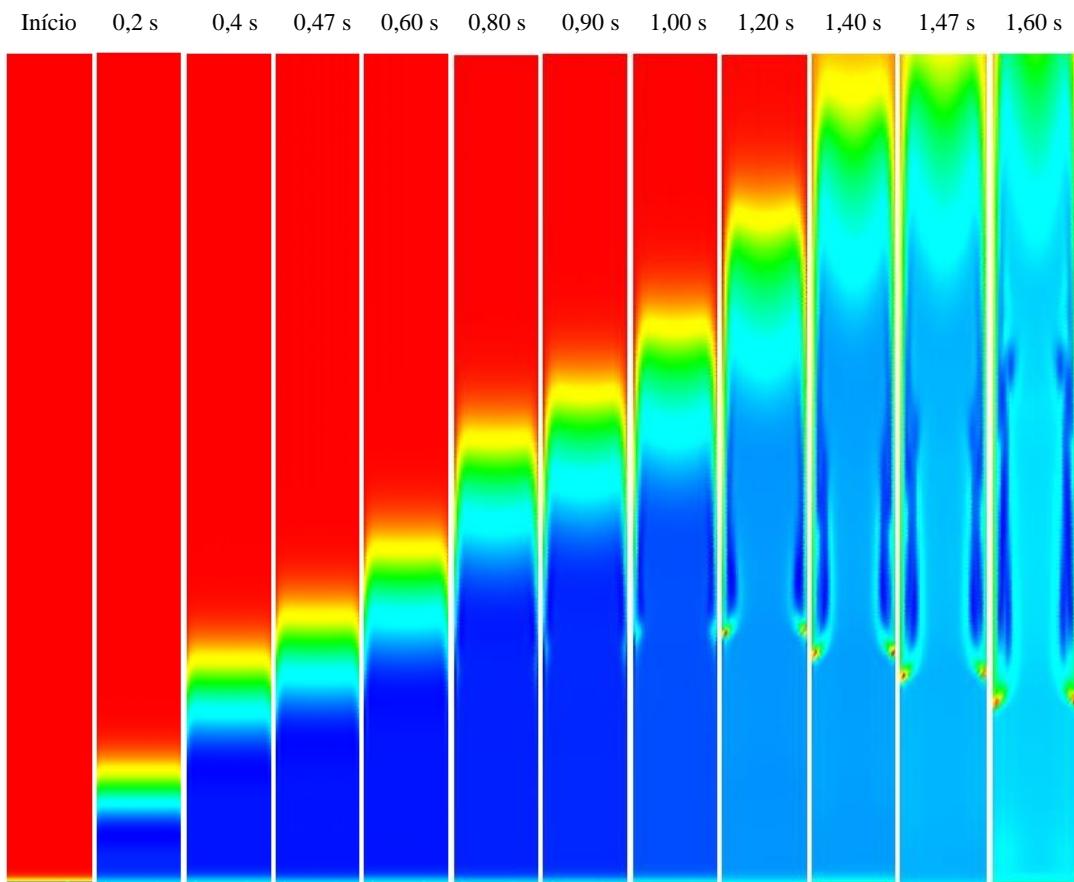


Figura 36. Evolução do campo de fração de sólido no centro da coluna plana, XZ. Da esquerda para direita: 0, 0,2, 0,4, 0,47, 0,60, 0,80, 0,90, 1,00, 1,20, 1,40, 1,47, 1,60 segundos. A tonalidade avermelhada corresponde a fração de sólidos 0,4 e a azul mais escuro 0,05.

O comportamento dos perfis de vorticidade assemelham-se aos apresentados nos casos anteriores, onde observa-se claramente tubos de vórtices contra-rotativos estirando-se em regiões de baixa concentração de sólidos. Observe-se que a grande diferença nos perfis de vorticidade encontra-se no valor da mesma, enquanto que para os casos anteriores os valores encontravam-se na faixa de no máximo de 300 (1/s), nesse caso os valores máximos estão na faixa de 600 (1/s).

Na Figura 38 é possível observar que a partir de 2.7 segundos o escoamento deixa de ser simétrico, com o aparecimento de tiras alongadas (*strands*) de sólidos por todas as regiões do reator. A região da base do reator apresenta-se densa com formação de *clusters*, que ascendem e descendem com a passagem do gás, assemelhando-se ao comportamento de um leito fluidizado borbulhante, como apresenta van Wachem (2000) em seus resultados para

escoamento em leito fluidizado em regime de bolhas. Qualitativamente estes resultados apresentam-se diferentes dos apresentados anteriormente (Casos 1 e 2).

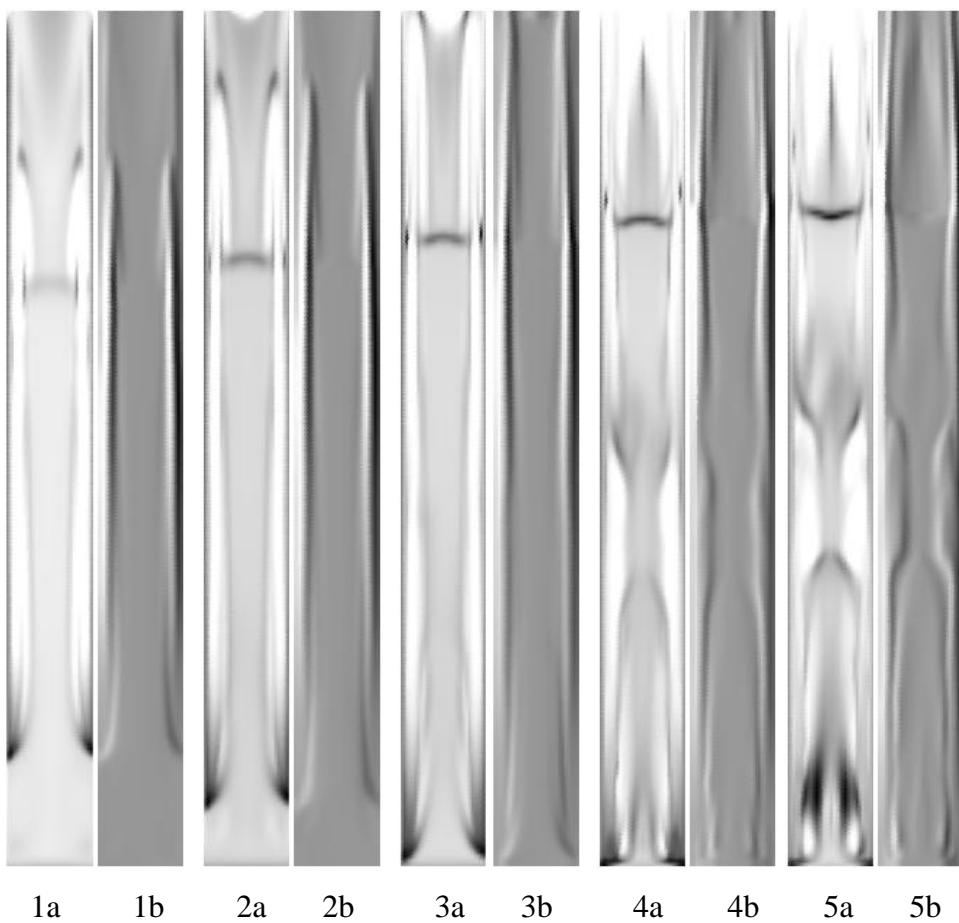


Figura 37. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s) perpendicular ao plano XZ. 1a, 2a, 3a, 4a, 5a, fração de sólidos para 1,80, 1,90, 2,00, 2,10 e 2,20 segundos respectivamente. 1b, 2b, 3b, 4b, 5b, componente da vorticidade (1/s), no plano XZ, para os mesmos tempos, respectivamente.

A seguir são apresentados (Figura 39) os campos de fração de sólido e vorticidade a partir de 3.8 segundos, com a finalidade de observar o comportamento destes campos para tempos maiores. Observa-se na Figura 39 a presença na região superior do leito de um escoamento descendente anular do sólido com uma região central com fração de sólidos baixa (0.004). A presença de aglomerados de partículas do tipo *strands* na região central menos densa é bastante visível, bem como uma região densa na base do leito. Os padrões de escoamento são significativamente diferentes dos apresentados nos Casos 1 e 2. No entanto, no que se refere, ao comportamento anteriormente citado da vorticidade, observa-se que há a presença de vórtices contra-rotativos alongados em grande profusão. Evidencia-se que os

vórtices contra-rotativos estão presentes exatamente ao lado de regiões de alta concentração de partículas, como apresentado nos Casos 1 e 2. Mesmo para a malha refinada, Caso 2, não há a presença de uma região mais densa nas proximidades da base do leito, quando se compara o resultado para o tempo de 4,6 segundos, tão pouco para tempos subsequentes.

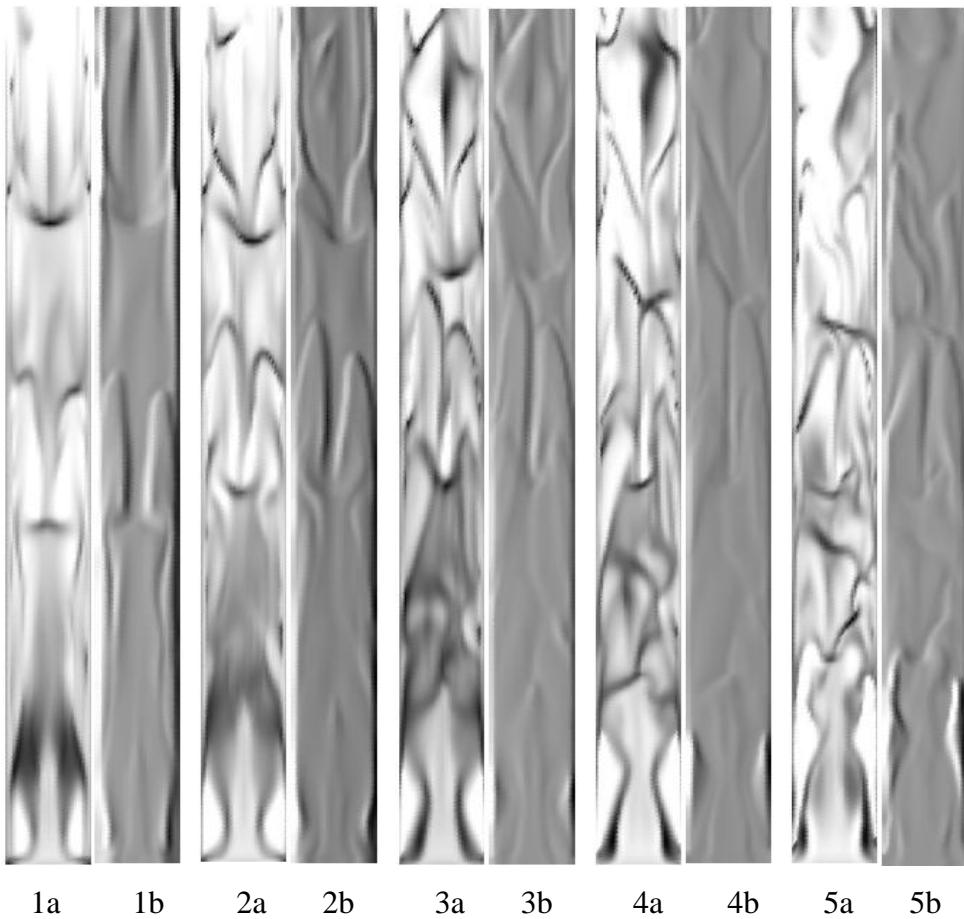


Figura 38. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s) perpendicular ao plano XZ. 1a, 2a, 3a, 4a, 5a, fração de sólidos para 2,30, 2,40, 2,50, 2,60 e 2,70 segundos respectivamente. 1b, 2b, 3b, 4b, 5b, componente da vorticidade (1/s), no plano XZ, para os mesmos tempos, respectivamente.

Outro aspecto importante que se verifica nos campos de fração de sólidos da Figura 39 é a impossibilidade de observar nestas figuras a presença de um comportamento do tipo *snake*, observado nos Casos 1 e 2 e salientado anteriormente.

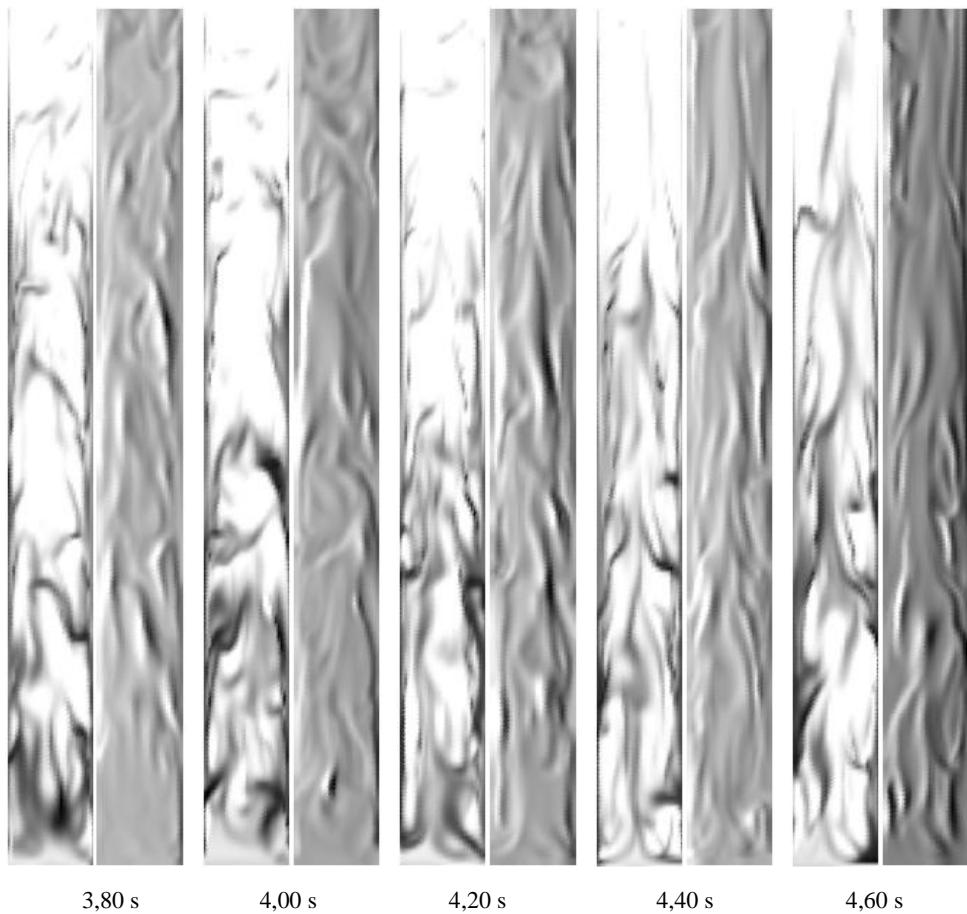


Figura 39. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s), respectivamente, perpendicular ao plano XZ.

A Figura 40 apresenta os campos de fração de sólidos e vorticidade para intervalo de tempo entre 4,8 e 5,6 segundos, evidenciando os mesmos fenômenos já discutidos e apresentados anteriormente para os Casos 1 e 2. Não se apresenta o campo de vetores velocidade do gás, visto que, sabe-se que geralmente onde há regiões com baixa concentração de partículas há a presença de vórtices contra-rotativos.

A seguir apresenta-se os resultados comparados com o Caso 1 para a velocidade axial de sólidos na altura de 1 metro da base do leito. Os resultados médios foram adquiridos realizando a média de *Favre* no intervalo de 8,39 segundos, e apresentados na Figura 41. Nos resultados para este Caso 3 utilizou-se diâmetro de partícula de 120 μm e densidade de 2400 kg/m^3 , diferente dos Casos 1 e 2, onde utilizou-se partículas com 75 μm e densidade de 1250 kg/m^3 .

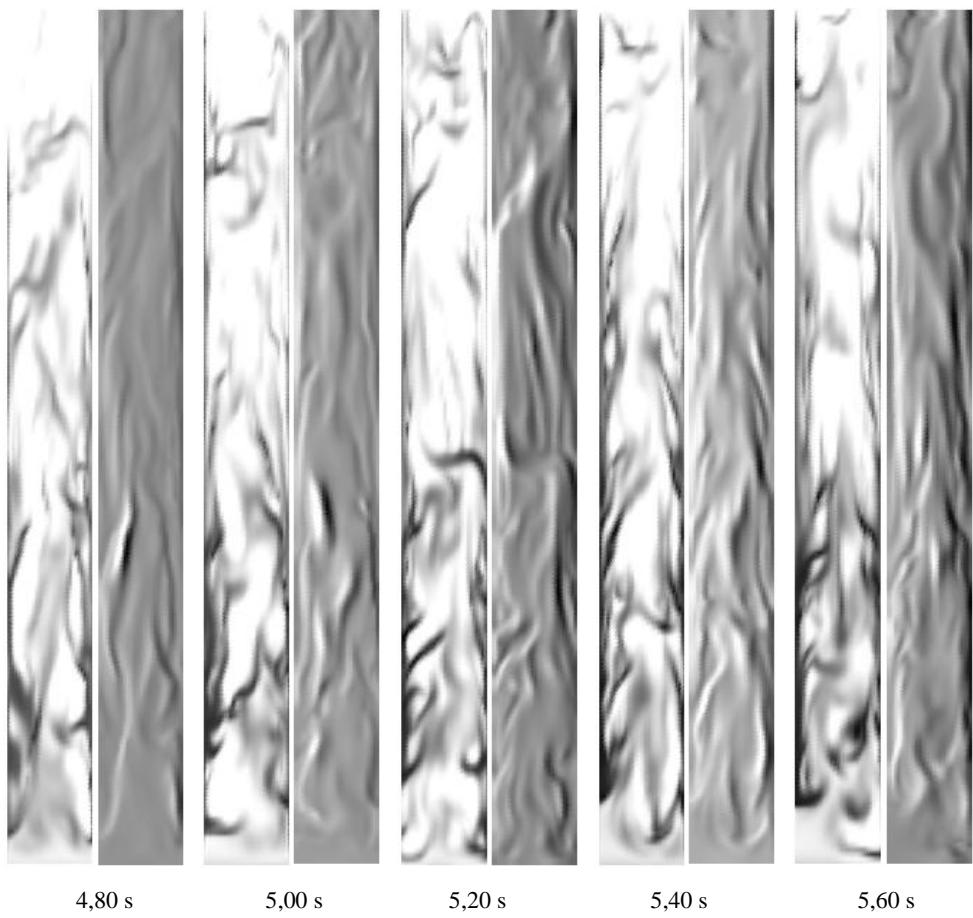


Figura 40. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s), respectivamente, perpendicular ao plano XZ.

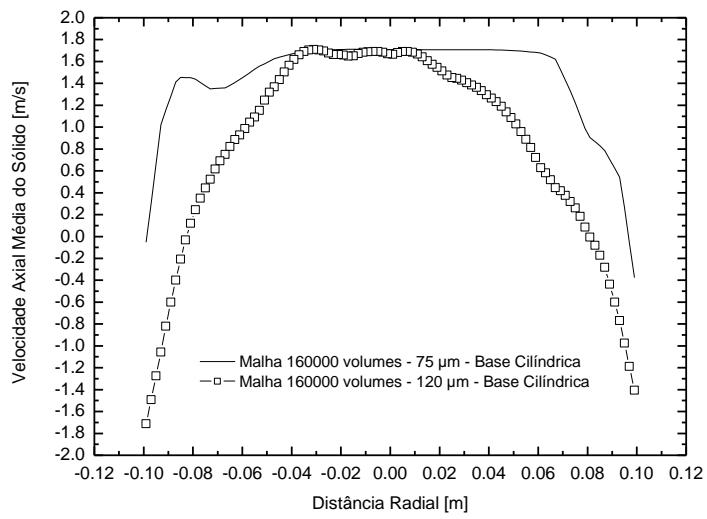


Figura 41. Comparação dos resultados médios para diferentes diâmetros de partículas, Caso 1 e 3.

Observa-se na Figura 41, onde comparam-se os resultados médios para o Caso 1 com os obtidos para o presente Caso 3, que para um mesmo refino de malha o arraste na região central é semelhante. Contudo, na região intermediária e junto a parede o comportamento é diferenciado. Os resultados médios para o Caso 3 mostram um comportamento parabólico e uma velocidade média junto a parede maior que os resultados do Caso 1.

Quando comparam-se os resultados médios do Caso 1, 2 e 3, Figura 42, observa-se que há um maior acumulo de sólido junto a parede com velocidades de descida maiores que os encontrados para os Casos 1 e 2, decorrente do aumento da concentração de partículas nesta região (Caso 3). De fato, como esperado, os resultados médios para o Caso 3 mostram um arraste menor que o observado para os Casos 1 e 2 onde o particulado apresenta diâmetro e densidade menores.

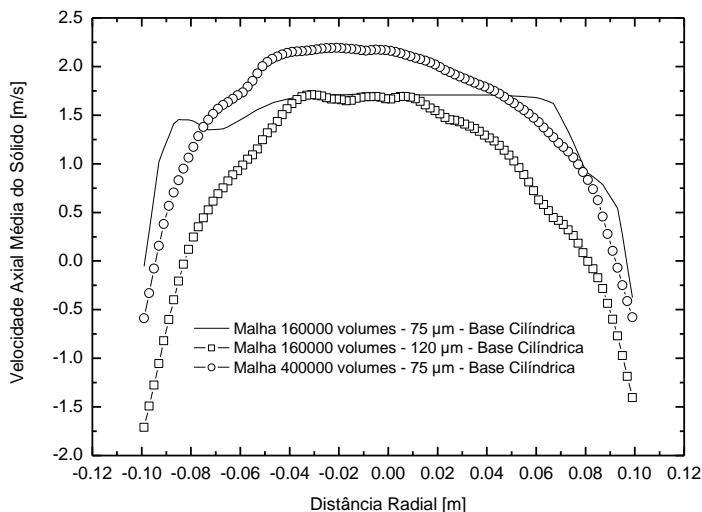


Figura 42. Comparação dos resultados médios para diferentes diâmetros de partículas, Casos 1, 2 e 3.

Observa-se ainda na Figura 42 que o aumento no diâmetro da partícula não correspondeu a um refino de malha para os resultados médios da velocidade axial do sólido comparados entre o Caso 2 e 3, tendo em vista que os perfis não se assemelham. Os perfis instantâneos de fração de sólido mostram um maior detalhe de estruturas para o Caso 3 que para o Caso 2 e 1, mas os resultados médios são substancialmente diferentes.

No item a seguir será apresentado o estudo de Caso 4, onde mantém-se a malha mais grosseira, mas utiliza-se um modelo sub-malha do tipo Smagorinsky (1963) para a fase gás e um modelo empírico para a viscosidade do sólido.

6.3.4 Apresentação de resultados: Caso 4

Este estudo de caso apresenta resultados utilizando diâmetro da partícula de 120 μm e densidade de 2400 kg/m^3 . A malha utilizada é de 160000 volumes e a geometria continua cilíndrica. Utiliza-se o modelo sub-malha de Smagorinsky (1963) como o apresentado no Capítulo 5, Tabela 3, para representar a turbulência da fase gás. Em conjunto com o modelo sub-malha, utiliza-se um modelo empírico para a viscosidade do sólido proposto por Huilin e Gidaspow (2003).

O principal objetivo deste estudo de caso é observar o comportamento dos campos de fração de sólido quando da utilização de um modelo sub-malha para a fase gás. Espera-se que os resultados qualitativos revelem um maior detalhe nos campos de fração de sólidos.

O modelo empírico para a viscosidade de sólido foi implementado para comparar os resultados posteriores, com o modelo sub-malha para a fase sólido utilizado pelo autor da presente tese, apresentado no estudo de Caso 5, no subitem a seguir. Ressalta-se que ambos os modelos foram implementados pelo autor no software de simulação CFX-5.6, tendo em vista que o software não permite a utilização da simulação de grandes escalas quando resolvem-se duas ou mais fases.

A base conceitual por traz de um modelo sub-malha está em modelar a troca de informações entre duas bandas do espectro de energia, a banda resolvida e a banda não resolvida. Conceitualmente, a utilização de um modelo sub-malha para a fase sólido e gás, é importante, haja vista que o modelo de dois fluidos é um modelo advindo de um processo de média. Sendo assim, os gradientes associados à presença de uma partícula não podem ser percebidos por um modelo com essas características. Portanto, utiliza-se um modelo que traz as informações associadas às menores escalas. Como já visto nas subseções anteriores, a malha refinada revelou uma relação entre a fração de sólido e as taxas de deformação. O que o modelo sub-malha faz é exatamente incorporar este efeito no cálculo da viscosidade.

Para comparar os resultados do presente estudo de caso com os precedentes, são apresentados os campos de fração de sólido no início das simulações, da mesma forma como apresentado nas subseções anteriores, para que possa ser feita uma análise qualitativa dos resultados. A Figura 43 apresenta os campos de fração de sólido a partir de 0,04 segundos do início da simulação.

Observa-se que já a 0,2 segundos o perfil de fração de sólidos não é comparável ao estudo de caso anterior. Este comportamento mantém-se em todos os tempos apresentados na figura. A formação de aglomerado de sólidos inicia-se em 0,4 segundos, quando no caso anterior iniciou-se em 1,2 segundos. Evidencia-se a presença de dois vórtices contra-rotativos semelhantes aos da Figura 36 para o tempo de 1,6 segundos. A diferença, além do tempo de

formação dos vórtices, é a região onde estes são formados. O detalhe em tonalidade esverdeada, de concentração média de partículas, acima dos dois vórtices, não é captado por nenhum dos casos anteriores. Diferentemente dos casos anteriores, o perfil da frente que ascende verticalmente torna-se parabólico, a partir de 0,47 segundos, provavelmente pelo efeito da correlação empírica utilizada para correção da viscosidade do sólido proposta por Huilin e Gidaspow (2003).

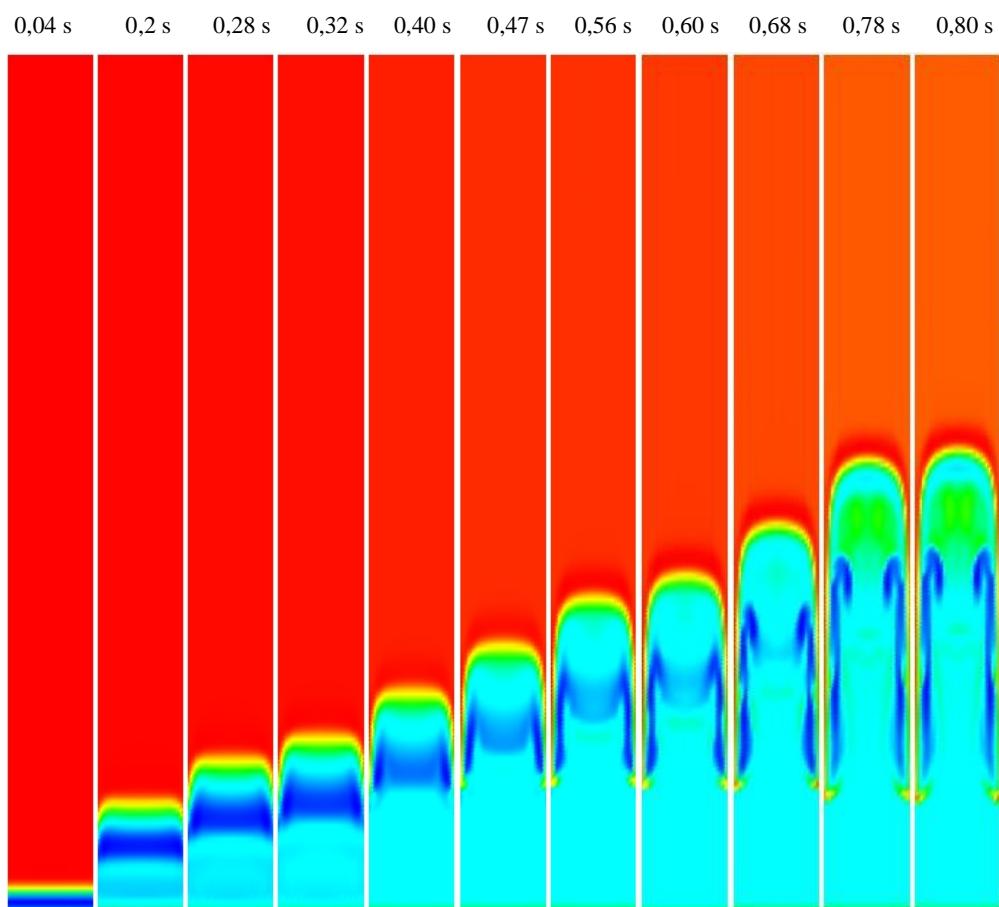


Figura 43. Evolução do campo de fração de sólido no centro da coluna plano, XZ. Da esquerda para direita: 0,04, 0,2, 0,28, 0,32, 0,4, 0,47, 0,56, 0,60, 0,68, 0,78 e 0,80 segundos. A tonalidade avermelhada corresponde a fração de sólidos 0,4 e azul mais escuro 0,02.

Fica evidente, que o modelo sub-malha mostra mais detalhes quando comparado aos casos anteriores onde a viscosidade era constante. A Figura 44 apresenta os resultados dos tempos subsequentes aos anteriores.

Os resultados apresentados na Figura 44 evidenciam a presença de estruturas as mais variadas, desde *clusters* descendo pela parede, *strands* estirados pelo efeito dos vórtices e comportamento significativamente diferente de todos os casos estudados anteriormente. A partir de 0,88 segundos observa-se a formação de uma estrutura densa, no centro do leito,

similar à encontrada na simulação para malha refinada, que se mantém por 0,38 segundos. Depois deste período, a estrutura ou desaparece do plano, ou é consumida para formar estruturas alongadas neste mesmo plano.

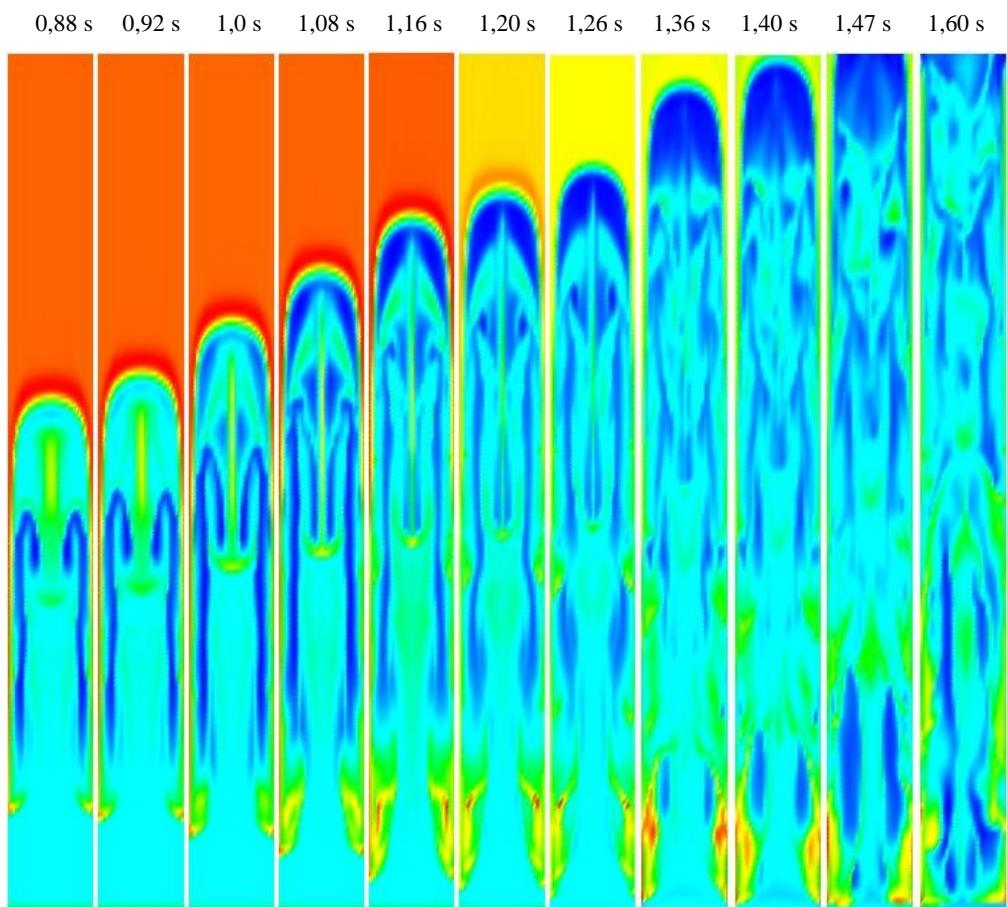


Figura 44. Evolução do campo de fração de sólido no centro da coluna plana, XZ. Da esquerda para direita: 0,88, 0,92, 1,0, 1,08, 1,16, 1,20, 1,26, 1,36, 1,40, 1,47 e 1,60 segundos. Tonalidade avermelhada corresponde a fração de sólidos 0,4 a 0,5 e azul mais escuro 0,02.

A Figura 45 apresenta os campos de fração de sólido e vorticidade, semelhante à Figura 37. Observa-se que não há nenhuma semelhança dos resultados da Figura 45 com os resultados da Figura 37, no que se refere aos perfis de fração de sólidos. Contudo, os campos de fração de sólido e vorticidade são de uma semelhança qualitativa fascinante. Novamente, onde há maior concentração de partículas tem-se baixa vorticidade. Observam-se estruturas contra rotativas estiradas em todas as regiões do leito. De fato a utilização de um modelo sub-malha para a fase gás revela uma gama enorme de detalhes não revelados pelos estudos de caso onde este não foi utilizado.

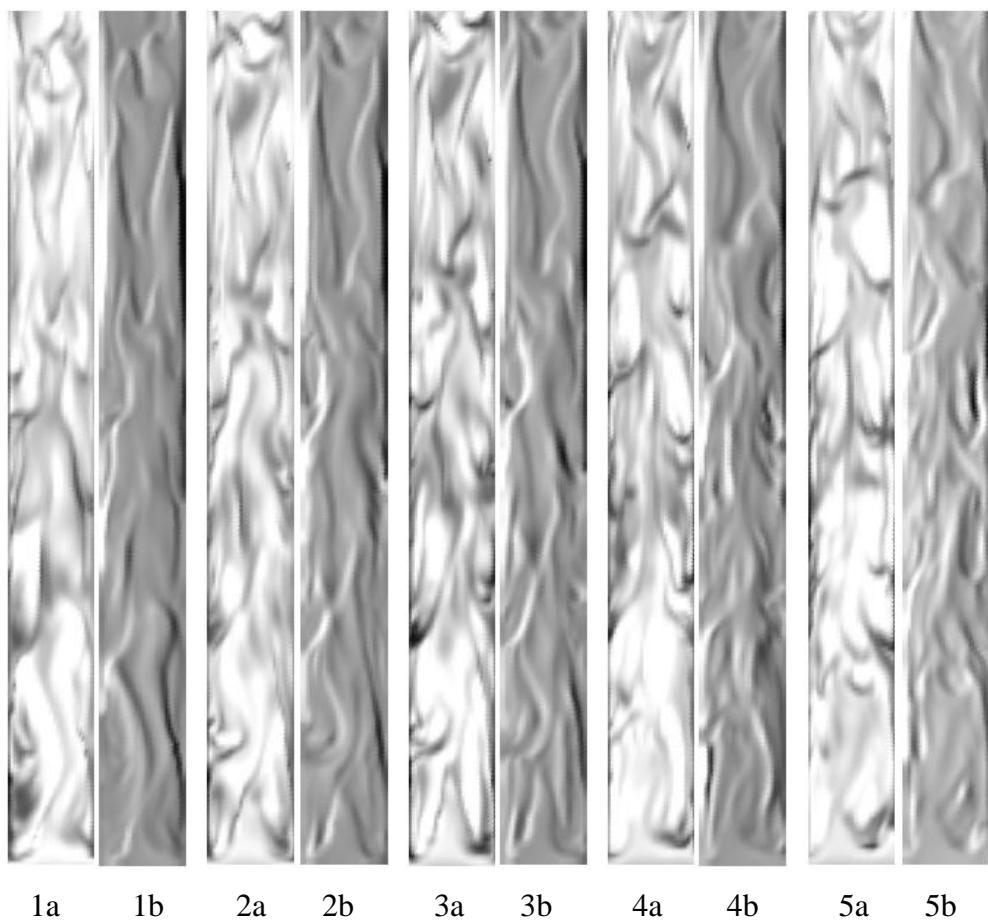


Figura 45. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s) perpendicular ao plano XZ. 1a, 2a, 3a, 4a, 5a, fração de sólidos para 1,80, 1,88, 1,92, 2,00 e 2,10 segundos respectivamente. 1b, 2b, 3b, 4b, 5b, componente da vorticidade (1/s), no plano XZ, para os mesmos tempos, respectivamente.

Os campos de fração de sólidos e vorticidade para tempos maiores são apresentados na Figura 46, semelhante aos tempos da Figura 39. Comparando-se os campos de fração de sólidos, observa-se que os resultados do presente estudo de caso, utilizando modelo sub-malha para a fase gás, não apresenta a região superior do leito com um perfil anular. Esta região é mais densa, quando comparada com os resultados da Figura 39, sendo que a base do leito por sua vez é menos densa. A relação da fração de sólidos com a vorticidade e a taxa de deformação mantém-se, com a formação de vórtices contra-rotativos estirados, em locais próximos a alta concentração de partículas e a estruturas de *clusters* estirados.

Um detalhe da Figura 46, para o tempo de 4,6 segundos é apresentado na Figura 47. A figura aponta as estruturas encontradas em todo o domínio do leito, onde pode-se observar que na região onde há *cluster* tem-se baixa vorticidade, e por conseguinte, alta taxa de deformação.

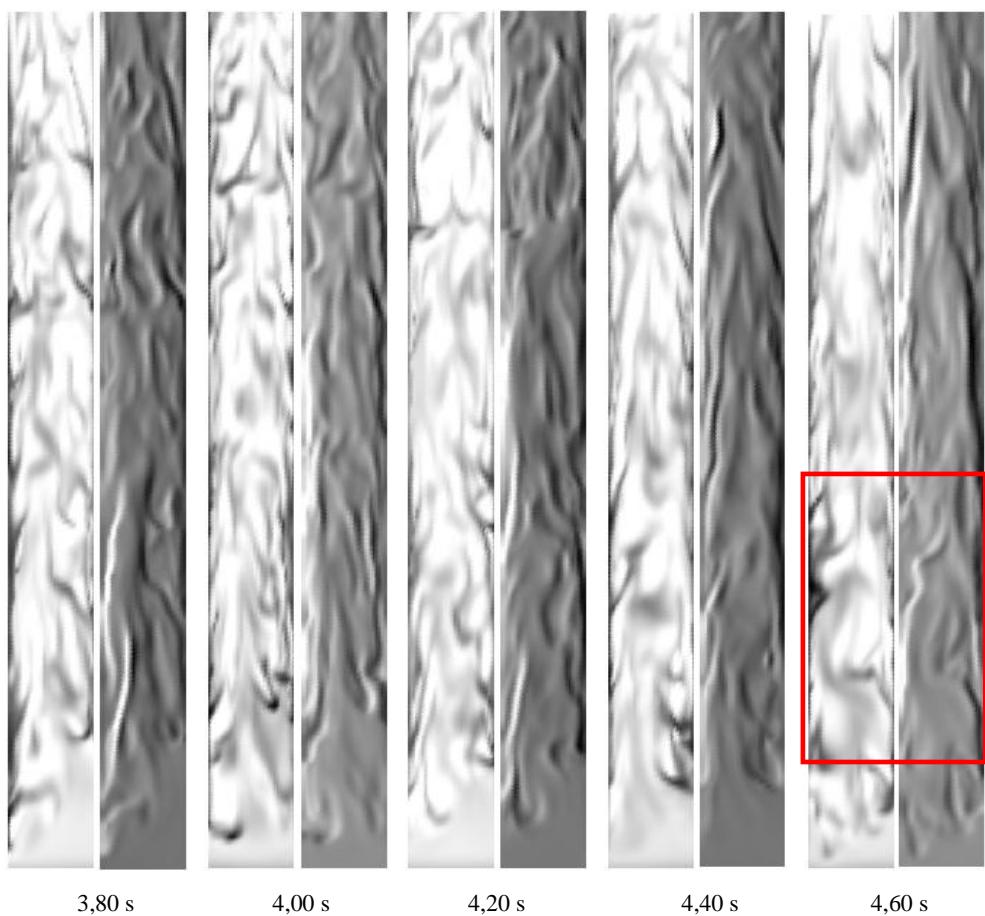


Figura 46. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s), respectivamente, perpendicular ao plano XZ. Retângulo avermelhado representa detalhe para a Figura 47.

Ao lado de estruturas estiradas de concentração mediana de sólidos, os chamados *strands*, encontram-se tubos contra-rotativos direcionados verticalmente. Isto deixa claro que as mencionadas estruturas são formadas por mecanismos fluido dinâmicos associados às estruturas turbinholares encontradas em leitos fluidizados turbulentos. Mais a frente serão discutidas as faixas de aplicação associadas às relações entre o diâmetro da partícula e as escalas da turbulência.

Na Figura 48 apresenta-se a comparação da velocidade axial média dos sólidos dos Casos 1,2 e 4. Observa-se que a inclusão de modelo sub-malha resulta em uma aproximação com os resultados da malha refinada (Caso 2) na região junto a parede, mantendo o comportamento parabólico observado para o Caso 3 anterior.

Quando se compara com o resultado anterior, Caso 3, onde não foi utilizado modelo sub-malha (Ver Figura 49) observa-se que a inclusão do modelo sub-malha resulta em uma menor acumulação de sólidos junto a parede com velocidades descendentes menores que as encontradas para o Caso 3. O comportamento na região diluída (centro do reator) assemelha-se ao encontrado para o Caso 3 com um perfil parabólico. Importante lembrar que o modelo

sub-malha foi implementando apenas para a fase gás neste caso e para a fase sólido o modelo empírico proposto por Huilin e Gidaspow (2003). No subitem a seguir serão apresentados resultados utilizando modelo sub-malha para a fase gás e sólido.

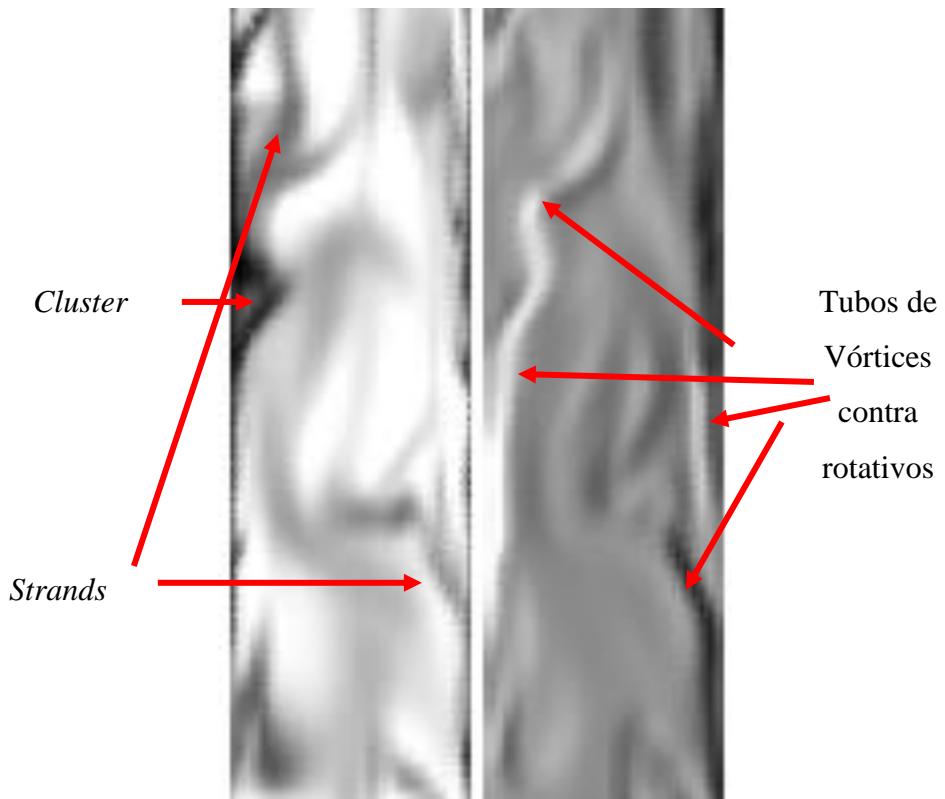


Figura 47. Detalhe do campo de fração de sólido e vorticidade do tempo 4,6 segundos, conforme encontrado na Figura 47.

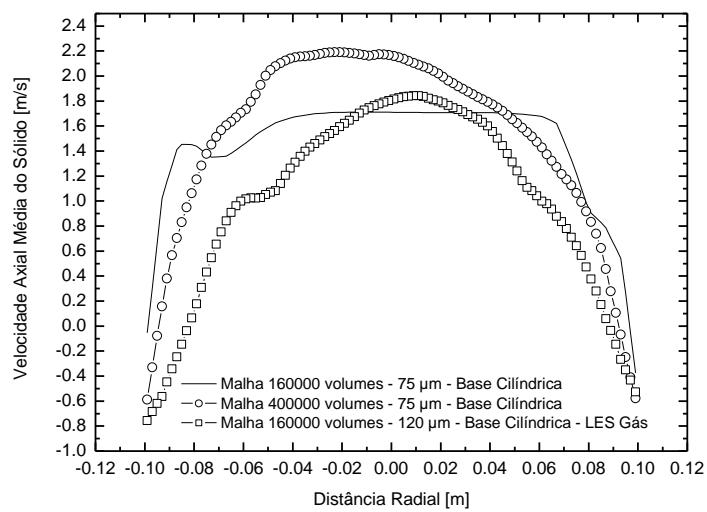


Figura 48. Comparação resultados médios para diferentes diâmetros de partículas e modelo sub-malha para a fase gás e modelo empírico para viscosidade da fase sólido.

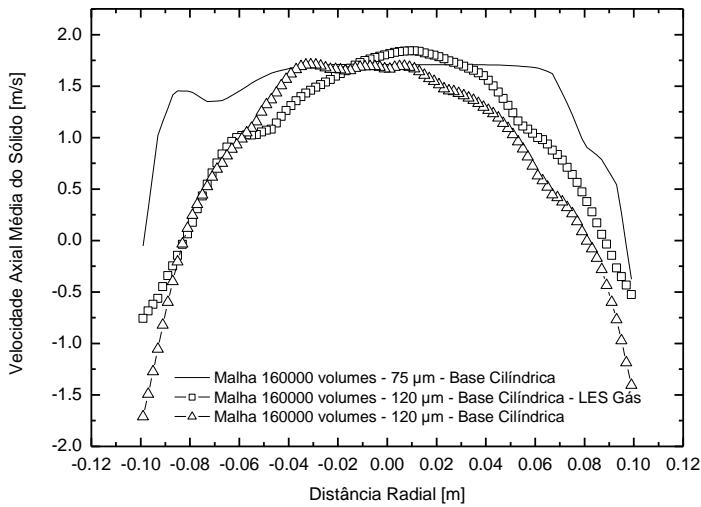


Figura 49. Comparação de resultados médios para diferentes diâmetros de partículas e modelo sub-malha para a fase gás e modelo empírico para a viscosidade da fase sólido.

6.3.5 Apresentação de resultados: Caso 5

Este estudo de caso apresenta resultados utilizando diâmetro da partícula de 120 μm e densidade de 2400 kg/m^3 . A malha utilizada é de 160000 volumes e a geometria é cilíndrica. Utiliza-se o modelo sub-malha de Smagorinsky (1963) como o apresentado no Capítulo 5, Tabela 3, para representar a turbulência da fase gás e um modelo sub-malha, implementado pelo autor, para representar as flutuações da fase partícula, como o apresentado no referido capítulo e Tabela 3.

O modelo sub-malha para a fase sólido parte da sugestão de Agrawal (2000), que sugere a inclusão de um modelo sub-malha levando em conta as flutuações da escala da partícula.

Os resultados do modelo são comparados com os resultados numéricos apresentados anteriormente, especialmente o Caso 4, onde utilizou-se um modelo de ajuste da viscosidade empírico para a fase sólido, função da fração de sólido, tendo em vista os bons resultados apresentados no item anterior e os ótimos resultados encontrados por Huilin e Gidaspow (2003). A comparação com os resultados do Caso 4 dará uma boa idéia da utilidade do modelo proposto e de sua consistência no que concerne aos resultados qualitativos e quantitativos. Mais à frente, em outro estudo de caso, baseado nos resultados experimentais de Luo (1987) e Tsuo e Gidaspow (1989), reportado por Gidaspow (1994), este modelo será avaliado para outras condições de escoamento, em um leito fluidizado com razão de aspecto

semelhante a um reator de craqueamento catalítico. No momento faremos apenas comparação com resultados numéricos do presente trabalho.

Apresenta-se a evolução temporal do inicio do escoamento na Figura 50. A partir de 0,6 segundos a frente que avança começa a ter um formato do tipo parabólico, que fica estabelecido em torno de 0,76 segundos. A frente de deslocamento parece mover-se com menor velocidade, contudo o comportamento seja semelhante. O comportamento do campo de frações de sólido é semelhante ao apresentado no Caso 4, Figura 43. Observa-se a presença de dois vórtices contra-rotativos estirando-se na direção vertical, semelhantes aos encontrados para os resultados do Caso 4.

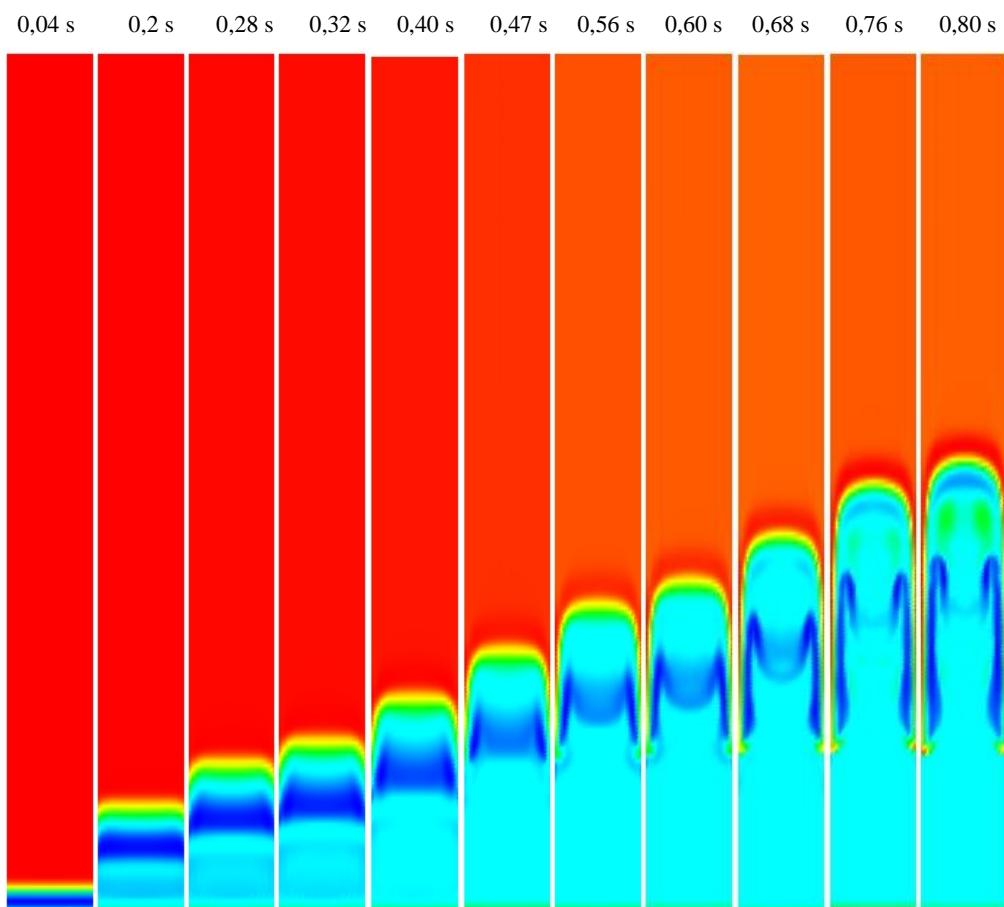


Figura 50. Evolução do campo de fração de sólido no centro da coluna plano, XZ. Da esquerda para direita: 0,04, 0,2, 0,28, 0,32, 0,4, 0,47, 0,56, 0,60, 0,68, 0,76 e 0,80 segundos. A tonalidade avermelhada corresponde a fração de sólidos 0,4 e azul mais escuro 0,02.

A Figura 51 compara os resultados para o tempo de 0,8 segundos dos Casos 4 e 5, onde observa-se que a frente caminha com velocidade menor no Caso 5 comparada ao Caso 4. Os *clusters* junto à parede formam-se numa região mais próxima da base do leito, e os vórtices encontram-se mais alongados que no Caso 5.

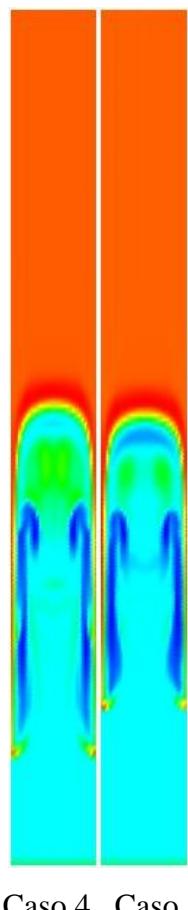


Figura 51. Comparação do campo de fração de sólidos no tempo 0,8 segundos para resultados dos Casos 4 e 5, respectivamente.

Observa-se (Figura 51) a formação de dois vórtices contra-rotativos de sólido acima dos vórtices da fase gás, para o Caso 5, efeito não observado no Caso 4, onde aparece uma região compacta mais densa na região superior dos vórtices da fase gás. Os comportamentos de ambos os casos são qualitativamente semelhantes com exceção do avanço da frente ascendente e os *cluster* formados na região junto a parede, como mencionado acima.

Como primeira observação com relação ao comportamento revelado pela Figura 51, pode-se afirmar que o modelo sub-malha implementado para a fase sólido (Caso 5), tem um comportamento junto a parede diferente do modelo empírico para a fase sólido implementado no Caso 4, indicando que a camada limite forma-se de forma diferente.

De forma a comparar os resultados, apresenta-se a evolução dos campos de fração de sólido para tempos maiores que 0,8 segundos, como apresentado para o Caso 4 na Figura 44.

A Figura 52 apresenta os resultados dos campos de fração de sólido a partir de 0,8 segundos. Observa-se a formação de uma estrutura densa de sólidos no centro da coluna, a partir de 1 segundo, semelhante a estrutura encontrada no Caso 4. Esta estrutura está abaixo,

para o Caso 4, quando comparada com sua localização para o Caso 5 (Ver Figura 53). No Caso 5 esta estrutura mantém-se por 0,6 segundos, e no Caso 4 por 0,38 segundos.

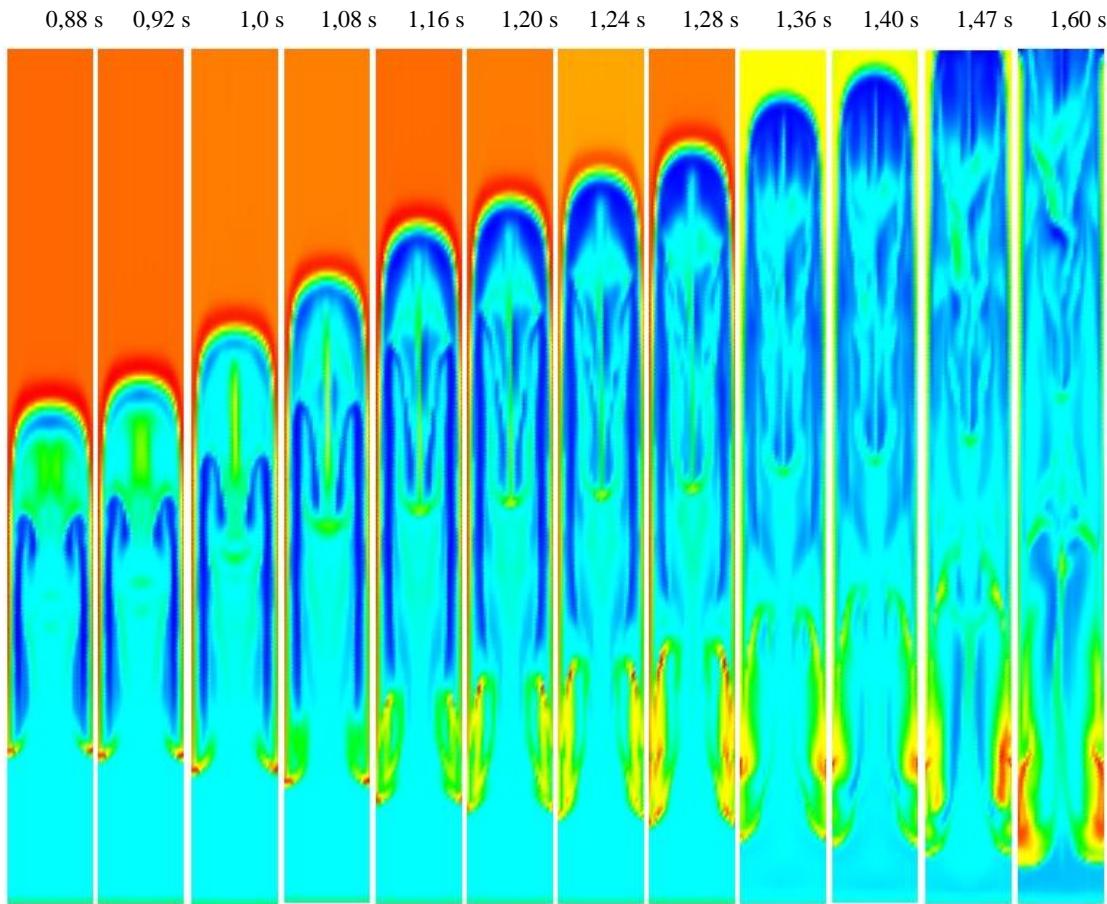


Figura 52. Evolução do campo de fração de sólido no centro da coluna plana, XZ. Da esquerda para direita: 0,88, 0,92, 1,0, 1,08, 1,16, 1,20, 1,24, 1,28, 1,36, 1,40, 1,47 e 1,60 segundos. A tonalidade avermelhada corresponde a fração de sólidos de 0,4 a 0,5 e azul mais escuro 0,02.

Como pode-se observar pelos resultados da Figura 51, o escoamento de sólido para o Caso 5 está atrasado em relação ao Caso 4. A viscosidade do sólido para o tempo de 1,6 segundos (Caso 5), varia de 0,021 a 0,37 kg/ms no plano central, e para o Caso 4 no mesmo tempo, varia de 3×10^{-5} a 34,05 kg/ms. Provavelmente as diferenças na viscosidade do sólido sejam a causa do comportamento diferenciado dos perfis de fração de sólido. No caso da viscosidade do gás, tem-se para o mesmo tempo, uma viscosidade variando de $1,84 \times 10^{-5}$ a $3,6 \times 10^{-4}$ kg/ms (Caso 4), e para o Caso 5 tem-se a viscosidade variando de $1,79 \times 10^{-5}$ a $2,14 \times 10^{-4}$ kg/ms. Os valores para a viscosidade do gás são da mesma ordem de grandeza. Assim, pode-se afirmar que o Caso 4 pode ser visto, para a fase sólido, como “mais” dissipativo que o Caso 5, para o tempo de 1,6 segundos (Figura 53).

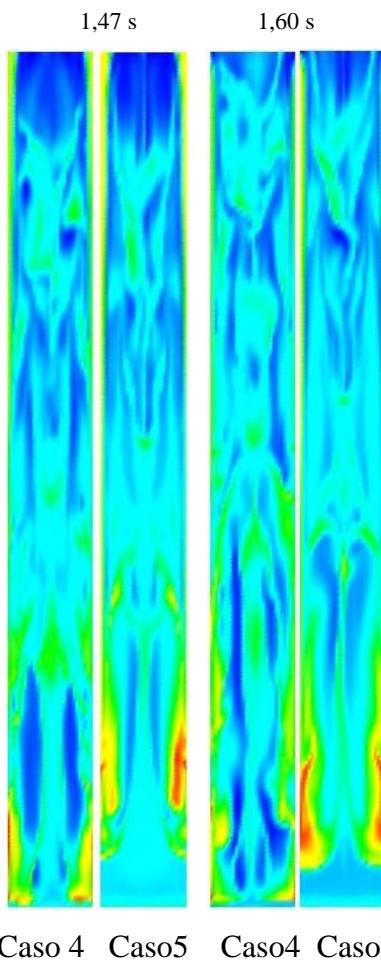


Figura 53. Comparação dos campos de fração de sólido nos tempos 1,47 e 1,6 segundos para os Casos 4 e 5.

Outra diferença importante é a presença (Ver Figura 53) de dois *clusters* com dimensões pronunciadas para o tempo de 1,6 segundos presentes próximo à região da base do reator, formados pela descida de sólido pela parede. Estas estruturas são de dimensão maior quando comparadas com os resultados do Caso 4.

A seguir são apresentados os resultados de campos de fração de sólidos e vorticidade para tempos maiores. A Figura 54 apresenta os resultados para tempos a partir de 1,8 segundos, onde é possível observar a presença de estruturas de vórtices como mencionado nos estudos de caso anteriores. Estas estruturas mantêm-se próximas a regiões de alta concentração de partículas. Os valores de vorticidade são menores que no Caso 4, variando de 200 a 70 (1/s) para os campos apresentados na Figura 54. Evidencia-se, como no Caso 4, a semelhança dos campos de fração de sólidos e vorticidade. Com relação aos campos de fração de sólidos, observa-se que para os tempos apresentados na Figura 54, a região próxima à base

do reator mantém alta concentração de partículas, similar ao comportamento descrito para o Caso 4.

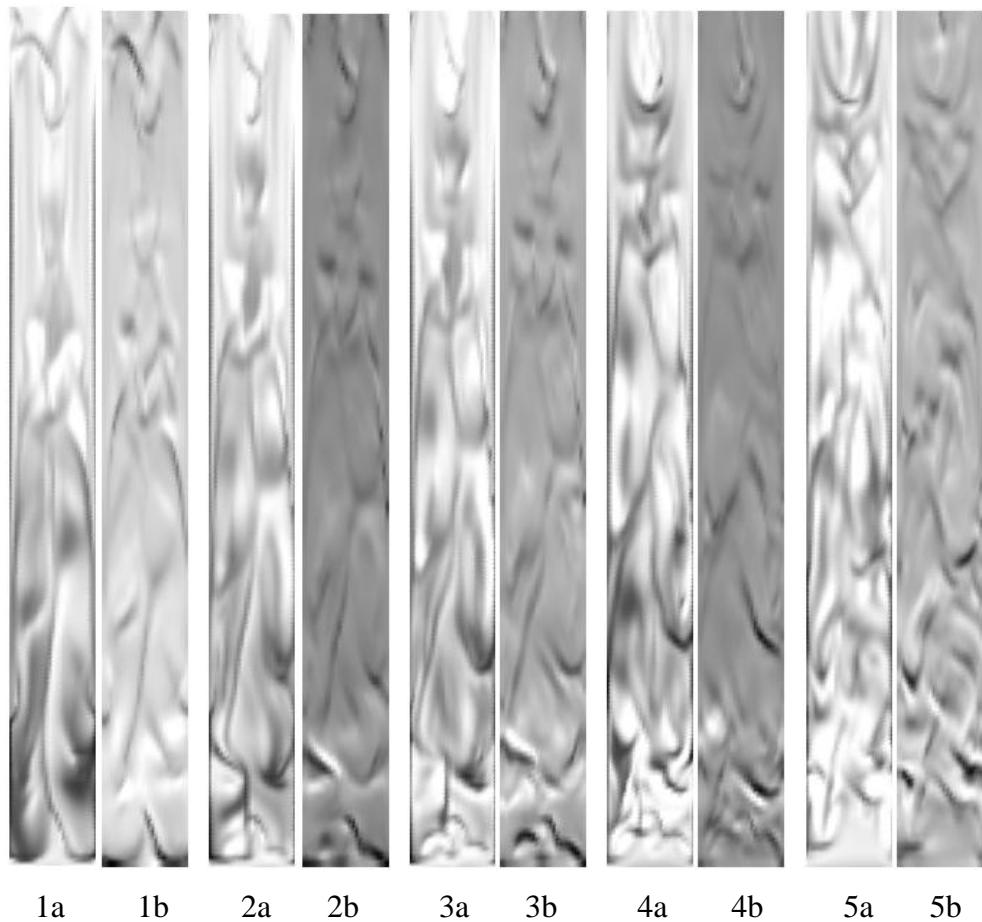


Figura 54. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade ($1/s$) perpendicular ao plano XZ. 1a, 2a, 3a, 4a, 5a, fração de sólidos para 1,80, 1,88, 1,92, 2,00 e 2,10 segundos respectivamente. 1b, 2b, 3b, 4b, 5b, componente da vorticidade ($1/s$), no plano XZ, para os mesmos tempos, respectivamente.

Os campos de fração e de vorticidade para tempos maiores, a partir de 3,8 segundos, são apresentados na Figura 55, com tempos iguais aos apresentados na Figura 46, para o Caso 4. Os resultados assemelham-se qualitativamente aos apresentados para o Caso 4. Evidencia-se a presença de tubos de vórtices contra-rotativos próximos a estruturas de *strands*, e *clusters* em regiões de baixa vorticidade. O modelo sub-malha proposto comporta-se de forma semelhante, no que concerne ao aspecto das estruturas turbinholares, ao modelo empírico proposto por Huilin e Gidaspow (2003). Isto não valida o modelo proposto, mas mostra que ele é capaz de obter resultados fisicamente consistentes.

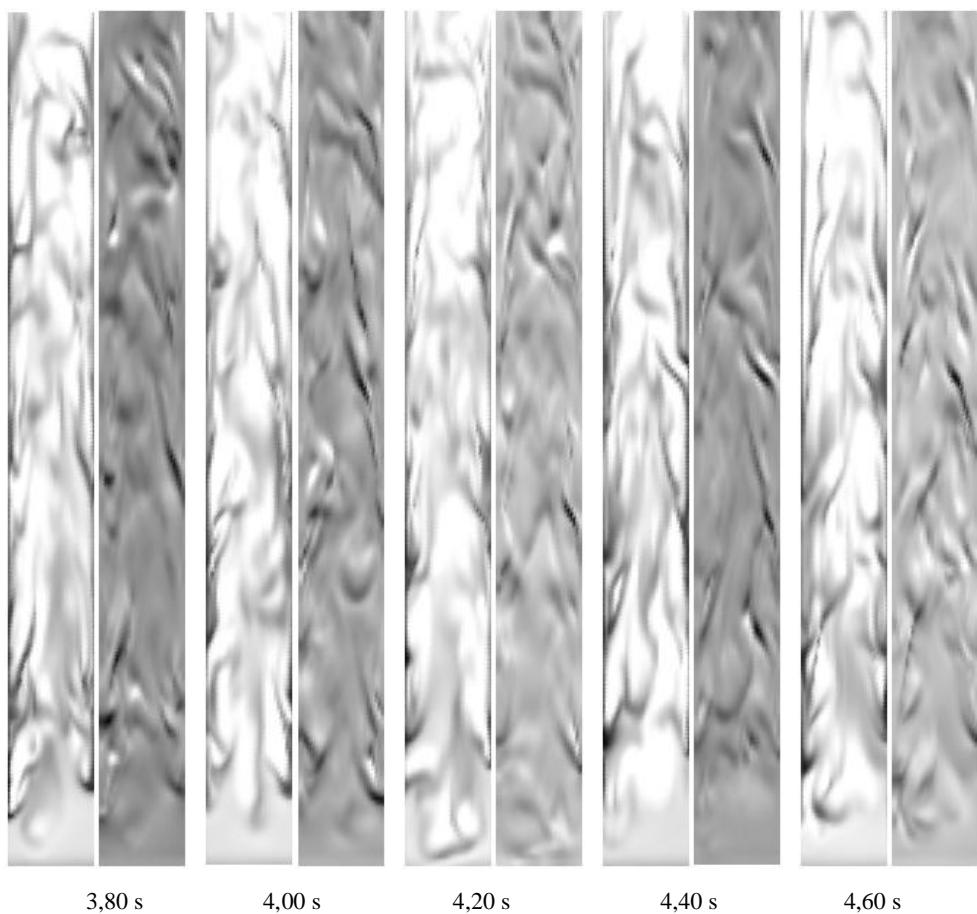


Figura 55. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s), respectivamente, perpendicular ao plano XZ.

Neste contexto, cabe ressaltar que nas simulações realizadas utilizando-se o modelo sub-malha proposto não houve qualquer problema de convergência. Na verdade, no que diz respeito ao aspecto da convergência numérica, esta mostrou-se mais rápida, quando comparada a simulações que foram realizadas sem a utilização de um modelo sub-malha. De certa forma isto se deve, talvez, ao fato de que os campos de velocidade são melhor resolvidos, levando em conta os maiores gradientes.

O presente estudo de caso utilizou-se de um modelo sub-malha (**LES**) para a fase gás e sólido o qual foi simulado utilizando uma malha grosseira, quando comparada a malha utilizada para o Caso 2, que é objeto de comparação na Figura 56. Esta comparação é importante, pois espera-se, quando da utilização de um modelo sub-malha, que os resultados aproximem-se dos resultados da malha refinada, apesar de que no Caso 2 o diâmetro de partícula seja de 75 μm e densidade de 1250 kg/m^3 , enquanto no presente estudo de Caso 5 as partículas tem 120 μm e densidade 2400 kg/m^3 . Estas diferenças implicam em um comportamento fluidodinâmico diferenciado e será discutido com profundidade no sub-item Discussão.

Desta forma, a Figura 56 compara os resultados do Caso 5 com o resultado do Caso 2. Observa-se que os resultados aproximam-se dos resultados da malha refinada, como esperado. A aproximação junto a parede é semelhante ao do Caso 2, mesmo com diferentes propriedades utilizadas para o Caso 2 como apontado acima.

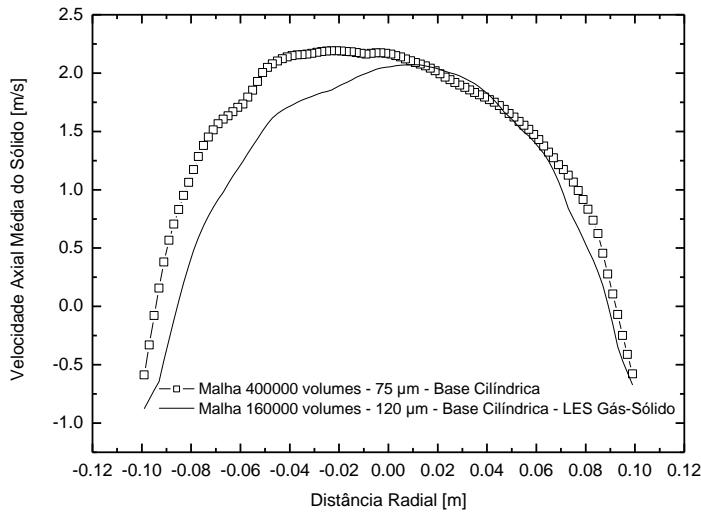


Figura 56. Perfil de velocidade axial da fase sólida comparado entre Casos 5 e 2.

Quando comparamos os resultados médios do Caso 4 com o Caso 5 (Figura 57) observa-se que os resultados médios do Caso 5 são qualitativamente semelhantes aos resultados do Caso 4. No centro, região diluída, os resultados para o modelo sub-malha utilizando **LES** para o gás e sólido mostram um arraste maior que no Caso 4. O comportamento dos resultados numéricos médios da velocidade axial do sólido para o Caso 5 na região junto a parede e na região intermediária ao centro é semelhante ao obtido para o Caso 4.

Deve-se lembrar que os resultados apresentados para todos os casos anteriores, utilizou-se uma geometria cilíndrica, e os resultados experimentais são para uma reator de seção quadrada. Com os resultados apresentados neste sub-item e nos anteriores pode-se afirmar que o modelo sub-malha comporta-se semelhante a um refino de malha e este aumenta o arraste em regiões diluídas (centro), com comportamento oposto junto a parede. A comparação do modelo sub-malha proposto para ambas as fases (Caso 5) com os resultados obtidos utilizando-se o modelo empírico proposto por Huilin e Gidaspow (2003) mostra a coerência física do modelo proposto no presente trabalho, tendo em vista os resultados apresentados na Figura 57, ou seja, tanto na região diluída como na região densa do reator o comportamento mostrou-se semelhante.

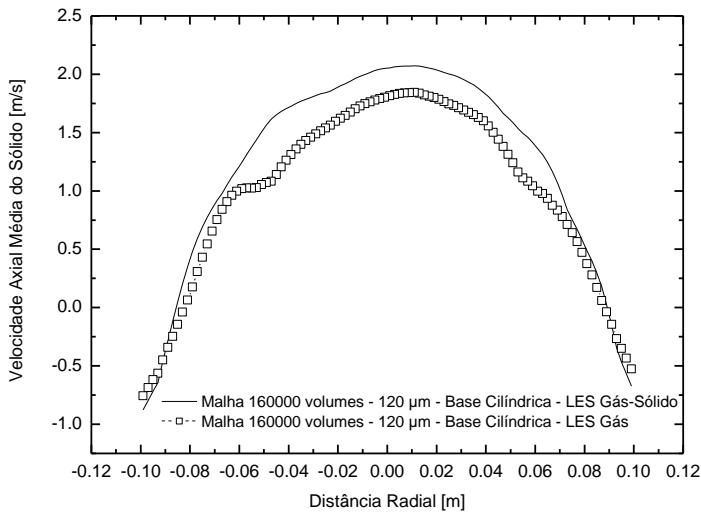


Figura 57. Perfil de velocidade axial médio da fase sólido comparado entre Casos 5 e 4.

6.3.6 Apresentação de resultados: Caso 6

Este estudo de caso apresenta resultados utilizando diâmetro da partícula de 75 μm e densidade de 1250 kg/m^3 , a malha utilizada é de 400000 volumes, e a geometria utilizada continua cilíndrica. Utiliza-se o modelo sub-malha de Smagorinsky (1963) como o apresentado no Capítulo 5, Tabela 3, para representar a turbulência da fase gás e um modelo sub-malha, implementado pelo autor, para representar as flutuações da partícula.

O principal objetivo é saber se o comportamento na região central será melhor ser captado com uma malha refinada utilizando modelo sub-malha. Apresenta-se inicialmente os resultados da evolução temporal no início da simulação para observar as modificações qualitativas geradas pelo modelo sub-malha para este refino de malha.

Observa-se na Figura 58 a evolução temporal dos campos de fração de sólido a partir do início da simulação. Até 0,2 segundos o perfil mantém similar aos casos anteriores; a partir deste tempo, aparecem flutuações na frente que avança verticalmente, gerando um fluxo ascendente de gás através de caminhos preferenciais. Evidencia-se a capacidade do modelo sub-malha de captar detalhes do escoamento que não estavam evidentes nos resultados das simulações apresentadas anteriormente.

Os vórtices contra-rotativos próximos à região da parede, encontrados nos resultados anteriores, agora procuram escoar através do leito, buscando caminhos preferenciais, gerando assim instabilidades. A estrutura densa encontrada no Caso 2, para o mesmo refino de malha e diâmetro de partícula, aparece com bastante detalhe a partir de 0,68 segundos. Através da evolução temporal é possível observar o mecanismo de formação desta estrutura, que

basicamente pode ser explicado através de caminhos preferenciais tomado pelo gás para escoar através da estrutura de sólidos, bem como a zona cisalhante gerada entre os vórtices contra-rotativos. Esta quantidade de detalhes não é captado sem o modelo sub-malha.

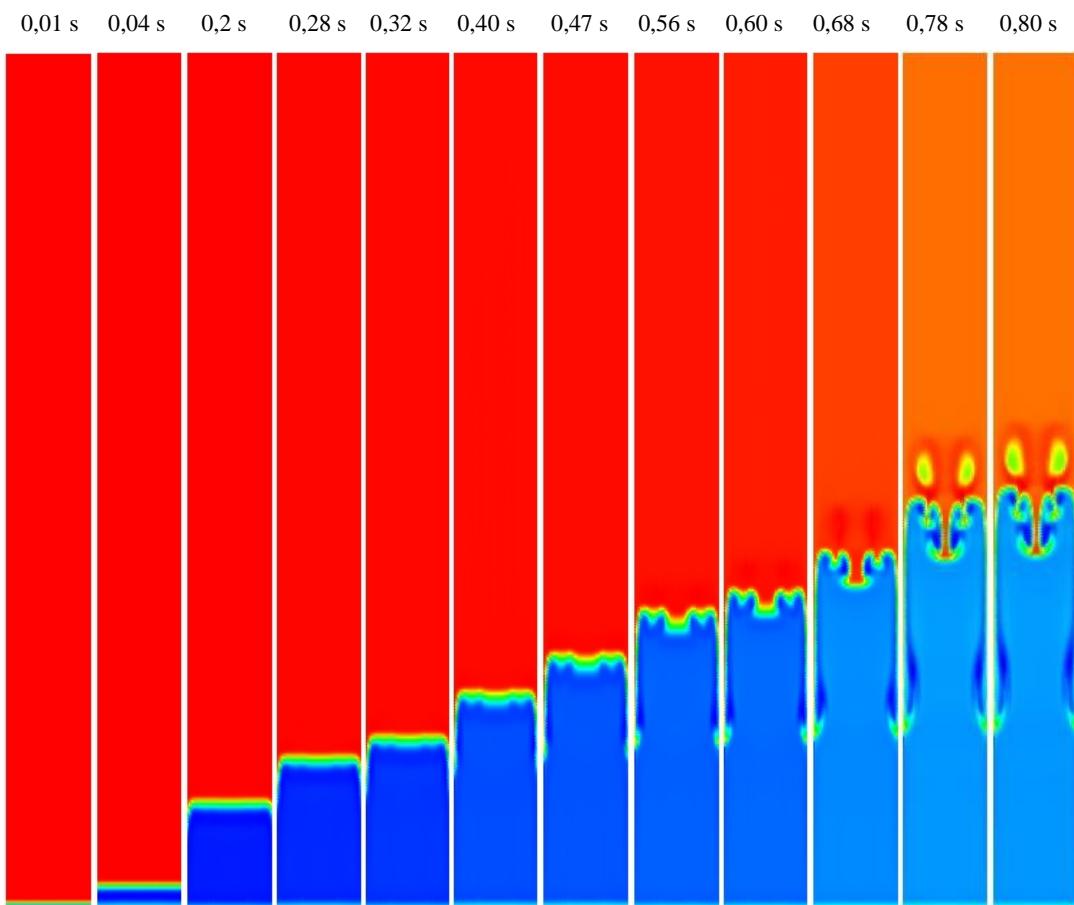


Figura 58. Evolução do campo de fração de sólido no centro da coluna plano, XZ. Da esquerda para direita: 0,01, 0,04, 0,2, 0,28, 0,32, 0,4, 0,47, 0,56, 0,60, 0,68, 0,78 e 0,80 segundos. A tonalidade avermelhada corresponde a fração de sólidos 0,4 e azul mais escuro 0,02.

Este aspecto pode ser melhor observado na evolução temporal apresentada na Figura 59. O gás procura a melhor forma para passar através da estrutura densa, os vórtices aumentam sua magnitude, gerando uma zona cisalhante entre eles, produzindo uma compressão do sólido presente nesta região, formando uma estrutura densa de sólidos na região central superior do leito. A partir de 1,24 segundos o gás alcança a região superior, formando “*fingers*” de gás, e estruturas turbinhônicas de menor intensidade, sempre na forma de vórtices contra rotativos.

Os resultados das Figuras 58 e 59, mostram detalhes que não apareceram em nenhum dos resultados apresentados anteriormente, mostrando qualitativamente que o modelo sub-

malha resolve melhor os campos de velocidade e fração de sólido. O campo de fração de sólidos na região próxima à base do reator mantém-se constante, sem a formação ou queda de *clusters*, como os resultados apresentados para a malha refinada sem a utilização de modelo sub-malha, Caso 2.

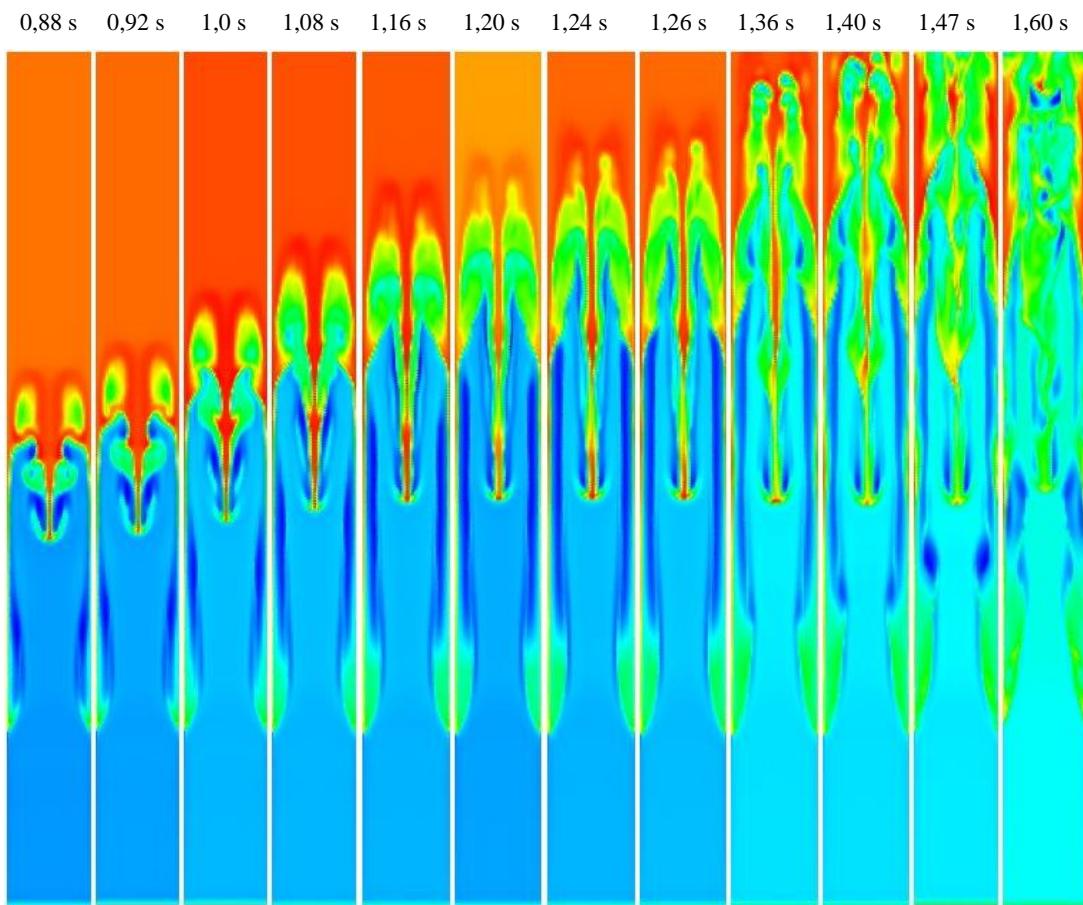


Figura 59. Evolução do campo de fração de sólido no centro da coluna plana, XZ. Da esquerda para direita: 0,88, 0,92, 1,0, 1,08, 1,16, 1,20, 1,24, 1,26, 1,36, 1,40, 1,47 e 1,60 segundos. A tonalidade avermelhada corresponde a fração de sólidos 0,4 e azul mais escuro 0,02.

A seguir apresentam-se resultados para tempos maiores, comparando os campos de fração de sólido e vorticidade, como nos casos anteriores. A Figura 60 apresenta os resultados comparativos dos campos de vorticidade e fração de sólidos para tempos a partir de 1,8 segundos. Observa-se a formação de estruturas semelhantes às encontradas para malha refinada, contudo com maior detalhamento.

Observa-se no tempo de 1,8 segundos, que o *cluster* denso presente no Caso 2 está bem acima do *cluster* denso, já se desfazendo, no presente caso. O *cluster* denso no Caso 2

mantém-se ainda até 2,3 segundos enquanto que para o presente caso desfaz-se a partir de 1,9 segundos, como comentado anteriormente.

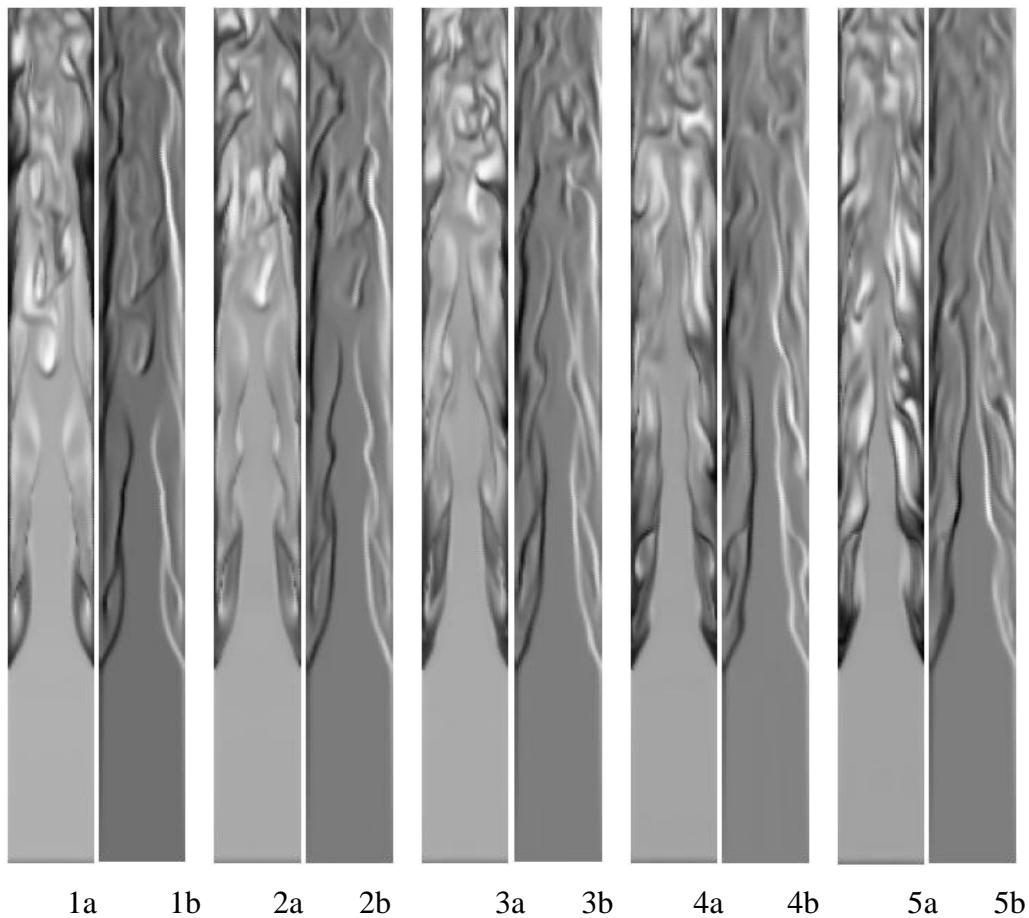


Figura 60. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade ($1/s$) perpendicular ao plano XZ. 1a, 2a, 3a, 4a, 5a, fração de sólidos para 1,80, 1,90, 2,00, 2,10 e 2,20 segundos respectivamente. 1b, 2b, 3b, 4b, 5b, componente da vorticidade ($1/s$), no plano XZ, para os mesmos tempos, respectivamente.

Fica evidente com a apresentação dos resultados comparados que o modelo sub-malha parece resolver melhor o escoamento e resulta em comportamento diferenciado junto à parede assim como no centro do reator.

A estrutura densa encontrada em 1,6 segundos mantém-se ainda até 1,9 segundos, mantendo-se desde seu aparecimento a 1,22 segundos, representando uma freqüência de 0,82 hertz. A vorticidade tem um valor que varia em torno de 200 ($1/s$), com a presença de estruturas tubulares estiradas contra-rotativas. Os campos de fração de sólido mantém-se simétricos até uma certa altura do leito, e então inicia-se a formação de não homogeneidades, até descambar (próximo à saída), para um comportamento completamente aleatório. A base do reator mantém-se homogênea, sem a formação de qualquer estrutura turbulhonar.

A Figura 61 apresenta os resultados para tempos a partir de 2,3 segundos, onde é possível observar um comportamento semelhante ao da malha refinada. O escoamento mantém-se uniforme na base do reator, sem o aparecimento de *clusters* ou turbilhões nesta região. Observam-se *clusters* densos descendo pela parede do reator e *strands* se desprendendo quando da passagem do gás próximo aos *clusters*. Os perfis de vorticidade revelam a formação de tubos contra-rotativos de intensidade média (200 (1/s)), da mesma forma como apresentado para a malha refinada sem a utilização de modelo sub-malha, Caso 2. Os perfis são muito semelhantes aos resultados do Caso 2, exceto que revelam um maior detalhe nas estruturas presentes no escoamento.

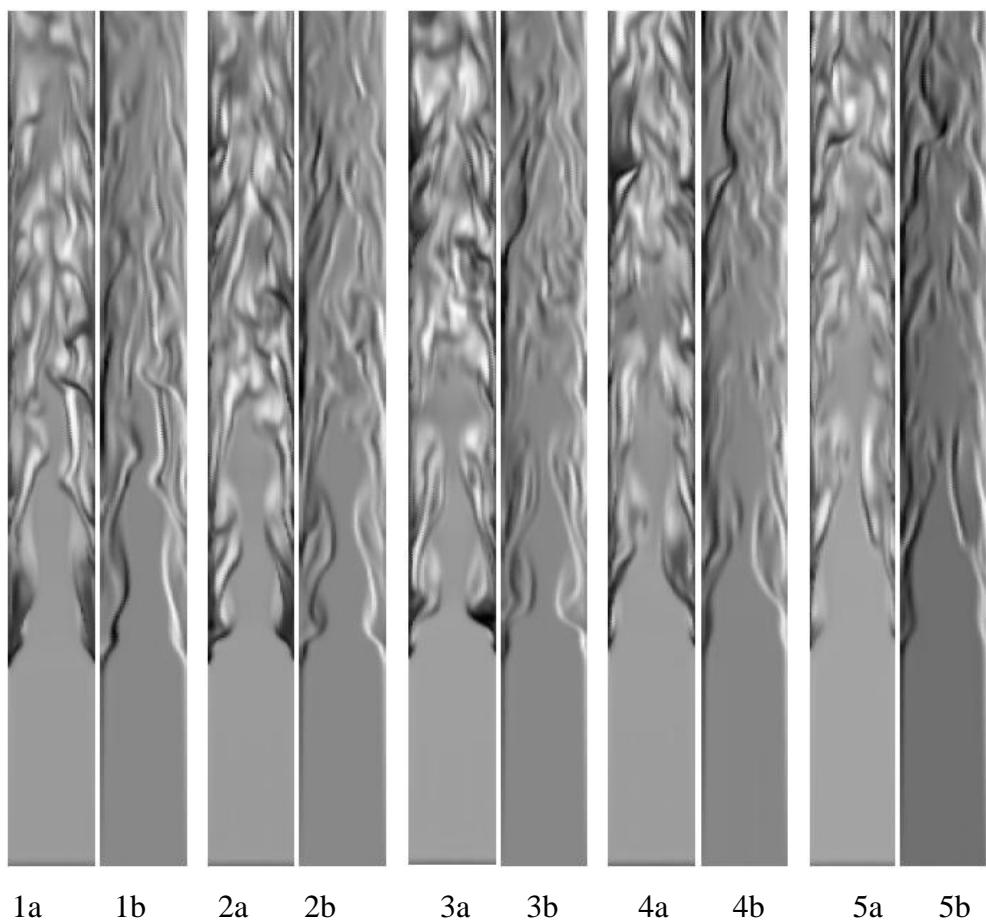


Figura 61. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s) perpendicular ao plano XZ. 1a, 2a, 3a, 4a, 5a, fração de sólidos para 2,30, 2,40, 2,50, 2,60 e 2,70 segundos respectivamente. 1b, 2b, 3b, 4b, 5b, componente da vorticidade (1/s), no plano XZ, para os mesmos tempos, respectivamente.

Com o intuito de comparar as diferenças entre o Caso 2 e o presente, apresentamos a Figura 62, que apresenta comparação dos campos de fração de sólidos para o Caso 2 e o presente estudo de caso. No Caso 2, utilizou-se uma malha de 400000 volumes sem a

utilização de modelo sub-malha. As diferenças são muito grandes no que se refere aos detalhes do escoamento. O modelo sub-malha parece “frear” o perfil junto à parede, gerando uma maior acumulação, próxima a região da base do reator, mas não tão próxima como apresentam os resultados do Caso 2. A região superior é mais rica em detalhes para os resultados do presente caso quando comparado com o Caso 2.

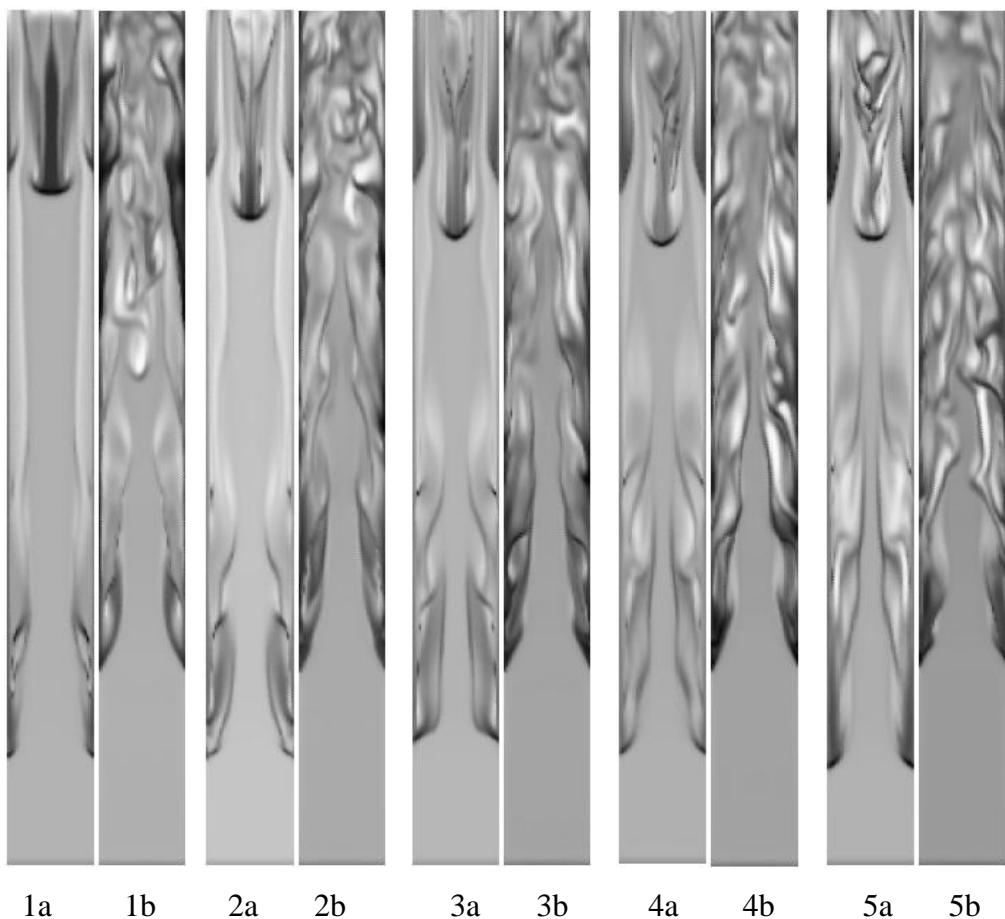


Figura 62. Campos de fração de sólido; Caso 2: 1a, 2a, 3a, 4a, 5a, fração de sólidos para 1,80, 2,00, 2,10, 2,20 e 2,30 segundos respectivamente. Caso 6: 1b, 2b, 3b, 4b, 5b, para mesmos tempos.

A Figura 63 apresenta os campos de fração de sólidos e vorticidade para o período de tempo entre 3,8 segundos e 4,6 segundos. Nesta figura observa-se que o comportamento em relação aos campos de vorticidade mantém-se para tempos maiores, não restringindo-se apenas ao início do escoamento, como apresentados em todos os estudos de caso anteriores ao presente.

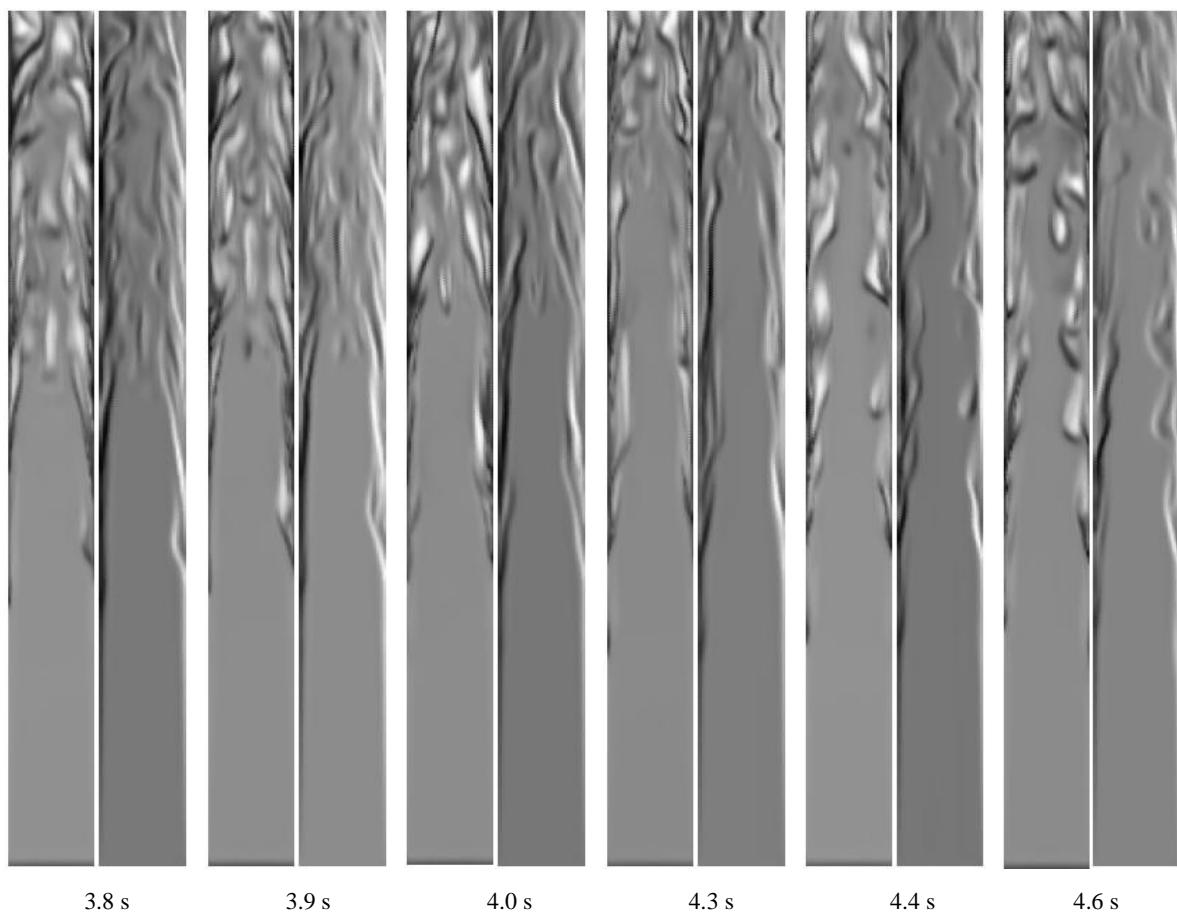


Figura 63. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade ($1/s$) perpendicular ao plano XZ.

As proximidades da base ainda mantêm-se com fração de sólido constante, não havendo qualquer formação de instabilidades tais como *clusters* ou *strands*, oposto ao comportamento da região superior do leito, onde é possível observar a formação de *clusters* alongados na direção vertical. Até 4,6 segundos não observa-se qualquer formação de aglomerados na região central do reator. Estes apresentam-se apenas na região próxima à parede. Neste mesmo período de tempo os resultados para o Caso 2 apresenta a região próxima a base do reator com maior formação de *clusters*, quando comparada ao presente caso, comportamento já evidenciado na comparação apresentada na Figura 62, para tempos iniciais, que mantém-se para um período de tempo maior.

A Figura 64 apresenta os campos de fração de sólidos e vorticidade para tempos a partir de 4,8 segundos até 5,8 segundos, onde observa-se que não há formação de aglomerados na região próxima a base do reator como apresentado nos resultados para o mesmo período de tempo no Caso 2 (Ver Figura 33).

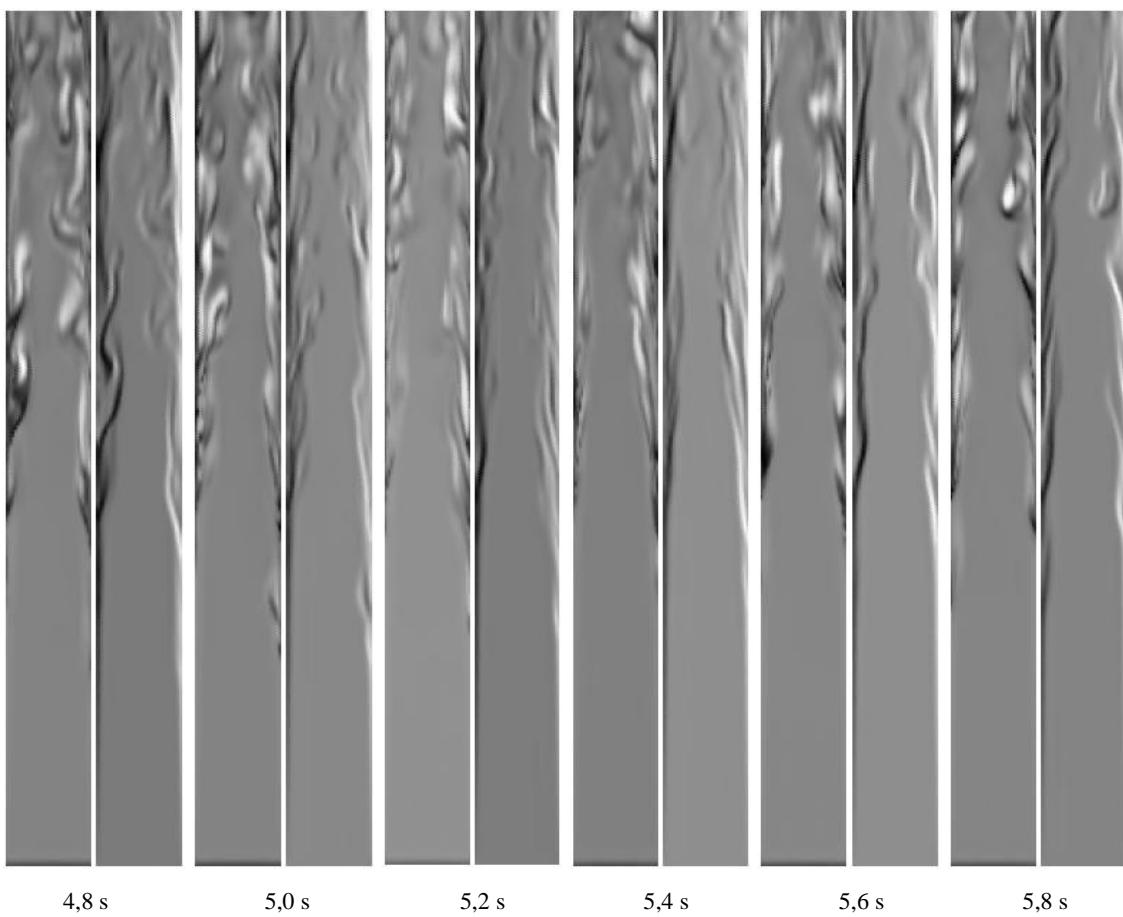


Figura 64. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade ($1/s$) perpendicular ao plano XZ.

Encontram-se estruturas alongadas contra-rotativas em menor número, quando comparam-se os resultados com o Caso 2. O campo de fração de sólidos mantém-se uniforme até uma altura superior ao registrado para o Caso 2, até o tempo de 5,8 segundos. Há uma menor formação de *clusters* por todo o plano. Os campos de fração de sólido têm fração de sólido máxima de 0,3 para o presente caso; no Caso 2 o máximo é 0,63 no mesmo plano.

Apesar do modelo sub-malha captar maiores instabilidades nos tempos iniciais do escoamento, o mesmo não ocorre para tempos maiores, como é evidenciado na Figura 64. Os resultados para o campo de fração de sólidos e vorticidade são muito similares aos resultados encontrados para o Caso 1, onde utilizou-se uma malha grosseira, até o tempo de 5,8 segundos.

A Figura 65 apresenta comparação dos resultados médios da velocidade axial de sólidos para o modelo sub-malha para ambas as fases com os resultados do Caso 2. Observa-se que o modelo sub-malha influencia substancialmente o padrão de escoamento na região diluída, assim como na região densa junto a parede. O arraste na região diluída é melhor quando comparado com os resultados do Caso 2, onde não foi utilizado modelo sub-malha. A

concentração de sólido junto a parede diminuiu com a utilização do modelo sub-malha obtendo velocidades descendentes menores que no Caso 2. Uma discussão detalhada a respeito deste comportamento será realizada no subitem Discussão.

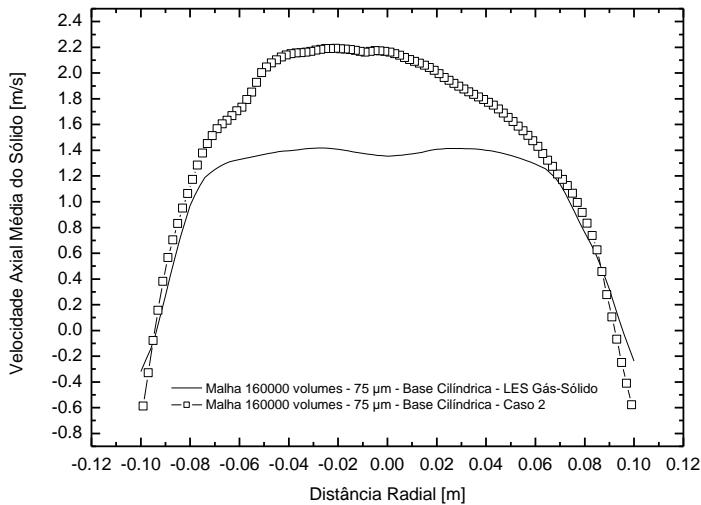


Figura 65. Comparação velocidade de sólidos média axial do modelo sub-malha para a fase gás e sólido (Caso 6) e resultados para o Caso 2.

6.3.7 Apresentação de resultados: Caso 7

Este estudo de caso apresenta resultados utilizando diâmetro da partícula de 120 μm e densidade de 2400 kg/m^3 , a malha utilizada é de 160000 volumes e a geometria de base quadrada. Foram utilizadas as mesmas condições de contorno e esquema numérico do Caso 1 e 2. Este estudo de caso considerou a viscosidade do gás e do sólido constantes, nos mesmos valores dos Casos 1 e 2.

O principal objetivo deste estudo de caso é observar as diferenças associadas a mudança da geometria cilíndrica para um de base quadrada, quando comparado com os resultados experimentais, bem como com resultados de estudos de caso anteriores. Para tanto apresentaremos os resultados dos campos de fração de sólidos do inicio da simulação para compará-los qualitativamente com os resultados anteriores.

A Figura 66 apresenta os resultados dos campos de fração de sólidos do início das simulações até o tempo de 0,9 segundos, como apresentado para os casos anteriores. Os perfis dos campos de fração de sólido são muito similares aos apresentados para os Casos 1 e 2. Observa-se a formação de *clusters* na região próxima à parede, e dois vórtices contra-rotativos estirando-se próximos à região da parede. Evidencia-se um perfil inflexional no centro do leito.

Quando comparam-se os perfis de fração de sólido do Caso 2, malha mais refinada, e do presente Caso 7, observa-se a semelhança entre os perfis, mesmo com diâmetros de partícula diferentes. Lembrando que os Casos 2 e 6 a partícula tem $75 \mu\text{m}$. Os resultados dos campos iniciais são muito semelhantes.

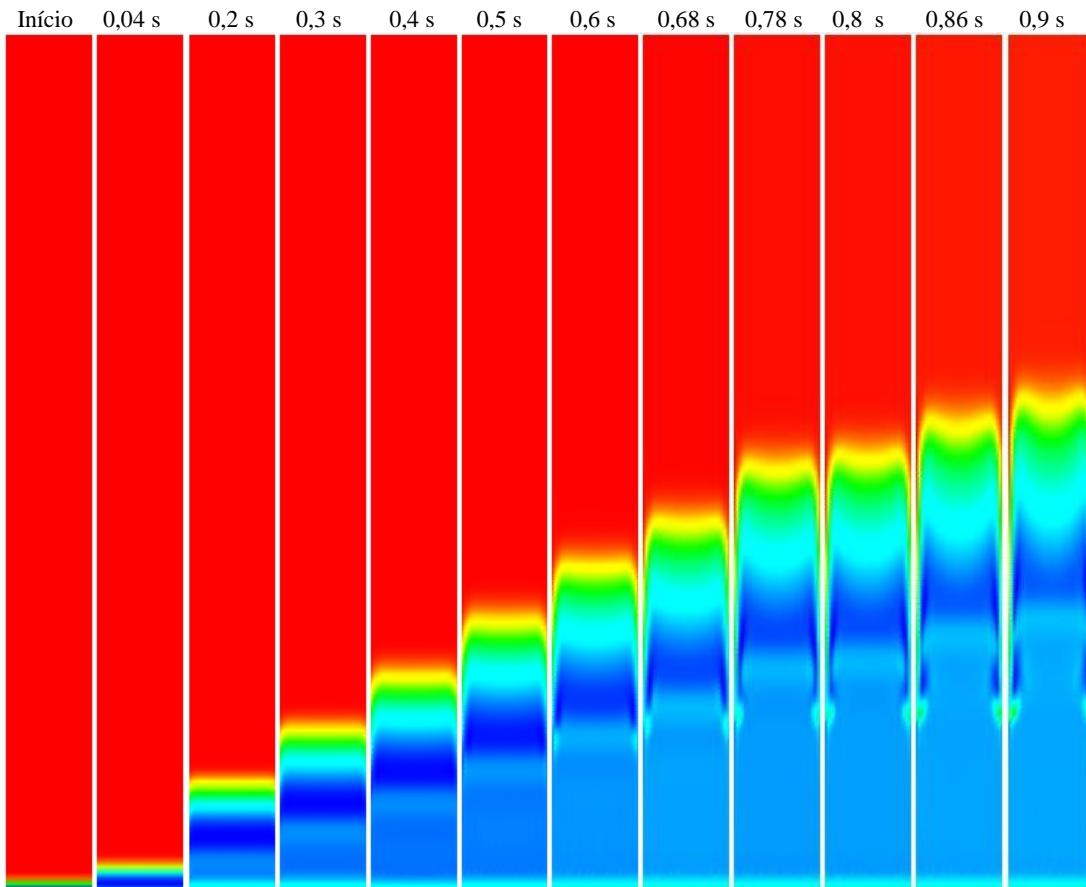


Figura 66. Evolução do campo de fração de sólido no centro da coluna plano, XZ. Da esquerda para direita: Início, 0,04, 0,2, 0,3, 0,4, 0,5, 0,6, 0,68, 0,78, 0,80, 0,86, e 0,9 segundos. A tonalidade avermelhada corresponde a fração de sólidos 0,4 a 0,5 e azul mais escuro 0,02.

A Figura 67 apresenta comparação dos campos de fração de sólido para os Casos 2, 6 e 7, para os tempos de 0,6, 0,8 e 0,9 segundos. Observa-se que o perfil para o Caso 2 é “mais” inflexional no centro da coluna do que os resultados apresentados para o Caso 7. As regiões de formação de *clusters* próximo a parede estão localizadas em alturas diferentes. Contudo, no Caso 6, onde utilizou-se o modelo sub-malha, os perfis são diferentes e aparecem com maior detalhe. Nos resultados do Caso 6 o sólido desce pela parede a uma região mais abaixo que no Caso 2, e surgem instabilidades acima dos vórtices rotativos, que até 0,9 segundos não aparecem nos outros dois casos apresentados na Figura 67.

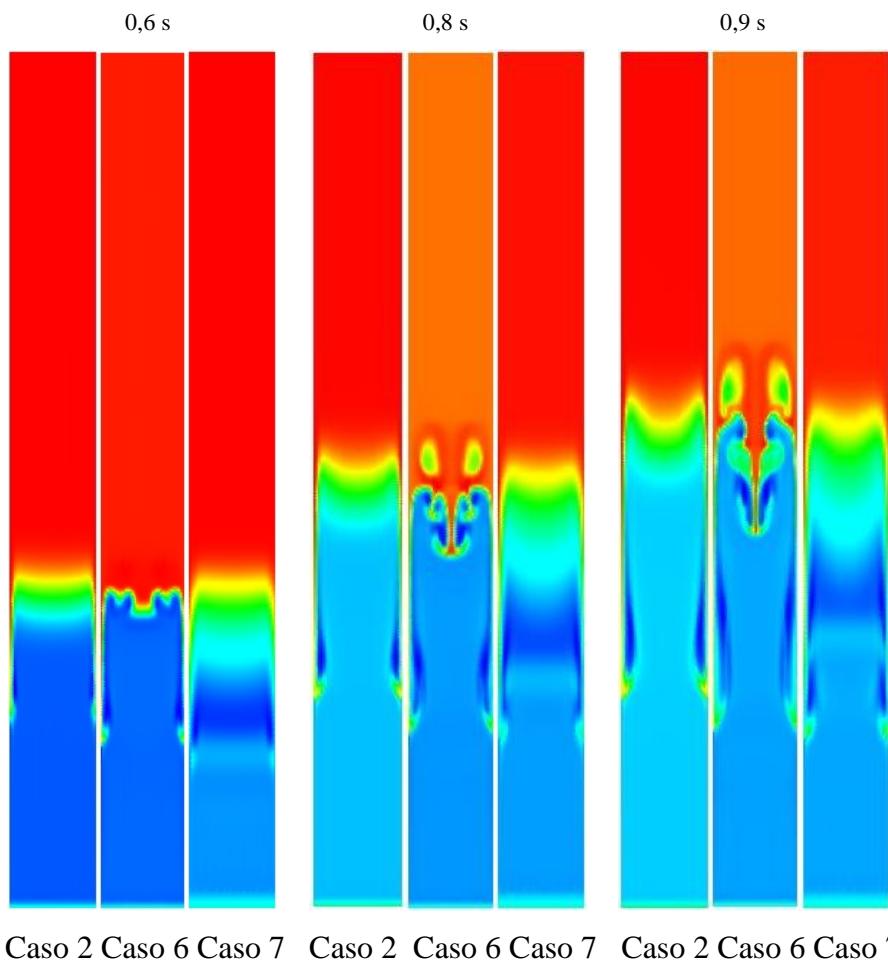


Figura 67. Comparação dos campos de fração de sólido para os Casos 2, 6 e 7.

A Figura 68 apresenta os campos de fração de sólido a partir de 1 segundo até 1,8 segundos. Evidencia-se a formação de uma estrutura densa no centro do leito, exatamente como nos resultados dos Casos 2 e 6. Ou seja, mesmo para uma geometria diferente, os perfis mantém-se qualitativamente semelhantes. Observa-se que há o aparecimento de instabilidades na região acima dos vórtices contra-rotativos gerando caminhos preferenciais, semelhante aos resultados apresentados para o Caso 6 mas com detalhes menores.

Importante notar que as instabilidades para o Caso 6 iniciam já em 0,8 segundos enquanto para o presente caso apenas em 1,36 segundos. A partir de 1,7 segundos, a região central do leito mantém-se com a fração de sólidos média de 0,16, enquanto para os tempos anteriores a fração de sólidos média nesta região é de 0,1.

A Figura 69 apresenta os campos comparados entre os Casos 2, 6 e 7, sendo possível observar os diferentes padrões encontrados nos três casos. A 1,2 segundos o resultado do Caso 6, mostra que a estrutura densa central já foi formada e desce pelo centro do leito. Observa-se que tanto o Caso 6 como o Caso 7 apresentam instabilidades acima dos vórtices contra-rotativos, que no Caso 7 são de menor intensidade. Em 1,4 segundos as estruturas estão

bastante diferenciadas quando comparam-se os Casos 6 e 7. Observa-se que neste tempo o Caso 2 apresenta dois vórtices contra-rotativos estirando-se para encontrar passagem através do leito denso, na região superior do leito, de forma semelhante ao Caso 7.

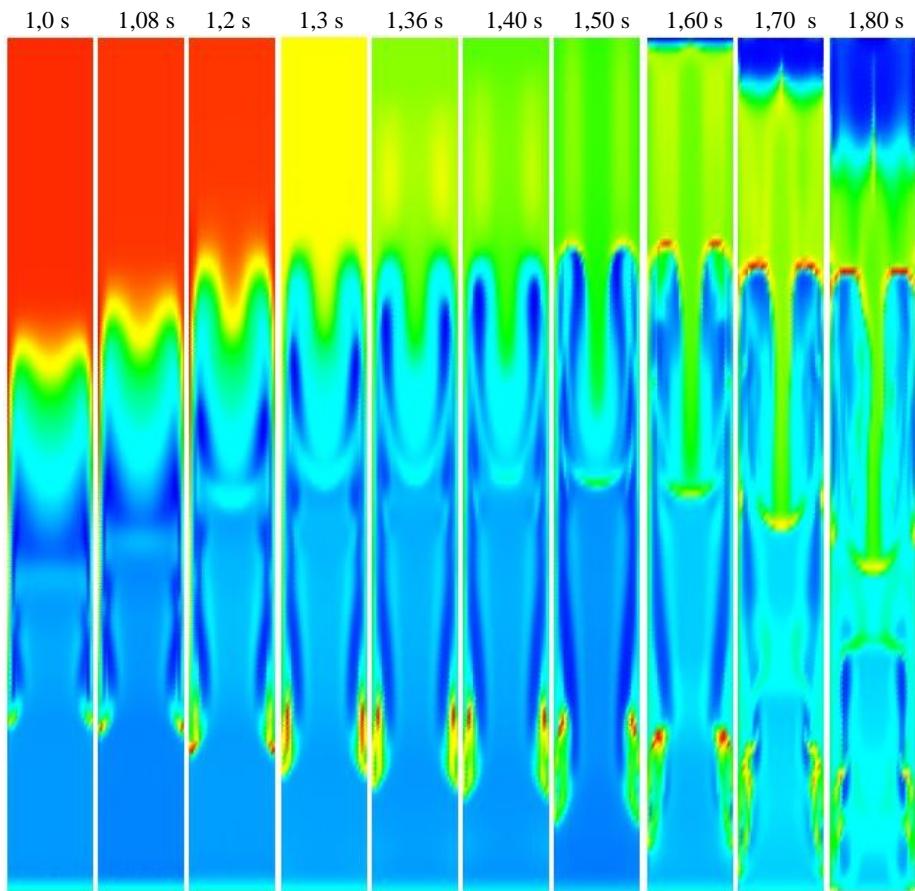


Figura 68. Evolução do campo de fração de sólido no centro da coluna plano, XZ. Da esquerda para direita: 1,0, 1,08, 1,2, 1,3, 1,36, 1,40, 1,50, 1,60, 1,70 e 1,80 segundos. A tonalidade avermelhada corresponde à fração de sólidos 0,4 a 0,64 e azul mais escuro 0,02 a 0,004.

Os campos de fração de sólido junto a parede, evidenciam a formação de aglomerados em todos os casos, com a diferença entre o comportamento desta região do Caso 7 em relação aos outros. No caso 7 os sólidos descem para mais próximo da base do reator (Ver Figura 69) no tempo de 1.6 segundos, evidenciando um arraste menor quando comparado com os Casos 2 e 6, onde o diâmetro da partícula é menor, assim como a densidade do sólido.

Os resultados para o Caso 6 apresentam os campos de fração de sólidos com maior detalhe quando compara-se com os outros dois casos. De fato, o Caso 6 foi resolvido com modelo sub-malha para a fase gás e sólido; sendo assim, espera-se que os campos de velocidade e de fração de sólido sejam melhor resolvidos, para ambas as fases.

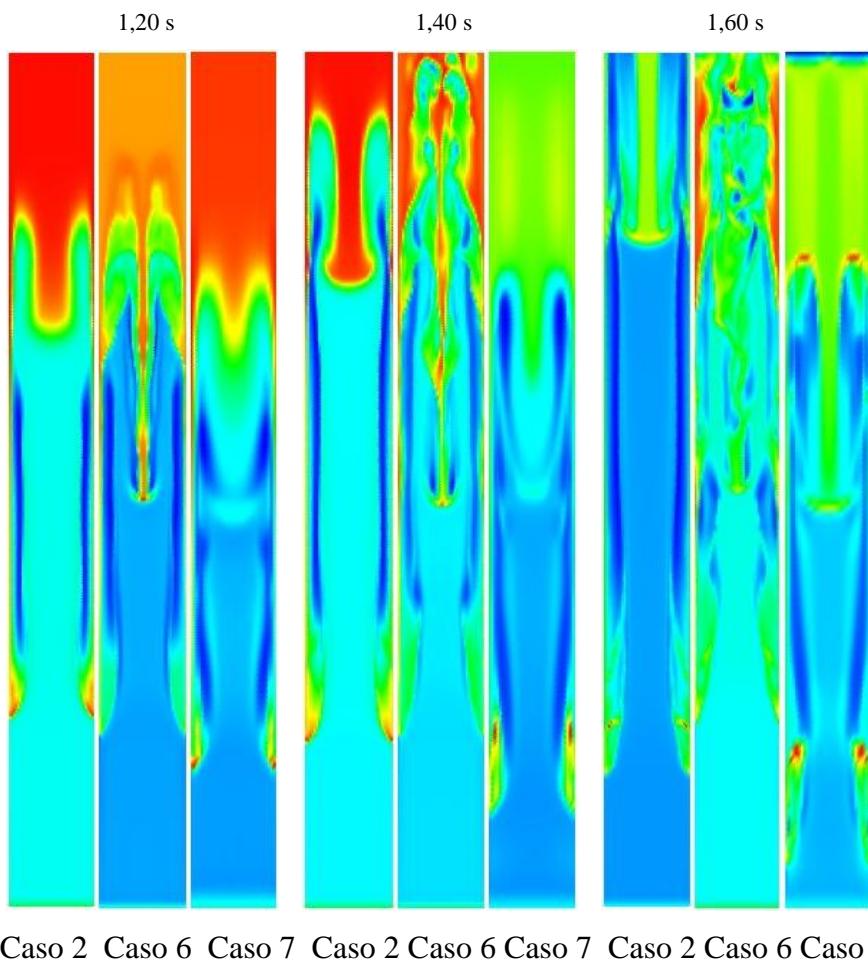


Figura 69. Comparação dos campos de fração de sólido para os Casos 2, 6 e 7.

Com a finalidade de constatar se o que foi observado anteriormente sobre o comportamento da taxa de deformação/vorticidade e o campo de fração de sólidos, apresenta-se resultados dos campos de fração de sólido e vorticidade a partir de 1,8 segundos, em tons de cinza, Figura 70. Lembramos que tons tendendo para o negro representam, no caso dos campos de fração de sólido, regiões mais ricas em sólido, e tons tendendo para o branco representam regiões ricas em gás. No caso da vorticidade, regiões com tons tendendo para o máximo branco e negro, são regiões de alta vorticidade.

Observa-se na Figura 70 que o campo de fração de sólidos ainda apresenta, para o tempo de 1,8 até 2,2 segundos, a estrutura densa central caindo como observado anteriormente. No Caso 6 esta estrutura não mantém-se por este período, ocorrendo antes do presente caso e “desfazendo-se” no tempo de 2 segundos. Os campos de vorticidade e fração de sólidos são virtualmente semelhantes, apresentando regiões de alta vorticidade onde há baixa concentração de partículas. Observa-se a formação de vórtices contra-rotativos estirados com estrutura semelhante aos resultados dos casos anteriores.

No período de tempo apresentado na Figura 70, as estruturas mantêm-se simétricas, com uma pequena quebra de simetria na região superior no tempo de 2,2 segundos, efeito da interação de dois vórtices contra-rotativos e estruturas de *clusters* estirados que encontram-se nesta região. A base do leito apresenta a formação de *clusters* e grandes bolhas de gás. O sólido desce até muito próximo da entrada do leito. Os resultados para malha de base quadrada do presente caso, são qualitativamente semelhantes aos apresentados anteriormente para geometria cilíndrica, apresentando estruturas semelhantes.

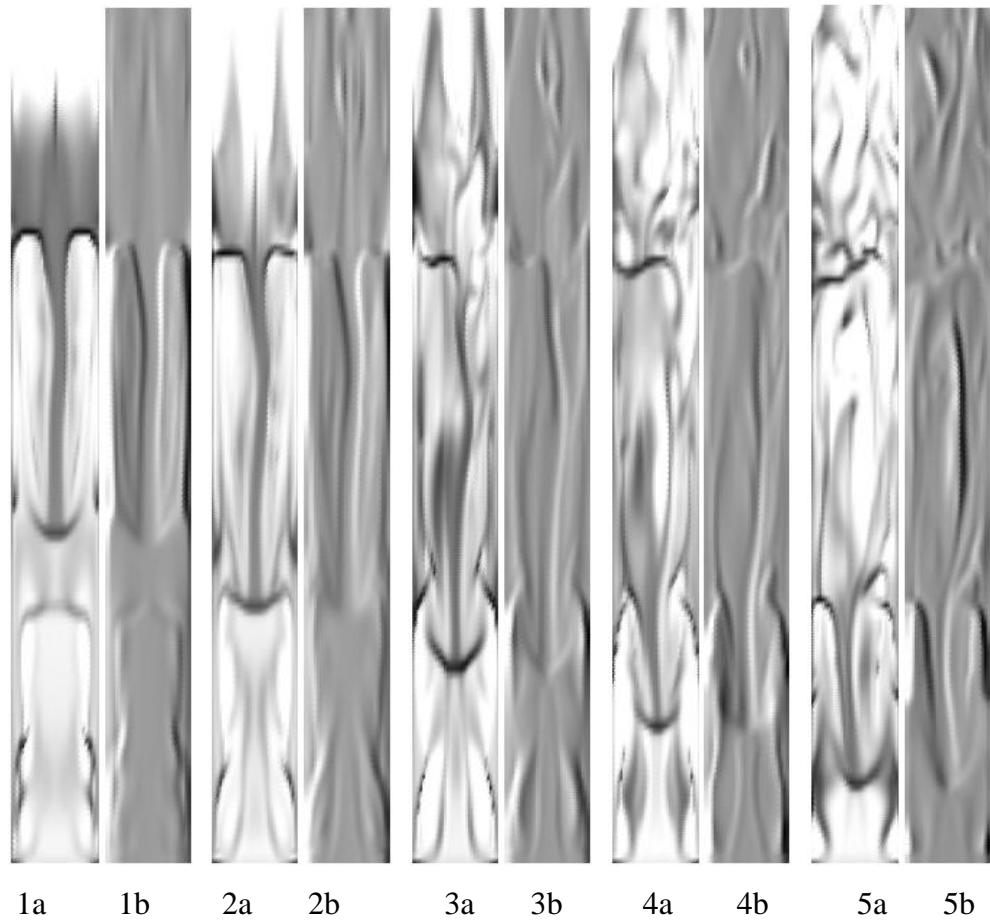


Figura 70. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s) perpendicular ao plano XZ. 1a, 2a, 3a, 4a, 5a, fração de sólidos para 1,80, 1,90, 2,00, 2,10 e 2,20 segundos, respectivamente. 1b, 2b, 3b, 4b, 5b, componente da vorticidade (1/s), no plano XZ, para os mesmos tempos, respectivamente.

Na continuação observam-se os resultados da Figura 71, com resultados a partir de 2,3 segundos, onde é possível observar que a estrutura densa no centro do reator, mas agora mais próxima da base do reator, ainda mantém-se, sendo destruída na base do leito no tempo de 2,4 segundos. Em 2,3 segundos observa-se que a quebra de simetria continua, e vai aumentando significativamente com o passar do tempo. A queda da estrutura densa no centro do leito, gera

desprendimento de vórtices que a partir de uma certa distância geram instabilidades, degenerando para um comportamento eminentemente turbulento na região superior do leito. A quebra de simetria, neste caso, está associada à presença de *clusters*. No tempo de 2,3 segundos inicia-se o aparecimento de instabilidades nas proximidades da base do leito, geradas pela queda livre do corpo denso central, e aglomerados na região junto à parede.

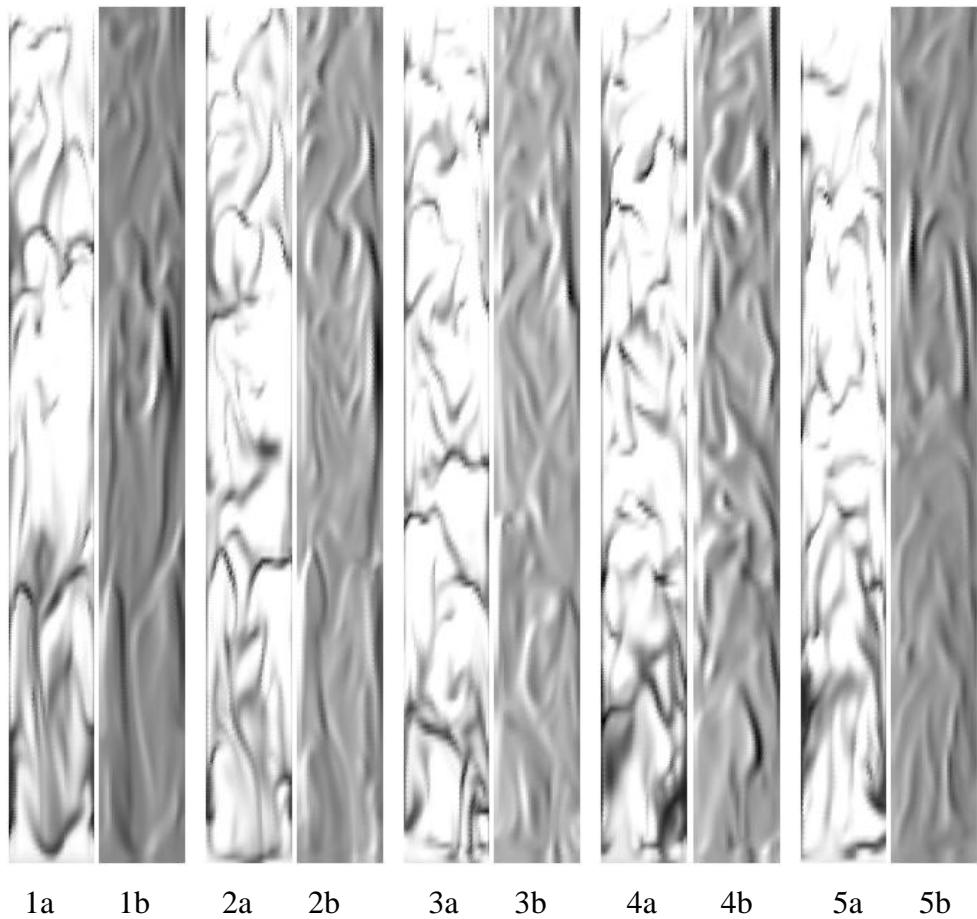


Figura 71. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s) perpendicular ao plano XZ. 1a, 2a, 3a, 4a, 5a, fração de sólidos para 2,30, 2,40, 2,50, 2,60 e 2,70 segundos, respectivamente. 1b, 2b, 3b, 4b, 5b, componente da vorticidade (1/s), no plano XZ, para os mesmos tempos, respectivamente.

Evidencia-se a presença de estrutura alongadas contra rotativas, com vorticidade alta, na faixa de 200 a 600 (1/s). Os *clusters* apresentam-se na região central do leito, bem como nas regiões próximas as paredes, onde observa-se o desprendimento de *clusters* alongados.

A Figura 72 apresenta resultados a partir de 3,8 até 4,5 segundos. Observa-se que com o passar do tempo o leito mantém-se com maior densidade na região próxima à região de entrada, com comportamento semelhante a um leito borbulhante. Na região superior encontram-se *clusters* alongados, assim como na região próxima à parede. Os perfis de

vorticidade mostram uma semelhança qualitativa muito grande com os campos de fração de sólidos. Observa-se a formação e destruição de tubos de vórtices contra-rotativos em todas as regiões do leito, sempre em consonância com a presença de *clusters* e *strands*, como mencionado nos itens anteriores.

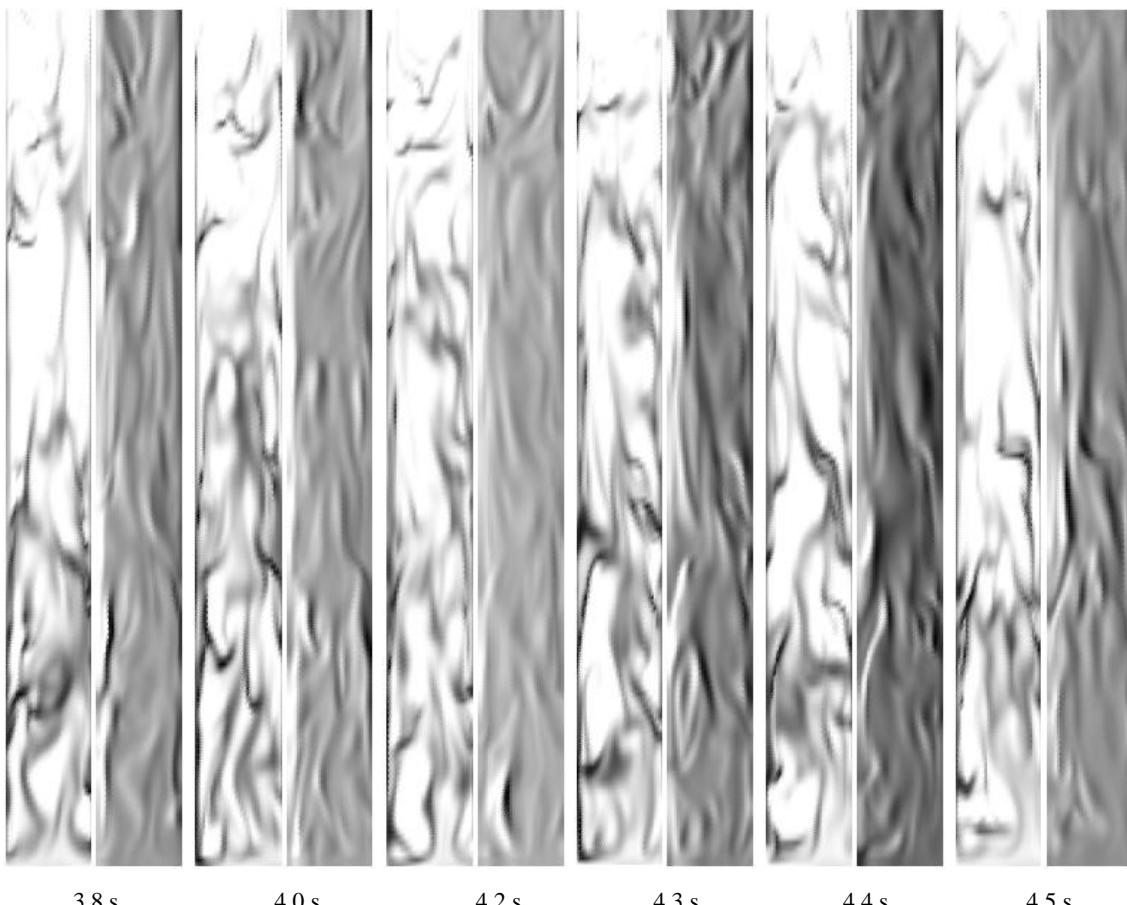


Figura 72. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade ($1/s$) perpendicular ao plano XZ.

É bastante nítida a presença de bolhas de gás (tonalidade para o branco no campo de fração de sólido) rodeadas por aglomerados de partículas, tanto na região próxima à base do leito como na região superior. Regiões de alta vorticidade (baixa taxa de deformação), apresentam-se com baixa concentração de partículas, e *clusters* alongados identificam-se com estruturas de tubos de vórtices contra-rotativos.

Com o passar do tempo a região superior do leito torna-se menos densa com a presença de *clusters* estirados na direção vertical. Em contrapartida, a região próxima à base do leito mantém o comportamento de um leito borbulhante denso, como mostra a Figura 73.

Observa-se que para todos os tempos apresentados na Figura 73 a presença de *strands* está associada a estruturas de tubos de vórtices contra rotativos. O comportamento do leito,

neste aspecto, é diferente dos apresentados para os Casos 1 e 2 onde utilizou-se partículas com 75 μm e densidade de 1250 kg/m^3 . Com partículas menores o leito expande-se mais, e a região próxima a base do reator não apresenta a formação de heterogeneidades como no presente caso. Análise pertinente associado a estes resultados será apresentada mais a frente no item Discussão. Este comportamento mantém-se com o passar do tempo como é possível observar na Figura 74.

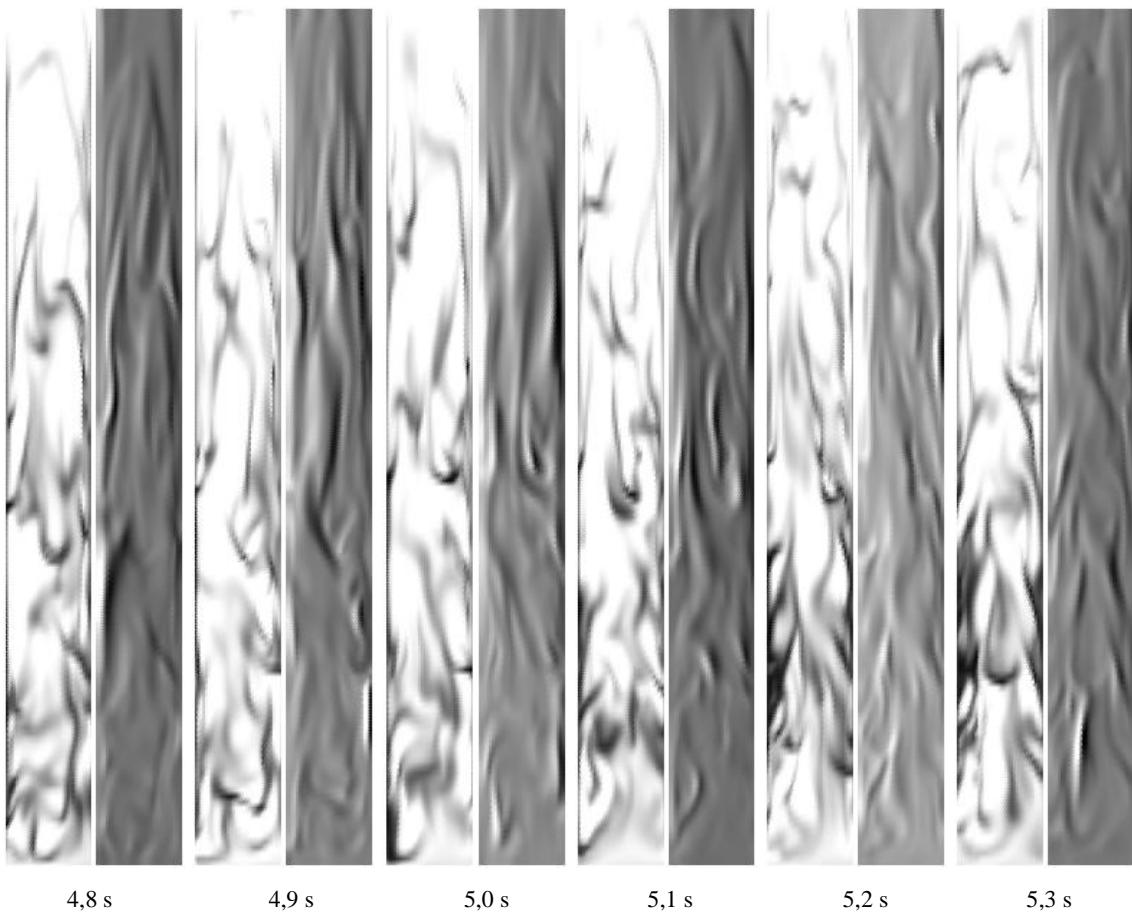


Figura 73. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade ($1/\text{s}$) perpendicular ao plano XZ.

Quando compara-se quantitativamente os resultados médios da velocidade de sólido com os experimentos de van den Moortel *et al.* (1998), observa-se na Figura 75, a boa concordância na região central do leito mas pobre junto à parede. A região intermediária entre a parede e a região central do leito, há um desvio dos resultados médios em relação aos experimentais. Esta região, situada a 2 cm da parede não foi aproximada adequadamente. Este comportamento assemelha-se muito aos resultados apresentados anteriormente para geometria de base cilíndrica, Figura 76 Caso 3, onde foi utilizado o mesmo diâmetro de partículas e o mesmo refino de malha. Este resultado indica que a geometria parece não influenciar nos

resultados médios, na região da parede e intermediária ao centro o mesmo não ocorrendo na região central mais diluída, onde é possível observar que para o Caso 3 o arraste é maior que para o presente Caso 7.

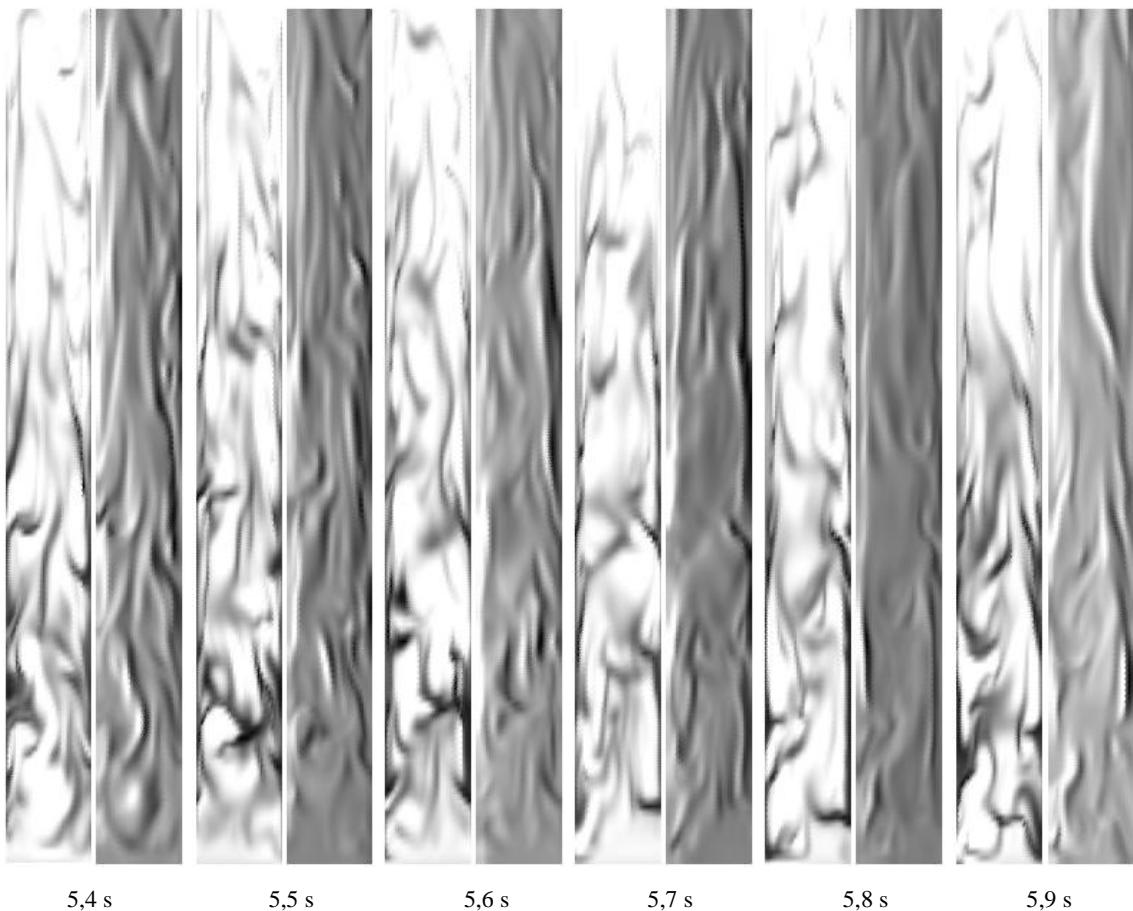


Figura 74. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade ($1/s$) perpendicular ao plano XZ.

A Figura 76 apresenta ainda comparação com os resultados médios para uma malha cilíndrica refinada (Caso 2) mas com diâmetro de partícula menor que o presente estudo de caso. Observa-se que os resultados para o Caso 2, onde o diâmetro da partícula é menor que o utilizado nos casos 3 e 7, há um arraste maior na região diluída, e na região próxima a parede o perfil aproxima-se aos valores médios encontrados no experimento.

Cabe lembrar que os resultados experimentais de van den Moortel et al. (1998) foram realizados em um leito fluidizado de base quadrada, e o diâmetro médio das partículas utilizado por estes autores foi de $120 \mu\text{m}$. Os resultados apresentados anteriormente foram todos para geometria cilíndrica. O resultado apresentado para malha de base quadrada, com o mesmo diâmetro de partículas experimental, sem a utilização de qualquer modelo de

turbulência, não aproximou a tendência dos dados experimentais adequadamente na região junto a parede.

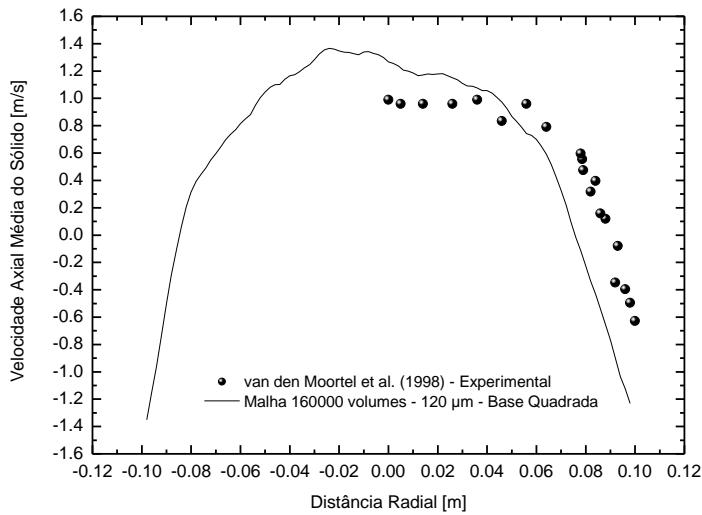


Figura 75. Comparação com dados experimentais, van den Moortel *et al.* (1998) e resultado numérico para geometria base quadrada e diâmetro de partícula 120 μm .

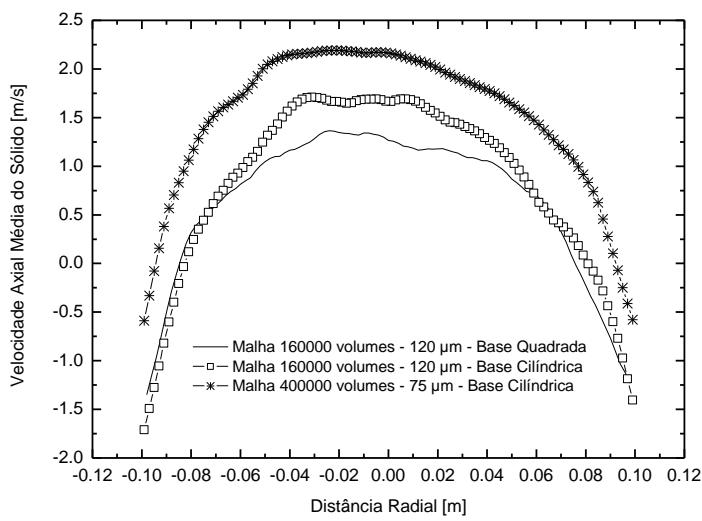


Figura 76. Comparação de resultados numéricos para diferentes geometrias, Caso 7, 3 e 2.

Quando comparado com os resultados numéricos de Ibsen (2002) e Zhang e van der Heyden (2001), apresentado na Figura 77, observa-se que há nítido desvio dos resultados do presente caso na região intermediaria entre o centro do leito e a parede. Na região central os resultados aproximam-se mais dos dados experimentais quando compara-se com os trabalhos de Zhang e van der Heyden (2001) e Ibsen (2002).

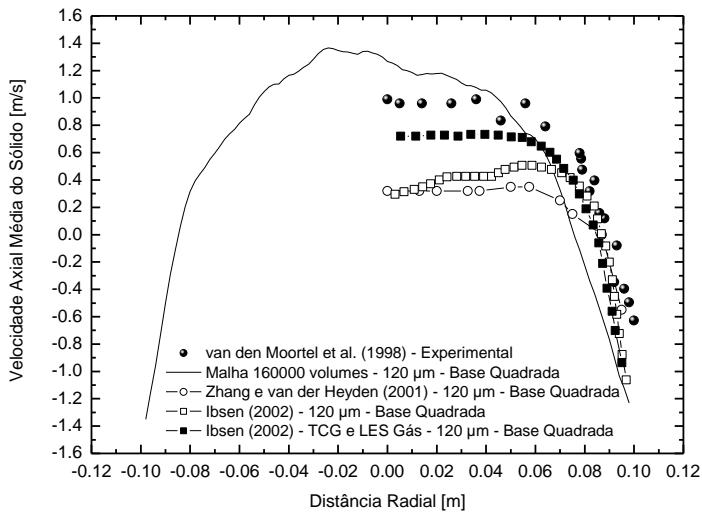


Figura 77. Comparação dos resultados experimentais com o presente caso e resultados numéricos de Zhang e van der Heyden (2001) e Ibsen (2002).

Cabe ressaltar que o experimento é realizado com uma distribuição de partículas, que neste caso tem como valor médio 120 μm . Este valor constante foi utilizado por todos os autores citados na comparação dos resultados da Figura 77. Os resultados com diâmetro de 75 μm , indicam uma melhor aproximação na região intermediária ao centro e a parede. A dúvida fica no que concerne às condições de contorno e ao esquema de interpolação. Ibsen (2002) utilizou um esquema *up-wind*, de primeira ordem. O presente trabalho, em todas as simulações, utilizou-se de um esquema de segunda ordem. Uma discussão detalhada destes resultados será apresentada mais à frente.

No estudo de caso que se segue serão apresentados resultados qualitativos e quantitativos utilizando o modelo sub-malha desenvolvido para a fase sólido, com o intuito de observar o comportamento do modelo frente à comparação com os dados experimentais e com os resultados do presente caso.

6.3.8 Apresentação de resultados: Caso 8

Este estudo de caso apresenta resultados utilizando diâmetro da partícula de 120 μm e densidade de 2400 kg/m^3 , a malha utilizada é de 160000 volumes e a geometria de base quadrada. Foram utilizadas as mesmas condições de contorno e esquema numérico dos Casos 1 e 2. Este estudo de caso utiliza o modelo sub-malha para a fase gás e fase sólido, como descrito anteriormente. O principal objetivo é observar a capacidade do modelo sub-malha de “melhorar” a aproximação com os dados experimentais e com os resultados apresentados para

o Caso 7. Desta forma apresentamos os resultados dos campos de fração de sólido no início do escoamento (Figura 78) de forma a comparar com os resultados do Caso 7.

A Figura 78 apresenta a evolução do campo de fração de sólido a partir do início da simulação até 0,86 segundos. Nota-se que o perfil inflexional inicia-se no mesmo tempo, 0,6 segundos, que no Caso 7, mas com uma diferença significativa no comportamento junto a parede, onde observa-se a formação de aglomerado já em 0,4 segundos, quando no Caso 7 este inicia-se em 0,6 segundos.

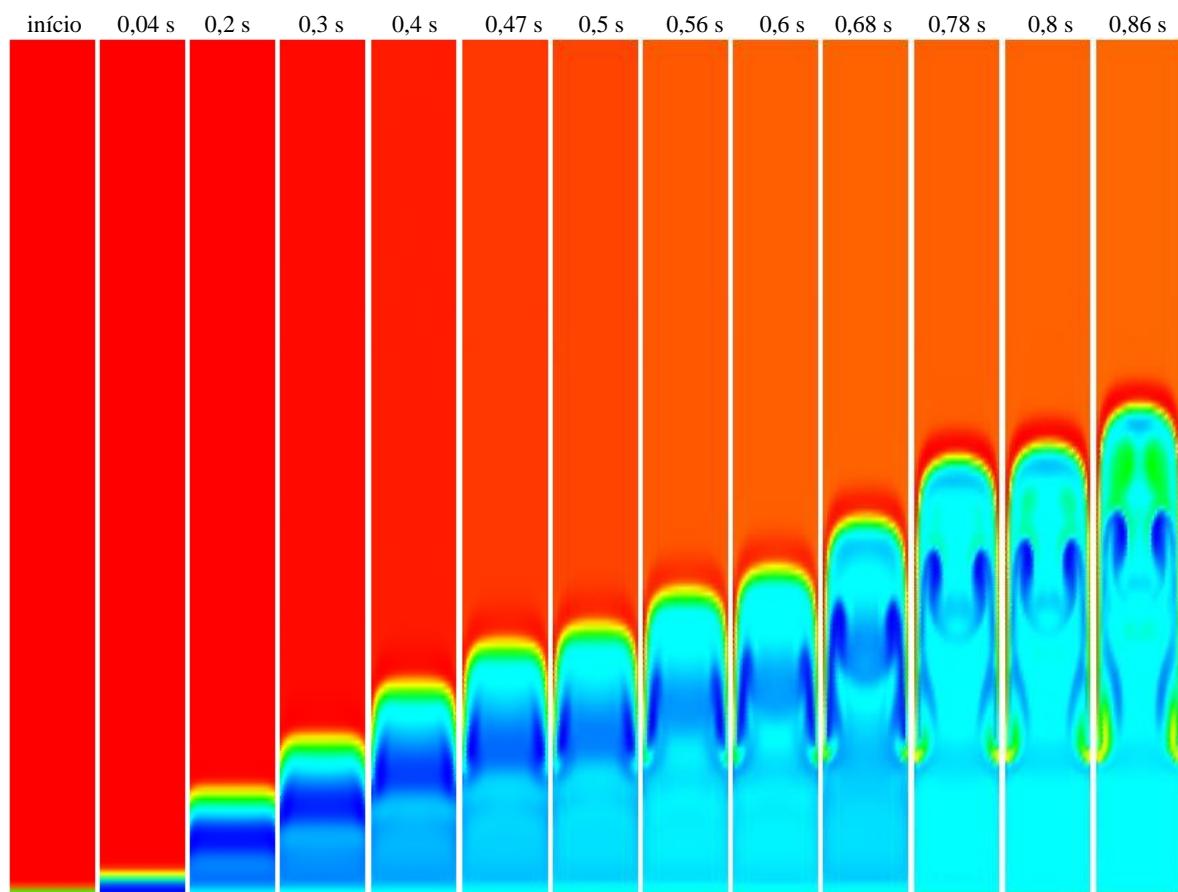


Figura 78. Evolução do campo de fração de sólido no centro da coluna plana, XZ. Da esquerda para direita: início, 0,04, 0,2, 0,3, 0,4, 0,47, 0,5, 0,56, 0,6, 0,68, 0,78, 0,80 e 0,86 segundos. A tonalidade avermelhada corresponde a fração de sólidos 0,4 a 0,5 e azul mais escuro 0,02.

A partir de 0,7 segundos o perfil é visivelmente parabólico, característica não encontrada no Caso 7. Evidencia-se a presença de vórtices contra-rotativos estirando-se na região próxima a parede a partir de 0,5 segundos. Em 0,86 segundos é possível observar a presença de dois vórtices contra-rotativos na região central, logo abaixo da frente de fração de sólido que avança verticalmente. Estes vórtices encontrados na região central tem fração de sólido superior aos encontrados junto a região da parede.

A Figura 79 apresenta comparação dos perfis de fração de sólido para os tempos de 0,6, 0,8 e 0,9 segundos para os Casos 2, 6, 7 e 8. Os campos de fração de sólido do Caso 8 apresentam-se diferentes do Caso 7 no que se refere a pequenos detalhes, tais como perfil inflexional no centro do leito, concentração de sólidos maior junto a parede e a formação de vórtices. Os Casos 2 e 6 são resultados para 75 μm e os Casos 7 e 8 para 120 μm . Os Casos 6 e 8 são resultados utilizando modelo sub-malha, sendo que para o Caso 6 a malha é de 400000 volumes, e o Caso 8 tem 160000 volumes. Observe que as diferenças entre o Caso 7 e 8 estão apenas na utilização do modelo sub-malha, onde os resultados apresentam-se com maior detalhamento, mesmo para o início do escoamento.

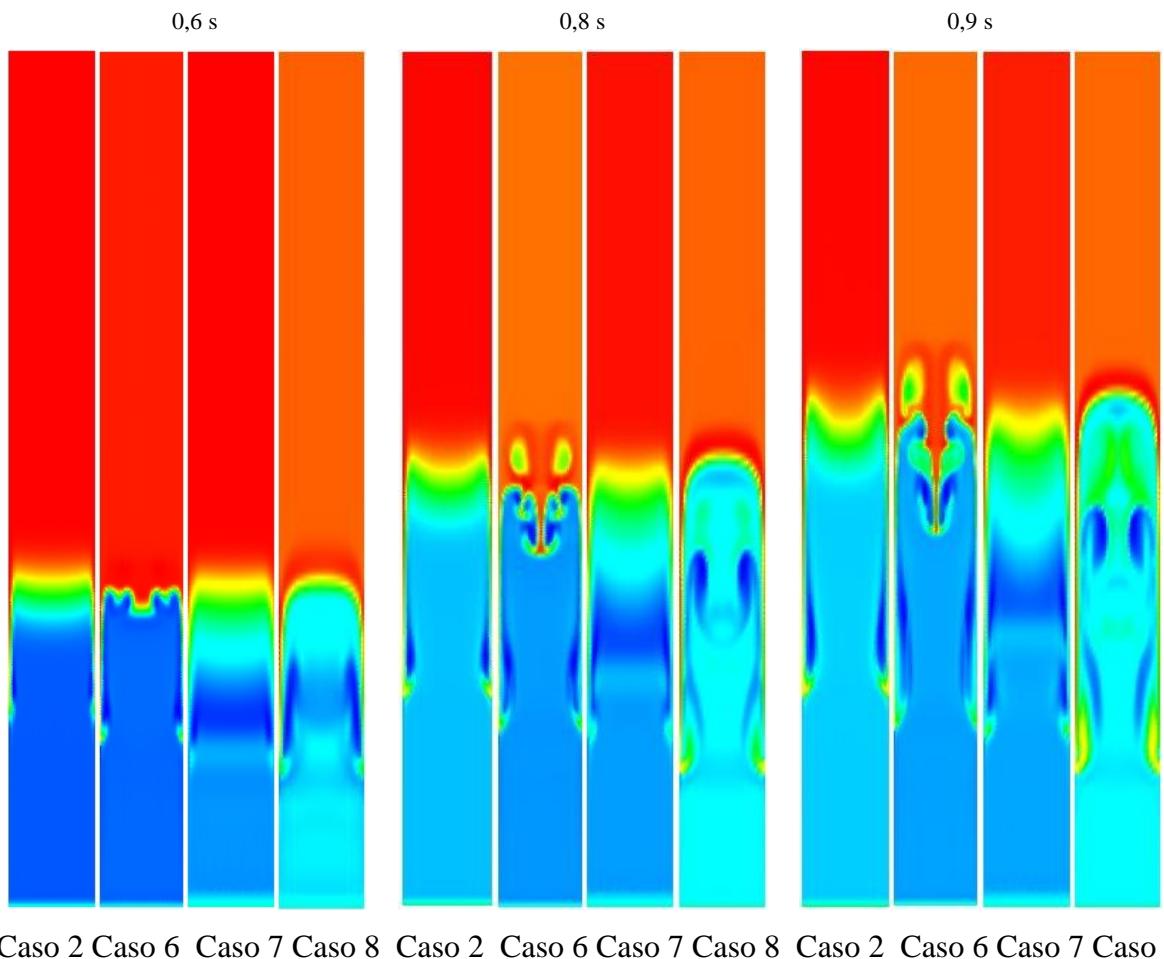


Figura 79. Comparação dos campos de fração de sólido para os Casos 2, 6, 7 e 8.

As frentes de deslocamento que ascendem, quando compara-se o resultado da Figura 79 em 0,9 segundos, para os Casos 7 e 8, encontram-se na mesma altura, observando-se no resultado do Caso 8, a formação de vórtices contra-rotativos associados com a presença de bolhas de gás. No Caso 7 para o mesmo tempo, os vórtices contra-rotativos estão associados a

uma região maior de gás. A utilização do modelo sub-malha leva a um maior detalhe das estruturas presentes quando comparado com o Caso 7 onde não utilizou-se qualquer modelo.

A Figura 80 apresenta os campos de fração de sólidos a partir de 0,9 até 1,7 segundos para o presente caso. Com a evolução temporal é possível observar que as instabilidades na região superior da frente que avança verticalmente não são formadas até 1,7 segundos, diferente do comportamento do Caso 2, que apresenta o início das instabilidades em 0,8 segundos.

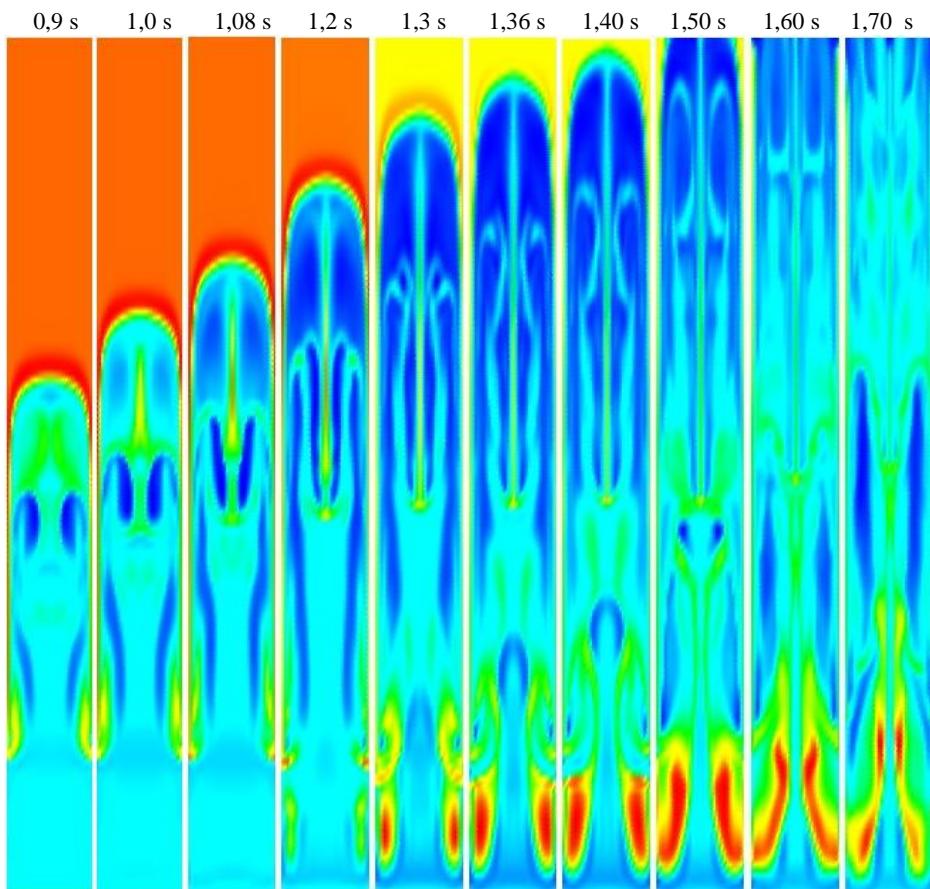


Figura 80. Evolução do campo de fração de sólido no centro da coluna plana, XZ. Da esquerda para direita: 0,9, 1,0, 1,08, 1,2, 1,3, 1,36, 1,40, 1,50, 1,60 e 1,70 segundos. A tonalidade avermelhada corresponde a fração de sólidos 0,4 a 0,5 e azul mais escuro 0,02.

A partir de 0,9 segundos observa-se que a estrutura densa na região superior do leito afinou-se, devido ao cisalhamento, como descrito anteriormente. Em ambos os lados de toda a extensão desta estrutura encontram-se dois vórtices contra-rotativos, com média concentração de sólidos. Esta estrutura está em queda livre, portanto encontra-se com velocidade descendente, o que causará instabilidades nas regiões próximas a esta. Em 1,2 segundos formam-se estruturas de aglomerados na região próxima a base do leito, que no Caso 7

aparecem somente em 1,6 segundos. Estes aglomerados na região da base do reator são mais densos quando comparados aos apresentados para o Caso 7.

A Figura 81 compara os resultados dos campos de fração de sólidos para os tempos 1,2, 1,4 e 1,6 segundos para os Casos 2, 6, 7 e o presente Caso 8. Os resultados para os Casos 7 e 8 são qualitativamente diferentes; o Caso 8 apresenta-se com maior detalhamento e um acúmulo maior de sólidos na região junto à parede. A frente que ascende verticalmente para o Caso 8 é mais rápida que para o Caso 7. Talvez esta seja a razão do porque a fração de sólidos junto à parede, para o Caso 8, está mais próxima da região de entrada quando comparada ao Caso 7, para o tempo de 1,6 segundos.

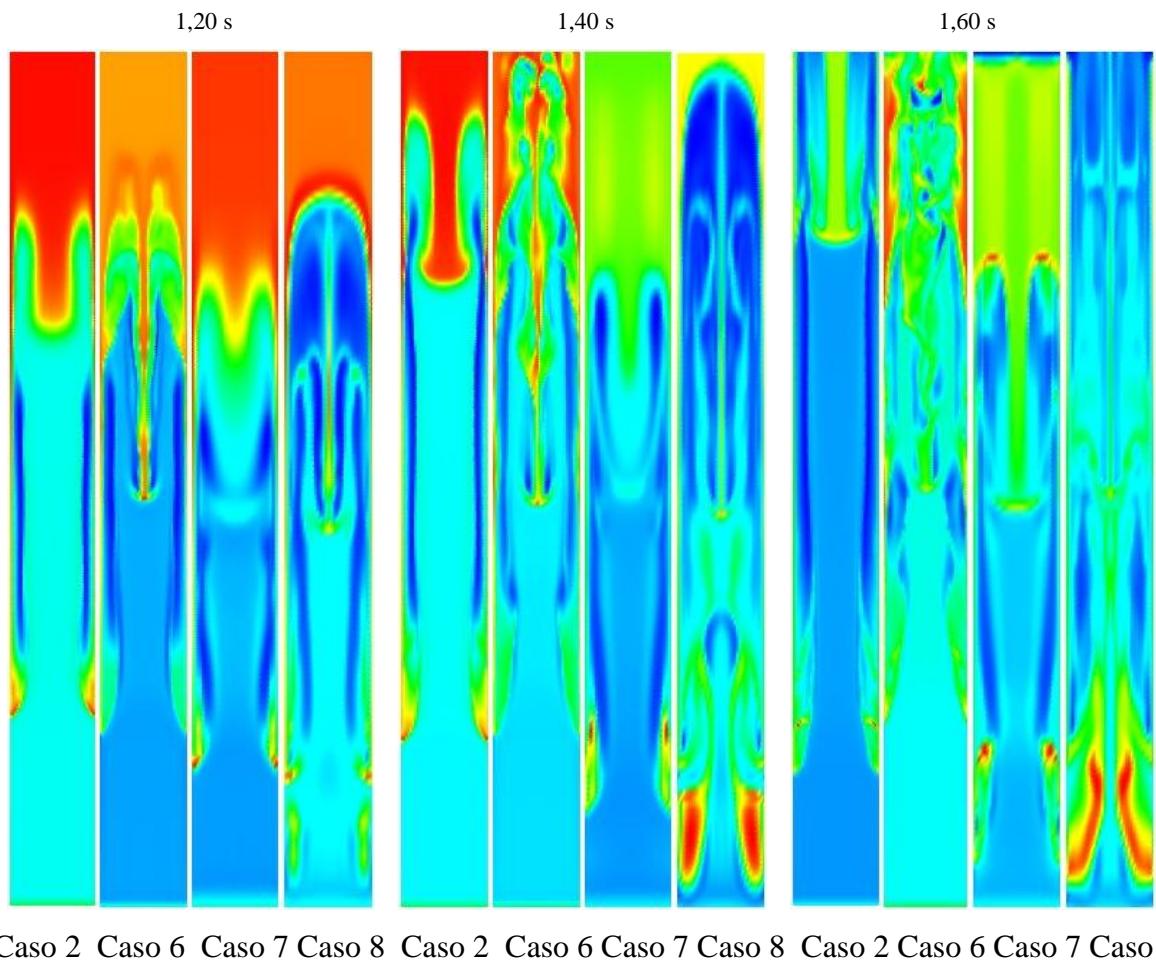


Figura 81. Comparação dos campos de fração de sólido para os Casos 2, 6, 7 e 8.

Em 1,4 segundos esta mesma região não mantém-se na mesma cota para ambos os casos citados. Ou seja, fica evidente que no Caso 8 os sólidos saem antes do reator do que no Caso 7 (sem modelo sub-malha), ou seja, no Caso 8 parece haver um arraste de sólidos maior na região superior do leito e menor na região próxima à base. De qualquer forma, para todos os casos estudados até o presente momento, não foi realizada qualquer modificação na

modelagem do arraste. Os Casos 7 e 8 tem o mesmo diâmetro de partícula, 120 μm . Os casos 2 e 6 tem diâmetro de partícula de 75 μm . A princípio observa-se que o refino de malha e o modelo sub-malha têm influência maior no arraste quando comparam-se os resultados para diferentes diâmetros de partículas. *A priori* pode-se dizer que as diferenças associadas ao diâmetro de partícula não são tão importantes quanto o refino de malha.

Observa-se na Figura 82 que para 1,8 segundos os campos de fração de sólido e vorticidade são simétricos; contudo, já a 2 segundos inicia-se a “quebra” de simetria de ambos os campos. A quebra de simetria inicia-se à meia altura do leito, quando há uma tendência à segregação de sólidos vinda do centro em direção à parede esquerda do leito.

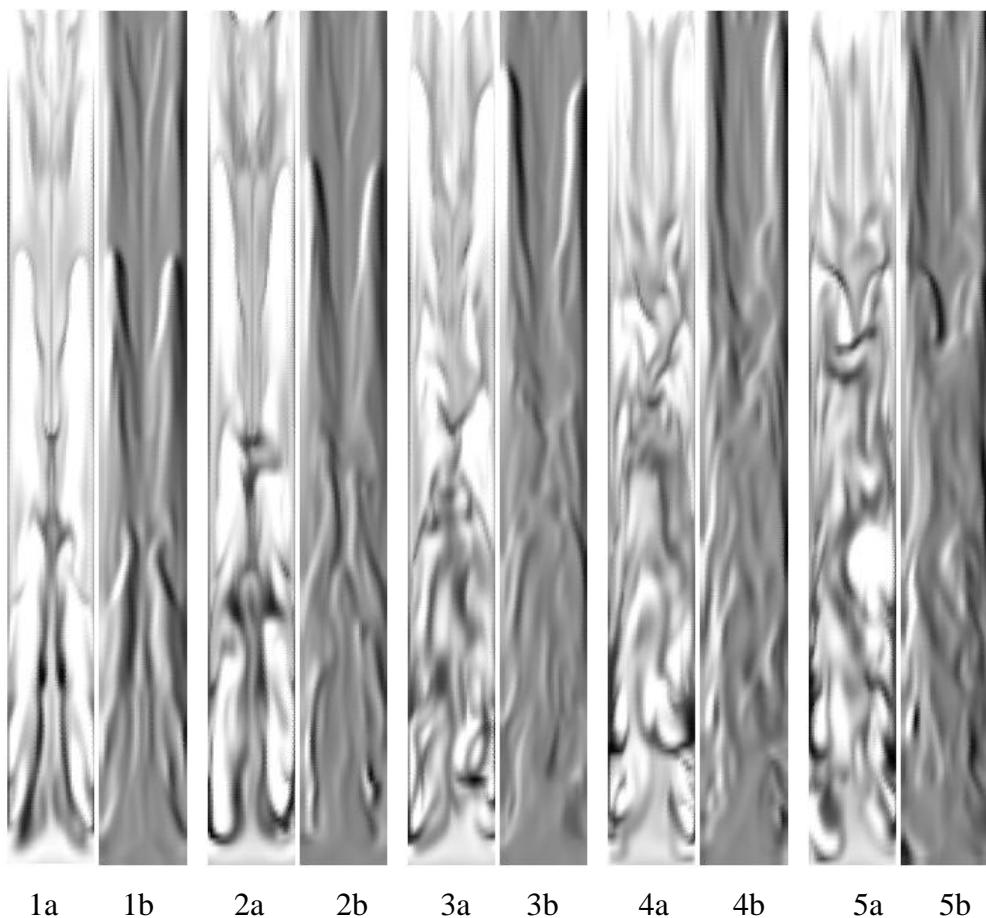


Figura 82. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s) perpendicular ao plano XZ. 1a, 2a, 3a, 4a, 5a, fração de sólidos para 1,80, 1,90, 2,00, 2,10 e 2,20 segundos respectivamente. 1b, 2b, 3b, 4b, 5b, componente da vorticidade (1/s), no plano XZ, para os mesmos tempos, respectivamente.

Os campos de vorticidade e fração de sólido são virtualmente iguais, sendo que onde há alta concentração de sólidos tem-se baixa vorticidade, e em regiões onde observa-se a

formação e destruição de estruturas alongadas encontram-se sempre, tubos de vórtices contrarotativos estirando-se, inclusive na região inferior do leito, próximo a base.

A Figura 83 apresenta os campos de fração de sólido e vorticidade comparados com os resultados para os mesmos tempos para o Caso 7. Fica claro que os campos são diferentes, principalmente na região superior do leito, onde os resultados dos campos de fração de sólidos são mais diluídos para o Caso 7 do que para o Caso 8. Em ambos os estudos de caso observa-se a formação de tubos contra rotativos estirando-se na direção axial. Outro aspecto interessante, quando comparam-se os resultados para os Casos 7 e 8, é a quantidade de detalhes captada nos campos de fração de sólido para o Caso 8 (modelo sub-malha). No Caso 7 a vorticidade varia de 200 a 700 (1/s) enquanto para Caso 8 a faixa está entre 200 a 400 (1/s), para o intervalo de tempo apresentado na Figura 83. A fração de sólidos varia de 0,004 a 0,63 para o Caso 7 e 0,02 a 0,5 para o Caso 8. Ambos os casos tem valores de fração de sólido próximos ao máximo empacotamento.

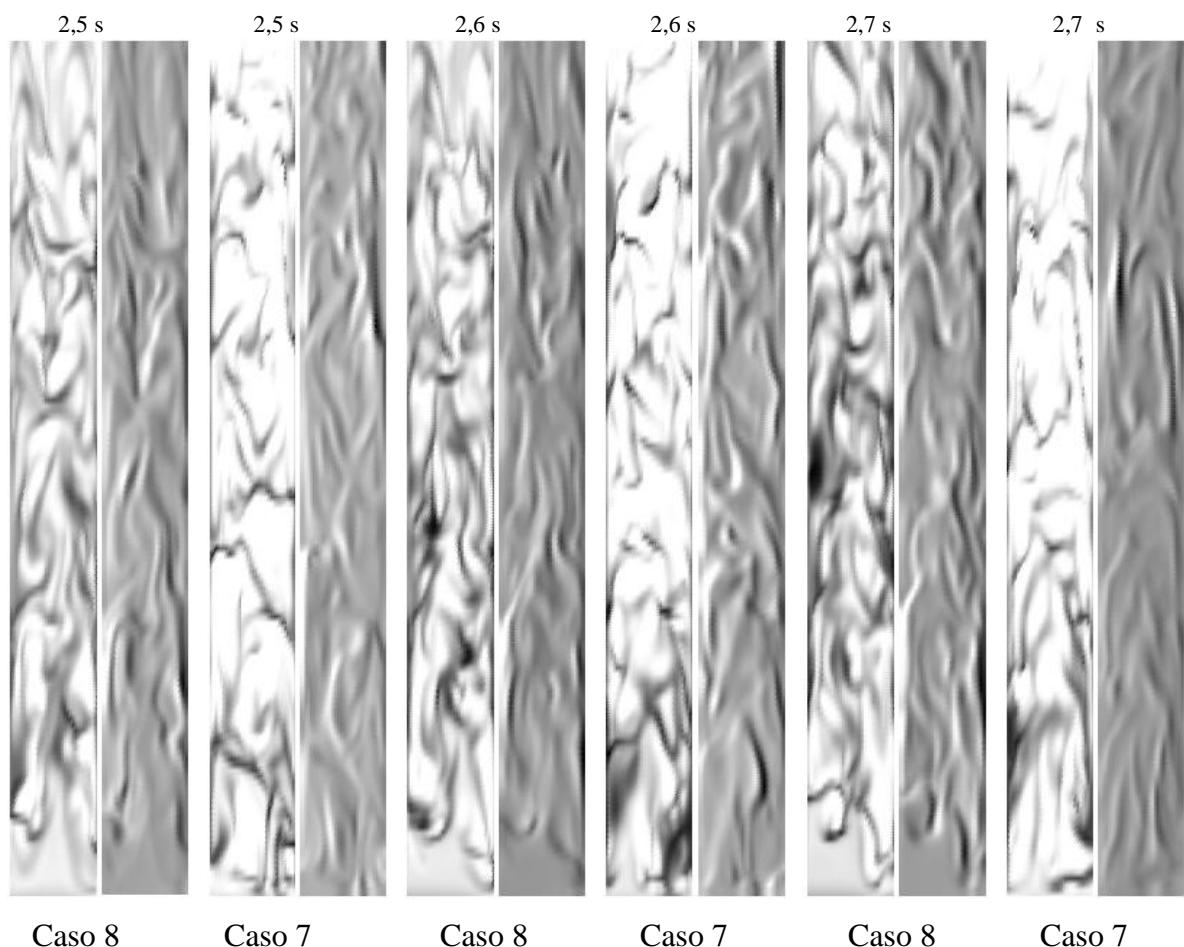


Figura 83. Comparação dos campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s) perpendicularly ao plano XZ para os Casos 7 e 8.

Como nos estudos de caso anteriores, na Figura 83 evidencia-se que onde há baixa vorticidade encontram-se aglomerados de partículas, e onde há tubos de vórtices contrarotativos estirando-se encontram-se os chamados *strands*, para todas as regiões do leito.

A Figura 84 apresenta os resultados comparados dos campos de fração de sólido e vorticidade, para tempos a partir de 3,8 segundos. Observa-se que no período de tempo apresentado na Figura 84 o campo de fração de sólido para o Caso 8 mantém-se semelhante aos anteriores no que se refere a região superior do leito, ou seja, esta região encontra-se mais densa quando comparada com o Caso 7.

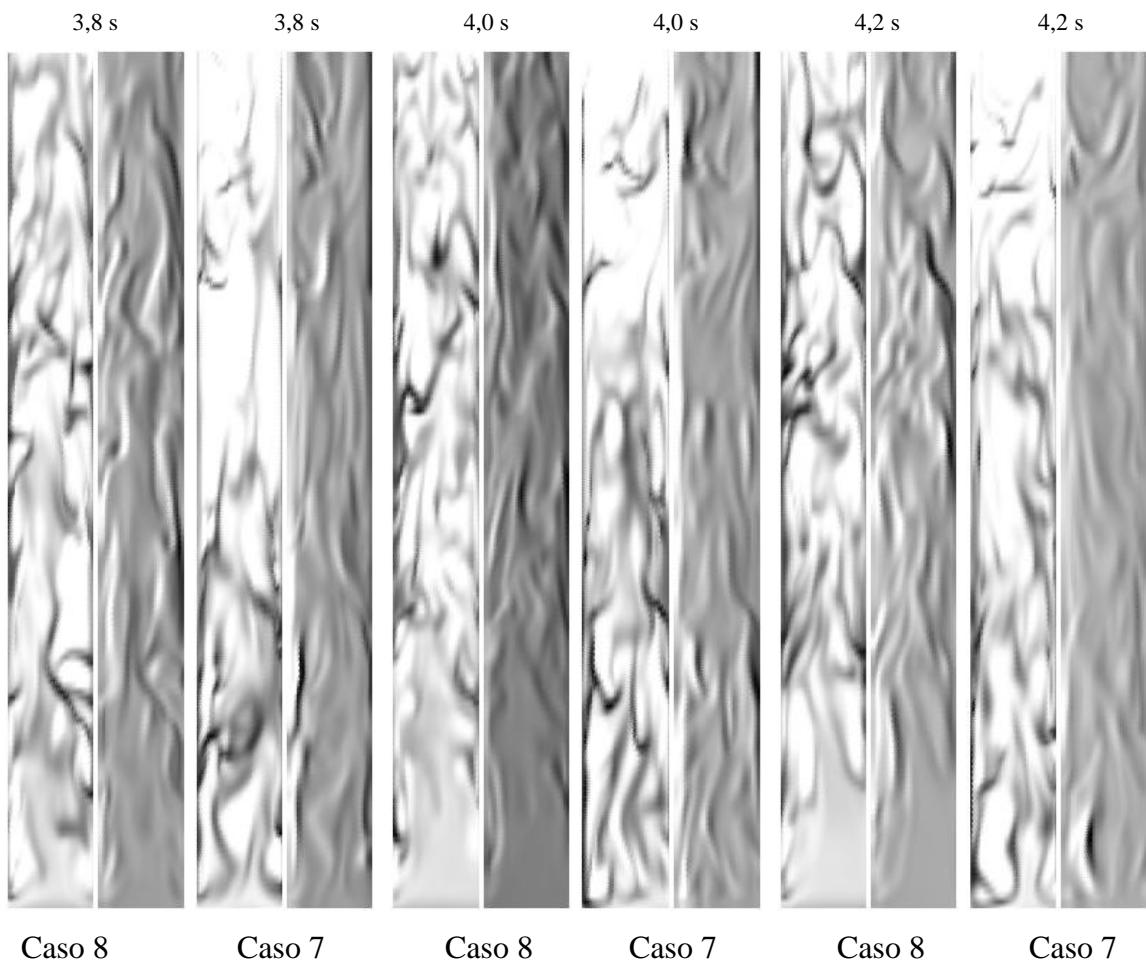


Figura 84. Comparação dos Campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s) perpendicular ao plano XZ para os Casos 7 e 8.

A região da base para o Caso 8 encontra-se mais homogênea que no Caso 7. Em ambos os casos *clusters* são encontrados na região junto à parede assim como na região central do leito. Na região central os *clusters* ascendem verticalmente na forma de *clusters* estirados, associados com a presença de tubos de vórtices estirados na mesma direção. Na região da parede os *clusters* têm velocidade descendente.

Com a intenção de se observar a evolução dos campos de fração de sólido e vorticidade para tempos maiores a Figura 85 é apresentada para tempos a partir de 4,3 segundos para o Caso 8 apenas. No período apresentado na Figura 85, as mesmas características apontadas anteriormente são observadas. A região próxima da base mantém-se mais homogênea e na região superior encontra-se a formação de aglomerados assim como na região central e na região próxima à parede. A região superior mantém-se com características mais densas quando comparada aos resultados reportados para o Caso 7 anterior.

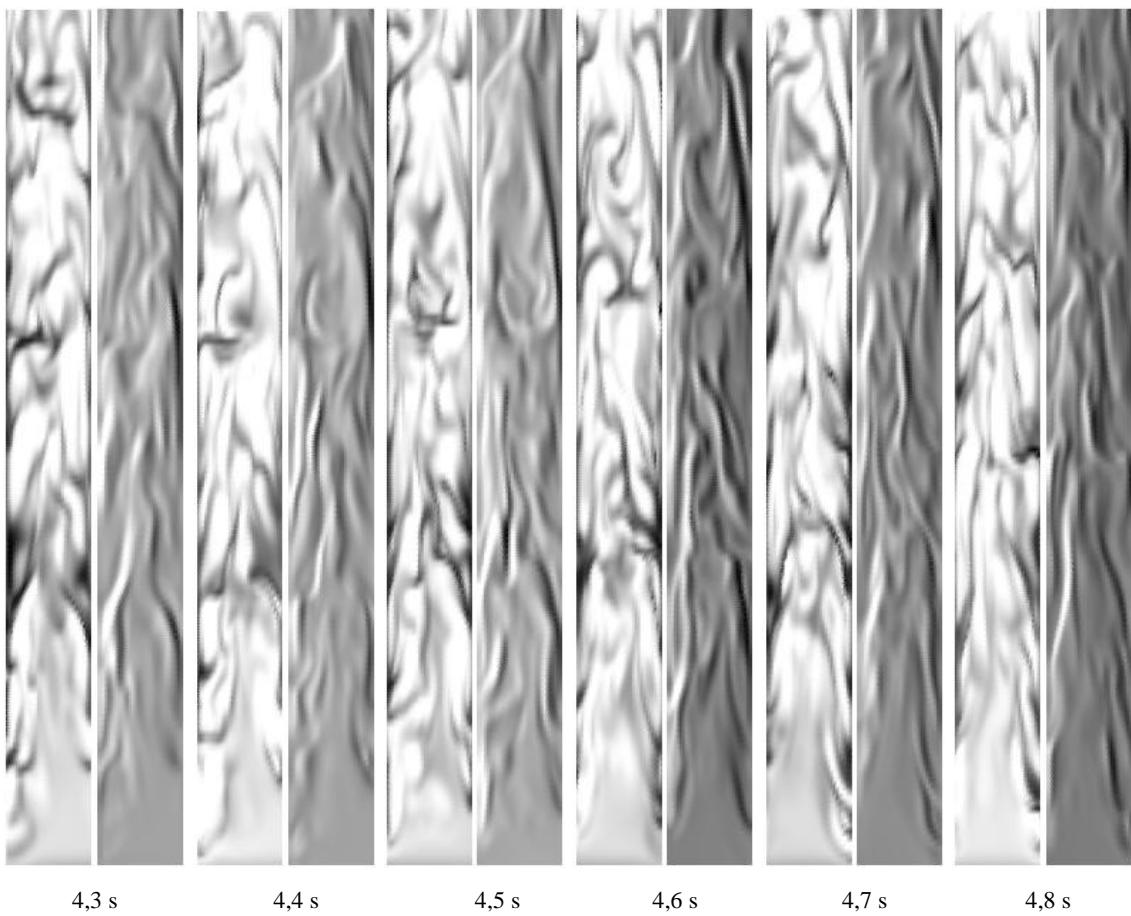


Figura 85. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s) perpendicular ao plano XZ.

Para tempos maiores mantém-se a relação entre altas taxas de deformação/*clusters*, e alta vorticidade/baixa concentração de partículas. Os tubos de vórtices contra-rotativos encontram-se em todas as regiões do leito, com exceção da região homogênea na base do leito.

A Figura 86 apresenta resultados para os campos de fração de sólidos e vorticidade a partir de 5 segundos. Neste período observa-se a formação de bolhas de gás na região próxima à entrada do leito, aumentando a heterogeneidade desta região. Observam-se *clusters*

descendo pela parede, e grandes porções de gás ascendendo na região central do leito. Esta região assemelha-se ao comportamento de um leito fluidizado borbulhante.

A região superior apresenta a formação de estruturas estiradas verticalmente, com sólidos descendo pelas paredes do reator, assemelhando-se mais ao comportamento de um leito fluidizado turbulento.

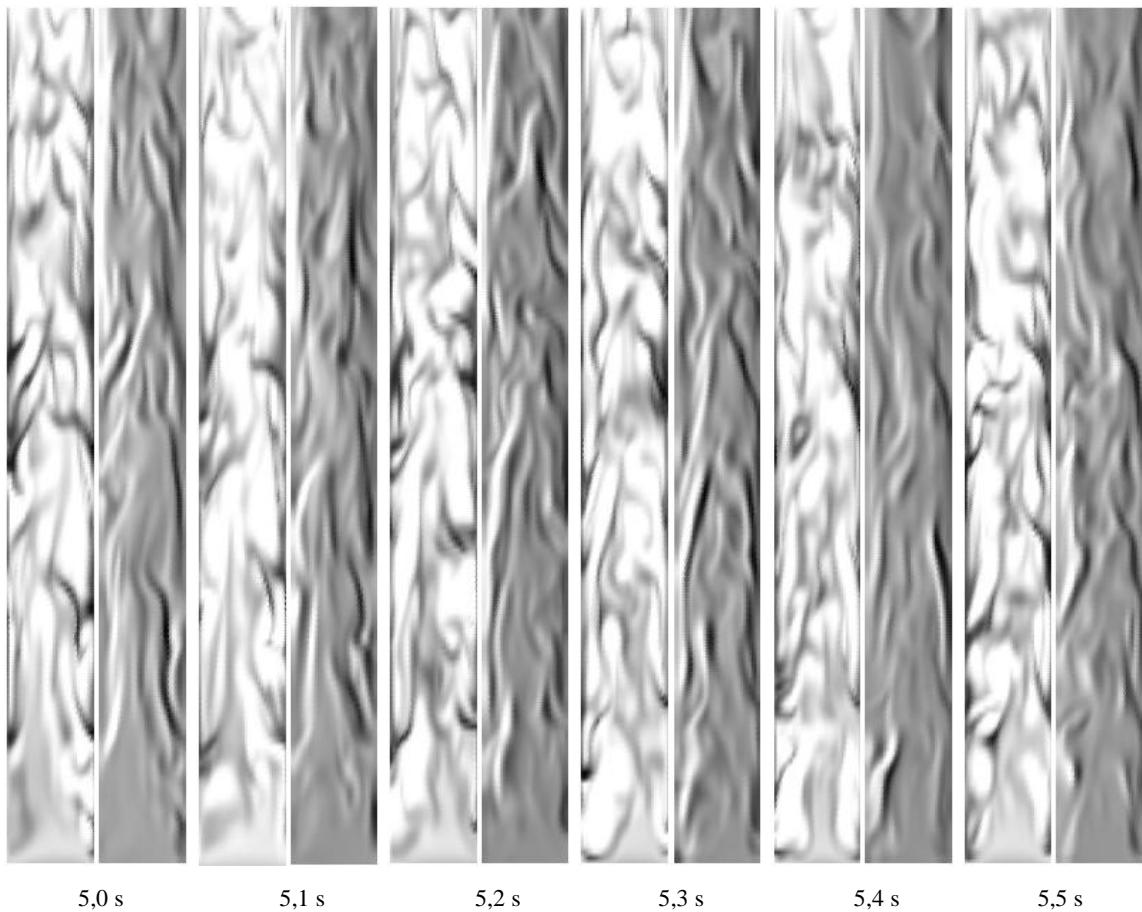


Figura 86. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade ($1/s$) perpendicular ao plano XZ.

Em ambas as regiões, superior e inferior do leito, observa-se a presença de vórtices contra rotativos estirando-se na direção vertical associados à presença de estruturas de aglomerados do tipo *strands*. Contudo, o comportamento qualitativo geral do presente caso mantém-se semelhante aos resultados apresentados para os casos anteriores, onde observou-se a presença das estruturas turbinhonianas, associadas aos *clusters* e *strands*. Em geral, o modelo sub-malha mostra-se eficaz neste contexto, dando resultados qualitativos coerentes com os fenômenos físicos encontrados em escoamentos gás-sólido em leito fluidizado turbulento.

A seguir são apresentadas comparações quantitativas para que se possa avaliar a utilidade e deficiências do modelo sub-malha utilizado na presente tese. Como nos casos

anteriores, são apresentadas comparações com os dados experimentais de van den Moortel *et al.* (1998), como pode-se observar na Figura 87. Nesta figura observa-se a excelente aproximação obtida para este estudo de caso na região da parede e intermediária. Os resultados médios numéricos aproximam-se substancialmente dos dados experimentais, principalmente na região intermediária entre o centro e a parede, onde os resultados apresentados para o Caso 7, anterior, desviavam-se substancialmente dos dados médios experimentais. O resultado apresentado na Figura 87 mostra que junto a parede, o modelo é capaz de representar todos os pontos experimentais e na região central o desvio está dentro da faixa do desvio experimental que é de 0,5 m/s.

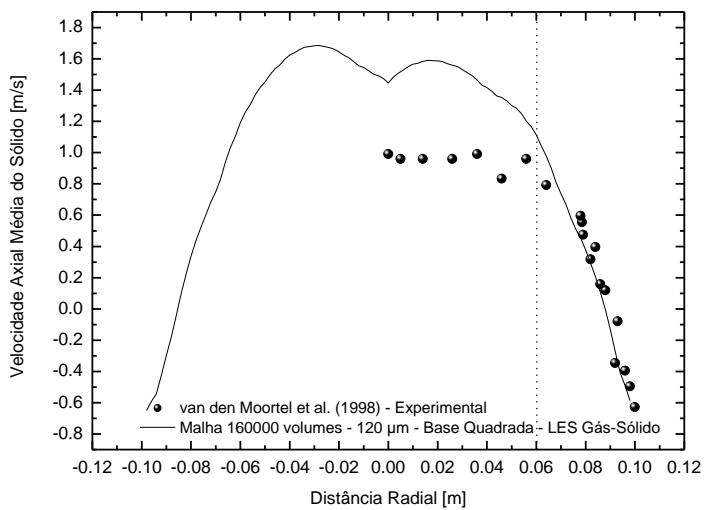


Figura 87. Comparação com dados experimentais, van den Moortel *et al.* (1998) e resultado numérico para geometria base quadrada e diâmetro de partícula 120 μm , utilizando modelo sub-malha para o gás e sólido.

Quando compararam-se os resultados médios do presente caso com os resultados numéricos de Ibsen (2002) e Zhang e van der Heyden (2001), Figura 88, observa-se a excelente concordância dos resultados Caso 8. Os resultados de Ibsen (2002), quando da utilização de modelo **LES** para fase gás e **TCG** para o sólido, divergem junto a parede, dando um comportamento muito bom na região intermediária e central do leito. No caso dos resultados do presente modelo sub-malha, a aproximação é excelente nas regiões intermediária e parede e boas na região central.

Os resultados de Zhang e van der Heyden (2001), aproximam bem os resultados próximo a parede do reator, mas não representam bem as regiões intermediária e central do leito. Lembramos que estes autores não utilizaram modelo sub-malha e nem a **TCG**. Além

disto, utilizaram condição de contorno de livre escorregamento na parede, e a condição de igualdade de fluxo de sólido na entrada e saída do reator. Fica evidente que as condições de contorno do presente trabalho onde utilizou-se condição de não escorregamento na parede representa melhor os resultados médios experimentais, mesmo sem a utilização de modelo sub-malha. Cabe ressaltar que os resultados de Ibsen (2002) utilizando modelo sub-malha e TCG, são resultados médios com condição de não escorregamento na parede.

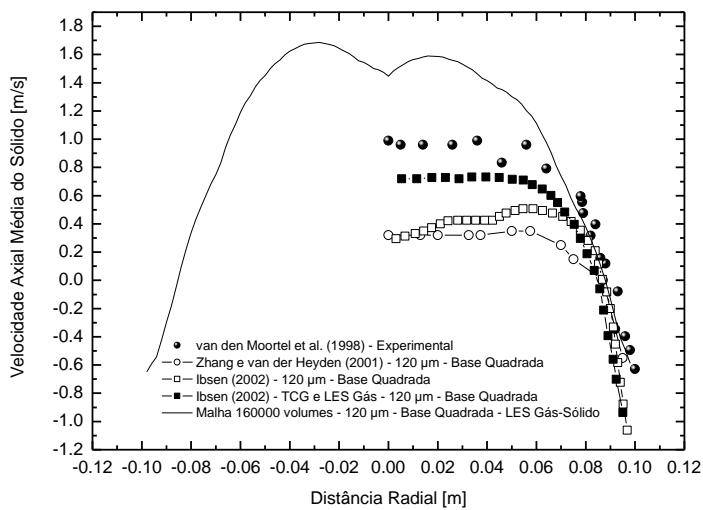


Figura 91. Comparação dos resultados experimentais com o presente caso e resultados numéricos de Zhang e VanderHeyden (2001) e Ibsen (2002).

Os resultados até o presente momento apontam para algumas evidências interessantes, que serão discutidas mais à frente. A seguir serão apresentados resultados para geometria de base quadrada, com partículas com diâmetro de 120 μm , mas densidade do sólido de 1250 kg/m^3 . A principal intenção é observar o comportamento associado às relações de densidade e como estas influenciam nos padrões de escoamento, qualitativamente e quantitativamente, para que tenhamos informações suficientes para discutir os resultados observados.

6.3.7 Apresentação de resultados: Caso 9

Este estudo de caso apresenta resultados utilizando diâmetro da partícula de 120 μm e densidade de 1250 kg/m^3 . A malha utilizada é de 160000 volumes e a geometria de base quadrada. Foram utilizadas as mesmas condições de contorno e esquema numérico dos Casos 1 e 2. Este estudo de caso considerou a viscosidade do gás e do sólido constantes, nos mesmos valores dos Casos 1 e 2, sem utilizar modelo sub-malha.

O principal objetivo deste estudo de caso é observar as diferenças associadas à mudança da geometria cilíndrica para uma de base quadrada, quando comparada com os resultados experimentais, bem como com resultados de estudos de caso anteriores, e observar a modificação qualitativa representada pela diminuição da densidade da fase sólida. Para tanto apresentaremos os resultados dos campos de fração de sólidos do início da simulação para compará-los qualitativamente com os resultados anteriores.

A Figura 89 apresenta os resultados dos campos de fração de sólidos do início das simulações até o tempo de 0,9 segundos, como apresentado nos casos anteriores. Os perfis dos campos de fração de sólido são muito similares aos apresentados para os Caso 1 e 2. Observa-se a formação de aglomerado de *clusters* na região próxima a parede, e dois vórtices contrarotativos estirando-se próximo à região da parede. Evidencia-se um perfil inflexional no centro do leito.

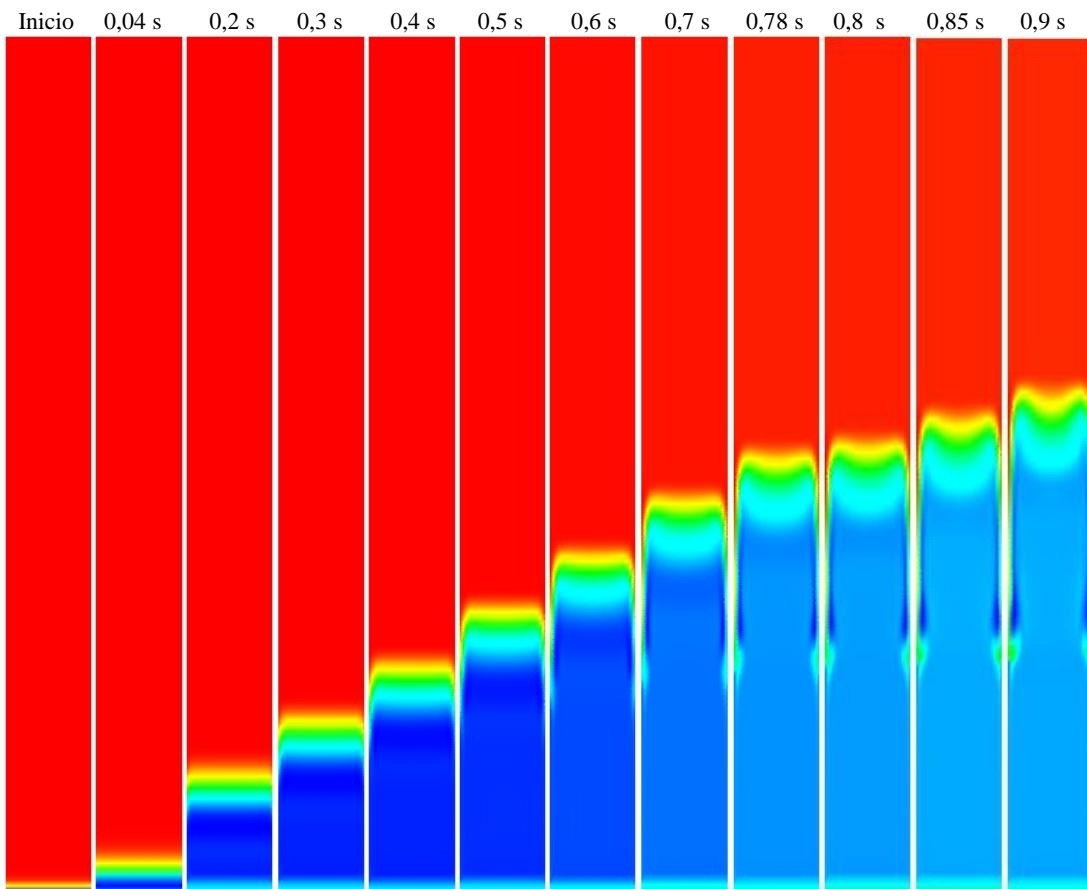


Figura 89. Evolução do campo de fração de sólido no centro da coluna plana, XZ. Da esquerda para direita: Inicio, 0,04, 0,2, 0,3, 0,4, 0,5, 0,6, 0,7, 0,78, 0,80, 0,85, e 0,9 segundos. A tonalidade avermelhada corresponde à fração de sólidos 0,4 a 0,5 e azul mais escuro 0,02.

Quando compara-se os perfis de fração de sólido do Caso 2, malha mais refinada, com o do presente Caso 9, observa-se a semelhança entre os perfis, mesmo com diâmetros de

partícula diferentes. Lembrando-se que no Caso 2 a partícula tem 75 μm . O resultado dos campos iniciais são muito semelhantes.

A Figura 90 apresenta comparação dos campos de fração de sólido para os Casos 2, 6, 7 e 9 para os tempos de 0,6, 0,8 e 0,9 segundos. Observa-se que o perfil para o Caso 2 é “mais” inflexional no centro da coluna do que os resultados apresentados para o Caso 7 e 9. As regiões de formação de *clusters* próximas à parede estão localizadas em alturas diferentes. Contudo, para o Caso 6, onde utilizou-se o modelo sub-malha, os perfis são diferentes e aparecem com maior detalhe. Nos resultados do Caso 7 o sólido desce pela parede a uma região mais abaixo que para os Casos 2, 6 e 9. No Caso 6 surgem instabilidades acima dos vórtices contra-rotativos, que até 0,9 segundos não aparecem nos outros três casos apresentados na Figura 90. Dentre os casos apresentados na Figura 93, apenas no Caso 6 utilizou-se modelo sub-malha. Os Casos 2 e 6 são para geometrias cilíndricas e o diâmetro da partícula é de 75 μm com densidade de 1250 kg/m^3 . Os Casos 7 e 9 são resultados para geometria com base quadrada e diâmetro de partícula de 120 μm , com densidade do sólido de 1250 kg/m^3 .

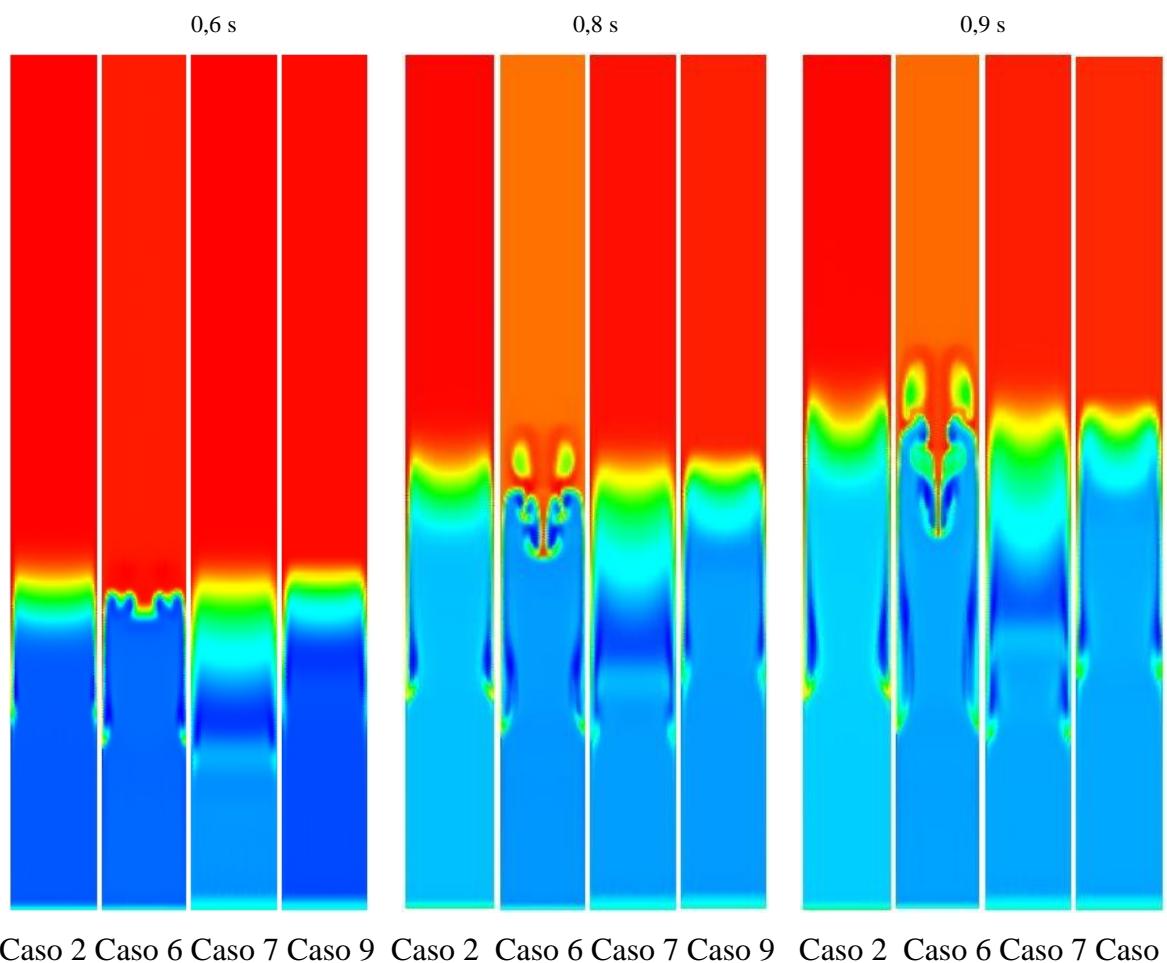


Figura 90. Comparação dos campos de fração de sólido para os Casos 2, 6, 7 e 9.

Os perfis para os Casos 7 e 9 são semelhantes (Ver Figura 90), mas na região junto a parede observa-se que os *clusters* que ali se formam, para o Caso 7, aproximam-se mais da região da entrada do reator do que os *clusters* presentes nesta região no Caso 9.

A Figura 91 apresenta os campos de fração de sólido a partir de 1 segundo até 1,78 segundos. Evidencia-se a formação de uma estrutura densa no centro do leito, exatamente como nos resultados dos Casos 2 e 6. Ou seja, mesmo para uma geometria diferente, os perfis mantém-se qualitativamente semelhantes. Observa-se que há o aparecimento de instabilidades na região acima dos vórtices contra-rotativos gerando caminhos preferenciais, de forma semelhante aos resultados apresentados para o Caso 6, mas com detalhes menores. Observa-se ainda a presença da estrutura densa no centro do leito, formada pela compressão exercida pelos dois vórtices contra-rotativos que ascendem junto a parede, como descrito nos casos anteriores.

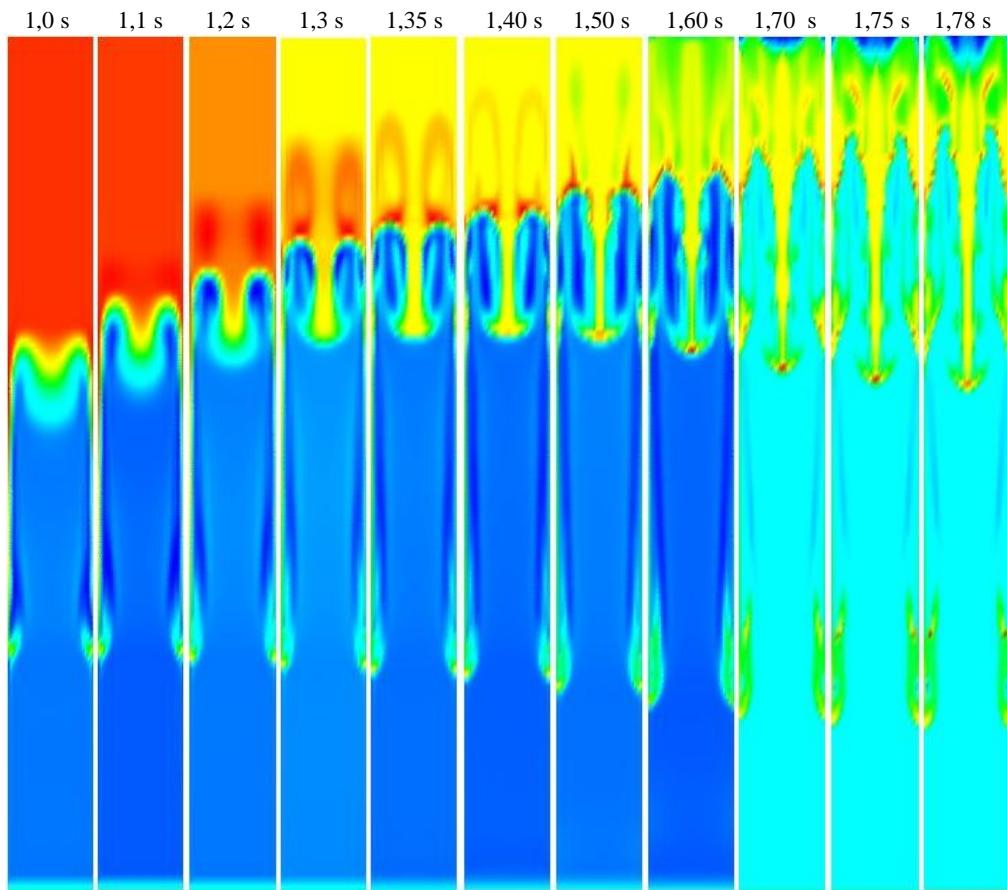
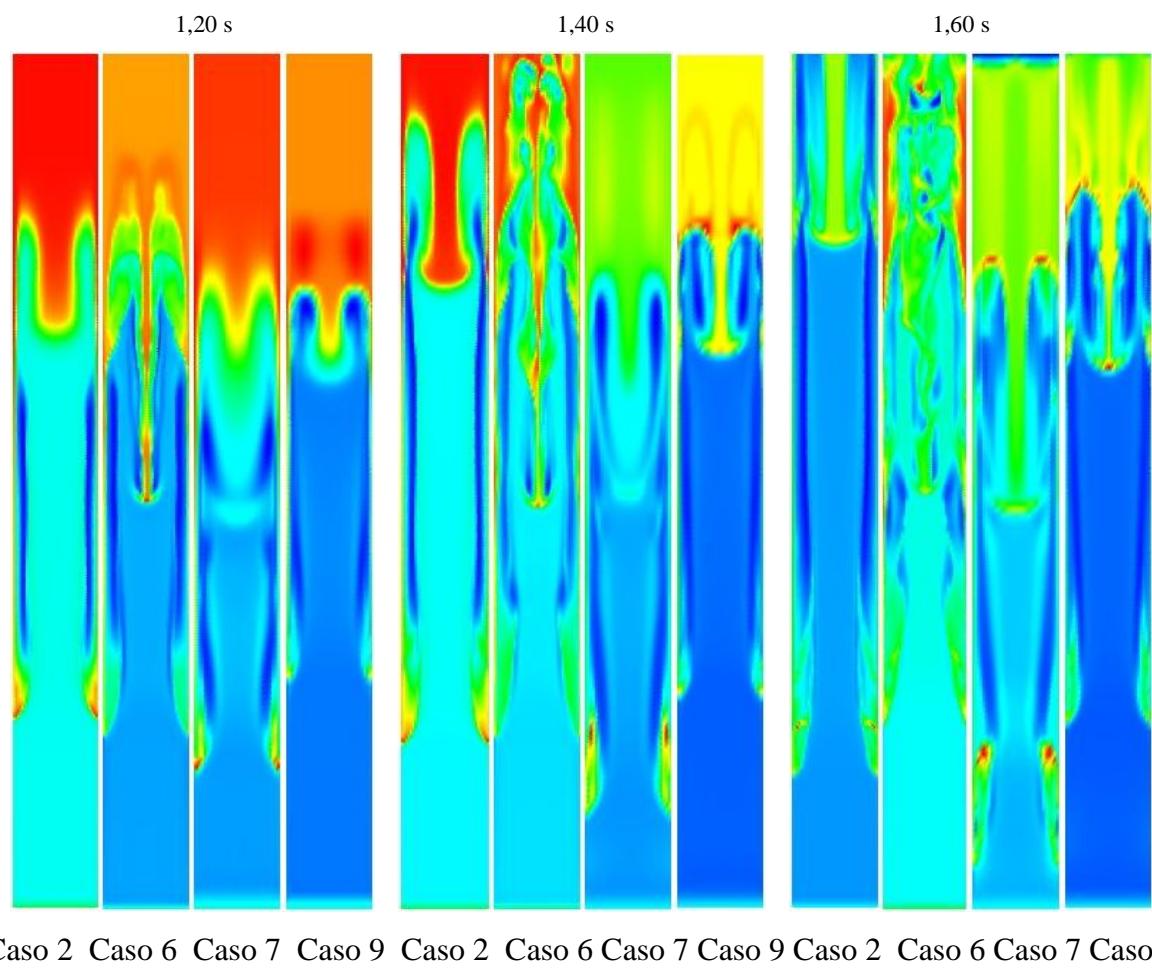


Figura 91. Evolução do campo de fração de sólido no centro da coluna plano, XZ. Da esquerda para direita: 1,0, 1,1, 1,2, 1,3, 1,35, 1,40, 1,50, 1,60, 1,70, 1,75 e 1,78 segundos. A tonalidade avermelhada corresponde a fração de sólidos 0,4 a 0,5 e azul mais escuro 0,02.

É importante notar que as instabilidades para o Caso 6 iniciam já em 0,8 segundos enquanto para o presente caso apenas em 1,2 segundos. A partir de 1,7 segundos, a região central do leito mantém-se com a fração de sólidos média de 0,16, enquanto para os tempos anteriores a fração de sólidos média nesta região é de 0,1.

A Figura 92 apresenta os campos comparados entre os casos 2, 6, 7 e 9 sendo possível observar os diferentes padrões encontrados nos quatro casos. A 1,2 segundos o resultado do Caso 6 mostra que a estrutura densa central já foi formada e desce pelo centro do leito, enquanto que para os outros casos esta estrutura ainda está iniciando sua formação. Observa-se que tanto o Caso 6 quanto o Caso 9, apresentam instabilidades acima dos vórtices contra-rotativos, que no Caso 7 são de menor intensidade, e irão estabelecer-se apenas em 1,4 segundos.



Caso 2 Caso 6 Caso 7 Caso 9 Caso 2 Caso 6 Caso 7 Caso 9 Caso 2 Caso 6 Caso 7 Caso 9

Figura 92. Comparação dos campos de fração de sólido para os Casos 2,6,7 e 9.

Em 1,4 segundos as estruturas estão bastante diferenciadas quando comparam-se os Casos 6, 7 e 9. Observa-se que neste tempo o Caso 2 apresenta dois vórtices contra-rotativos

estirando-se para encontrar passagem através do leito denso, na região superior do leito, de forma semelhante ao Caso 7, mas em posição diferente.

Os campos de fração de sólido junto à parede na região próxima à parede evidenciam a formação de aglomerados em todos os casos, com a diferença entre o comportamento desta região do Caso 7 em relação aos outros. No Caso 7 os sólidos descem para mais próximo da base do reator, como se pode ver na Figura 92 no tempo de 1,6 segundos.

Os resultados para o Caso 6 apresentam os campos de fração de sólidos com maior detalhe quando compara-se com os outros três casos. De fato, o Caso 6 foi resolvido com modelo sub-malha para a fase gás e para a fase sólido. Sendo assim, os campos de velocidade e de fração de sólido são melhor resolvidos para ambas as fases, trazendo informações de escalas não resolvidas para o nível da solução da malha computacional.

Com a finalidade de confirmar o que foi observado anteriormente sobre o comportamento da taxa de deformação/vorticidade, e o campo de fração de sólidos, apresentam-se resultados dos campos de fração de sólido e vorticidade a partir de 1,8 segundos, em tons de cinza, Figura 93. Novamente, os tons tendendo para o negro representam, no caso dos campos de fração de sólido, regiões mais ricas em sólido, e tons tendendo para o branco representam regiões ricas em gás. No caso da vorticidade, regiões com tons tendendo para o máximo branco e negro, são regiões de alta vorticidade.

Observa-se na Figura 93 que o campo de fração de sólidos ainda apresenta, para o tempo de 1,8 até 2,2 segundos, a estrutura densa central caindo, como observado anteriormente. No Caso 6 esta estrutura não mantém-se por este período, ocorrendo antes do presente caso e “desfazendo-se” no tempo de 2 segundos. Os campos de vorticidade e fração de sólidos são virtualmente semelhantes, apresentando regiões de alta vorticidade onde há baixa concentração de partículas. Observa-se a formação de vórtices contra-rotativos estirados, com estrutura semelhante aos resultados dos casos anteriores. No período de tempo apresentado na Figura 93, as estruturas mantêm-se simétricas, com uma pequena quebra de simetria na região superior no tempo de 2,2 segundos, efeito da interação de dois vórtices contra-rotativos e estruturas de *clusters* estirados. A base do leito mantém-se uniforme, sem a presença de estruturas nesta região, neste período de tempo. Os resultados para malha de base quadrada do presente caso são qualitativamente semelhantes aos apresentados anteriormente para geometria cilíndrica, apresentando estruturas semelhantes.

Na continuação observa-se os resultados da Figura 94, para resultados a partir de 2,3 segundos, onde é possível observar que a estrutura densa no centro do reator, mas agora mais próxima da base ainda mantém-se, mesmo no tempo de 2,7 segundos. Em 2,3 segundos

observa-se que a quebra de simetria continua e vai aumentando significativamente com o passar do tempo.

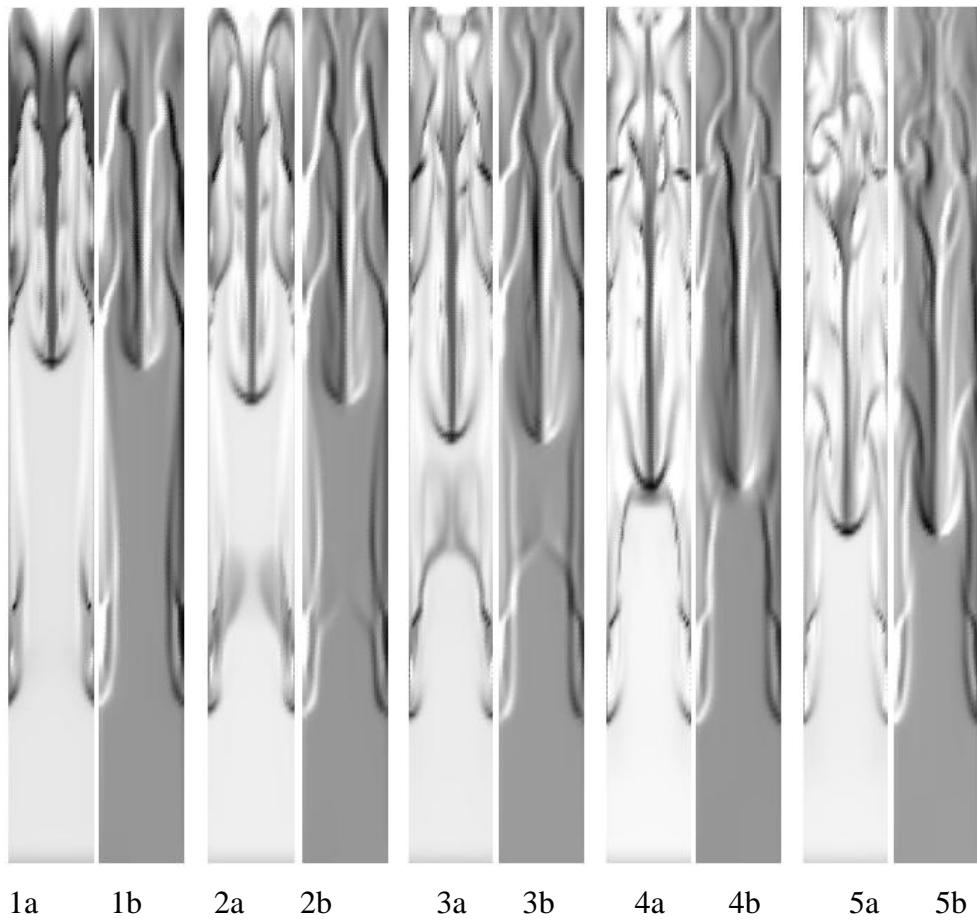


Figura 93. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s) perpendicular ao plano XZ. 1a, 2a, 3a, 4a, 5a, fração de sólidos para 1,80, 1,90, 2,00, 2,10 e 2,20 segundos respectivamente. 1b, 2b, 3b, 4b, 5b, componente da vorticidade (1/s), no plano XZ, para os mesmos tempos, respectivamente.

A queda da estrutura densa no centro do leito gera desprendimento de vórtices que a partir de uma certa distância geram instabilidades, degenerando para um comportamento eminentemente turbulento na região superior do leito. Sob este aspecto, parece que a presença de *clusters*, gera a quebra de simetria. No tempo de 2,6 segundos inicia-se o aparecimento de instabilidades nas proximidades da base do leito, geradas pela queda livre do corpo denso central, e aglomerados na região junto a parede. Evidencia-se a presença de estrutura alongadas contra-rotativas, com vorticidade alta, em torno de 200 (1/s). Os *clusters* apresentam-se na região central do leito, bem como nas regiões próximas as paredes onde observa-se o desprendimento de *clusters* alongados.

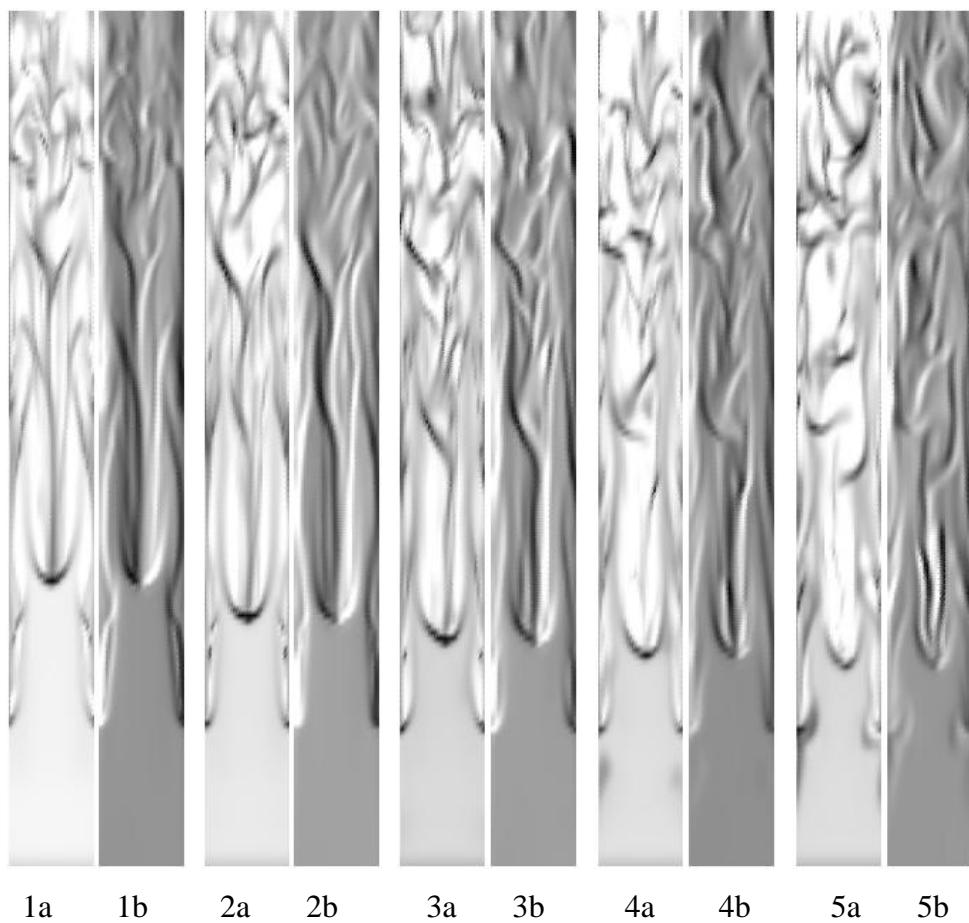


Figura 94. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade (1/s) perpendicular ao plano XZ. 1a, 2a, 3a, 4a, 5a, fração de sólidos para 2,30, 2,40, 2,50, 2,60 e 2,70 segundos respectivamente. 1b, 2b, 3b, 4b, 5b, componente da vorticidade (1/s), no plano XZ, para os mesmos tempos, respectivamente.

As estruturas para tempos maiores apresentam-se semelhantes ao descrito para os casos anteriores, sendo que as estruturas de *clusters* próximo a base do reator estão presentes em menor proporção quando comparam-se os resultados deste Caso 9 com os Casos 7 e 8. Estes resultados não serão apresentados, pois o comportamento é semelhante ao descrito anteriormente.

Quando compara-se quantitativamente os resultados médios da velocidade de sólido com os experimentos de van den Moortel *et al.* (1998) observa-se, Figura 95, a boa concordância em toda a região de estudo, tanto junto à parede como na região central e intermediária, com desvio na região central dentro do desvio padrão experimental.

Sem dúvida o resultado apresentado na Figura 95 é muito semelhante ao resultado para o Caso 8, apresentado na Figura 96. Os resultados médios numéricos aproximam-se substancialmente dos dados experimentais médios experimentais, tanto na região da parede, onde há uma exata predição do comportamento dos sólidos, (presente caso), como na região

intermediária, de 3 cm da parede, onde o comportamento médio segue a tendência apontada pelos pontos experimentais.

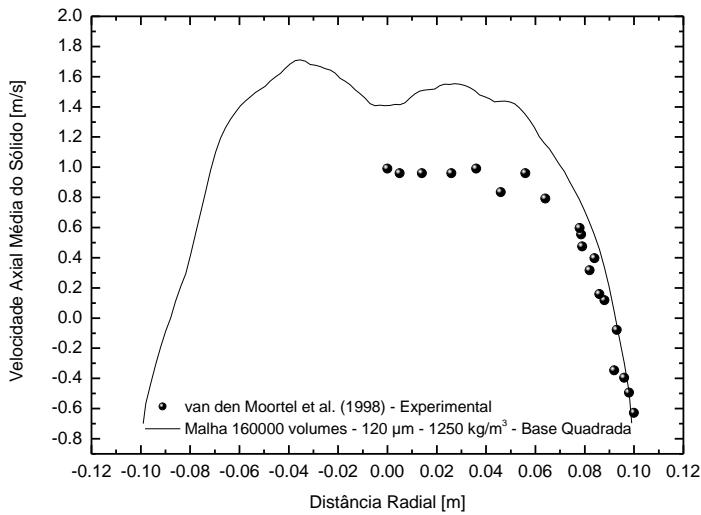


Figura 95. Comparação com dados experimentais, van den Moortel *et al.* (1998) e resultado numérico para geometria base quadrada e diâmetro de partícula 120 μm e densidade 1250 kg/m^3 .

Na Figura 96 observa-se a comparação do presente Caso e Caso 8. Importante ressaltar que o presente caso modificou a relação $\rho_{\text{sólido}}/\rho_{\text{gás}}$. Esta relação tem influência interessante, pois sem modelo sub-malha, apenas utilizando densidade menor que a experimental, os resultados médios comparam-se aos resultados utilizando modelo sub-malha. Mais à frente, no item Discussão, será apresentado análise no que concerne a este efeito, tendo em vista a classificação de Geldart.

Cabe lembrar que os resultados experimentais de van den Moortel *et al.* (1998), foram realizados em um leito fluidizado de base quadrada, e o diâmetro médio das partículas utilizado por estes autores foi de 120 μm . Alguns dos resultados apresentados anteriormente utilizaram geometria cilíndrica. Parece que a geometria tem grande influência no comportamento médio das partículas, junto a região da parede e na região intermediária entre o centro e a parede (Ver por exemplo os resultados médios para os Casos 4 e 5).

A Figura 97 apresenta comparação com dois resultados anteriores, um para malha refinada cilíndrica com diâmetro de partícula 75 μm , e outra com malha de 160000 volumes e diâmetro igual ao experimental, e resultado do presente caso.

Observa-se que os resultados médios, utilizando-se o mesmo refino de malha e mesmo diâmetro de partículas, tem resultados diferenciados quanto a utilização da geometria. Os

resultados para geometria cilíndrica não são capazes de captar o comportamento na região intermediária, com exceção dos resultados da malha refinada.

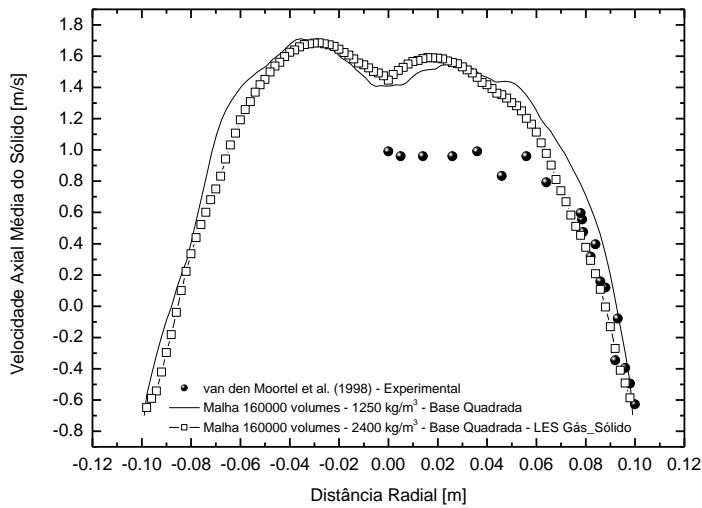


Figura 96. Comparação com dados experimentais, van den Moortel *et al.* (1998) e resultados numéricos para geometria base quadrada e diâmetro de partícula 120 μm , densidades 1250 kg/m^3 (presente caso) e 2400 kg/m^3 (Caso 8) utilizando modelo sub-malha para o sólido.

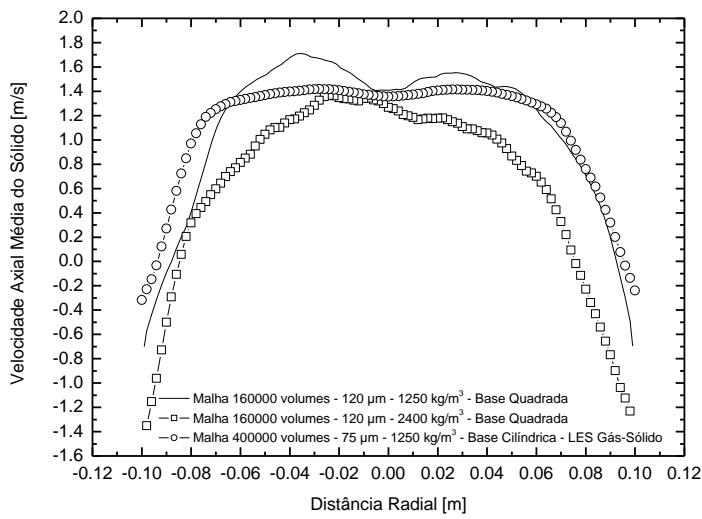


Figura 97. Comparação de resultados numéricos para diferentes geometrias, Casos 9, 7 e 6.

Outro aspecto interessante é que a malha refinada, mesmo com geometria cilíndrica capta muito bem o comportamento na região do centro do reator e da intermediária, mas junto a parede não é capaz de captar a alta velocidade de partículas descendo nesta região. Mas provavelmente isto deve-se a utilização de diâmetro de partícula menor que a experimental (exceção dos Casos 4 e 5), a velocidade terminal é menor, resultando em arraste maior, efeito

que pode-se observar com bastante clareza na Figura 97 na região intermediária entre o centro e a parede (2-8cm).

Frente aos bons resultados apresentados nas Figuras 96 e 97, poder-se-ia pensar que bastaria um refino radial da malha para captar o comportamento na região intermediária, ou um ajuste ou modificação da função de arraste. O resultado apresentado para malha de base quadrada, com o mesmo diâmetro de partículas experimental, sem a utilização de qualquer modelo de turbulência, mostra a importância das condições de contorno, e da relação entre densidades, tendo em vista a comparação com os resultados numéricos de Ibsen (2002) e Zhang e van der Heyden (2001), apresentado na Figura 98. Estes autores utilizaram a forte condição de igualdade de fluxo de sólidos na entrada e saída do leito. Ibsen (2002) realizou uma série de testes com diferentes funções para o arraste e diferentes modelos de turbulência, bem como a TCG, não obtendo resultado tão bom quanto os apresentados nos Casos 8 e 9 para a região da parede e intermediária. Cabe ressaltar que estes autores utilizaram uma ordem de discretização do tipo “upwind”, de primeira ordem, e este trabalho, em todos os casos estudados, utilizou um esquema de segunda ordem para o tempo e para o espaço, e não foi utilizada a condição de igualdade de fluxo.

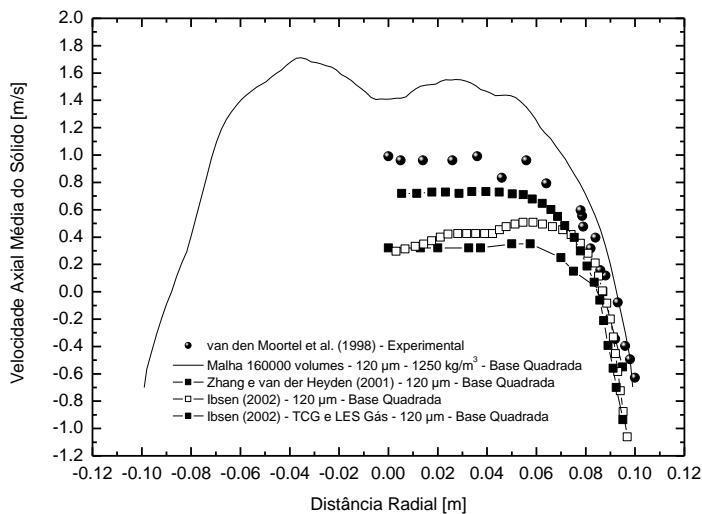


Figura 101. Comparação dos resultados experimentais com o presente caso e resultados numéricos de Zhang e van der Heyden (2001) e Ibsen (2002).

A diferença está apenas na condição de igualdade de fluxo, na ordem de discretização, na condição inicial e na relação entre densidades.

Desta forma, os resultados indicam que os mecanismos físicos descritos nos Capítulos 3 e 4, no que se refere à formação e destruição de aglomerados e à interação de vórtices

contra-rotativos com *strands*, são válidos e devem realmente representar a física por traz da formação destas estruturas, ou seja, não há necessidade de utilizar a **TCG** para representar os fenômenos físicos inerentes ao escoamento gás-sólido em um leito fluidizado turbulento, para as condições aqui presentes. Discussão pertinente sobre este e outros aspectos será apresentada na seção intitulada Discussão.

Como os resultados são bons para o presente estudo de caso assim como para o Caso 7 e 8, pode-se utilizar os resultados numéricos para construir modelos sub-malha, com base neste, com a finalidade de utilizá-los para simulações em malha grosseira, como sugere Agrawal (2000), ou seja, que sejam válidos quando da aplicação em unidades industriais, tais como o reator FCC.

No estudo de caso que se segue, serão apresentados resultados quantitativos utilizando o modelo sub-malha para a fase sólido, com o intuito de se observar o comportamento do modelo frente a comparação com os dados experimentais e com os resultados do presente caso e anteriores.

6.3.8 Apresentação de resultados: Caso 10

Este estudo de caso apresenta resultados utilizando diâmetro da partícula de 120 μm e densidade de 1250 kg/m^3 , a malha utilizada é de 160000 volumes e a geometria de base quadrada. Foram utilizadas mesmas condições de contorno e esquema numérico do Caso 9. Este estudo de caso utilizou modelo sub-malha para a fase gás e sólido.

A evolução temporal para este caso manteve-se semelhante aos resultados para o Caso 9, até em torno de 5 segundos. Após este tempo, os perfis são mais homogêneos quando comparados aos dos Casos 8 e 9. Estes perfis não serão apresentados na intenção de economia de espaço, tendo em vista as semelhanças com o anterior.

A Figura 99 apresenta comparação com os dados experimentais de van den Moortel *et al.* (1998). Observa-se que os resultados numéricos médios aproximam-se muito bem dos resultados experimentais na região central e intermediária a parede, contudo não capturando os efeitos de parede. Este resultado parece indicar a necessidade de algum ajuste do modelo sub-malha no que se refere ao comportamento junto a parede, tendo em vista os resultados obtidos para o Caso 9, onde o comportamento junto a parede é bem representado.

No item a seguir serão apresentados resultados tridimensionais de clusters, *strands* e estruturas de vórtices, objetivando relacionar as estruturas de aglomerados de partículas com as estruturas de vórtices identificadas utilizando-se técnicas apropriadas.

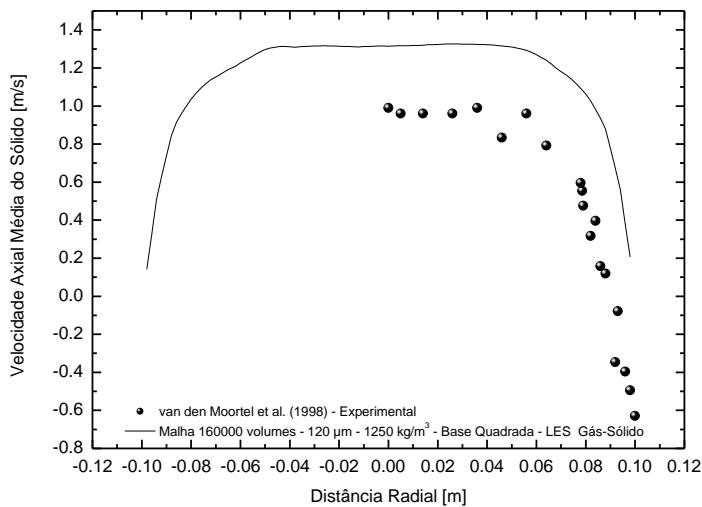


Figura 99. Comparação com dados experimentais, van den Moortel *et al.* (1998) e resultado numérico para geometria base quadrada e diâmetro de partícula 120 μm e densidade 1250 kg/m^3 , utilizando modelo sub-malha para sólido e gás.

6.4 Visualização 3D de Estruturas de Clusters e Estruturas de Vórtices

Nos itens anteriores foram apresentados resultados qualitativos e quantitativos referentes ao estudo experimental de van den Moortel *et al.* (1998), comparados com resultados numéricos de Zhang e VanderHeyden (2001) e Ibsen (2002) e com os resultados numéricos obtidos no presente trabalho. Neste item serão apresentados e discutidos os resultados tridimensionais dos campos de fração de sólido, vorticidade, helicidade relativa, centro de vórtices (*vortex core*) e Fator Q. Primeiramente serão apresentados iso superfícies de fração de sólido identificando as estruturas de clusters, bolhas de gás e *strands*. Em seguida são apresentadas as técnicas de identificação de vórtices mais empregadas, suas vantagens e deficiências como apontado na literatura técnica específica. O principal objetivo é poder observar a relação entre vórtices contra-rotativos e aglomerados de partículas, consubstanciando o que foi discutido e apresentado anteriormente.

6.4.1 Estruturas de clusters, strands e bolhas de gás

A partir dos resultados do Caso 7 para o tempo de 5,9 segundos (ver Figura 77) serão apresentadas iso superfícies de fração de sólido de forma que se possa visualizar as estruturas tridimensionais de aglomerados e bolhas de gás presentes no interior do leito fluidizado. A Figura 100 apresenta iso superfícies com fração de sólido 0,05, 0,1, representando regiões ricas em gás. Observa-se na Figura 100 a, cuja fração de sólido é de 0,05, que a região próxi-

ma a base é mais densa que a região superior do leito, como esperado para o comportamento de um leito fluidizado turbulento. A medida que aumenta-se a fração de sólidos para um leito denso, observa-se que a região da base está mais enriquecida com sólidos. Um leito denso é definido à partir de 0,2 de fração de sólido. Evidencia-se que as bolhas de gás estão orientadas na direção axial Z do leito com exceção da região junto a base do leito, onde há alta recirculação. Poucas bolhas de gás são encontradas na região junto à parede.

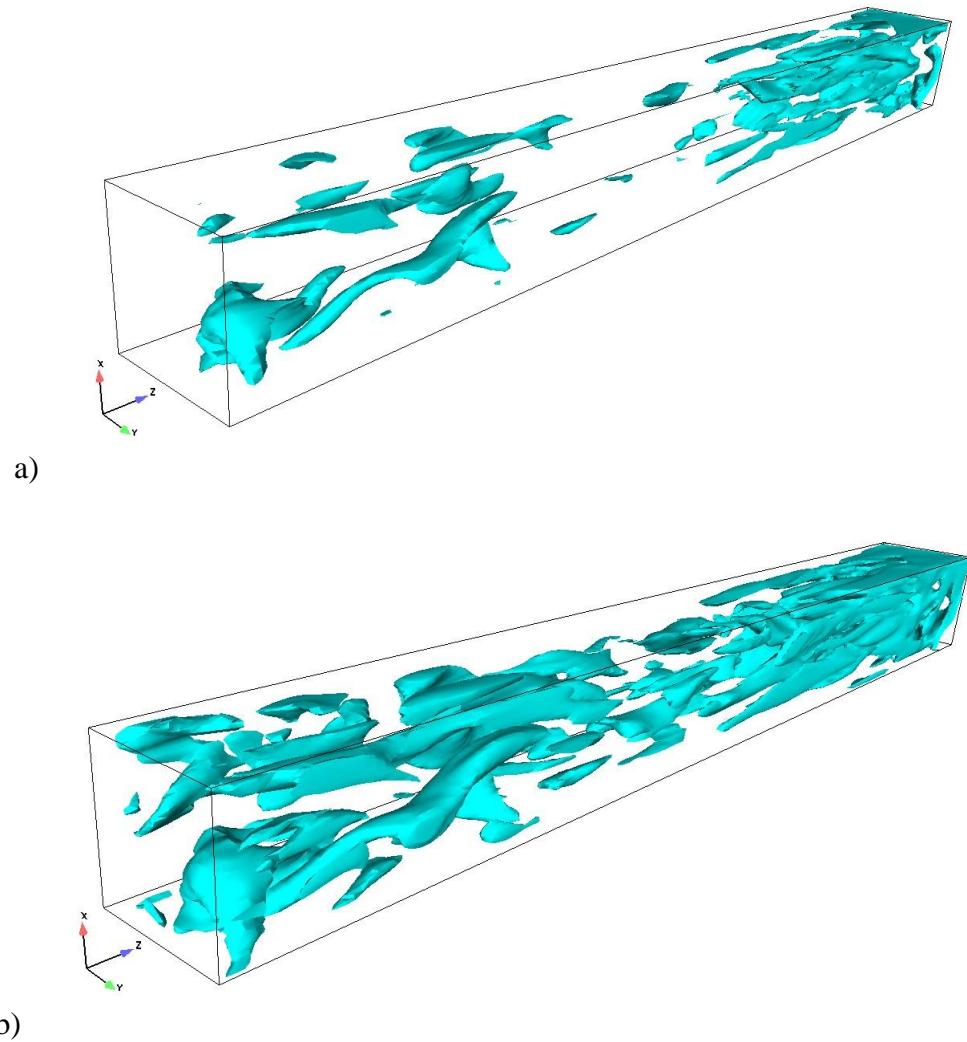
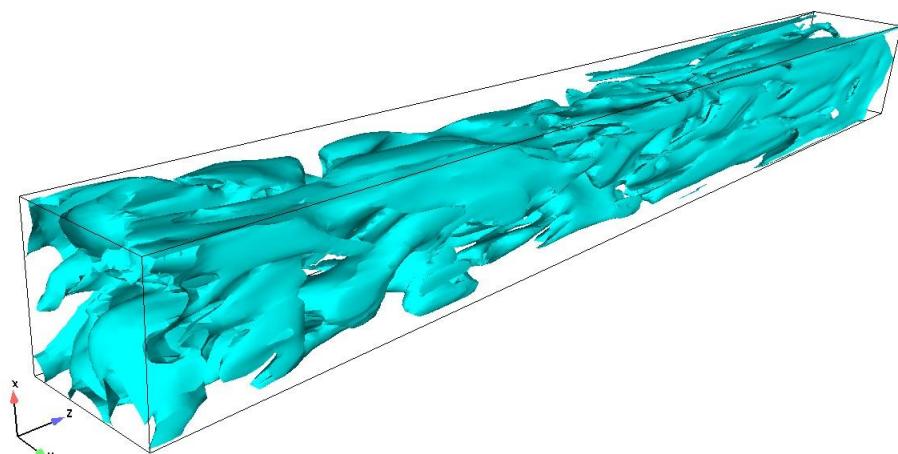


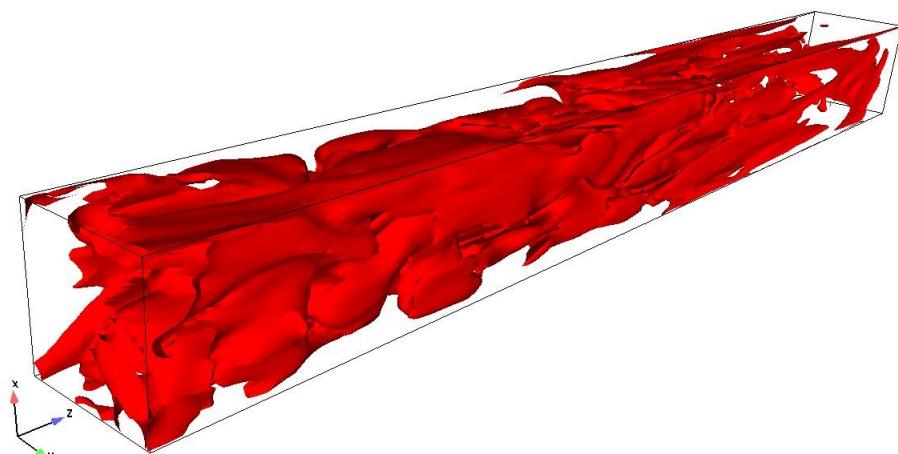
Figura 100. Iso superfícies de fração de sólido com a) 0,05, b) 0,1, representando regiões ricas em gás.

A Figura 101 apresenta iso superfícies de fração de sólido 0,2, 0,3 e 0,4, representando regiões ricas em sólido. A fração de sólido média no interior do leito para o Caso 7 encontra-se com valor de 0,4. Observa-se na Figura 101 c que a região superior do leito está praticamente livre de sólidos, com estruturas de sólidos localizadas preferencialmente junto às paredes. A região da base é mais rica em sólidos com acumulo de sólidos junto a parede bem

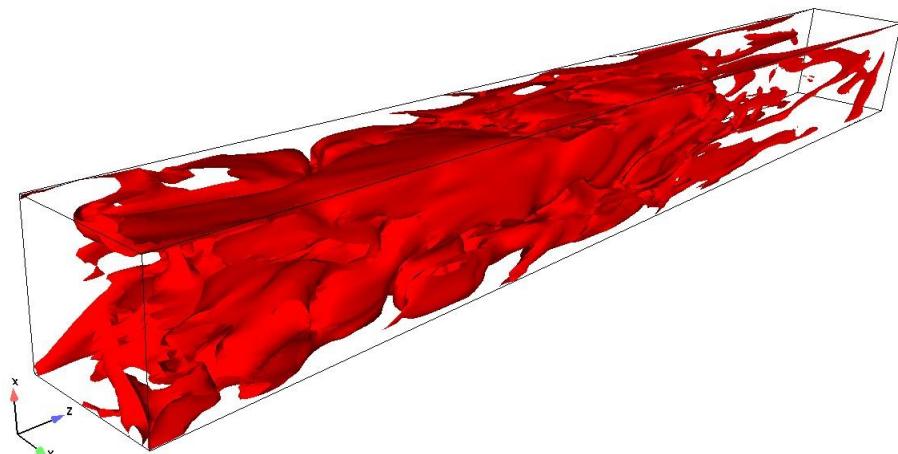
como na região central. Evidencia-se que as estruturas de aglomerados de partículas, Figura 101 c são de dimensões acentuadas encontrando-se em praticamente todas as regiões do leito.



a)



b)



c)

Figura 101. Iso superfícies de fração de sólido com a) 0,2, b) 0,3 e c) 0,4, representando regiões ricas em sólido.

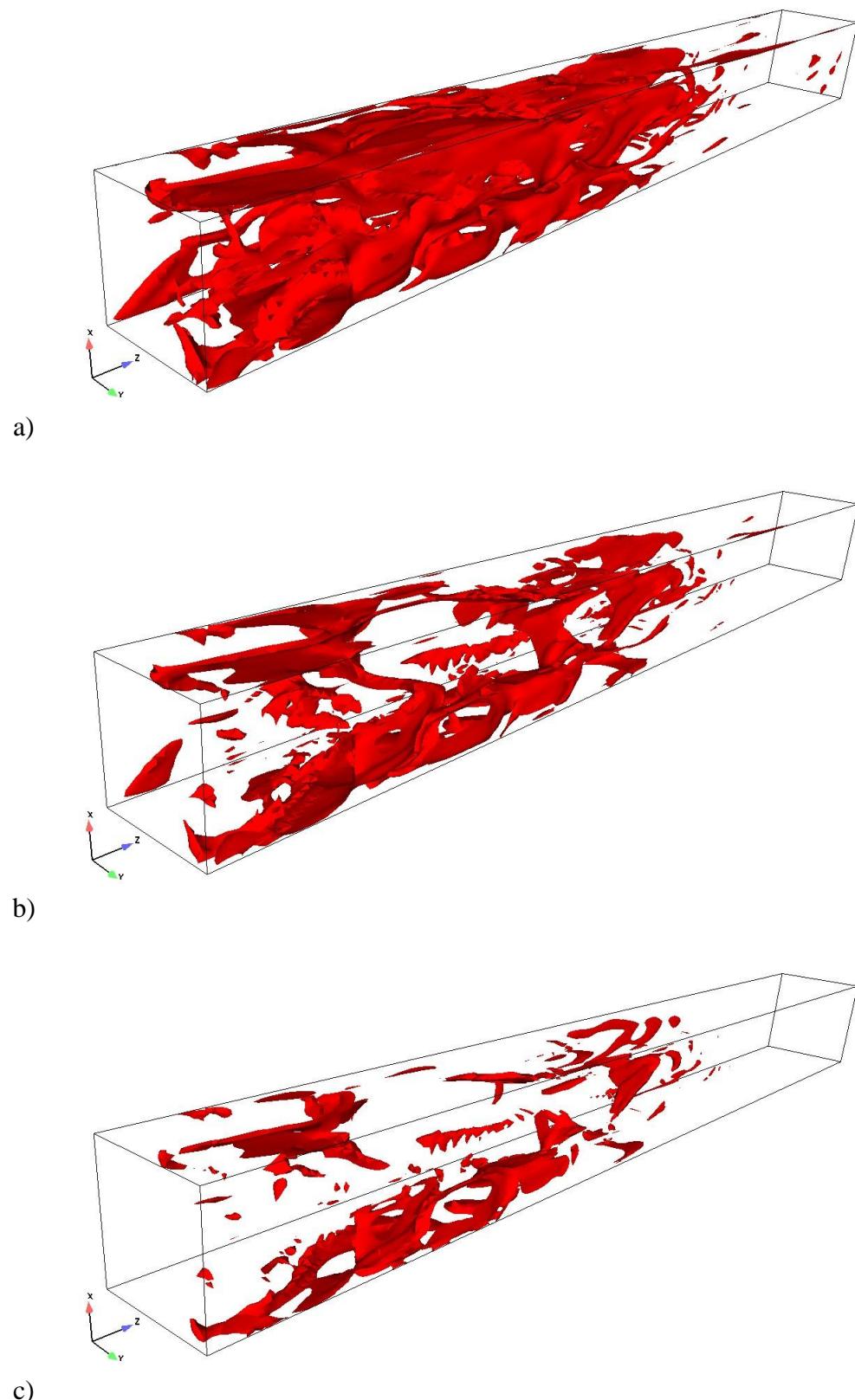


Figura 102. Iso superfícies de fração de sólido com a) 0,5, b) 0,58 e c) 0,63, representando regiões ricas em sólido.

A Figura 102 apresenta iso superfícies de fração de sólido 0,5, 0,58 e 0,63. À partir de 0,5 pode-se definir clusters que são encontrados na região próxima a base e intermediária do leito, Figura 102 a e b. Evidencia-se que as estruturas de clusters não são encontradas apenas na região junto à parede. Observa-se uma quantidade relativamente grande de estruturas de clusters no centro do leito. Estruturas de *strands* são visualizadas na Figura 102 c, onde observa-se que estão orientados na direção axial Z. Observa-se na Figura 103 que o regime turbulento está bem caracterizado com a base do leito mais denso e a região superior mais diluída.

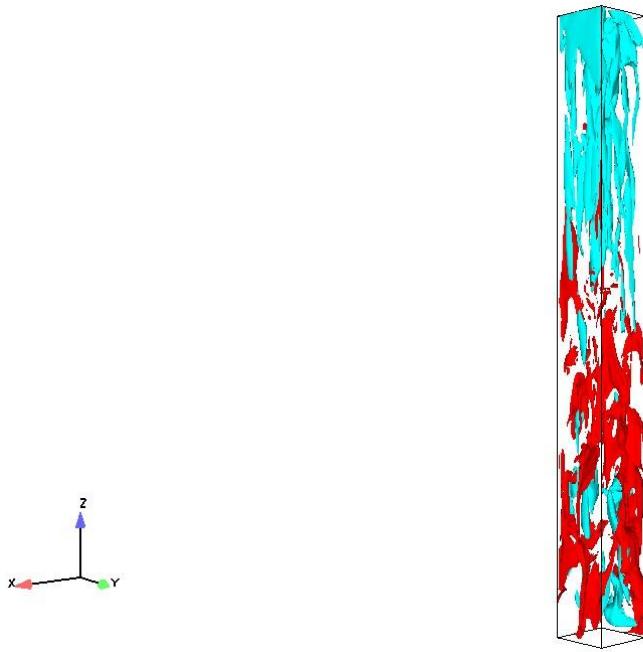


Figura 103. Iso superfícies de fração de sólido 0,05 (azul - gás) e 0,58 (vermelho - sólidos).

Nos sub-itens a seguir serão apresentadas iso superfícies de vorticidade, helicidade, fator Q, estiramento de vórtices e fração de sólidos de forma a demonstrar a interação entre clusters e *strands* com estruturas rotativas mencionadas anteriormente.

6.4.2 Base Teórica para Identificação de Vórtices

Nos estudos de caso apresentados nos itens anteriores comparou-se os campos de fração de sólido e vorticidade para o centro do leito. Observou-se a intima relação entre a formação de aglomerados de partículas e tubos de vórtices, tendo em vista que os clusters tendem a manter-se na região externa do vórtice, como descrito no Capítulo 4. As estruturas de *strands* estão associadas com tubos de vórtices contra-rotativos em processo de estiramento como pode ser observado nos resultados apresentados, onde o pós-processamento

foi realizado para um corte no centro do leito. Entretanto, pela análise 2D não é possível afirmar categoricamente a presença de um vórtice com base no pressuposto de que no máximo de vorticidade deve ser encontrado um vórtice. Segundo Zabusky *et al.* (1991) um vórtice tem alta magnitude de vorticidade, mas o contrário não é sempre verdadeiro. Isto é, existindo regiões de alta magnitude de vorticidade não significa que um vórtice seja encontrado na região, como por exemplo, no escoamento sobre placa plana (camada limite).

Iso superfícies de magnitude de vorticidade são freqüentemente utilizadas para visualização de vórtices, contudo, a direção da vorticidade é perdida por essa técnica, Sadlo *et al.* (2004). Outro aspecto importante é o fato de que os campos de vorticidade não separam as zonas cisalhantes das puramente rotativas, o que resulta em uma sobre estimação das estruturas rotativas.

A grande dificuldade na discussão de vórtices é a falta de uma definição formal de vórtices, como comentado no Capítulo 3. Segundo Roth (2000) e Sadlo *et al.* (2004), a definição de Robinson (1991) e Lugt (1972) freqüentemente citada

“um vórtice existe quando linhas de corrente instantâneas mapeadas sobre um plano normal ao eixo central do vórtice exibem um padrão circular ou espiral, quando observadas à partir de um ponto de referencia movendo-se com este eixo”

é difícil de ser aplicada pois para que se possa checar a presença de um vórtice seguindo esta definição, deve-se conhecer a priori o eixo central do vórtice, exatamente o que se procura determinar.

Tendo em vista o mencionado acima serão apresentados os vários métodos descritos na literatura técnica para a identificação de estruturas rotativas e centro de vórtices, para então associá-los às estruturas de clusters e *strands*. Estes métodos estão bem estabelecidos na comunidade científica, Roth (2000) e Sadlo *et al.* (2004), provendo assim uma maior confiabilidade na identificação das estruturas rotativas apresentadas a seguir.

Um número bem conhecido de critérios para a presença de vórtices, ou de forma geral, estruturas rotativas, são derivados imediatamente da equação de Navier-Stokes. Para um fluido incompressível a equação de Navier-Stokes é

$$\frac{D\mathbf{U}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{U} \quad (6.1)$$

onde o lado esquerdo da equação é a derivada material da velocidade, e ν a viscosidade cinemática.

Aplicando-se os operadores divergente, rotacional e gradiente na Equação 6.1, resulta em equações relevantes para a visualização de estruturas de vórtices. O operador divergente aplicado a Equação 6.1 é a equação escalar

$$\nabla \cdot \left(\frac{D\mathbf{U}}{Dt} \right) = -\frac{1}{\rho} \nabla^2 p \quad (6.2)$$

fazendo uso da equação da continuidade $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$. Um valor positivo do Laplaciano da pressão é um bem conhecido indicador de vórtices, Sadlo *et al.* (2004). O Laplaciano da pressão é um fator constante idêntico ao segundo invariante Q do tensor gradiente de velocidade. A Equação 6.2 leva a uma interpretação intuitiva de regiões de baixa pressão, como apresentado e discutido no Capítulo 4.

Aplicando-se o operador rotacional na Equação 6.1 obtém-se a equação da vorticidade

$$\frac{D\boldsymbol{\omega}}{Dt} = (\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla) \mathbf{U} + \nu \nabla^2 \boldsymbol{\omega} \quad (6.3)$$

onde $\boldsymbol{\omega}$ é a vorticidade $\nabla \times \mathbf{U}$. Esta equação descreve a variação da taxa de vorticidade pelo efeito do estiramento de vórtice e pela difusão da vorticidade. Esta equação permite visualizar separadamente o efeito do estiramento de vórtices e o mecanismo de difusão da vorticidade.

O operador gradiente aplicado na Equação 6.1 resulta na equação matricial

$$\nabla \left(\frac{D\mathbf{U}}{Dt} \right) = -\frac{1}{\rho} \nabla \nabla p + \nu \nabla \nabla^2 \mathbf{U}. \quad (6.4)$$

A Equação 6.4 é a base para o chamado critério lambda 2 (λ_2) para identificação de vórtices apresentado por Jeong e Hussain (1995). O Hessiano da pressão é uma matriz simétrica, desta forma, basta tomar a parte simétrica da Equação 6.4

$$\nabla \left(\frac{D\mathbf{S}}{Dt} \right) - \nu \nabla \nabla^2 \mathbf{S} + \mathbf{S}^2 + \boldsymbol{\Omega}^2 = -\frac{1}{\rho} \nabla \nabla p \quad (6.5)$$

onde \mathbf{S} é a parte simétrica e $\boldsymbol{\Omega}$ é a parte anti-simétrica da matriz $\nabla \mathbf{U}$. Depois de eliminar os termos que representam o estiramento irrotacional e os efeitos viscosos, o termo da pressão Hessiana (lado direito da Equação 6.5) é a matriz simétrica $\mathbf{S}^2 + \boldsymbol{\Omega}^2$. Se os três autovalores da matriz Hessiana são ordenados como $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3$, o critério para λ_2 é $\lambda_2 < 0$, o que significa que a função pressão tem curvatura positiva ao menos em duas direções ortogonais segundo Jeong *et al.* (1997). Através deste método é possível separar regiões decorrentes de cisalhamento e regiões que são puramente rotativas, como será mostrado mais a frente quando aplicado aos resultados para o Caso 7.

Poucos métodos não estão ligados diretamente a equação de Navier-Stokes, tais como extração de linhas extremas de pressão ou altas magnitudes de vorticidade, Sadlo *et al.* (2004). O método utilizado com maior freqüência para visualização de estruturas rotativas é a

helicidade, que é a projeção do vetor vorticidade sobre o vetor velocidade ($(\nabla \times \mathbf{U}) \cdot \mathbf{U}$). Desta forma, o componente da vorticidade perpendicular a velocidade é eliminado, contudo este método não é invariante galileano (ver Haller (2005)). Outro método é a helicidade normalizada que também não é invariante e é obtido dividindo-se vetor velocidade e vorticidade pelos seus comprimentos.

Os métodos chamados *vortex core* (centro de vórtices) foram utilizados na apresentação dos resultados que identificam os centros de vórtices e são baseados nos trabalhos de Sujudi e Haimes (1995), utilizando-se o software EnSight 8.0. Os centros de vórtices são propriedades inerentes do campo de velocidades e não dependem de qualquer escolha paramétrica, como é o caso das iso superfícies. O problema deste método é que o resultado contém apenas informação local. Contudo, este método identifica a existência de um vórtice e seu centro com extrema precisão. A visualização do vórtice como estrutura tridimensional só é possível com o auxílio de linhas de corrente do vetor velocidade ou do vetor vorticidade, ou ainda com o auxílio de iso superfícies do fator Q positivo. De qualquer forma, todos os métodos citados acima dependem de alguma técnica de verificação, seja ela visual ou Heurística. Importante ressaltar que não se pode esperar que um tubo de vórtice siga a linha central por um determinado período de tempo. Mesmo se uma linha de corrente coincida com o centro do vórtice, esta deveria flutuar ao redor do centro, como ressaltam Sadlo *et al.* (2004) e observável no comportamento de ciclones e furacões.

Com o exposto acima, fica evidente a necessidade de utilizar os métodos citados acima em conjunto, com a finalidade de visualizar com precisão as estruturas de vórtices e tubos de vórtices e então associá-los com as estruturas de clusters e *strands*, o que será apresentado no subitem 6.4.3 a seguir.

6.4.3 Estruturas de clusters, strands, vorticidade, helicidade, estiramento de vórtice e fator Q

A seguir serão apresentados resultados tridimensionais para o Caso 7 no tempo de 5,9 segundos (ver Figura 74 e 104) de iso superfícies de vorticidade, helicidade, estiramento de vórtice e fator Q, assim como os resultados de centro de vórtices. O principal objetivo é identificar as estruturas de vórtices e associá-los as estruturas de clusters e *strands*.

Os resultados apresentados na Figura 74 e reapresentados na Figura 104 no tempo de 5,9 segundos são para um corte no centro do leito de campos de fração de sólido e a componente da vorticidade perpendicular ao plano XZ, ou seja, a componente Y da vorticidade. Observa-se a presença de estruturas de tubos de vórtices contra-rotativos

orientados na direção axial, tendo como critério para esta afirmação o máximo de vorticidade representada na figura em tons de cinza máximo e mínimo (branco e preto). Este resultado no plano XZ, indica a existência de tubos de vórtices, contudo não é possível afirmar com certeza se são tubos. Desta forma é necessário visualizar o campo tridimensional de vorticidade em conjunto com iso superfícies de estiramento de vórtice e fator Q para que se tenha certeza que trata-se de tubos de vórtices. Isto se deve principalmente a natureza tridimensional das estruturas de vórtices, assim como das estruturas de clusters e *strands*.

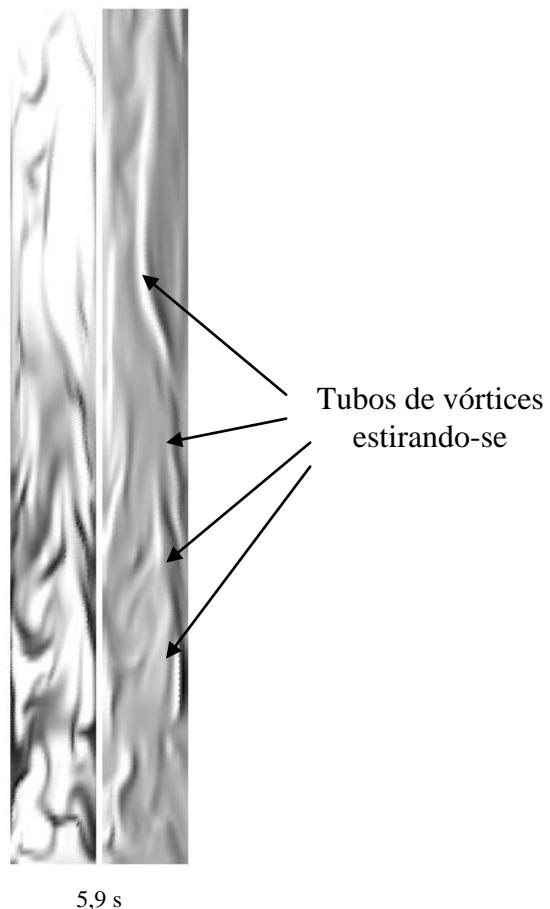


Figura 104. Campos de fração de sólido e componente da vorticidade ($1/s$) perpendicular ao plano XZ.

As componentes X e Y da vorticidade têm maior contribuição para a formação de estruturas rotativas, como pode ser observado na Figura 105, onde são apresentadas iso superfícies de vorticidade nas direções X, Y e Z. As estruturas de vórtices na direção X concentram-se mais na região da parede, Figura 105 a, enquanto as na direção Y, Figura 105 b, apresentam-se como tubos contra-rotativos orientados na direção axial, ora próximo à parede ora na região central. A componente Z da vorticidade contribui pouco para a formação destas estruturas de tubos como é possível observar na Figura 105 c.

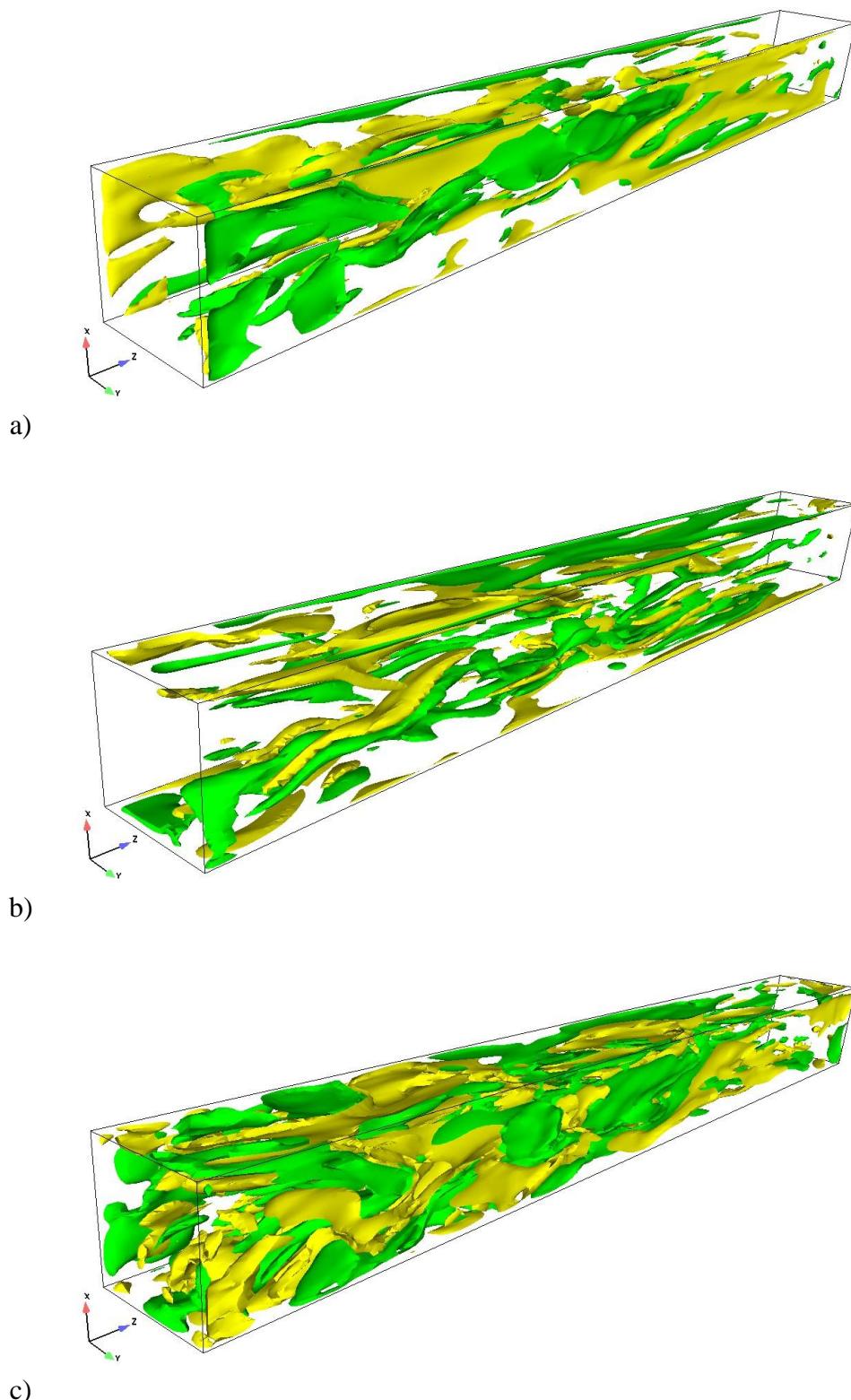


Figura 105. Iso superfícies vorticidade; a) Componente da vorticidade na direção X com valor de (+/-) 150 (1/s); b) Componente da vorticidade na direção Y com valor (+/-) 150 (1/s); c) Componente da vorticidade na direção Z com valor (+/-) 30 (1/s). Sentido horário de rotação estão representadas pela cor amarela.

À partir da Figura 106, que apresenta iso superfícies de fração de sólido com valor de 0,58 representando assim os clusters e *strands*, serão introduzidas para comparação as iso superfícies de vorticidade para a direção X e Y com a finalidade de observar a interação entre clusters e *strands* com estruturas rotativas.

A Figura 106 apresenta o plano central de fração de sólido com tons de cinza exatamente como apresentado na Figura 104 para auxílio na visualização. A região escolhida para o zoom apresenta a formação de *strands* orientados na direção axial Z e clusters atravessando a superfície do plano central, bem como clusters junto às paredes e na região central. A região é próxima ao centro do leito à partir da base.

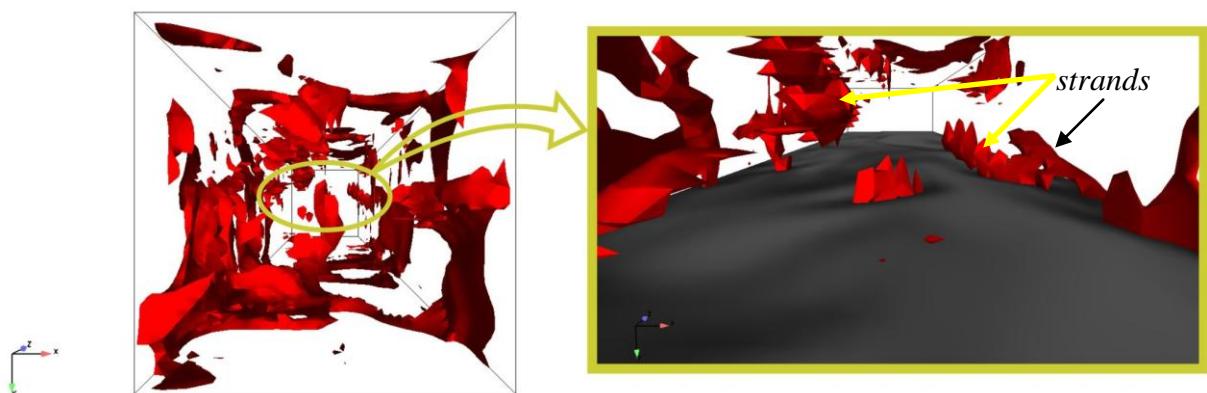


Figura 106. Vista frontal de Iso superfícies de fração de sólido com valor de 0,58, com zoom da região de interesse e inserção do plano central de fração de sólido em tons de cinza para o Caso 7 em 5,9 segundos.

Evidencia-se nos resultados apresentados na Figura 107 que as iso superfícies de vorticidade na direção X envolvem as estruturas de *strands*. Ao fundo da Figura 107 a observa-se que o grande tubo observado no plano da Figura 106 é de fato uma estrutura rotativa que se estende na direção axial Z e atravessa o plano auxiliar de fração de sólido exatamente na posição em que observa-se a referida estrutura. O cluster central que atravessa o plano central não aparece envolto por estruturas rotativas de iso superfícies de vorticidade na direção X, Figura 107 b. Outro aspecto importante a ressaltar é que os clusters presentes na parede não estão associados a estruturas rotativas com vorticidade na direção X neste zoom apresentado na Figura 107 e para este valor de vorticidade (± 150 (1/s)). Como estamos interessados em valores máximos de vorticidade, que identificam ou deveriam identificar estruturas de vórtices sem a presença de sólidos, valores abaixo do mencionado acima não serão apresentados. De fato a Figura 107 corrobora o mencionado anteriormente sobre a

presença de clusters e ou *strands* na região mais externa de um determinado vórtice ou tubo de vórtice.

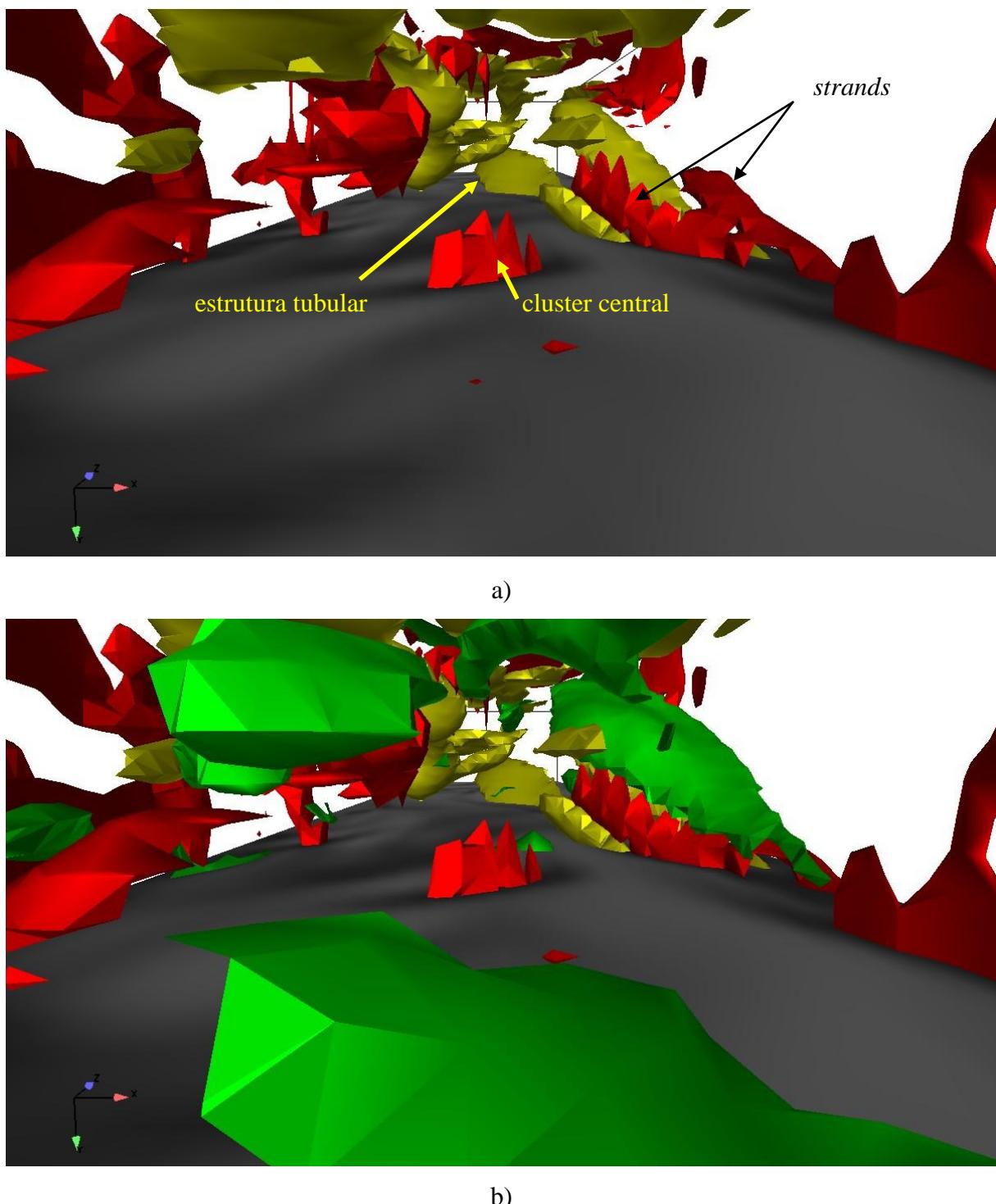


Figura 107. Zoom à partir da Figura 106 de iso superfícies de fração de sólido (coloração avermelhada) e plano central de fração de sólido em tons de cinza; a) iso superfícies de vorticidade na direção X com valor de 150 (1/s) com rotação horária (coloração amarelada); b) iso superfícies de vorticidade X com valor (+/-) 150 (1/s).

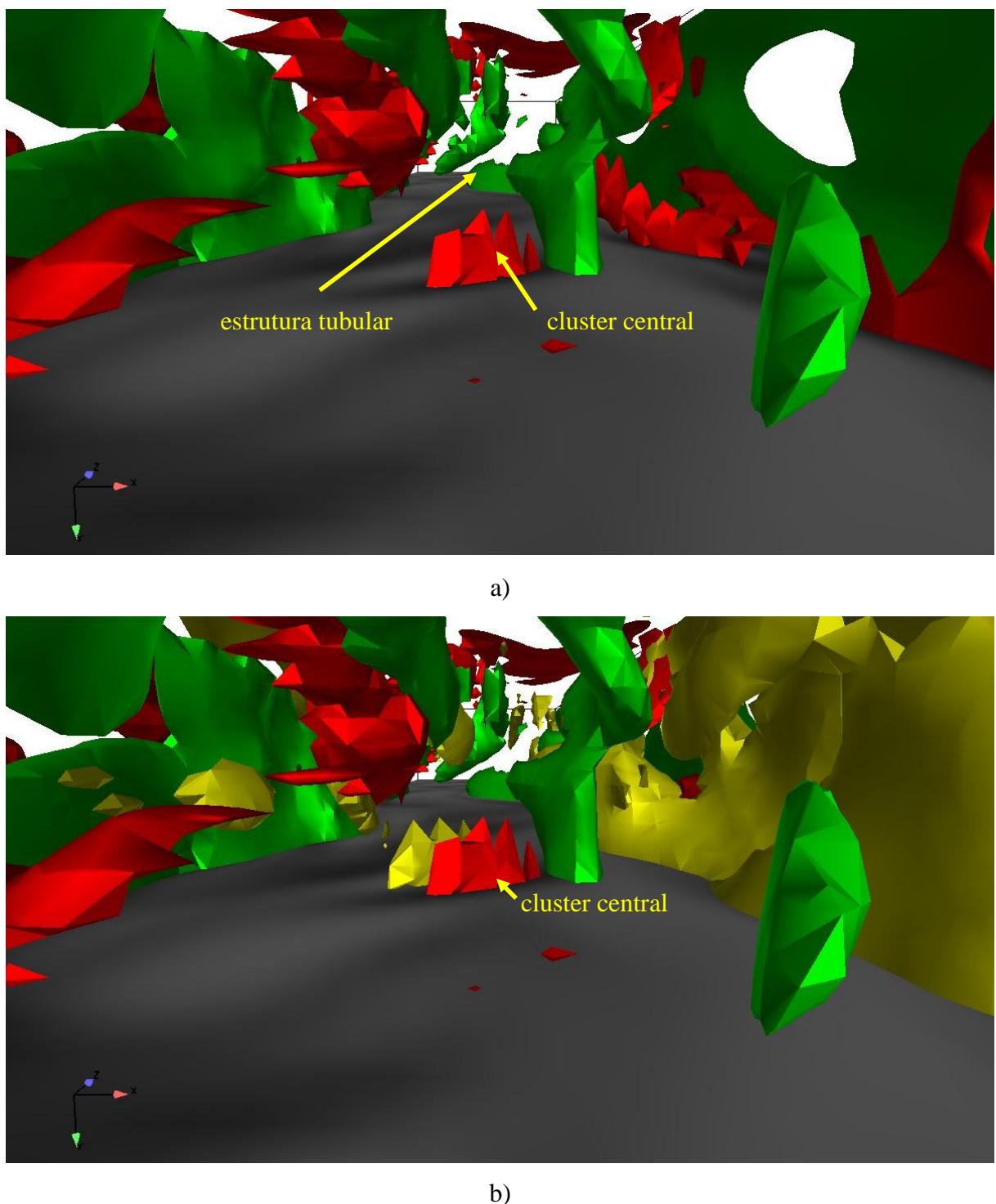


Figura 108. Zoom à partir da Figura 106 de iso superfícies de fração de sólido (coloração avermelhada) e plano central de fração de sólido em tons de cinza; a) iso superfícies de vorticidade na direção Y com valor de 150 (1/s) com rotação horária (coloração amarelada); b) iso superfícies de vorticidade Y com valor (+/-) 150 (1/s).

A Figura 108 apresenta iso superfícies para vorticidade na direção Y da mesma forma que a apresentada na Figura 107 para a direção X. É possível observar na Figura 108 a que o cluster central está associado com um vórtice que atravessa o plano auxiliar central. A Figura 108 b mostra a presença de dois vórtices contra-rotativos associados com o cluster central. Nota-se que o cluster encontra-se na região externa a estes dois vórtices. A estrutura de *strand* está associada com um vórtice com rotação horária. Observa-se que a região junto a parede apresenta uma estrutura de vórtice, contudo sem estar associado a clusters. Na região mais ao fundo observa-se uma estrutura que inicia-se próximo ao tubo de vórtice mencionado anteriormente associado ao plano da Figura 104. Esta estrutura será melhor observada com iso superfícies de estiramento de vórtices que serão apresentadas mais a frente.

As Figuras 107 e 108 apresentadas anteriormente para iso superfícies de vorticidade na direção X e Y mostram a íntima relação entre estruturas rotativas e clusters e *strands*. Contudo, como afirmado anteriormente, não é possível utilizar apenas a vorticidade como critério de identificação de vórtices. Técnicas mais precisas e adequadas devem ser utilizadas para auxiliar na visualização destas estruturas e localizá-las com maior precisão.

Para a identificação do centro de vórtices utilizou-se a técnica conhecida como *vortex core*. Esta técnica encontra-se implementada no software EnSight 8.0 o qual foi utilizado para a visualização dos resultados tridimensionais. O EnSight 8.0 cria segmentos de centro de vórtice à partir do tensor gradiente de velocidade de um escoamento tridimensional, como apresentado na Figura 109. A técnica utilizada pelo EnSight 8.0 é baseada nos trabalhos de Sujudi e Haimes (1995), Sujudi e Kewright (2000) e Haimes e Kewrigth (2000). A técnica é linear e nodal, ou seja, é baseada na decomposição dos elementos finitos em tetraedros e então são resolvidas formas fechadas de equações para determinar o tensor gradiente de velocidade nos nós. Existem duas abordagens, uma baseada na análise de auto valores que usa uma classificação de autovalores e auto vetores para determinar onde o centro do vórtice intercepta alguma face do tetraedro. A outra é baseada na vorticidade e utilizada para visualização no presente trabalho. Esta técnica utiliza o alinhamento da vorticidade e dos vetores velocidade para determinar os pontos de intersecção. A técnica baseada em autovalores pode encontrar centro de vórtices que não são vórtices, especialmente em problemas de camada limite. O método baseado em vorticidade não apresenta este problema, pois os componentes de tensão do tensor gradiente de velocidade foram removidos na formação do vetor vorticidade. Sendo assim, o método baseado na vorticidade produz centros de vórtices contínuos.

Os resultados para centro de vórtices encontrados são importantes, pois identificam com muita precisão e confiança a existência de vórtices e seus centros. Como a técnica está implementada em um software comercial garante-se a independência dos resultados. A Figura

109 apresenta os resultados para o centro de vórtice encontrados utilizando-se o método baseado na vorticidade. Não aplicou-se qualquer filtro nos resultados. Observa-se na vista lateral, Figura 109 a, a enorme complexidade encontrada no escoamento gás-sólido em um leito fluidizado.

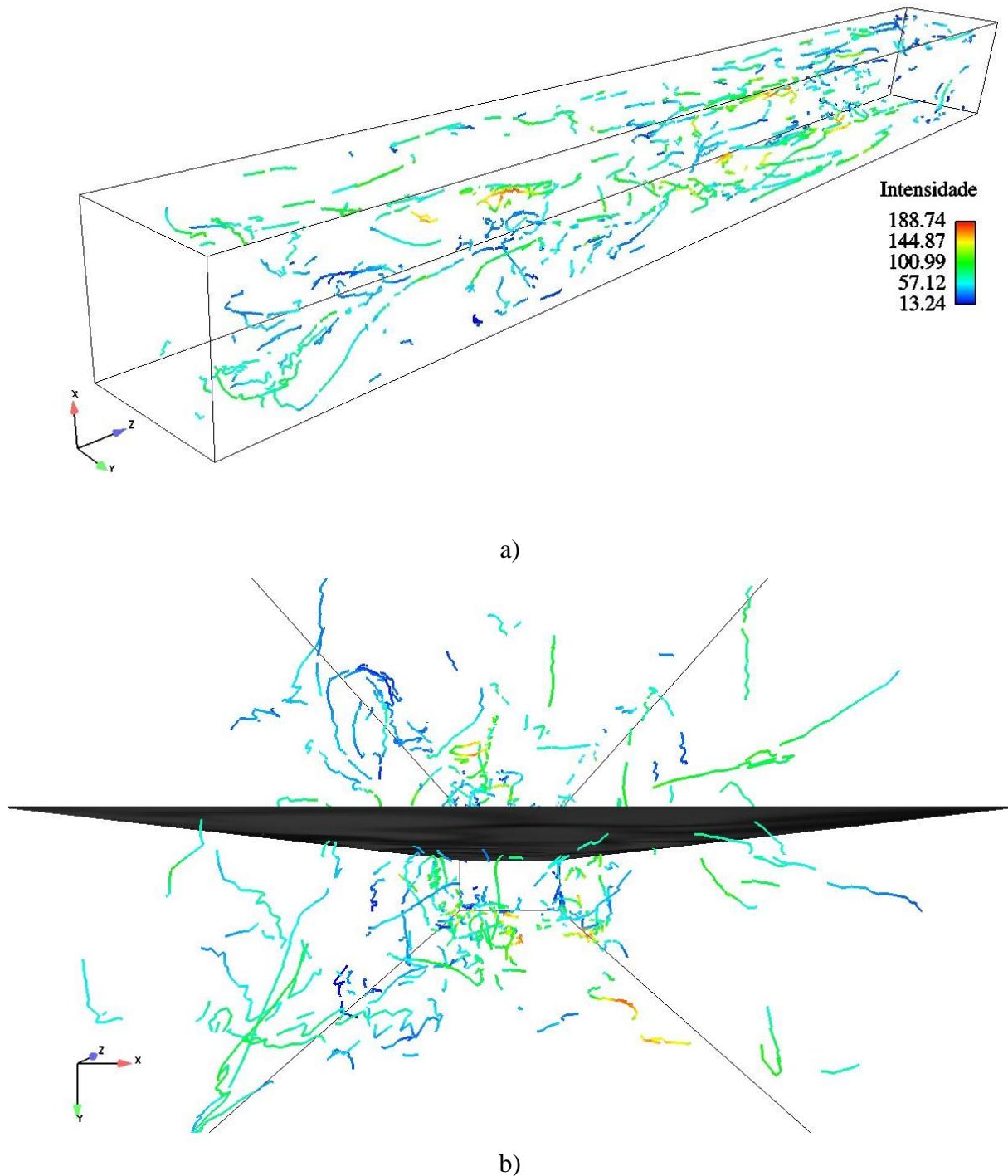


Figura 109. Centro de vórtices identificados com as técnicas descritas por Sujudi *et al.* (1995). As cores identificam a magnitude da vorticidade; a) Vista lateral; b) Vista frontal com o plano central de fração de sólidos.

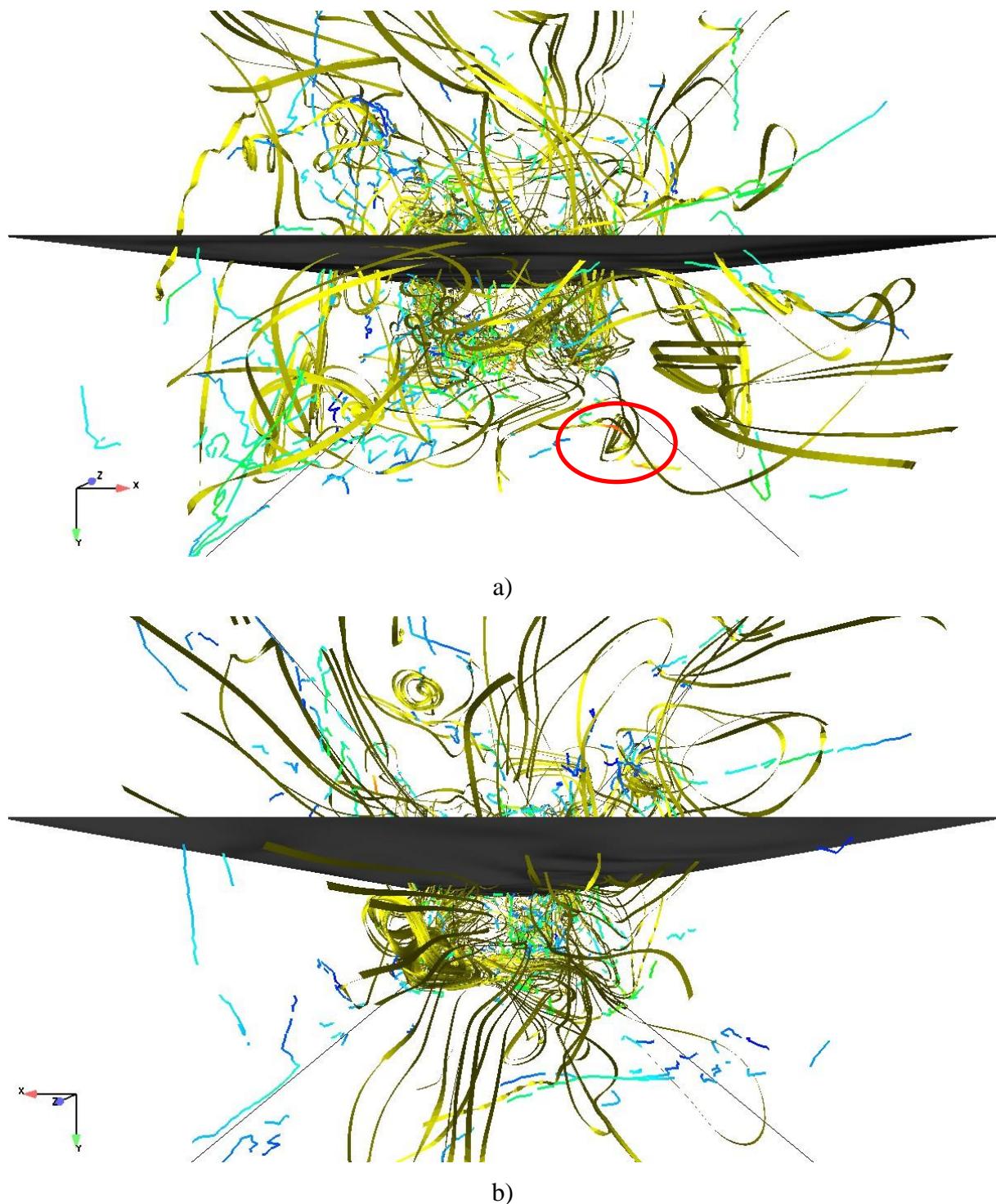


Figura 110. Centro de vórtices identificados com as técnicas descritas por Sujudi *et al.* (1995), e linhas de corrente do vetor velocidade do sólido para 5,9 segundos do Caso 7. As cores identificam a magnitude da vorticidade; a) Vista frontal da base do leito; o circulo vermelho é o zoom apresentado na Figura 111; b) Vista frontal da saída do leito, com o plano central de fração de sólidos.

Evidencia-se a presença de inúmeros centros de vórtices sendo que a grande maioria de intensidade média. Importante observar que os centros de vórtices encontram-se em todas as regiões do leito, inclusive no centro. A Figura 109 b apresenta uma vista frontal à partir da base do leito com o plano central de fração de sólido. Observa-se que muitos centros de vórtice atravessam a superfície do plano central. Evidencia-se que os resultados obtidos utilizando-se o método do centro de vórtices resulta em informação local. Não é possível visualizar a forma dos vórtices. Uma das técnicas utilizadas para auxiliar na visualização de vórtices é a utilização de linhas de corrente do vetor velocidade. À partir dos centros de vórtices são geradas linhas de corrente do vetor velocidade e estes representam as estruturas espiraladas e sua direção, ver Figura 110.



Figura 111. Zoom da Figura 110 a do centro de vórtice com linhas de corrente do vetor velocidade para o sólido, indicado com a seta.

A Figura 110 apresenta a vista frontal do centro de vórtices e linhas de corrente do vetor velocidade do sólido à partir do centro de vórtices. Observa-se a presença de estruturas rotativas representadas pelas trajetórias das linhas de corrente, espiralando-se em torno do centro dos vórtices identificados, tanto na base do leito, Figura 110 a, como na saída, Figura 110 b. No zoom da Figura 110 a (circulo vermelho), apresentado na Figura 111, é possível observar que as trajetórias de velocidade do sólido mantém-se externas ao centro de vórtice e dão uma boa ideia da forma do vórtice.

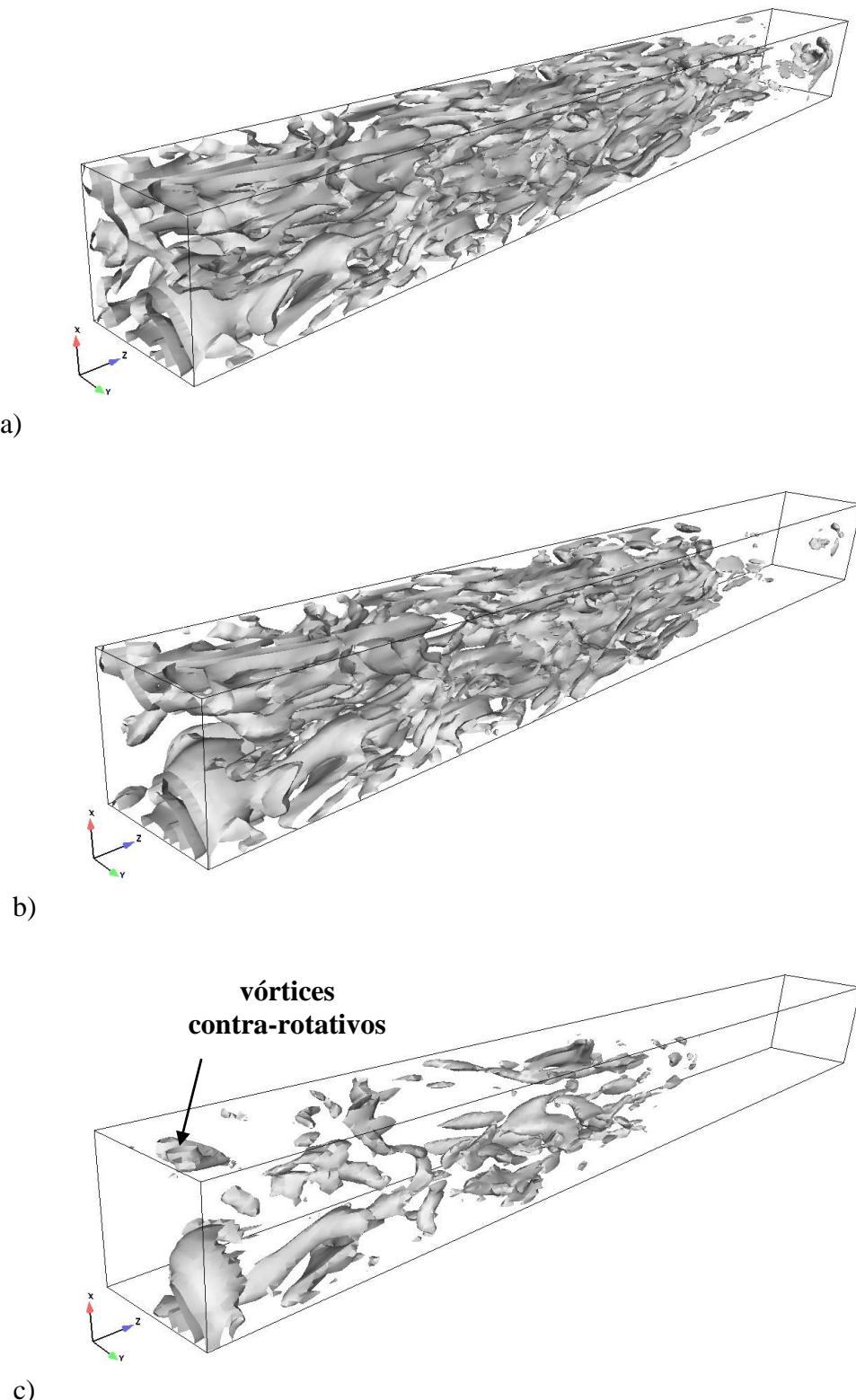


Figura 112. Iso superfícies do fator Q positivo, vista lateral; a) fator $Q = 1 \times 10^5$; b) 2×10^5 ; c) 9×10^5 . A seta indica dois vórtices contra-rotativos na base do leito.

A Figura 112 apresenta iso superfícies do fator Q positivo. Este fator descrito no item 6.4.2 anterior, extraí dos dados numéricos regiões onde a rotação é predominante, fator $Q > 0$,

e regiões onde predominam as taxas de deformação, fator $Q < 0$. Desta forma é possível observar porções do fluido que são apenas rotativas, o que não é possível utilizando-se a vorticidade como critério. De fato o método é capaz de extrair estruturas rotativas de baixa pressão associadas com o movimento de vórtices, Nagaosa e Handler (2003). O fator Q é equivalente ao Laplaciano da pressão como descrito pela Equação 6.5.

Neste trabalho não estamos preocupados com a estrutura de um dado vórtice. O principal objetivo é utilizar a técnica para que as porções de fluido devido apenas a rotação sejam identificadas e então mostrar que os clusters e *strands* encontram-se geralmente na região externa a estas estruturas que são regiões com alta tensão e baixa vorticidade como mencionado no Capítulo 4. Este método é largamente utilizado para visualização de vórtices e estruturas de vórtices em escoamentos turbulentos ou de transição tais como as chamadas estruturas de grampo de cabelo, vórtices de ponta de asa e tubos de vórtices contra-rotativos em turbinas Pelton (ver por exemplo Sadlo *et al.* (2004) e Post *et al.* (2003)). O método foi implementado no software de visualização EnSight 8.0, onde as iso superfícies foram geradas.

Observa-se na Figura 112 iso superfícies com três diferentes valores para o fator Q positivo, evidenciando-se uma enorme gama de estruturas turbilhonares. Desde estruturas rotativas de pequeno porte até estruturas com grandes dimensões orientadas na direção axial Z, Figura 112 a. A Figura 112 c apresenta uma série de estruturas rotativas e duas delas, apontadas pela seta na base do leito representam vórtices contra-rotativos que são visualizados em uma vista frontal na Figura 113.

Note que o fator Q positivo representa estruturas de fluido associadas apenas à rotação. Desta forma, é possível observar na Figura 113 a e b que as estruturas rotativas encontram-se envoltas por porções de aglomerados de partículas. Estas estruturas são contra-rotativas e observa-se com muita nitidez que entre estas duas estruturas encontra-se uma estrutura de cluster junto à parede. O cluster junto à parede, associado aos dois vórtices contra-rotativos, está descendo pela parede do reator. As outras estruturas de clusters apontadas na Figura 113 b são estruturas de clusters que não estão associadas com vórtices contra-rotativos. Importante ressaltar que a Figura 113 b mostra que as estruturas de aglomerados mantém-se na região externa dos vórtices identificados pelo método do fator Q .

À partir do detalhe da Figura 106 pode-se evidenciar que as estruturas de *strands* e clusters mantêm-se na região externa aos vórtices identificados, como é possível observar nas Figura 114 e 115. A Figura 114 apresenta iso superfícies de fração de sólido e fator Q positivo. Observa-se com muita clareza que as estruturas de *strands*, indicadas com as flechas, estão orientadas na direção axial, encontram-se na região externa de um grande tubo de vórtice.

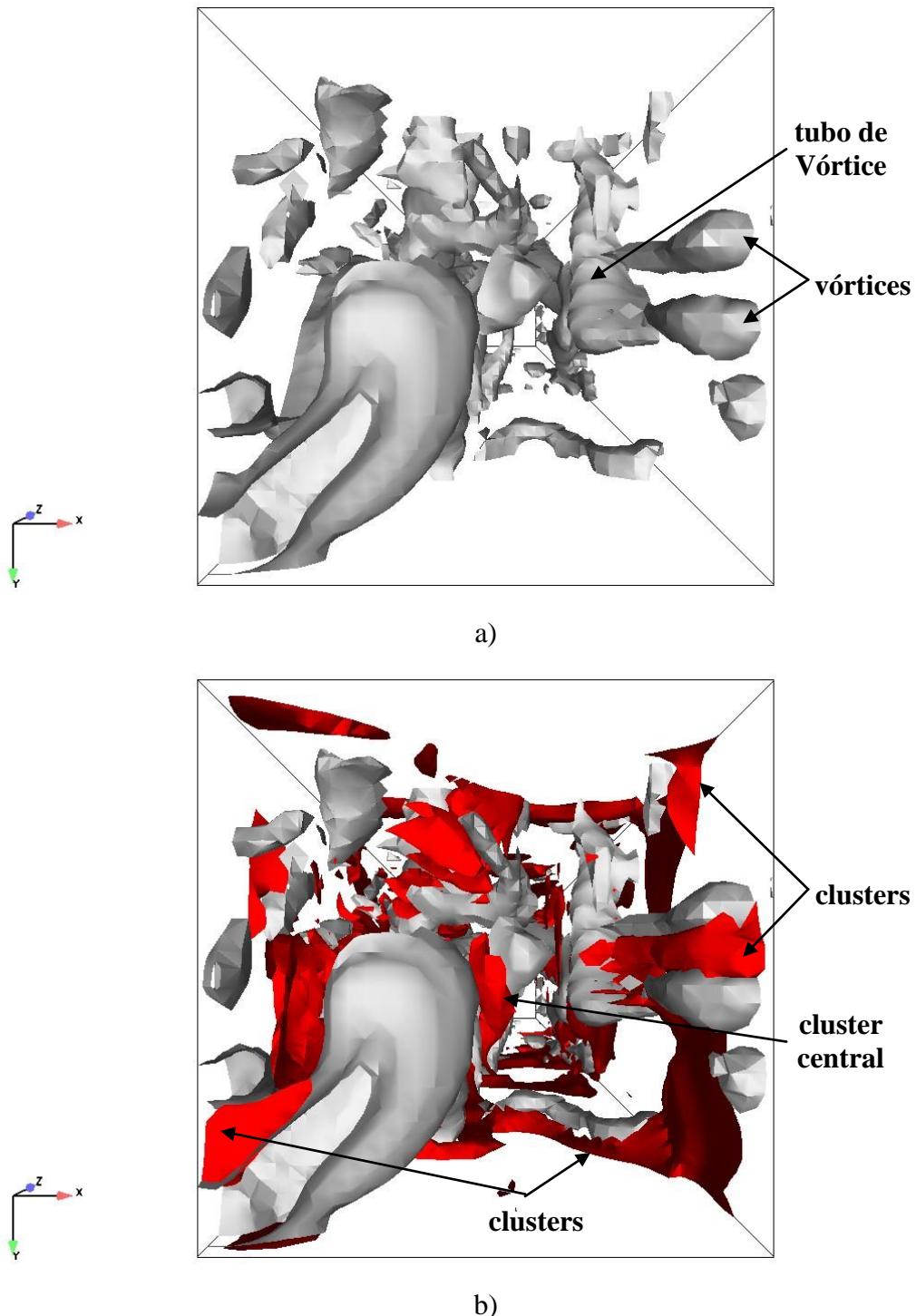


Figura 113. Iso superfícies do fator Q positivo, vista frontal da base do leito; a) fator $Q = 9 \times 10^5$; b) iso superfícies de fator Q e fração de sólido com valor de 0,58.

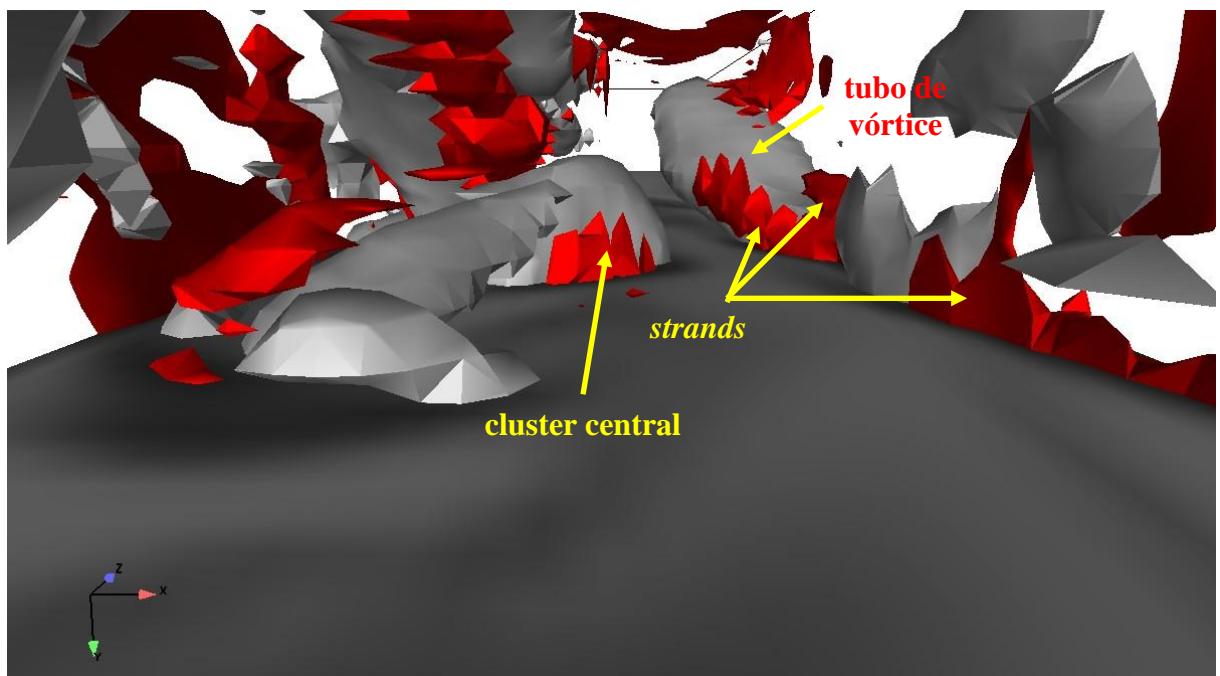


Figura 114. Iso superfícies do fator Q positivo, fração de sólido (cor avermelhada) e plano central de fração de sólido em tons de cinza, à partir do zoom apresentado na Figura 106. Fator $Q = 9 \times 10^5$ e fração de sólido com valor de 0,58. A flecha indica estrutura de *strand* orientado na direção Z.

A Figura 115 apresenta uma vista superior da mesma região mostrada na Figura 114. Nota-se que na Figura 115 a os vórtices que atravessam o plano central de fração de sólido mantém-se em regiões ricas em gás. Para este valor de fração de sólido apresentado na Figura 115 b, nota-se que onde há estruturas rotativas não encontram-se clusters ou *strands* e que estes estão próximos às regiões externas dos vórtices identificados pelo fator Q positivo.

Resultados para fator Q negativo são apresentados na Figura 116, onde é possível observar que as iso superfícies de fração de sólido e fator Q negativo coincidem para a estrutura de *strand* assim como para a estrutura de cluster no centro do leito, para o valor escolhido de fator Q. O fator Q negativo mapeia clusters e *strands* pois determina com precisão regiões decorrentes somente da deformação do fluido, ou seja, regiões onde há predominância da parte simétrica do tensor tensão. Não foi realizado nenhum estudo paramétrico para identificar com exatidão que faixas de fator Q negativo correspondem a clusters, contudo é possível observar na Figura 116 b a relação muito próxima do fator Q negativo com clusters e *strands* para o valor utilizado de fração de sólido e fator Q.

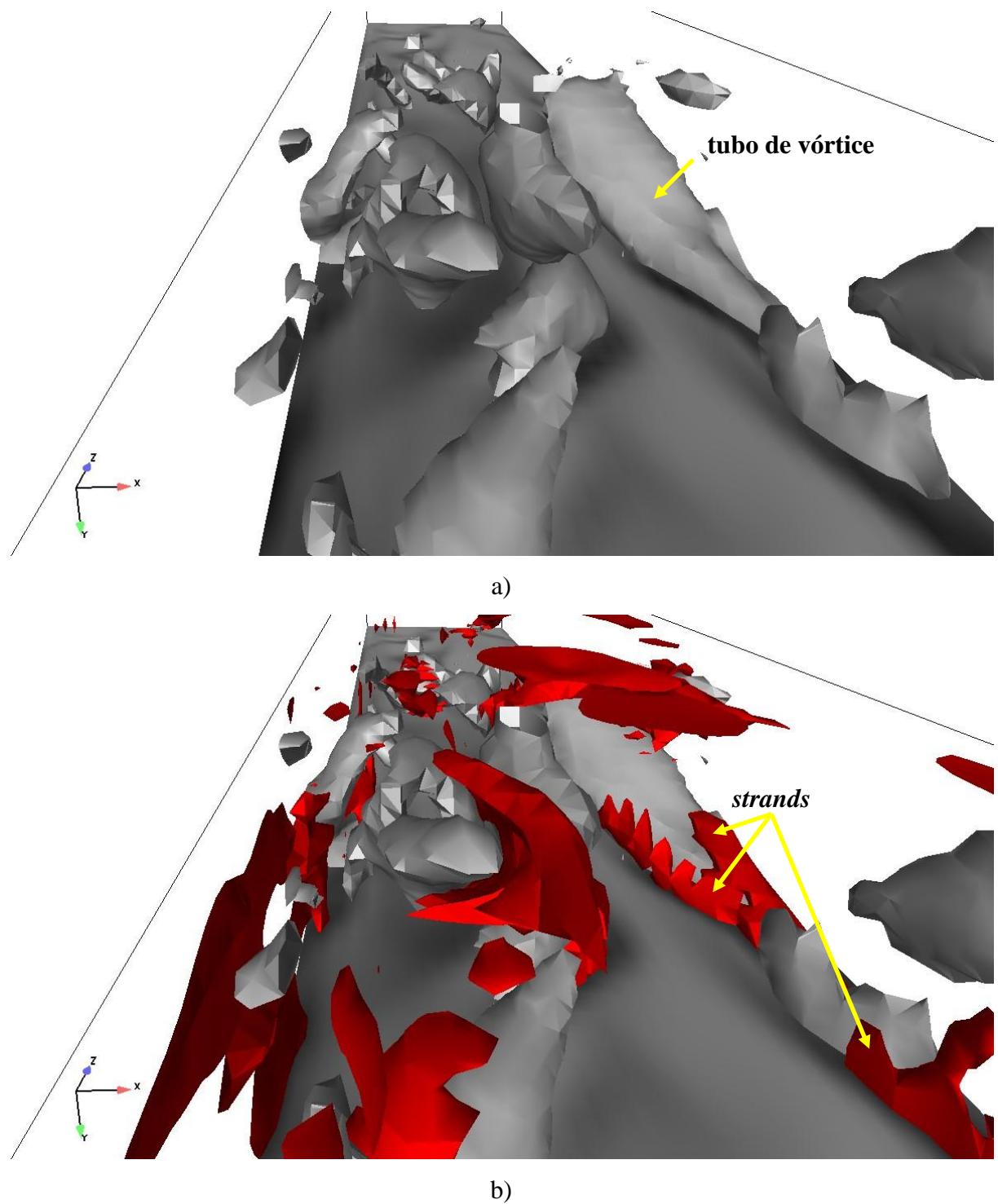


Figura 115. Iso superfícies do fator Q positivo, fração de sólido (cor avermelhada) e plano central de fração de sólido em tons de cinza, vista superior. Fator $Q = 9 \times 10^5$ e fração de sólido com valor de 0,58.

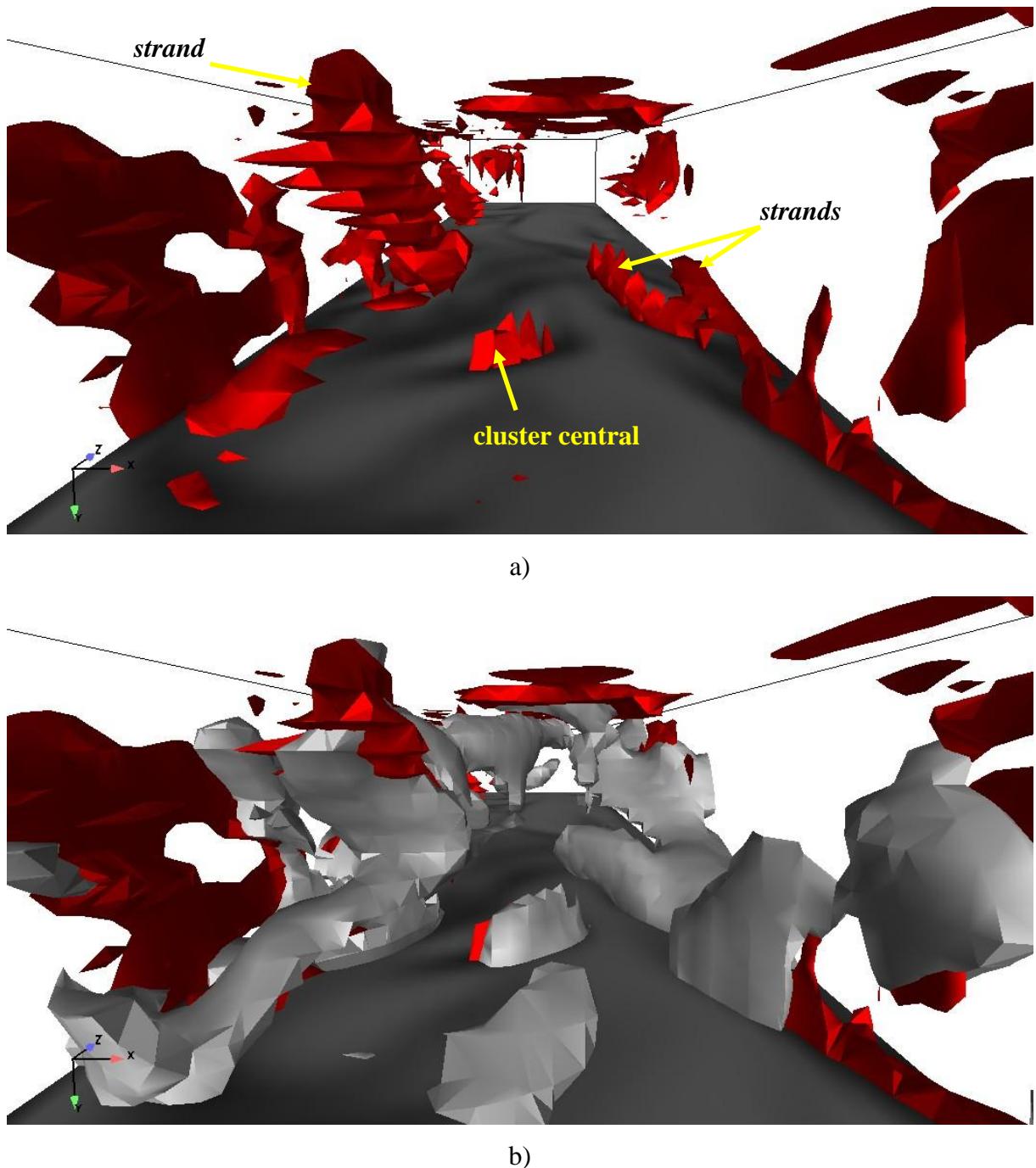


Figura 116. Iso superfícies do fator Q negativo, fração de sólido (cor avermelhada) e plano central de fração de sólido em tons de cinza, vista superior. Fator $Q = -9 \times 10^5$ e fração de sólido com valor de 0,58.

Em todos os resultados de vorticidade na direção Y apresentados para o plano central, (ver por exemplo a Figura 104), observou-se estruturas de tubos de vórtices orientados na direção axial Z e associados com estruturas de *strands* que também estão orientados na direção axial. Contudo, como estes resultados são bidimensionais, não é possível confirmar a estrutura tubular indicativa nessas figuras. Por esta razão serão apresentadas iso superfícies de estiramento de vórtices (*vortex stretching*) baseado no trabalho de Fu *et al.* (2003). O

principal objetivo é identificar a presença de vórtices estirando-se e estabelecer a relação com estruturas de *strands*.

Tradicionalmente o mecanismo de estiramento de vórtices é caracterizado pelo primeiro termo à direita da igualdade da Equação 6.3, $(\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla) \mathbf{U}$. Este termo é um vetor, mas não é invariante galileano, Fu *et al.* (2003). Fu *et al.* (2003) propuseram a representação do mecanismo de estiramento de vórtices que satisfaz o critério proposto por Jeong e Hussain (1995). A equação utilizada por Fu *et al.* (2003) para representar o mecanismo de estiramento de vórtice foi $S_{ij}W_{ij}^2$, chamado de parâmetro η_4 . O mecanismo de estiramento de vórtice tem lugar quando $\eta_4 > 0$ e o relaxamento de vórtice ocorre quando $\eta_4 < 0$. Este parâmetro é indicado para representar estruturas turbulentas coerentes pois captura o mecanismo de estiramento e relaxação inerente às estruturas turbulentas. O estiramento de vórtices não está associado com as menores escalas da turbulência, pois a energia turbulenta é dissipada em calor nas menores escalas. Assim, as estruturas coerentes possuem geralmente duas características bem definidas, a tridimensionalidade e o padrão de escoamento espiralado segundo Fu *et al.* (2003). Como o processo de cascata de energia ocorre na direção das menores escalas através do processo de estiramento de vórtices então uma estrutura coerente é um vórtice que sofre estiramento. A natureza tridimensional associada ao processo de estiramento de vórtices faz do parâmetro η_4 um parâmetro chave na identificação de estruturas coerentes de grande escala, Fu *et al.* (2003). O fator Q mencionado anteriormente também é apropriado para identificar vórtices, contudo, como este fator existe inclusive em escoamentos bidimensionais que em geral não são escoamentos turbulentos, este parâmetro pode produzir informação não necessariamente relacionada com a turbulência. De fato, nenhum dos métodos descritos anteriormente traz informação direta sobre os mecanismos de estiramento de vórtices e relaxação, mesmo estando intimamente relacionados.

A Figura 117 apresenta iso superfícies de estiramento de vórtices e relaxação para o Caso 7 a 5,9 segundos. Identifica-se uma série de vórtices estirando-se na direção axial na forma de tubos longitudinais (coloração amarelada), associados com estruturas em processo de relaxação do estiramento (coloração esverdeada). Evidencia-se que as estruturas identificadas pelo parâmetro η_4 encontram-se em todas as regiões do leito apresentando uma estrutura tubular alongada na direção longitudinal Z.

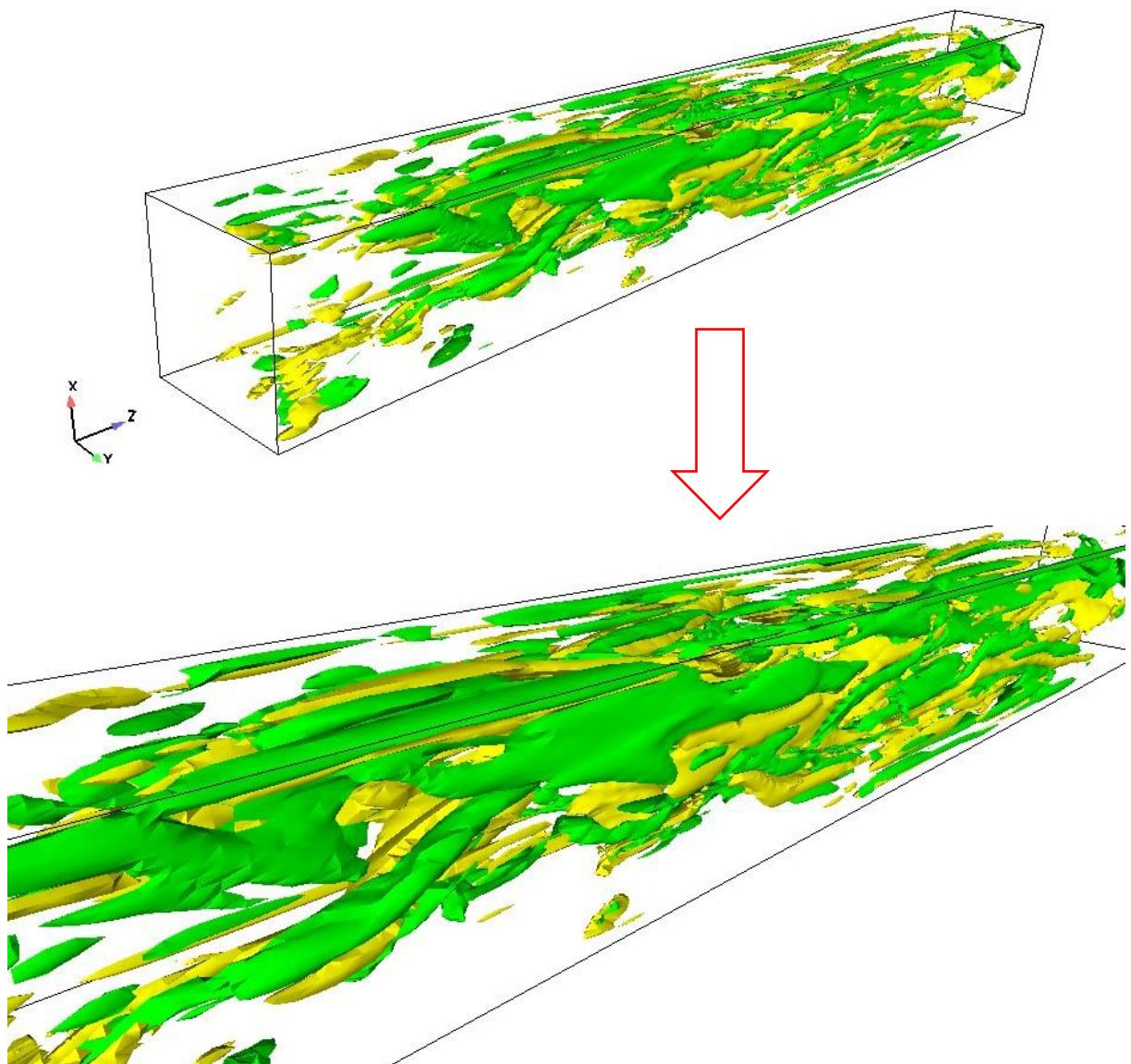


Figura 117. Iso superfícies do estiramento de vórtices definido por Fu *et al.* (2003). Coloração esverdeada representa valores de $\eta_4 < 0$ (mecanismo de relaxação) e amarelada $\eta_4 > 0$ (mecanismo de estiramento), com valor constante de $(+/-) 6 \times 10^5$.

A relação entre estruturas de *strands* estirando-se na direção axial é possível ser observada na Figura 118, onde são indicadas as estruturas de *strands* na região à partir do centro do leito. O cluster central que atravessa o plano central de fração de sólido, Figura 118 a, não está associado a nenhuma estrutura de tubos de vórtices (Figura 118 b). Nota-se na Figura 118 b que as estruturas de tubos de vórtices estão associadas com *strands* que mantém-se na região externa aos tubos de vórtices como afirmado anteriormente.

À partir do campo de fração de sólido e vorticidade apresentado na Figura 104, serão apresentadas iso superfícies de estiramento de vórtices com a finalidade de comprovar que a grande estrutura estirando na direção axial é de fato um tubo de vórtice.

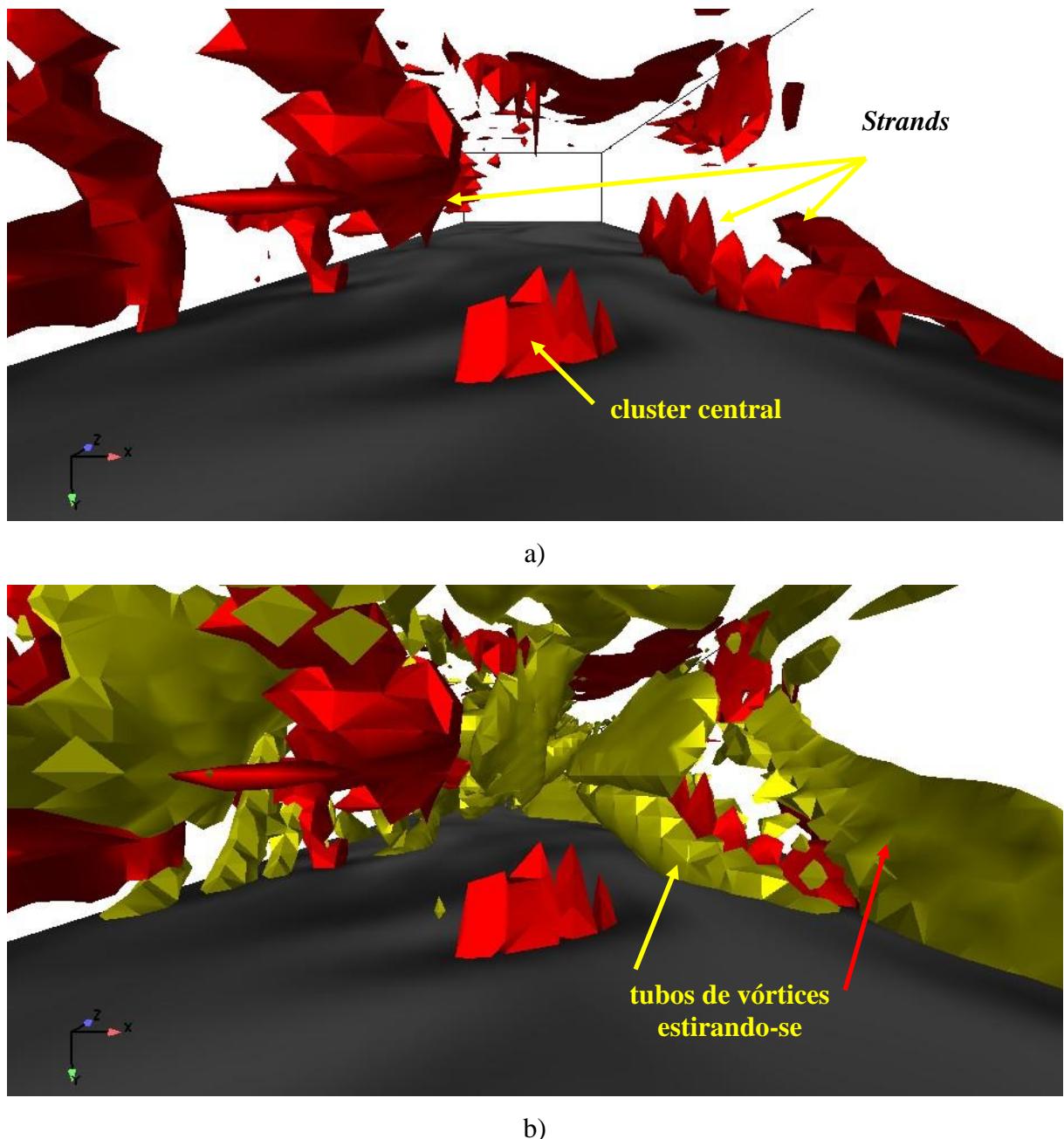


Figura 118. Iso superfícies do estiramento de vórtices ($\eta_4 > 0$) definido por Fu *et al.* (2003), comparado com iso superfícies de fração de sólido com valor de 0,58.

A Figura 119 apresenta uma vista superior da região superior do leito onde encontra-se a estrutura de vórtice contra-rotativo estirando-se na direção axial observado na Figura 104. O *strand* estirando-se é mostrado na Figura 119 a, no plano central de fração de sólido. Evidencia-se na Figura 119 b que a estrutura de cluster no plano está associada com um

grande tubo de vórtice estirando-se. Observa-se que o tubo atravessa a superfície do plano central, e que o *strand* indicado pelas flechas encontra-se na região externa a este tubo de vórtice, como é possível observar também no plano central para a vorticidade na direção Y reapresentado na Figura 104. As iso superfícies de fração de sólido não são apresentadas pela dificuldade de visualização, pois o referido *strand* encontra-se com fração de sólido entre 0,3 a 0,4 (ver por exemplo a Figura 101 b), e neste caso infelizmente não é possível identificar as referidas estruturas, contudo, observáveis com o auxilio do plano central de fração de sólido.

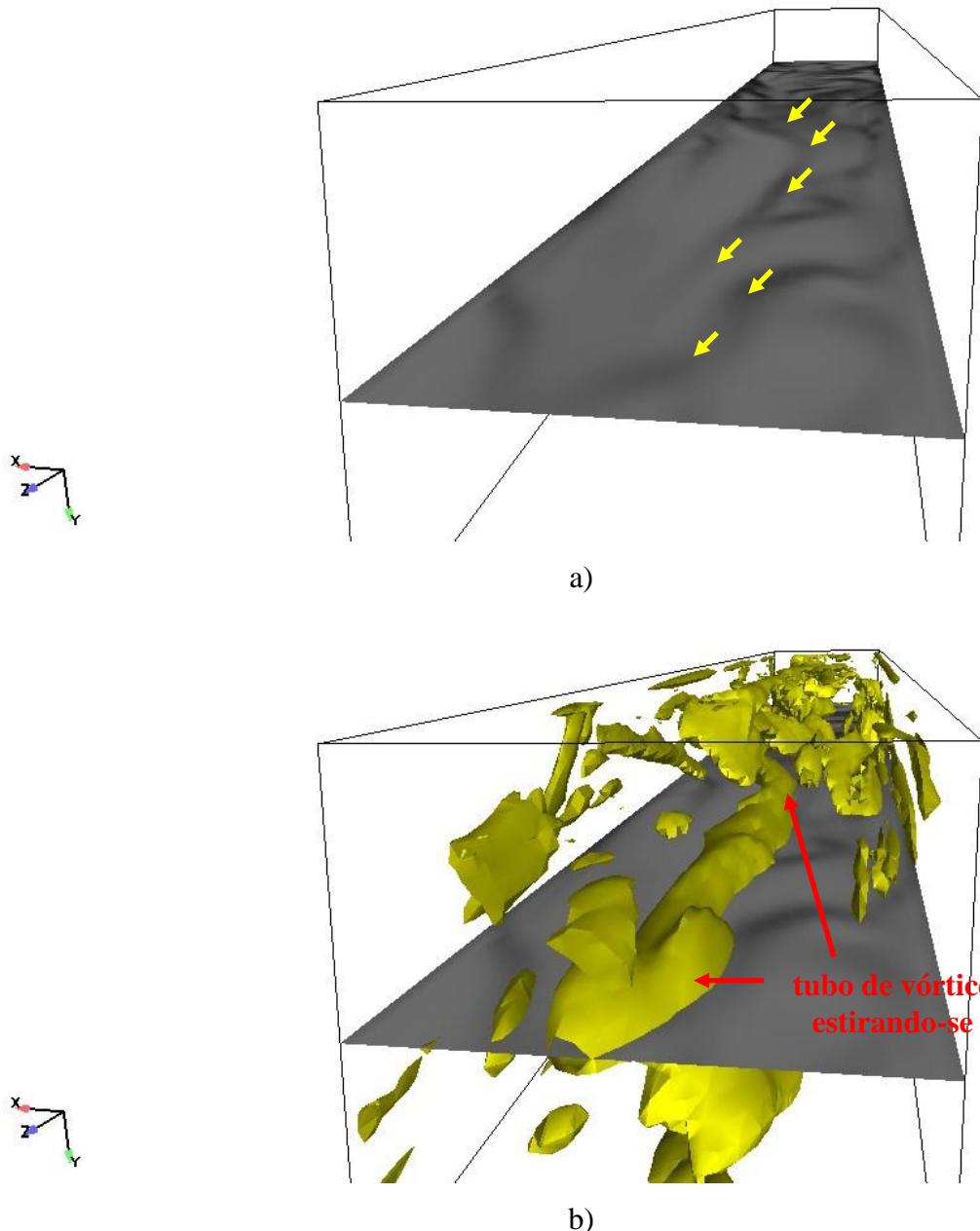


Figura 119. Vista da região superior do leito; a) plano central de fração de sólido em tons de cinza, as setas indicam o *strand*; b) iso superfície de estiramento de vórtice com $\eta_4 = 6 \times 10^5$.

Importante observar que o processo de estiramento de vórtice está também associado ao de relaxamento. Sempre encontram-se porções de fluido que estiram-se e porções que relaxam, como é possível observar na Figura 120, onde são apresentadas iso superfícies de estiramento e relaxação de vórtices, com uma vista à partir da região superior do leito. Para finalizar, apresentamos iso superfícies de estiramento de vórtices (Figura 120 a) e relaxação (Figura 120 b, coloração esverdeada) com a vista da região superior, onde encontra-se o grande vórtice estirando-se na direção axial, mencionado anteriormente.

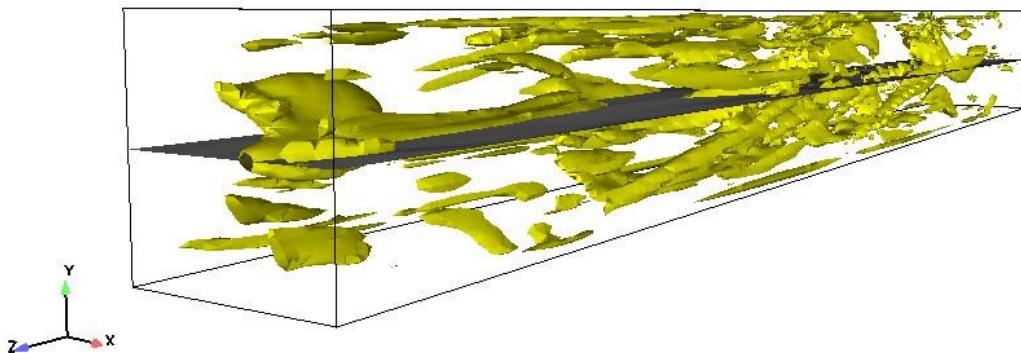
Os resultados para helicidade são pouco reveladores no caso do escoamento gás-sólido em um leito fluidizado. Além deste parâmetro não apresentar invariância galileana, as iso superfícies não apresentaram-se úteis no presente trabalho. A exceção se faz quando as iso superfícies de fator Q são coloridas com a helicidade relativa, o que dá uma idéia muito precisa da orientação (horária ou anti-horária) de um dado vórtice. Na Figura 113 observam-se dois vórtices interagindo com um cluster na base do leito. Afirmou-se que estes dois vórtices eram contra-rotativos, e esta informação é revelada apenas quando as iso superfícies do fator Q são coloridas com a helicidade relativa, apresentadas na Figura 121.

Evidencia-se na Figura 121 que os dois vórtices apontados pelas setas são vórtices contra-rotativos, o que só é possível de observar quando as iso superfícies do fator Q são coloridas com os valores da helicidade relativa. Nota-se ainda que os vórtices identificados tem em seu interior estruturas contra-rotativas, podendo ou não estar sofrendo processo de estiramento.

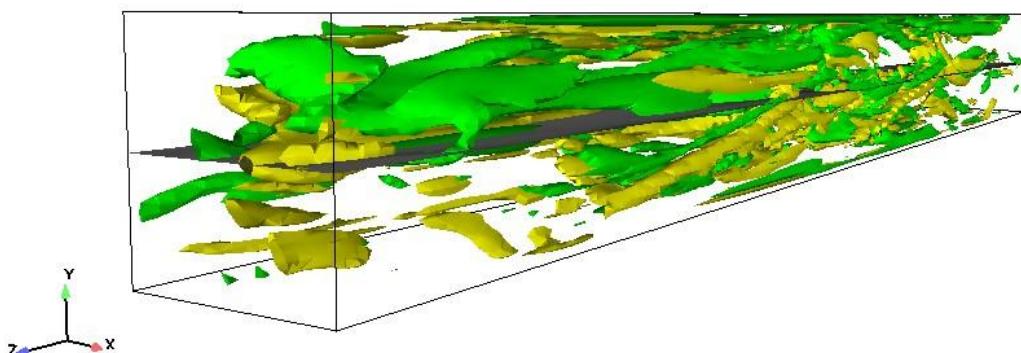
Neste item foram apresentadas técnicas de visualização e determinação de estruturas de vórtices e centro de vórtices encontradas na literatura técnica. O principal objetivo foi estabelecer a relação entre vórtices e clusters vórtices contra-rotativos e *strands*. Com esta finalidade foram apresentadas iso superfícies de vorticidade, fator Q, estiramento de vórtices, linhas de corrente de velocidade de sólido e iso superfícies de fração de sólido. Mostrou-se através das técnicas mencionadas acima a complexidade do escoamento gás-sólido em leito fluidizado turbulento evidenciando-se uma série de estruturas turbulentas, em sua grande maioria estruturas rotativas e contra-rotativas. Estas estruturas rotativas encontram-se associadas com estruturas de aglomerados de partículas (clusters) e *strands*. Observou-se que as estruturas de *strands* estão associadas com tubos de vórtices contra-rotativos estirando-se na direção axial, através do método de estiramento de vórtices. As estruturas de *clusters* estão associados com regiões do fluido com alta tensão (fator Q negativo).

A técnica de centro de vórtices auxiliou na identificação do vórtice assim como na visualização da complexidade das estruturas turbulentas. O método baseado na helicidade não mostrou-se eficaz na visualização de estruturas rotativas, contudo pode ser utilizada como

auxiliar na identificação das estruturas rotativas ou contra-rotativas associadas ao fator Q positivo.



a)



b)

Figura 120. Vista à partir da região superior do leito; a) plano central de fração de sólido em tons de cinza e iso superfícies de estiramento de vórtice com $\eta_4 = 6 \times 10^5$; b) iso superfície de estiramento de vórtice com $\eta_4 = 6 \times 10^5$ (coloração amarela) e iso superfície de relaxação de vórtice (coloração amarela) com $\eta_4 = -6 \times 10^5$.

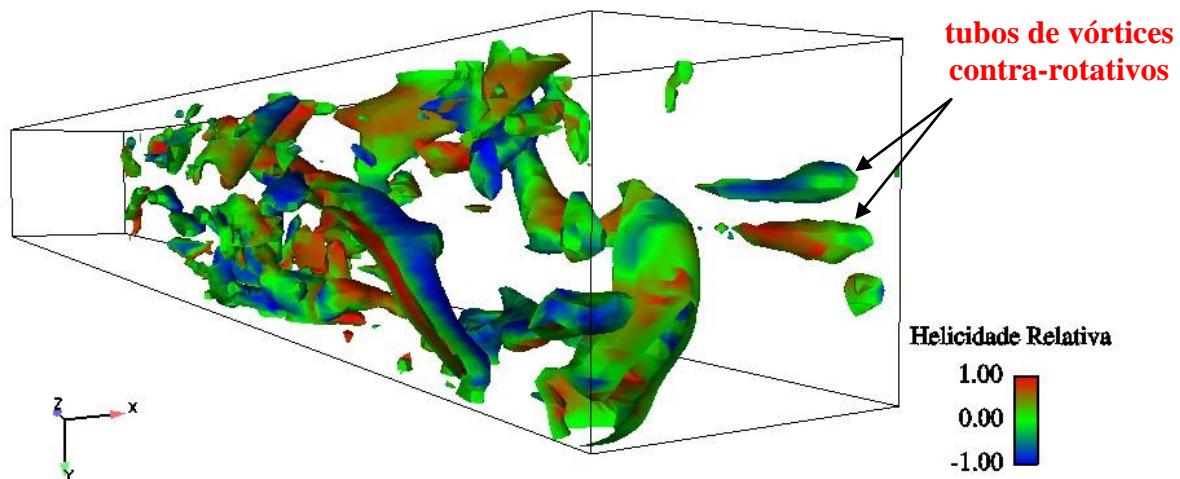


Figura 121. Vista da região superior do leito; a) plano central de fração de sólido em tons de cinza, as setas indicam o *strand*; b) iso superfície de estiramento de vórtice com $\eta_4 = 6 \times 10^5$.

Como conclusão a este item pode-se afirmar como mencionado anteriormente que no escoamento gás-sólido em leito fluidizado turbulento diluído, existe uma íntima relação entre as estruturas de vórtices e vórtices contra-rotativos estirando-se associados com *clusters* e *strands* respectivamente. Pode-se afirmar com segurança que neste tipo de escoamento os aglomerados de partículas mantém-se na região externa a um dado vórtice e que as estruturas de *strands* estão associados com tubos de vórtices contra-rotativos sofrendo um mecanismo de estiramento, geralmente orientados na direção axial Z.

O Fator Q e o critério η_4 tem grande potencialidade para serem utilizados na identificação de estruturas de *clusters* e *strands* no escoamento gás-sólido em um leito fluidizado turbulento como apresentado anteriormente. Um estudo paramétrico é necessário para a utilização destes critérios para a identificação de estruturas de *clusters* e *strands*, com a finalidade de otimizar sua utilização, o qual não foi objeto de estudo deste trabalho. No item que se segue serão discutidos os resultados qualitativos e quantitativos apresentados até o momento.

6.5 Discussão e análise dos resultados

Nos itens anteriores foram apresentados resultados qualitativos e quantitativos ao que se refere ao estudo experimental de van den Moortel *et al.* (1998), comparados com resultados numéricos de Zhang e VanderHeyden (2001) e Ibsen (2002) e com resultados numéricos obtidos no presente trabalho. Neste item serão apresentados e discutidos os resultados

comparados, para alguns casos, assim como os resultados para os perfis laterais e análise espectral.

A partir dos resultados resumidos na Tabela 7, onde são apresentados os pontos importantes observados dos resultados apresentados até o momento, serão discutidos alguns aspectos pertinentes.

Tabela 7. Propriedades e modelos utilizados nos estudos de caso anteriores.

	dp [μm]	ρ _s	ρ _g	μ _s [kg/ms]	μ _g [kg/ms]	Geometria	Refino
Experimental	120	2400	1,2	-	1,7x10 ⁻⁵	B.Q	160000
Ibsen (2002)	120	2400	1,2	TCG	LES	B.Q	160000
Ibsen (2002)	120	2400	1,2	-	1,5x10 ⁻⁵	B.Q	160000
Zhang (2001)	120	2400	1,2	-	1,5x10 ⁻⁵	B.Q	160000
Caso 1	75	1250	1,2	0,0185	1,7x10 ⁻⁵	B.C	160000
Caso 2	75	1250	1,2	0,0185	1,7x10 ⁻⁵	B.C	409600
Caso 3	120	2400	1,2	0,0185	1,7x10 ⁻⁵	B.C	160000
Caso 4 ¹	120	2400	1,2	C.E	LES	B.C	160000
Caso 5 ²	120	2400	1,2	LES	LES	B.C	160000
Caso 6 ³	75	1250	1,2	LES	LES	B.C	409.600
Caso 7 ⁴	120	2400	1,2	0,0185	1,7x10 ⁻⁵	B.Q	160000
Caso 8 ⁵	120	2400	1,2	LES	LES	B.Q	160000
Caso 9 ⁶	120	1250	1,2	0,0185	1,7x10 ⁻⁵	B.Q	160000
Caso 10 ⁷	120	1250	1,2	LES	LES	B.Q	160000

B.Q – Base Quadrada; B.C – Base Cilíndrica; C.E – Correlação empírica para viscosidade do sólido proposta por Huilin e Gidaspow (2003), descrita na Tabela 3, Capítulo 5.

Os resultados até o momento, indicam que a geometria não tem efeito pronunciado nos resultados médios para a velocidade axial de sólido. A relação ρ_s/ρ_g parece ter uma influência maior nos resultados haja vista os resultados obtidos para os Casos 10 e 9, onde manteve-se o diâmetro da partícula dos Casos 7 e 8, apenas modificando o valor de ρ_s.

¹ Caso 4 – Arraste aumentou e a região da parede é bem capturada, as regiões intermediária e central são semelhantes ao do Caso 3.

² Caso 5 – Resultado similar ao Caso 4 com pequenas diferenças no centro. Comportamento semelhante ao encontrado para o Caso 4.

³ Caso 6 – Resultado aproximou a região central e intermediária, não capturando a região próxima da parede. Este resultado é melhor que o Caso 1 e 2.

⁴ Caso 7 – Resultado semelhante ao Caso 3 com excelente aproximação no centro mas pobre na região intermediária e próximo a parede, indicando que a geometria influencia pequena.

⁵ Caso 8 – Resultado aproxima os dados experimentais de forma excelente na região da parede e intermediária e distancia-se na região central, mas dentro do desvio padrão experimental.

⁶ Caso 9 – Resultado semelhante ao Caso 8.

⁷ Caso 10 – Resultado semelhante ao Caso 6.

Nos casos estudados não houve oportunidade de observar o comportamento em relação ao modelo sub-malha para sólido sem a utilização de **LES** para fase gás. Ou seja, não houve nenhum estudo de caso que utilizou apenas o modelo sub-malha para fase sólido. Os resultados indicam que a inclusão do modelo sub-malha para o sólido (Caso 5), para mesmo diâmetro de partícula e ρ_s que o utilizado nos experimentos, mas geometria cilíndrica, diminui o arraste no centro aproximando-se dos resultados encontrados quando da utilização da correlação empírica para viscosidade do sólido (Caso 4). A aproximação junto a parede e a região intermediária é excelente, com desvio no centro.

O efeito do aumento do arraste na parede, não foi significativo para os resultados com geometria com base quadrada, com exceção do Caso 10, onde ρ_s foi diminuído.

O refino na direção vertical (Casos 6 e 2) mostra uma melhora nos resultados na região central e intermediária à parede, com pobre ajuste junto à parede, indicando que um refino radial seria necessário, para partículas menores e com ρ_s menor. Aumentando-se ρ_s e o diâmetro da partícula (Caso 3) os resultados aproximam-se melhor na parede e região intermediária, mas com pobre aproximação na região central. Isto indica de fato, que para os resultados para geometria cilíndrica, utilizando o mesmo diâmetro de partícula e ρ_s que o experimental, um refino radial captaria melhor os efeitos das grandes escalas, região intermediária. Este efeito é visível nos resultados para o Caso 6, pois o refino deu-se na direção vertical, mantendo-se o mesmo comprimento de onda para a direção radial. Ou seja, o efeito de parede no que se refere a geometria cilíndrica pode estar associado às menores escalas de turbulência, ou menores que a escala utilizada. Contudo os resultados apresentados na Figura 68 mostram um efeito interessante associado ao modelo sub-malha utilizado para o Caso 6. Observa-se nesta figura, onde são comparados os resultados do Caso 6 e 2, que para as partículas Geldart A (Casos 6 e 2), o modelo sub-malha diminui o arraste na região central e aumenta na parede. O resultado do Caso 6 é substancialmente melhor na região central do que no Caso 2.

Os resultados para o Caso 3 indicam que a geometria não tem efeito relevante sobre os resultados médios, pois seu comportamento assemelha-se ao obtido para o Caso 7. Entretanto, os resultados para geometria cilíndrica, Casos 4 e 5, apresentam um comportamento diferenciado junto a parede, quando comparados aos resultados do Caso 3. No Caso 3 as viscosidades foram constantes. Isto parece indicar que tanto o modelo empírico como o sub-malha não necessitam ser modificados quando da aplicação destes a geometria cilíndrica, no que concerne a região da parede, o mesmo não ocorre para a região central.

Contudo, é importante lembrar que a modificação da relação ρ_s/ρ_g obteve resultados muito interessantes, com diferenças mais pronunciadas que a variação do diâmetro da partícula. Cabe ressaltar que o coeficiente de transferência de quantidade de movimento na interface sólido/gás, β [kg/m³s], é proporcional ao inverso do diâmetro de partícula ou do quadrado deste. Ou seja, β diminui sensivelmente com o aumento do diâmetro da partícula. Desta forma, espera-se que a formação e destruição de *clusters* tenha influência significativa no valor de β . Contudo, β não é influenciado significativamente com a modificação de ρ_s , mas o empuxo sim. De fato, quando há uma modificação no diâmetro da partícula, um *cluster*, por exemplo, o arraste é modificado, desta forma, a relação entre as forças modifica-se. Para visualizar este efeito, tem-se o balanço entre arraste e o empuxo, da seguinte forma

$$\phi_s(\rho_s - \rho_g)g = \frac{\beta}{\phi_g}(v_g - v_s), \text{ desconsiderando a fricção do gás com as paredes e as tensões}$$

transmitidas pelas partículas. Observe que se ρ_s aumenta, β aumenta, tendo em vista que $\rho_s >> \rho_g$. Ou seja, não é apenas o arraste que importa, mas a relação de forças, pois um *cluster* é um aglomerado de partículas cujo diâmetro é maior (10 a 50 vezes maior) que o diâmetro de uma partícula e a densidade do *cluster*, de fato é menor, pois $\rho_c = \rho_s \phi_s + \rho_g \phi_g$ é menor que ρ_s , mas o volume de um *cluster* é maior que o de uma única partícula assim como sua área. Desta forma, o *cluster* gera uma diminuição no arraste local e no empuxo e este efeito está associado a densidade efetiva do *cluster* e ao diâmetro do mesmo. Modificações na densidade e no diâmetro da partícula, implicam em comportamentos diferenciados; os resultados mostram que a maior influência está na relação ρ_s/ρ_g , mais do que no diâmetro da partícula, considerando o afirmado acima.

Desta forma, quando ρ_s aumenta ou diminui, o balanço de forças é modificado consideravelmente, implicando nas diferenças encontradas nos estudos de caso, efeito este mais proeminente que o aumento ou diminuição do diâmetro da partícula.

Geldart (1973), mostra a relação entre ($\rho_s - \rho_g$) e o diâmetro da partícula na Figura 4, Capítulo 2. Se $\rho_s=1250$ e $dp=75$ μm, então segundo a classificação de Geldart, o comportamento do leito é definido como Geldart A, que é caracterizado por uma expansão considerável do leito, quando a velocidade de mínima fluidização é ultrapassada. Partículas do tipo Geldart A são as utilizadas no processo de craqueamento catalítico em leito fluidizado. Note que se $\rho_s=2400$ e $dp=120$ μm a classificação é Geldart B, onde a expansão do leito não é tão pronunciada. Desta forma, para $\rho_s=1250$ e $dp=120$ μm, Casos 9 e 10, tem-se partículas do tipo Geldart A, mas $\rho_s=2400$ e $dp=120$ μm, Casos 3, 4, 5, 7 e 8, tem-se um comportamento Geldart B. Assim, o arraste para os Casos 9 e 10 foi modificado sensivelmente, gerando uma

expansão maior do leito, simplesmente mudando a relação entre a força de arraste e empuxo, como esperado.

O que se deseja mostrar está no fato de que um experimento sempre utiliza-se de uma distribuição de partículas, com diâmetros e densidades médias. Nas simulações numéricas, utiliza-se um diâmetro fixo, assim como densidade fixa. Fica claro que o experimento numérico deveria utilizar uma distribuição de partículas, mais de acordo com o experimento em questão, mas isto insere um fator que é o aumento do tempo computacional.

De qualquer forma, os resultados para os Casos 8 e 9, mostram que mesmo utilizando ρ_s e d_p constantes, aproximam-se muito aos dados experimentais, pelo menos para a velocidade média axial do sólido.

A pergunta que pode-se formular é porque o resultado do Caso 10 apresenta expansão maior que o Caso 9? O comportamento junto a parede modificou-se com a utilização do modelo sub-malha para o sólido. A que se deve isto?

O modelo sub-malha deveria resolver melhor os campos de velocidade, haja vista os resultados dos Casos 8 e 6; ou seja, os campos de velocidade seriam “mais” realistas. Com o auxílio da classificação Geldart, pode-se conjecturar que o comportamento correto do Caso 9 é na verdade o encontrado para o Caso 10, onde há uma expansão maior (esperada), pois as partículas ($\rho_s=1250$ e $d_p=120 \mu\text{m}$), são Geldart A devendo comportar-se como tal em uma simulação numérica. Desta forma, pode-se conjecturar que o modelo sub-malha para a fase sólido e a fase gás representa adequadamente o comportamento esperado para partículas Geldart A, assim como para as partículas com comportamento do tipo Geldart B, e as diferenças encontradas estão associadas a utilização de partículas com classificação diferenciadas. Contudo isto não responde decisivamente as perguntas formuladas acima.

Deve-se fazer uma ressalva a observação apontada acima. Para os Casos 4 e 5, o comportamento fluidodinâmico deveria ser Geldart B, entretanto os resultados mostram um comportamento do tipo Geldart A. Lembrando que para os Casos 4 e 5 a geometria utilizada foi cilíndrica, assim como para o Caso 3 que tem a mesma classificação. Cabe ressaltar que para o Caso 4 foi utilizada uma correlação empírica para a fase sólido, obtendo o mesmo comportamento que o Caso 5. No Caso 3 a viscosidade manteve-se constante para ambas as fases, com comportamento esperado Geldart B.

Ressalta-se que a análise aqui apresentada é qualitativa e que não pode de forma alguma ser conclusiva, merecendo estudo mais profundo dos efeitos observados.

6.5.1 Diferenças entre estudo numérico de Zhang e van der Heyden (2001) e a presente tese

Zhang e van der Heyden (2001), em seu estudo numérico, utilizaram uma malha estruturada de base quadrada, que em 180 cm da base do reator realizaram uma diminuição linear de 10 cm da seção. Em nossos estudos de caso este artifício não foi utilizado. Van den Moortel *et al.* (1998) não detalham a região de saída de seu reator, portanto a escolha da forma física da região de saída é arbitrária. Nos estudos de casos apresentados, observa-se nitidamente que os resultados médios de Zhang e van der Heyden (2001) não aproximam bem os resultados na região intermediária e central do leito, com boa aproximação na região da parede. Em um dos estudos de caso apresentados para Ibsen (2002), foi utilizada malha exatamente semelhante a de Zhang e van der Heyden (2001), mostrando comportamento semelhante. Os estudos de caso apresentados anteriormente para malha de base quadrada tem melhor aproximação. Isto indica que a forma física da geometria de saída do reator tem importância significativa nos resultados médios da velocidade axial de sólido.

Além desta diferença, tem-se ainda a utilização da condição de igualdade de fluxo de sólido na entrada e saída do reator. Ou seja, Zhang e van der Heyden (2001), forçam o fluxo de sólido na entrada igual ao da saída que é o mesmo que o experimental. Esta condição de contorno, gera uma “amarração”, e a solução no interior do reator, tem que adaptar-se a esta condição. Deve-se lembrar, que em um leito fluidizado o regime permanente não é encontrado, tendo-se na verdade um regime de pseudo estado estacionário. Ou seja, o fluxo de sólido flutua consideravelmente na saída do reator, desqualificando desta forma a utilização da condição de igualdade de fluxo de sólido empregada por Zhang e van der Heyden (2001).

Outra diferença está associada a condição de parede para a fase sólido. Zhang e van der Heyden (2001) utilizaram condição de escorregamento livre para a fase sólido, e a presente tese utilizou condição de não deslizamento para ambas fases. Agrawal (2000) e Agrawal *et al.* (2001) mostram que os resultados não são dependentes da condição de contorno na parede. Recentemente Andrews *et al.* (2005) comparando resultados com as duas condições de contorno, mostram que os resultados médios são os mesmos, independendo da condição de contorno utilizada. Contudo, Andrews *et al.* (2005), observaram que quando da utilização de condição de livre deslizamento, aparecem pelo menos dois atratores. Ou seja, estes autores encontraram uma solução, que segundo eles demonstram, não física, quando da utilização da condição de escorregamento livre, o mesmo não ocorrendo quando da utilização da condição de não deslizamento. Glasser *et al.* (1997) utilizando o modelo de dois fluidos demonstraram a coexistência de duas soluções em seu estudo uma o estado homogêneo e outra com flutuações persistentes o heterogêneo.

De fato, para uma condição inicial uniforme e condição uniforme na entrada, como realizado em todos os estudos de caso apresentados anteriormente, o estado de flutuação persistente, quando utiliza-se condição de livre escorregamento, não pode ser alcançado, mantendo-se no estado homogêneo (Andrews *et. al.* 2005).

Quando a condição de não deslizamento é utilizada a camada limite cresce, gerando acumulo de partícula na região próxima a parede, como apresentado em todos os estudos de caso, e esta não uniformidade lateral é suficiente para manter o sistema atraído para o estado de flutuação persistente. Este efeito pôde ser observado em todos os casos estudados anteriormente, onde observou-se que os perfis de fração de sólido mantinham-se constantes no início das simulações, a 1 metro da base, onde os resultados foram avaliados, até que em algum momento, pelo efeito do aglomerado junto a parede, este estado inicial homogêneo quebrava-se em estruturas não homogêneas caracterizadas pela presença de *clusters* e *strands* por todas as regiões do leito.

Zhang e van der Heyden (2001) não reportam o esquema numérico utilizado em seu trabalho, assim não é possível realizar comparação a este aspecto.

A função arraste utilizada por Zhang e van der Heyden (2001) foi modelada como um arraste para uma esfera, com a justificativa de que o sistema em estudo é diluído, não necessitando assim dos efeitos associados as interações partícula-fluido-partícula, representados pelo ajuste da função de arraste como função da fração de sólido.

Ou seja, a função arraste utilizada por estes autores não utiliza a correção do arraste como uma função da fração de sólidos como a utilizada no presente trabalho. Ibsen (2002) comparou os resultados utilizando a função de arraste modificada com a função modelada da forma como utilizaram Zhang e van der Heyden (2001), encontrando resultados melhores com a função modificada, a mesma utilizada no presente trabalho.

De fato, a função de arraste deve conter a modificação em função da fração de sólidos, pelo simples fato da existência de aglomerados de partículas e os resultados numéricos comparados com os resultados de Zhang e van der Heyden (2001) mostram que o arraste é sub-estimado.

As diferenças apresentadas revelam a importância da modelagem correta do arraste e das condições de contorno, tendo em vista as melhores aproximações encontradas pelo presente trabalho, quando comparado com o trabalho de Zhang e van der Heyden (2001).

Outro aspecto relevante refere-se a região central diluída, onde a velocidade axial de sólido é sobre-estimada. Um possível efeito, já comentado refere-se ao arraste, outro associado ao cálculo da viscosidade. De fato a viscosidade do sólido é maior do que deveria ser na região diluída, contribuindo assim com o feito observado. Um “ajuste” no valor da

viscosidade em regiões diluídas aproximaria os resultados nesta região, como é possível observar quando comparam-se os resultados do Caso 7 (viscosidade constante) e Caso 8 (LES).

6.5.2 Escalas, resultados temporais e análise espectral

Neste item serão apresentadas as escalas envolvidas no problema de forma a realizar uma análise dos resultados apresentados até o momento, apresentação de resultados temporais e análise espectral dos resultados numéricos.

6.5.2.1 Escalas

Nos resultados dos Casos 6 e 2 a malha utilizada (maior refino) tem como dimensões dos volumes 0,625 cm nas direções laterais e 0,5 cm na direção axial. Para os demais casos nas direções laterais o refino foi mantido, contudo a direção axial a resolução foi de 1,33 cm. Sendo assim, a malha menos refinada tem $0,625 \times 0,625 \times 1,33$ cm e a malha refinada $0,625 \times 0,625 \times 0,5$ cm. Desta forma pode-se calcular a quantidade de partículas para cada uma das resoluções, supondo que as mesmas estão colocadas uma ao lado da outra em uma determinada direção do volume elementar; assim, para uma partícula com 75 μm ($=0,0075$ cm) tem-se: $0,625/0,0075 = 83$ partículas e $1,33/0,0075 = 177$ partículas. No caso de partículas com 120 μm ($=0,012$ cm) tem-se: $0,625/0,012 = 52$ partículas e $1,33/0,012 = 110$ partículas. Observe que com o aumento do diâmetro da partícula, a mesma resolução captura menos partículas, indicando um pseudo refino de malha. A Tabela 6 resume as escalas associadas a este contexto.

Note que quando da utilização de uma malha refina, esta captura uma quantidade de partículas menor quando comparada com a malha grosseira, gerando um arraste local diferenciado. Cabe ressaltar que a malha de base quadrada não foi refinada, e não há nenhum resultado apresentado que tenha se utilizado de malha refinada com partículas de 120 μm , desta forma, as três últimas linhas da última coluna da Tabela 8, não foram utilizadas no presente estudo.

Tabela 8. Quantidade de partículas para cada uma das resoluções de refino de malha e diâmetro de partículas.

	Resolução (cm)	75 μm	Nº partículas	120 μm	Nº partículas
Δx_1	0,625	$0,625/0,0075$	83	$0,625/0,012$	52
Δy_1	0,625	$0,625/0,0075$	83	$0,625/0,012$	52
Δz_1	1,33	$1,33/0,0075$	177	$1,33/0,012$	110

Δx_2	0,625	0,625/0,0075	83	0,625/0,012	52
Δy_2	0,625	0,625/0,0075	83	0,625/0,012	52
Δz_2	0,5	0,5/0,0075	66	0,5/0,012	42

A importância do conhecimento destas escalas reflete-se nos aspectos associados à turbulência e a relação entre as menores escalas da turbulência e as partículas ou aglomerados de partículas. Desta forma, para as propriedades da fase gás utilizadas nas simulações, e tomando a velocidade superficial do gás de 1 m/s, e a dimensão lateral do reator como base,

tem-se o Reynolds das grandes escalas: $Re_1 = \frac{u_1 L_1}{\nu} = \frac{1 \times 0.2}{1.4 \times 10^{-5}} = 14286$. Com este valor do número de Reynolds obtém-se a escala de comprimento das menores escalas de turbulência $\eta \sim 0,015$ cm. Observa-se que o valor do comprimento das menores escalas é maior que o diâmetro de partícula utilizado no presente trabalho. Para partículas com 120 μ m, a razão entre as menores escalas e o diâmetro da partícula é de 1,25 vezes menor, e para partículas com 75 μ m tem-se uma razão de 2 vezes menor. Desta forma, as partículas utilizadas nos estudos de caso tem diâmetro menor que as menores escalas da turbulência, indicando que estas, vistas como partículas individuais, terão o comportamento de um escalar passivo nesta escala. Contudo, $\Delta x / \eta = 42$, ou seja, o volume elementar da malha utilizada nas simulações é 42 vezes maior que as menores escalas de turbulência. O valor de u_{rms} para a fase gás no centro do reator, calculado nas simulações é da ordem de 1,51 m/s. Quando calcula-se novamente as menores escalas tem-se $\eta \sim 0,011$ cm. Assim, pode-se assumir que a ordem de grandeza é a mesma. Desta forma, para os cálculos de escala será utilizada a velocidade superficial como referência. A escala de tempo característica das menores escalas é da ordem 0,002 segundos. Importante observar que nas simulações realizadas o passo de tempo utilizado encontrava-se na faixa de 0,001 a 0,003 segundos, dependendo do estudo de caso.

Observa-se que a malha utilizada não resolve as menores escalas da turbulência. Outro aspecto interessante e importante, é o fato de que em um volume elementar tem-se, para a malha grosseira, em torno de 83 a 52 partículas, dependendo do diâmetro da partícula. Ou seja, no volume elementar não há apenas uma partícula, mas um conjunto de partículas. No caso de partículas com 75 μ m de diâmetro, há 83 partículas, o que representa uma dimensão característica de 0,62 cm, significando que o conjunto de partículas em um volume elementar, quando do máximo de compactação, é 41 vezes maior que as menores escalas. Sendo assim, nesta escala a partícula, ou *cluster*, não comporta-se mais como um escalar passivo, podendo modificar a turbulência nas regiões de ocorrência de aglomerados.

Importante observar, que o modelo de dois fluidos, com a malha computacional utilizada nos estudos de caso, resolve a fase partícula de forma a capturar a formação de aglomerados de partículas. Ou seja, para a fase partícula, a malha utilizada representa adequadamente os fenômenos inerentes associados a esta fase. Utilizar uma malha computacional onde encontram-se 10 diâmetros de partículas por exemplo, poderia incorrer em resultados não físicos, pois o modelo de dois fluidos toma como hipótese que as flutuações associadas ao movimento de uma partícula são suaves. Ao mesmo tempo, esta malha, no que se refere a fase gás, não resolve todas as escalas envolvidas, como visto acima. Fica clara a necessidade da utilização de uma abordagem sub-malha, para descrever a fase gás assim como as interações entre as fases.

Segundo Glasser *et al.* (1998) a escala espacial onde ocorrem os *clusters* pode ser calculada com a seguinte relação, advinda da adimensionalização das equações do modelo de dois fluidos, dada por

$$L = \left(\frac{\mu_s u_t}{\rho_s g} \right)^{1/2}, \quad (6.1)$$

onde u_t é a velocidade terminal. Para as partículas com 75 μm a velocidade terminal é 0,21 m/s e para as de 120 μm é 0,71 m/s. Desta forma, resolvendo a Equação 6.1 para partículas com 75 μm chega-se a $L = 0,057$ cm e para partículas com 120 μm tem-se $L = 0,075$ cm.

Observa-se que a escala proposta por Glasser *et al.* (1998) para capturar os *clusters* é 8 vezes menor que a resolução adotada na presente tese, e 5 vezes maior que as menores escalas de turbulência calculadas anteriormente para os estudos de caso até o presente. Segundo este critério, a resolução utilizada não poderia capturar *clusters* e *strands*. Com esta resolução de malha, em um volume elementar encontrariamos apenas 6 partículas, para o caso de partículas com 120 μm . Neste caso a questão que emerge fica sob a validade do modelo de dois fluidos nestas condições, como sugerido acima. De qualquer forma, Horio e Kuroki (1994) experimentalmente encontraram que os aglomerados são formados por 100 a 50 diâmetros de partículas. Estes valores estão de acordo com a resolução adotada para solução dos estudos de caso do presente trabalho, para a dimensão característica.

A espessura da camada limite da fase sólido, definida como a distância da parede onde o fluxo de sólido é nulo, pode ser estimada utilizando a relação proposta por Zhang *et al.* (1995), função apenas do diâmetro do duto $\delta = 0,05 D_e^{0,74}$, que para os estudos de caso apresentados até o momento tem o valor de 1,5 cm, ou seja, para a resolução utilizada tem-se 2 volumes dentro da camada limite da fase sólido.

O tempo de resposta da fase sólido é definido como a relaxação, e é dado por

$$\tau_p = \frac{\rho_s d_p^2}{18\mu_g}. \quad (6.2)$$

Para partículas com $75 \mu\text{m}$ e $\rho=1250 \text{ kg/m}^3$, o tempo de relaxação é 0,02 segundos. Para partículas com $120 \mu\text{m}$ e $\rho=2400 \text{ kg/m}^3$, o tempo de relaxação é 0,11 segundos. O tempo característico do fluido pode ser calculado através da razão entre o diâmetro do duto e a velocidade característica, obtendo-se um valor para nosso caso de 0,2 segundos. Desta forma pode-se calcular o número de Stokes¹, que para o primeiro caso é, $St = 0,1$ e para o segundo tem-se $St = 0,55$. Para ambos os casos tem-se $St < 1$, e neste caso o regime de escoamento é considerado diluído, e desta forma as partículas levam um tempo médio para responder ao escoamento do gás. No segundo caso, $St = 0,55$, há maior tendência para formação de *clusters*, pois quando o tempo característico da partícula aproxima-se da escala do fluido, há tempo suficiente para as partículas se acomodarem. Se $St \sim 1$, então o tempo de resposta é muito lento para seguir os vórtices das menores escalas, neste caso, a influência dos vórtices das grandes escalas é mais pronunciada, pois estes tem escalas de tempo aproximadamente equivalentes ao tempo de resposta da partícula. As partículas tem uma densidade maior que o fluido, sendo assim experimentam um efeito de centrifugação, movendo-as longe do centro dos vórtices das grandes escalas.

Observe que o tempo característico para o fluido foi tomado como o tempo característico das grandes escalas. Se tomarmos o tempo característico das menores escalas calculado anteriormente (0,002 segundos), tem-se para o primeiro caso ($75 \mu\text{m}$ e $\rho=1250 \text{ kg/m}^3$) $St = 10$, e para o segundo ($120 \mu\text{m}$ e $\rho=2400 \text{ kg/m}^3$) $St = 55$. Neste caso $St \gg 1$, significando que as partículas não respondem ao movimento dos menores vórtices, gerando novamente aglomerados². Pode-se concluir, segundo esta análise, que para os estudos de caso apresentados, deveria haver uma tendência maior de formação de aglomerados para os Casos 3, 4, 5, 7 e 8, baseado na análise do número de Stokes. Para os Casos 9 e 10 tem-se $St = 0,3$, valor menor que os obtidos para os Casos 3, 4, 5, 7 e 8, revelando uma menor tendência a formar aglomerados. Cabe ressaltar que esta análise é de uma certa forma qualitativa, uma análise de ordens de grandeza, de tempos característicos. Contudo, não foi realizado um

¹ O número de Stokes é definido como a razão entre o tempo característico da partícula e o tempo característico do fluido.

² Observe que a definição do número de Stokes pode variar substancialmente, ver por exemplo Capítulo 2, item 2.3.3, e Peirano (1998), Wylie e Koch (2000) e Falon e Rogers (2002). Muitos autores preferem definir o número de Stokes com base na temperatura granular, outros nas menores escalas da turbulência, levando as diferenças de definição. Importante salientar que as diferenças nas definições levam apenas a relações de escalas diferentes, mas o número de Stokes continua sempre sendo uma escala de tempos de relaxação.

estudo detalhado da influência do número de Stokes sobre a formação de estruturas de aglomerados. Para tanto seria necessário variar o número de Stokes para faixas maiores, em conjunto com outros parâmetros com a finalidade de estabelecer sua real influência.

O número de Stokes pode ser definido ainda como função do coeficiente de arraste C_D e a velocidade terminal, gerando tempos de relaxação maiores que os calculados anteriormente, calculados para o regime de Stokes. A Equação 3.5 do Capítulo 3, item 3.2 descreve esta relação. Neste caso o número de Reynolds da partícula é baseado na velocidade terminal da seguinte forma

$$\text{Re}_p = \frac{\rho_g u_t d_p}{\mu_g} \quad (6.3)$$

que para o caso onde tem-se $75 \mu\text{m}$ e $\rho=1250 \text{ kg/m}^3$, o valor de $\text{Re}_p \sim 1$, e desta forma a Equação 6.2 é válida. Mas com o conjunto $120 \mu\text{m}$ e $\rho=2400 \text{ kg/m}^3$, o valor de $\text{Re}_p \sim 6$, invalidando a utilização da Equação 6.2, gerando a necessidade de acrescentar a dependência ao coeficiente de arraste, ou a relação de Oseen, segundo Fallon e Rogers (2002), para o cálculo do tempo de relaxação da partícula, utiliza-se a Equação 3.5 reapresentada aqui

$$\tau_p = \frac{24\rho_p d_p^2}{18\mu_f C_D \text{Re}_p}, \quad (6.4)$$

Através da Equação 6.4 obtém-se, para o conjunto $120 \mu\text{m}$ e $\rho=2400 \text{ kg/m}^3$, o valor de 1,03 segundos para o tempo de relaxação da partícula e um $St = 5,13$ corrigido para o regime de Newton. Neste caso $St > 1$, as partículas não têm tempo para responder às forças hidrodinâmicas, tendendo a aglomerar-se; ou seja, no tempo de vida de um vórtice as partículas mantém-se em seu interior pelo tempo necessário para dissipar a energia daquele vórtice.

Desta forma observa-se que o conjunto representado por partículas de $120 \mu\text{m}$ e $\rho=2400 \text{ kg/m}^3$, tem um comportamento fluido dinâmico bastante diferenciado. Neste conjunto de parâmetros, para os Casos 3, 4, 5, 7 e 8, a tendência de formar aglomerados fica estabelecida, quando comparada aos Casos 1, 2, 9 e 10, como mostrou a análise através da classificação de Geldart (item 6.4).

De fato, estas diferenças estão associadas a velocidade terminal e a relação entre densidades, estabelecendo um maior ou menor tempo característico. No caso do gás a relação está associada ao movimento das grandes escalas, como definido aqui, pois vórtices maiores sobrevivem por um tempo maior que os menores. Enquanto para a fase partícula a relação da menor escala (partícula) estabelece o regime, para a fase gás, são as grandes escalas responsáveis pelo regime de escoamento. A relação entre as duas escalas, a escala da partícula

e as grandes escalas associadas a fase gás, levarão a formação e destruição de aglomerados de partículas, tendo em vista as limitações do modelo de dois fluidos para representar as flutuações associadas a dimensão da partícula.

De forma sucinta, os estudos de caso simulados utilizaram velocidade superficial de 1 m/s na entrada do reator. Com esta velocidade superficial o regime turbulento gás-sólido está estabelecido. O regime turbulento é caracterizado por regiões densas na base e diluídas na região superior, apresentando a formação de aglomerados de partículas. A resolução da malha computacional utilizada não resolve todas as escalas associadas ao escoamento do gás tão pouco da fase sólida. Os resultados numéricos apresentam-se com aproximação muito boa aos dados experimentais, sempre que as propriedades experimentais foram utilizadas. Os *clusters* e *strands* são captados por esta resolução, pois a malha encontra-se na ordem de grandeza destas estruturas. O numero de Reynolds baseado na velocidade terminal da partícula revela que o regime de escoamento encontra-se entre o regime de Stokes e o de Newton. De acordo com a análise baseada no número de Stokes as partículas tendem a seguir os grandes vórtices e não interagem com os menores, desta forma o tempo de vida de um *cluster* está associado a escala de tempo das grandes escalas, que neste caso está na ordem de 0,2 segundos. Vale ressaltar que estas conclusões são baseadas na análise de escala e dão de fato apenas uma visão geral dos fenômenos esperados.

6.5.2.2 Resultados temporais e análise espectral

A seguir são apresentados os resultados temporais para os Casos 2, 3, 6, 7 e 8 e respectivas análises espectrais de forma a contribuir para o melhor entendimento dos fenômenos encontrados em escoamentos gás-sólido. O principal objetivo é apresentar e discutir os resultados temporais e analisar os espectros de potência dos campos de fração de sólido, velocidade de sólido e velocidade do gás, determinar as freqüências dominantes, se estas existirem e correlacioná-las com a presença de estruturas de aglomerados.

Caso 2

A seguir são apresentados os resultados para o Caso 2 onde a malha é refinada com partículas de 75 μm e $\rho_s=1250 \text{ kg/m}^3$. A geometria é de base cilíndrica e não foi utilizado qualquer modelo de turbulência.

A Figura 122 apresenta a variação temporal da velocidade do sólido a 1 metro de distância da entrada do reator, com valores para a região central e junto a parede. Os resultados apresentados na Figura 122 revelam que na região central as freqüências são maiores quando comparados aos resultados junto a parede. As velocidades no centro são

positivas, com valor médio de 2,17 m/s, enquanto na parede as velocidades são negativas em sua maioria, com valor médio negativo de 0,58 m/s. Junto a parede evidencia-se a ocorrência de um fenômeno que inicia-se a 4,5 segundos mantendo-se até em torno de 8 segundos, o mesmo não ocorrendo na região central. Este fenômeno mantém-se por um período em torno de 3,5 segundos, onde é possível observar um aumento da velocidade do sólido junto a parede, podendo estar associado a algum fenômeno de aglomeração persistente.

O espectro de potência referente aos valores temporais junto a parede e na região central apresentados na Figura 122, são apresentados na Figura 123. Evidencia-se nesta figura que as grandes escalas representadas por baixas freqüências iniciam em 0,07 Hertz para a velocidade do sólido no centro, mas com uma energia maior que a encontrada para a velocidade do sólido junto à parede. Este resultado é esperado, pois a região da parede a energia das grandes escalas é menor. Em torno de 0,2 Hertz observa-se que o espectro apresenta um aumento de energia, associado ao evento anteriormente mencionado (4,5 a 8 segundos).

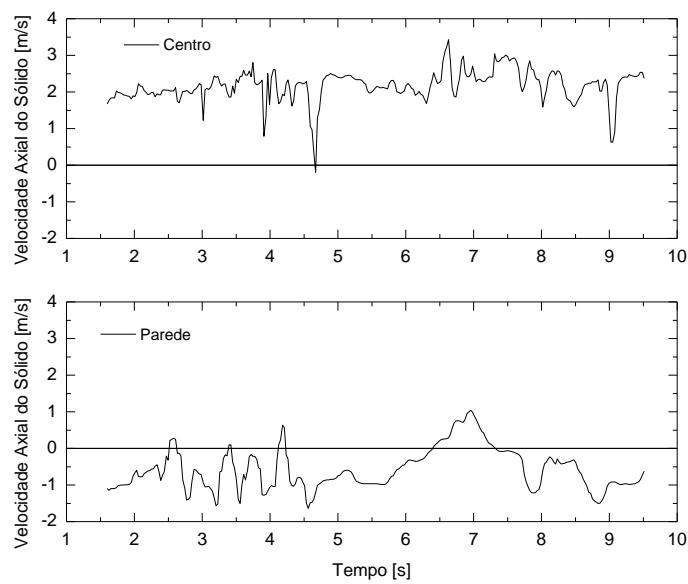


Figura 122. Variação temporal da velocidade axial do sólido, no centro e na parede, Caso 2.

A Figura 123 (a) apresenta a inclinação $-5/3$, representando a tendência da zona inercial, semelhante a tendência esperada da distribuição espectral. O espectro para região da parede apresenta-se sempre com energia menor quando comparada ao espectro da região central. A freqüência máxima está na ordem de 20 Hertz. O espectro não apresenta uma indicação clara da freqüência onde a zona inercial inicia.

Outro aspecto importante é que para a velocidade do sólido (Figura 123 (a)) não há praticamente diferença para energia turbulenta no centro e junto a parede para a velocidade do sólido, esta parece manter-se em toda a zona inercial de certa forma na mesma ordem de grandeza, com um aumento da energia turbulenta para a velocidade de sólido na região central, mas as diferenças não são tão acentuadas como veremos mais a frente. Contudo o espectro da flutuação da velocidade do sólido (Figura 123 (b)) na região central apresenta-se com maior energia quando comparada a região da parede, mantendo-se por toda região inercial. Este efeito foi observado experimentalmente por Moran e Glikman (2003) para partículas do tipo Geldart B.

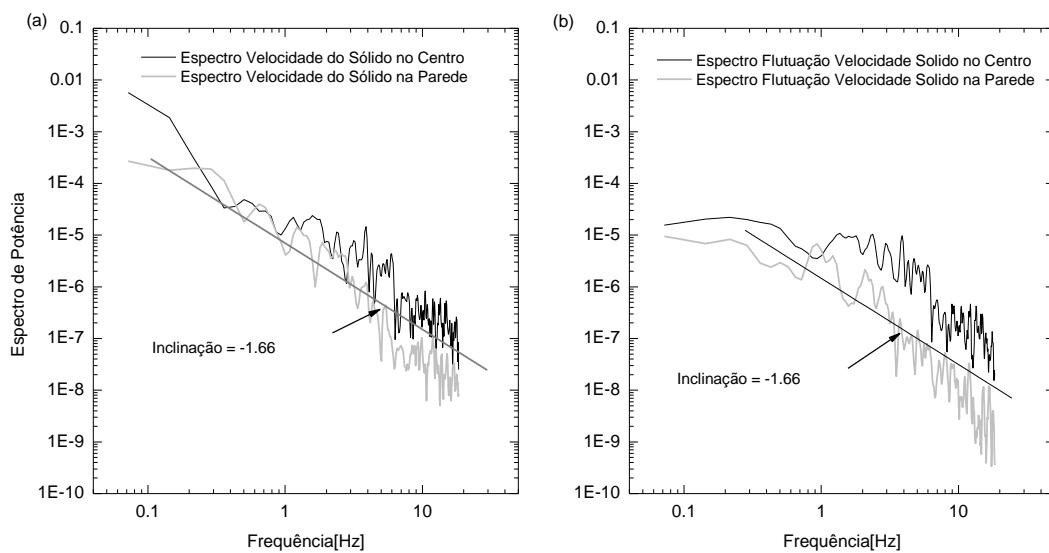


Figura 123. (a) Espectro de potencia para a velocidade do sólido e (b) flutuação da velocidade do sólido na região da parede e central, Caso 2.

A Figura 124 (a) apresenta a variação de $u'_s u'_s$ a um metro de distância da entrada do reator. Observa-se que na região central a energia cinética turbulenta é menor que na região próxima a parede. Observa-se um pico na energia cinética turbulenta a 0.05 metros e um decréscimo brusco da mesma até a região próxima a parede.

A Figura 124 (b) apresenta o espectro de potência da flutuação da velocidade da fase sólida a 1 metro de distância da entrada do reator em função do número de onda. O número de onda máximo representa a resolução da malha; ou seja, a freqüência máxima que a malha é capaz de captar, que para nosso caso é 500 Hertz. Nesta figura observa-se que a malha utilizada é capaz de captar o decaimento de energia na região inercial com inclinação $-5/3$. Na Figura 124 (b) observa-se ainda que a resolução espacial utilizada no presente trabalho não é

capaz de capturar a região dissipativa, contudo, a região inercial está bem definida, com o início da mesma em torno de 40 Hertz. Na região em torno de 3 Hertz até 30 Hertz observa-se a formação de estruturas coerentes. Estas estruturas podem ser identificadas como *clusters* ou bolhas de gás sendo geradas ou destruídas na região das grandes escalas, decaindo a partir de 40 com inclinação $-5/3$. Ou seja, a partir de 40 Hertz, estruturas menores com freqüência maior são formadas semelhante a descrição da cascata de energia.

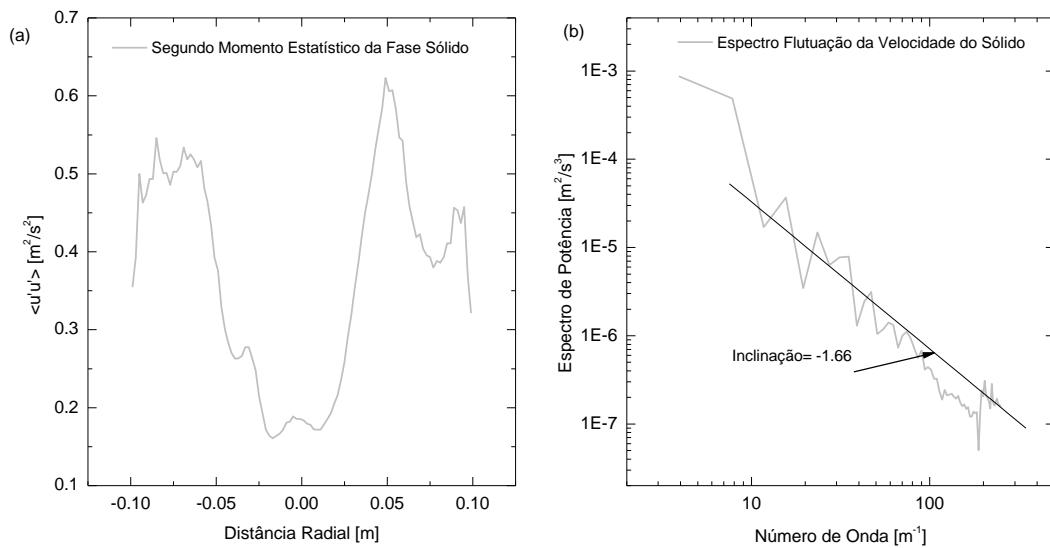


Figura 124. (a) Variação radial do segundo momento estatístico para a fase sólido em 1 metro da entrada do reator; (b) Espectro de energia da flutuação da velocidade do sólido em função do número de onda, a 1 metro da entrada do reator, Caso 2.

A Figura 125 apresenta a variação temporal da fração de sólidos na região próxima a parede e central. Como era esperado, a região da parede é mais densa que a região central. A região da parede apresenta-se com freqüências mais baixas e a central com freqüências mais altas. No tempo de 4,5 segundos, junto a parede, há uma diminuição substancial das freqüências, apresentando o aparecimento de *clusters*, que são formados e destruídos. O resultado da Figura 122, no tempo de 7 segundos apresenta um pico de velocidade dos sólidos, exatamente no mesmo tempo onde na Figura 125 observa-se uma queda brusca da fração de sólidos junto a parede, explicando assim o comportamento “estranho” apontado anteriormente ao que se refere a velocidade de sólido junto a parede. A região central encontra-se mais diluída que a parede, com fração de sólido média de 0,18, enquanto na parede a fração média é de 0,34.

Na região central observam-se freqüências maiores provavelmente associadas a passagem de bolhas de gás nesta região. Na parede as freqüências são menores, evidenciando a presença de estruturas altamente coerentes, do tipo *clusters* e *strands*.

A Figura 126(a) apresenta o espectro de potência da fração de sólido junto a parede e na região central e a Figura 126(b) o espectro de potência da flutuação da fração de sólido. Observa-se que na região da parede a densidade de potência é menor para as maiores escalas quando comparada a região central. Mas as altas freqüências o comportamento é semelhante, onde observa-se que o espectro junto a parede tem menor energia, na região inercial, quando comparado ao espectro na região central. A região inercial com decaimento $-5/3$ está bem estabelecida com o início da mesma em torno de 1 Hertz .

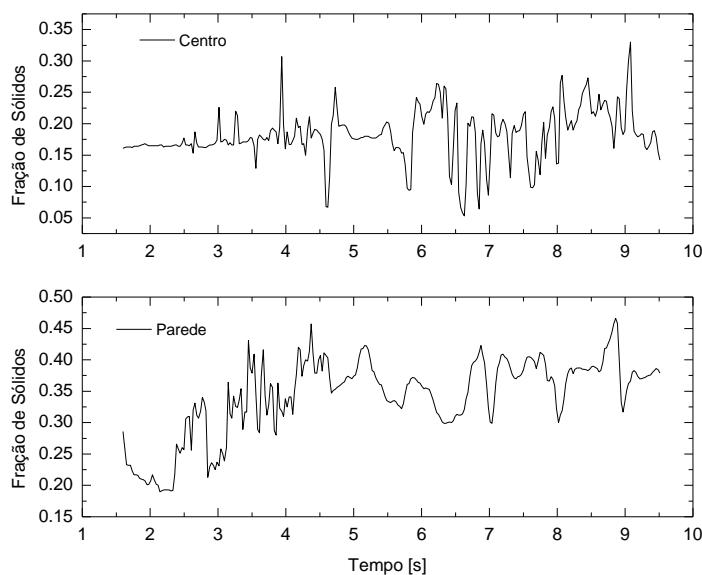


Figura 125. Variação temporal da fração de sólido, no centro e na parede, Caso 2.

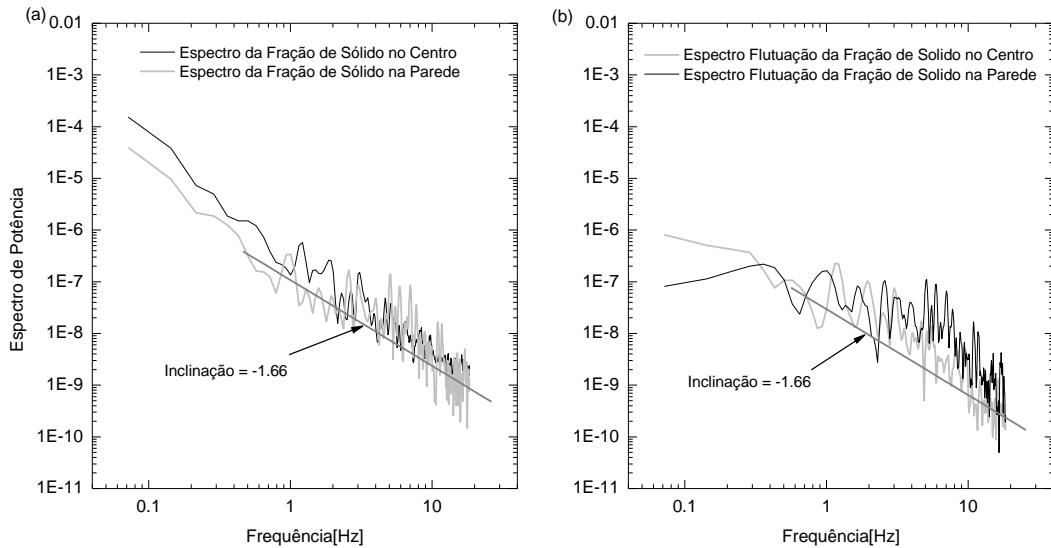


Figura 126. (a) Espectro de Potência para fração de sólido na região da parede e central e (b) Espectro de Potência para flutuação da fração de sólido na parede e centro, Caso 2.

O espectro da flutuação da fração de sólido, ϕ_s' , Figura 126(b), tem um comportamento diferenciado em relação ao espectro de energia total, Figura 126(a). Junto à parede as grandes escalas tem maior energia quando compara-se a região central, decaindo na região inercial com inclinação $-5/3$. Na região inercial o comportamento da região junto a parede apresenta-se com energia menor.

Evidencia-se ainda na Figura 126 (b) a formação de duas estruturas coerentes na baixa freqüência, em torno de 0,3 e 1 Hertz na região da parede, provavelmente associadas a formação e destruição de aglomerados de partículas.

A Figura 127 (a) apresenta a variação do segundo momento estatístico para a fração de sólido na região central a 1 metro de distância da entrada do reator. Observa-se que há menor energia cinética turbulenta no centro do que na região intermediária ao centro e à parede. Na região intermediária observa-se um fenômeno de intermitênciam provavelmente associada a formação e destruição de *clusters*.

A Figura 127 (b) apresenta o espetro da flutuação da fração de sólido em função do número de onda na região central a 1 metro da entrada do reator. Observa-se a presença de estruturas coerentes nas baixas freqüências, até em torno de 40 Hertz quando inicia-se o estabelecimento do decaimento da zona inercial com inclinação $-5/3$.

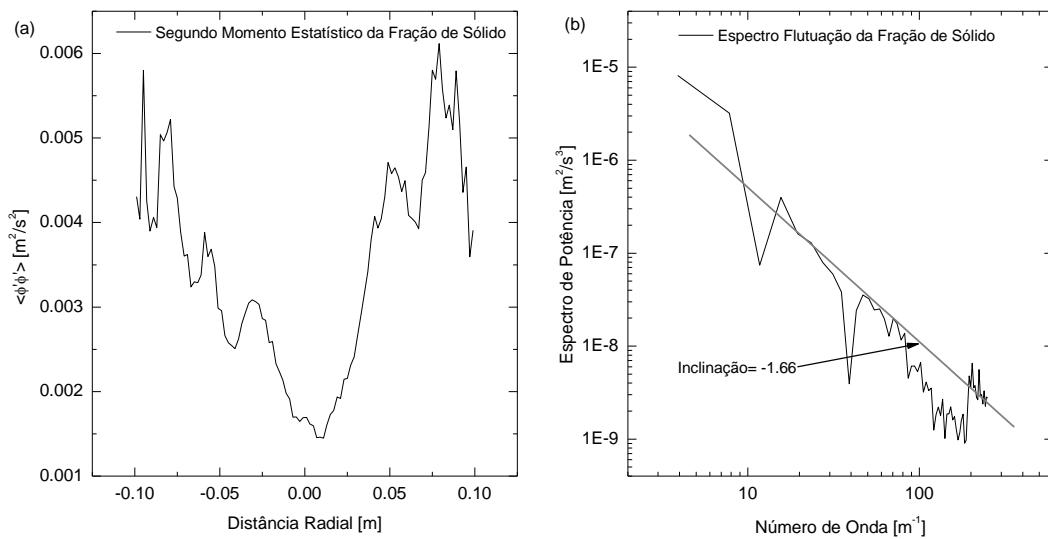


Figura 127. (a) Variação radial do segundo momento estatístico para fração de sólido em 1 metro da entrada do reator; (b) Espectro da energia flutuação fração de sólido em função do número de onda, a 1 metro da entrada do reator, Caso 2.

O decaimento com inclinação $-5/3$ do espectro da flutuação da fração de sólido não é comum em leitos fluidizados, como mostra van Wachem (2000). A inclinação para leitos fluidizados neste caso encontra-se na faixa de -2 a -5 ; contudo, segundo van Wachem (2000) a explicação para este comportamento não está estabelecida. De fato, van Wachem (2000) mostra que a passagem de uma bolha emite uma onda triangular assemelhando-se a flutuação da pressão em um leito fluidizado, que é função da fração de sólidos.

A Figura 128 apresenta a variação temporal para a velocidade do gás no centro e na parede do reator. As diferenças em relação a velocidade do sólido praticamente inexistem na parede, sendo virtualmente semelhantes nesta região. Na região central a velocidade de sólido é inferior a do gás, evidenciando uma diferença de velocidade pequena. Ou seja, o sólido é carregado pelo gás, não havendo praticamente nenhuma diferença entre suas velocidades, gerando uma relação de forças na interface gás/sólido pequena.

Este é um resultado típico associado a um escoamento do tipo Stokes onde o coeficiente de arraste pode ser descrito pela relação $24/\text{Re}_p$, mostrando que a análise de ordem de grandeza realizada anteriormente prevê corretamente o comportamento fluidodinâmico. O valor médio da velocidade do gás no centro é de 2,28 m/s, contra 2,17 m/s para a velocidade do sólido na mesma região. A diferença das velocidades médias é de 0,11 m/s, menor que a velocidade terminal para este caso que é de 0,21 m/s.

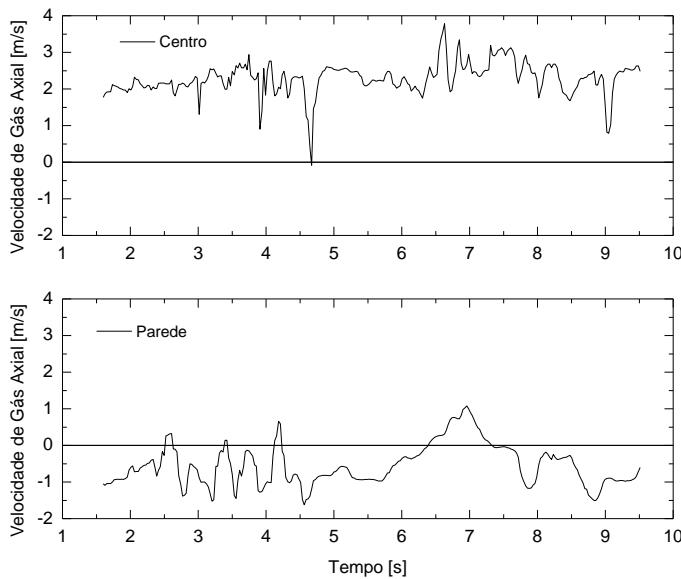


Figura 128 Variação temporal da velocidade axial do gás, no centro e na parede, Caso 2.

O espectro de potência para a velocidade do gás, apresentado na Figura 129, é muito semelhante ao apresentado para a velocidade do sólido (Figura 123(a)) e já discutido anteriormente. A Figura 129 (a) apresenta o espectro da velocidade do gás na região da parede e central, onde é possível observar que há maior energia no centro quando comparado a região da parede para a região de baixas freqüências (grandes escalas). Este comportamento mantém-se na região inercial com decaimento de $-5/3$. Um comportamento diferente observa-se para o espectro da flutuação da velocidade do gás (Figura 129 (b)); observa-se que o espectro de flutuação da velocidade do gás na parede tem maior energia junto a parede, a baixas freqüências, indicando um aumento da energia turbulenta nesta região. Na região inercial ocorre o oposto, com uma maior dissipação da energia na região da parede, comportamento diferente do observado na Figura 104 (b), onde o espectro para a região central tem sempre maior energia quando comparado a região da parede.

A Figura 129 (b) ainda evidencia para a região junto a parede um pico de energia em torno de 0,3 Hertz, com a presença de estruturas coerentes nas grandes escalas, provavelmente associada a presença de aglomerados de partículas. Em 0,2 Hertz observa-se na mesma figura um pico de energia para a região central, também associada à presença de estruturas coerentes mas agora associada provavelmente a formação e destruição de bolhas de gás.

A Figura 130 (a) apresenta comparação da energia cinética turbulenta para a fase gás e sólido no plano central a 1 metro da entrada do reator. Observa-se que a fase sólido tem menor energia na região central e intermediária à parede. Na região junto a parede a energia

cinética turbulenta é da mesma ordem de grandeza e maior que a presente na região central para ambas as fases.

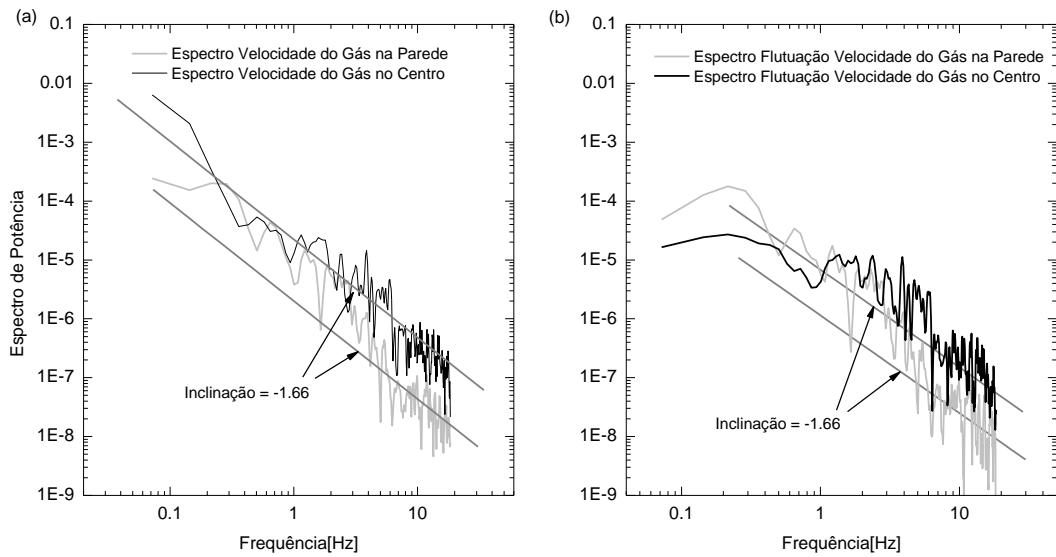


Figura 129. (a) Espectro da velocidade do gás no centro e na parede e (b) espectro da flutuação da velocidade do gás na parede e no centro, Caso 2.

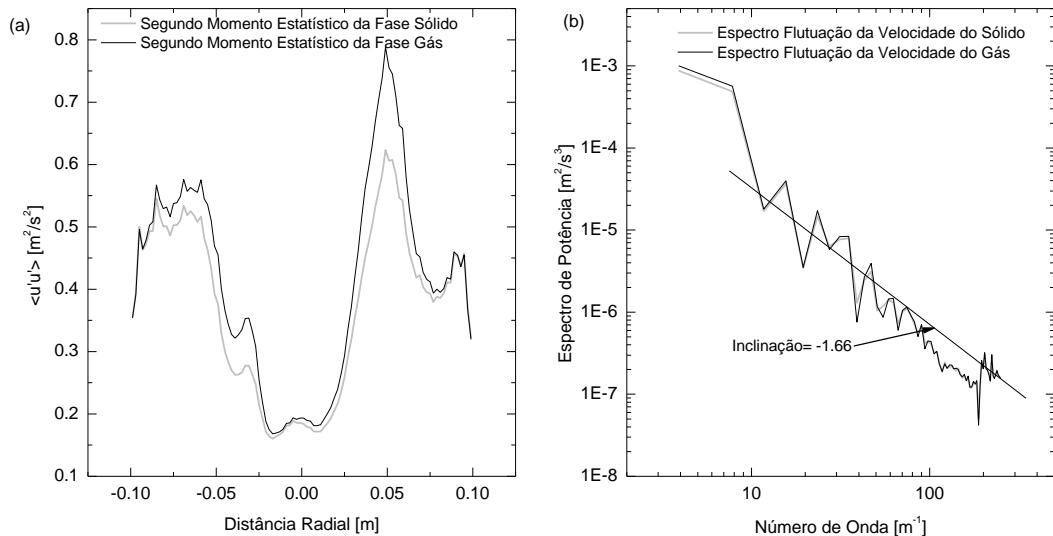


Figura 130. (a) Variação radial do segundo momento estatístico para a fase sólido e gás em 1 metro da entrada do reator; (b) Espectro de energia da flutuação da velocidade do sólido e do gás em função do número de onda, a 1 metro da entrada do reator, Caso 2.

No espectro de energia apresentado na Figura 130 (b) observa-se que para as grandes escalas há maior energia na fase gás do que na fase sólido até em torno de 10 Hertz. A partir de 10 observa-se a formação de estruturas coerentes que mantêm-se até em torno de 40 Hertz, quando inicia-se o decaimento da energia com inclinação -5/3. O espectro da fase sólido e da fase gás são semelhantes, evidenciando velocidades muito semelhantes.

Pode-se concluir para este estudo de caso, que a energia total (Figura 1123 (a) e 127 (a)) é maior no centro do reator quando comparado a região da parede, contudo, a intensidade da turbulência é modificada devido a presença de aglomerados junto a parede, gerando turbulência nas grandes escalas, e aumentando a dissipação nas pequenas escalas (Ver Figura 130 (b)) a partir de 20 Hertz, evidenciando um fenômeno de baixa freqüência. De acordo com os resultados apresentados para este estudo de caso, onde observou-se a tendência de decaimento da energia com inclinação -5/3 para todos os resultados apresentados, parece não haver evidência de cascata inversa de energia.

Deve-se ter presente que a resolução da malha computacional utilizada é maior que as menores escalas da turbulência, como mencionado anteriormente, impossibilitando uma análise mais detalhada desta região. Por isto, não é possível afirmar categoricamente que não há cascata inversa, apenas é possível afirmar que o espectro segue uma tendência de decaimento da energia prevista por Kolmogorov, com inclinação de -5/3.

Caso 3

A seguir serão apresentados os resultados para o Caso 3, onde a geometria é de base cilíndrica com o diâmetro de partículas $120 \mu\text{m}$ e $\rho_s=2400 \text{ kg/m}^3$, com a malha grosseira. A Figura 131 apresenta a variação temporal da velocidade do sólido a 1 metro de distância da entrada do reator, com valores para região central e a região junto a parede. Como nos resultados apresentados para o Caso 2, a região central apresenta freqüências maiores quando comparado aos resultados junto a parede do reator.

Os resultados da Figura 131 revelam que as velocidades na região da parede são em sua maioria negativas, indicando descida de sólidos pela mesma, com velocidade média de 1,44 m/s e desvio padrão de 0,83, superior ao valor médio do Caso 2 anterior. A velocidade média das partículas na região central é positiva com o valor de 1,97 m/s, com desvio padrão de 1,27.

Cabe ressaltar que este estudo de caso tem partículas mais densas que o Caso 2, assim como diâmetro de partícula maior, resultando assim em uma velocidade média junto a parede maior, e velocidade média na região central menor que o Caso 2. O pico na velocidade de sólido na região central dá-se em 8,2 segundos, talvez associado a presença de *clusters*

próximos a esta região, o que poderá ser evidenciado na apresentação dos resultados temporais para fração de sólido.

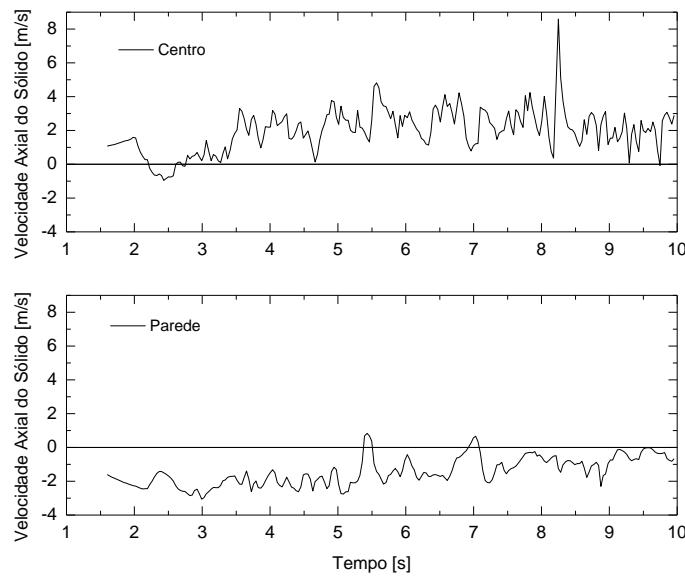


Figura 131. Variação Temporal da velocidade axial do sólido, no centro e na parede, Caso 3.

A Figura 132 apresenta o espectro da energia total para velocidade do sólido no centro e parede (Figura 132 (a)) e o espectro de energia para flutuação da velocidade do sólido no centro e parede (Figura 132 (b)). A Figura 132 (a), mostra que a energia total é maior no centro do reator do que na parede, e a dissipação na parede é maior para freqüências maiores. Ambos os espectros mostram a zona inercial com tendência a um decaimento com inclinação $-5/3$. O espectro para a flutuação da velocidade do sólido, Figura 132 (b), mostra a mesma tendência, com energia maior no centro e maior dissipação junto a parede para altas freqüências. O início da zona inercial, com decaimento $-5/3$ encontra-se em torno de 2 para ambas Figuras.

Em torno de 0,5 observa-se que o espectro de energia da flutuação da velocidade do sólido na região da parede (Figura 132 (b)) sofre um aumento de energia até em torno de 1 Hertz, quando decai e novamente aumenta até 2 Hertz, quando então inicia-se o decaimento definitivo.

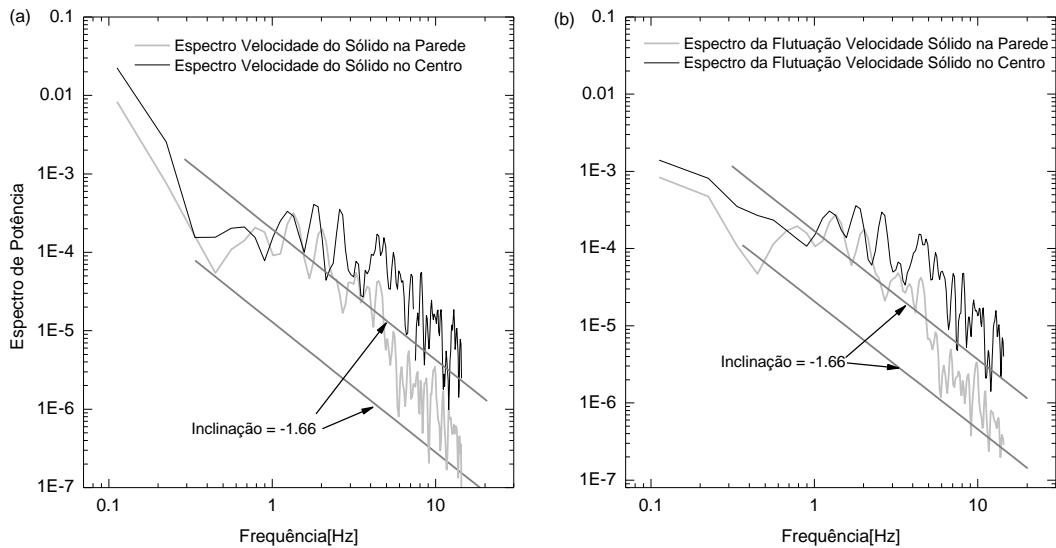


Figura 132. (a) Espectro de potencia para velocidade do sólido e (b) espectro da flutuação da velocidade do sólido na região da parede e central, Caso 3.

Na Figura 131, observa-se que há um aumento substancial da velocidade axial do sólido junto a parede, alcançando valor positivo em torno de 5,5 segundos. Este aumento da velocidade de sólido pode ter sido gerado pela destruição de um *cluster* nesta região. Este fenômeno pode ser visto como responsável por aumentar a flutuação local. Se olharmos para um *cluster* do ponto de vista da entropia, pode-se afirmar que este é uma estrutura coerente altamente organizada e por este motivo uma estrutura de baixa entropia. Quando esta estrutura de baixa entropia é destruída, a entropia daquele local aumenta. Uma discussão a respeito deste evento será realizada mais a frente, quando da apresentação dos resultados instantâneos para fração de sólido nesta região. De qualquer forma o evento ocorre a relativamente baixas freqüências, aumentando a energia local das grandes escalas da turbulência.

A Figura 133 (a) apresenta a variação da intensidade turbulenta em função da distância radial a 1 metro de distância da entrada do reator. Observa-se que há maior energia na região central e intermediária do que na região junto a parede, onde o perfil decresce substancialmente, diferente do comportamento para o Caso 2. A Figura 133 (b) apresenta o espectro da velocidade do sólido em função do número de onda, onde é possível observar o início da zona inercial em torno de 30 Hertz. O pico presente a 20 Hertz está associado a estruturas coerentes. Observa-se que a região inercial tem decaimento com inclinação $-5/3$.

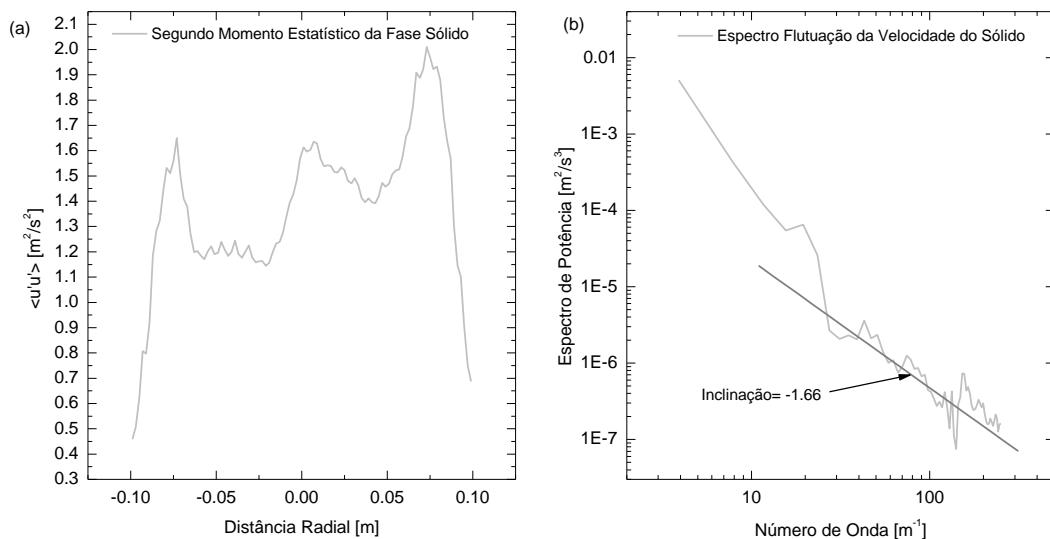


Figura 133. (a) Variação radial do segundo momento estatístico para fração de sólido em 1 metro da entrada do reator; (b) Espectro da energia flutuação fração de sólido em função do número de onda, a 1 metro da entrada do reator, Caso 3.

A variação temporal da fração de sólidos na região junto a parede e central é apresentada na Figura 134. Observam-se freqüências maiores na região central do que na parede. A fração de sólidos média para a região central é de 0,21 e na parede de 0,52.

Em 8,18 segundos observa-se na região central um pico de fração de sólido com valor de 0,4, e logo após em 8,20 segundos uma queda acentuada para 0,02, exatamente no mesmo tempo onde há um pico da velocidade de sólido (Ver Figura 131 na região central). De fato o pico dá-se pela formação de um *cluster* no tempo de 8,18 segundos, e sua destruição em 8,20 segundos. Os eventos junto a parede tem uma freqüência menor, com uma fração de sólido média maior que na região central. Os aglomerados na região da parede tem um tempo de vida maior que os presentes na região central.

A partir de 5 segundos a fração de sólidos mantém-se com um valor médio de 0,6 (região da parede), valor muito próximo ao máximo de compactação, caracterizando assim *clusters* persistentes, não observados com este valor, nos resultados do Caso 2.

A variação temporal para fração de sólido na região da parede revela o evento mencionado anteriormente, onde observa-se realmente que em 5,5 segundos há um decréscimo brusco da fração de sólido. A fração de sólido sai de um valor próximo ao empacotamento máximo e chega a um valor de 0,35. Este evento pode ser caracterizado como uma destruição de *cluster*, que logo em seguida é formado, como pode ser observado na

Figura 134 na região da parede. Pode-se pensar também como a passagem, pela “sonda”, de uma estrutura menos densa, com velocidade maior (ascendente), como observado nos resultados para a velocidade de sólido na Figura 112.

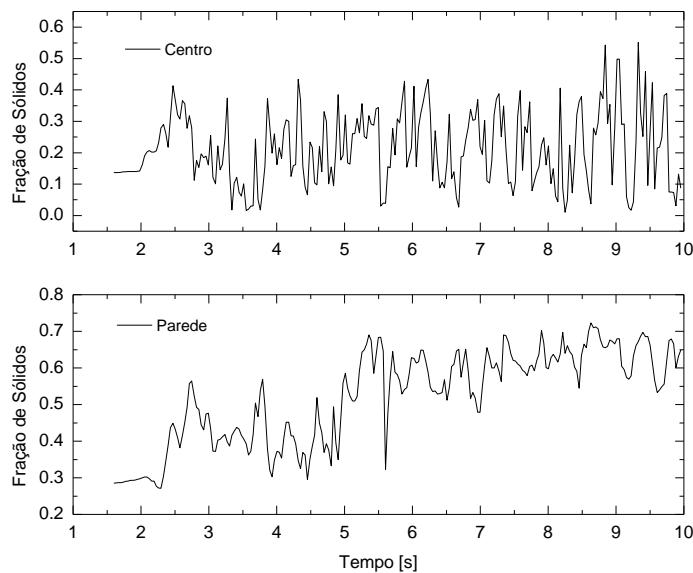


Figura 134. Variação temporal da fração de sólidos, no centro e na parede, Caso 3.

Assim, podemos ver os resultados como pontos de monitoramento, como uma sonda e desta forma, o efeito observado da diminuição da fração de sólido no ponto de monitoramento pode estar associado a passagem de uma estrutura menos densa. O aumento na velocidade dá-se pela quebra do balanço arraste/empuxo, produzido pela diminuição da fração de sólido local, carregando as partículas para cima.

Importante ressaltar que na Figura 131 observa-se a ocorrência de apenas dois eventos onde a velocidade do sólido é positiva; um dá-se a 5,5 segundos e o outro a 7 segundos. Na maioria do tempo o sólido está descendo próximo a parede. Quando a velocidade do sólido é nula, há um balanço de forças e desta forma o *cluster* está parado. As únicas formas deste movimentar-se, para baixo ou para cima, é um desbalanceamento destas forças ou algum evento associado ao incremento ou diminuição da energia local. Como a fração de sólido diminui (*cluster* se desfazendo), houve um aumento da energia local gerado pelo aumento do arraste em primeira instância e em segunda, pelo aumento da entropia. Como o arraste é um termo dissipativo, em seguida a energia é consumida e levada para as menores escalas, levando novamente à formação de *cluster*, que mais uma vez desce pela parede. Sendo assim,

pode-se conjecturar que esta deva ser uma das razões pelo aumento da intensidade turbulenta (Ver Figura 133) nas grandes escalas, comentado anteriormente.

A Figura 135 apresenta o espectro de potência da fração de sólido na região junto a parede e central. A Figura 135 (a) apresenta o espectro total da energia para fração de sólido, onde é possível observar que há energia maior na região da parede associado as grandes escalas. A zona inércia com decaimento $-5/3$ inicia-se em torno de 1 Hertz para ambas regiões. Este comportamento não foi observado para os resultados do Caso 2, Figura 126 (a). Observa-se que o decaimento das grandes escalas dá-se de forma mais vigorosa para região da parede, indicando a presença de aglomerados nesta região, que aumentam a dissipação para este caso.

A Figura 135 (b) apresenta o espectro de potência para a flutuação da fração de sólido, onde observa-se que a região da parede, na zona associada as grandes escalas decai com maior vigor quando comparado ao resultado para região central. O decaimento da zona inercial, com inclinação $-5/3$, inicia para região da parede em 0,2 Hertz, enquanto para região central em torno de 1 Hertz. A região central tem maior energia quando compara-se com a região parietal, na zona inercial.

A Figura 136 (a) apresenta a variação da energia cinética turbulenta com a distância radial no centro do reator a 1 metro de distância da entrada. Observa-se que a região central tem menor energia que a região intermediária à parede. Na região intermediária observam-se flutuações maiores com características de intermitência, e junto a parede a energia decai substancialmente. A Figura 136 (b) apresenta o espectro de energia das flutuações da fração de sólido a 1 metro de distância da entrada, em função do número de onda. Evidencia-se novamente o decaimento com inclinação $-5/3$ que inicia-se em torno de 20 Hertz.

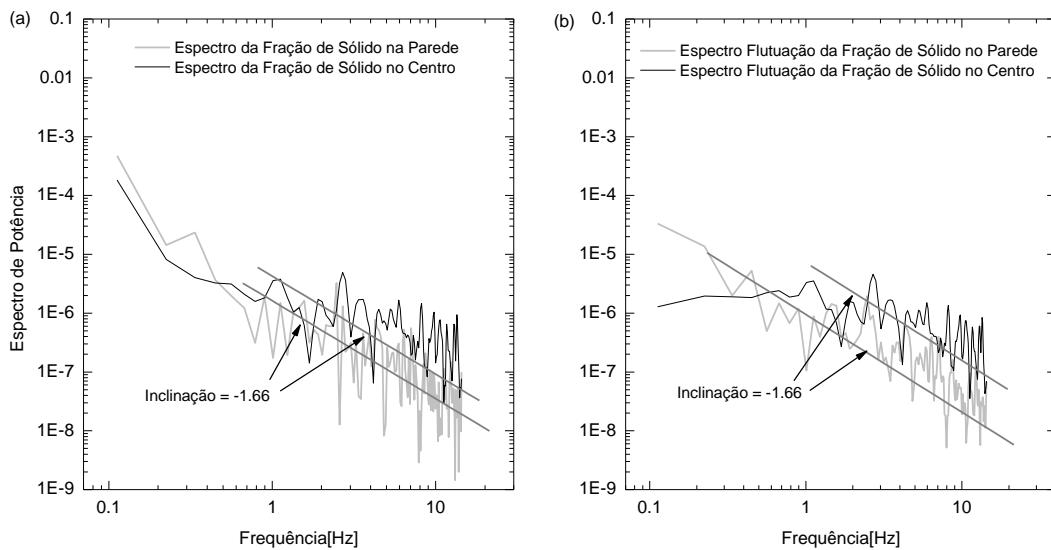


Figura 135. (a) Espectro de potência para fração de sólido na região da parede e central e (b) Espectro de potência para flutuação da fração de sólido na parede e centro, Caso 3.

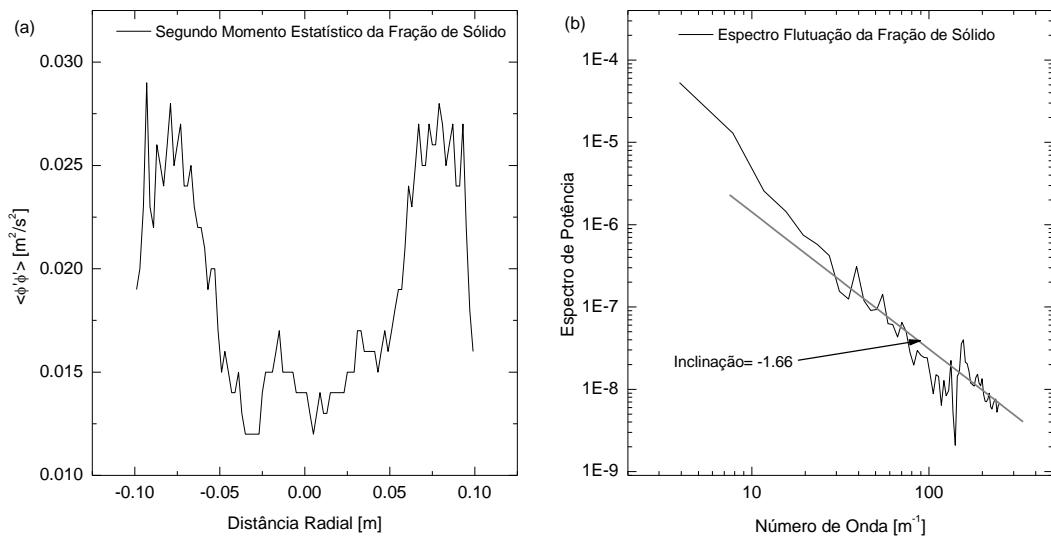


Figura 136. (a) Variação radial do segundo momento estatístico para fração de sólido em 1 metro da entrada do reator; (b) Espectro da energia flutuação fração de sólido em função do número de onda, a 1 metro da entrada do reator, Caso 3.

A Figura 137 apresenta a variação temporal para a velocidade do gás no centro e na parede do reator. Observam-se freqüências maiores no centro do que na parede. O evento que ocorre em 5,5 segundos para a velocidade do sólido junto a parede citado anteriormente,

ocorre em 5,43 segundos para o gás. Observa-se que a velocidade do gás na parede em sua grande maioria é negativa.

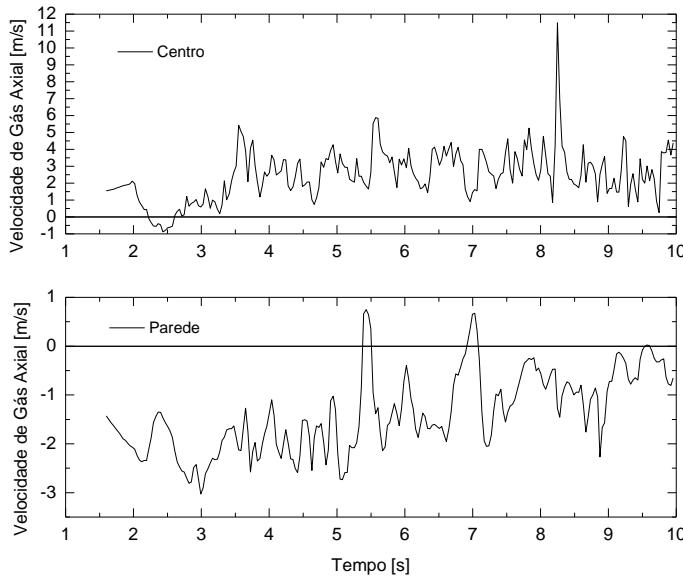


Figura 137. Variação temporal da velocidade axial do gás, no centro e na parede, Caso 3.

A Figura 138 apresenta o espectro da energia total e da flutuação da velocidade da fase gás. Observa-se um nítido aumento na energia total da velocidade do gás na parede que inicia-se em torno de 0,5 Hertz com um pico em torno de 0,9 Hertz e outro 1,4 Hertz. Após estes picos a energia decresce com inclinação $-5/3$, em ambas as regiões (Ver Figura 138 (a)).

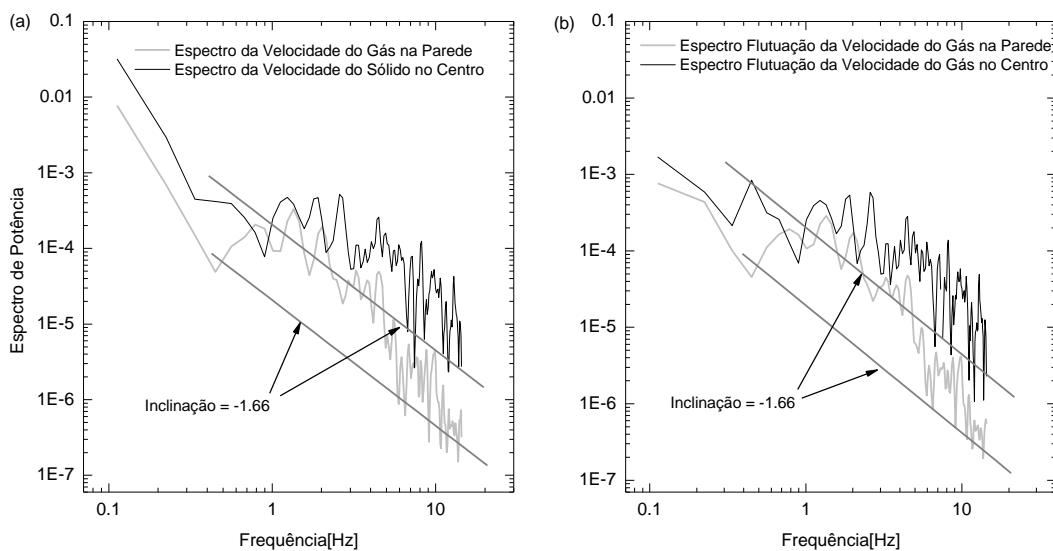


Figura 138. (a) Espectro de potência para velocidade do gás na região da parede e central e (b) Espectro de potência para flutuação da velocidade do gás na parede e centro, Caso 3.

Na Figura 138 (a) observa-se que há maior energia na região central do que na parede para toda faixa de freqüências, o mesmo ocorrendo para o espectro da flutuação da velocidade do gás, Figura 138 (b). A exceção dá-se justamente próxima a região onde ocorreu o evento mencionado anteriormente.

Ainda na Figura 138 (b) observa-se um pico no espectro de energia para o gás na região central em torno de 0,5 Hertz com subsequente decaimento e novamente a formação de outros três picos em 2, 3 e 4 Hertz, característico de estruturas coerentes formando-se e destruindo-se na grande escala.

A Figura 139 (a) apresenta a variação do segundo momento estatístico com a distância radial para a fase gás e sólido. Evidencia-se que a fase gás tem maior energia cinética turbulenta em toda a região apresentada na figura, com rápido decaimento junto a parede, onde o perfil se assemelha ao da fase sólido. O espectro de energia apresentado na Figura 139 (b) mostra o espectro da flutuação da velocidade do gás e do sólido como função do número de onda. Observa-se que a zona inercial em torno de 30 Hertz. A fase sólido tem menor energia que a fase gás na região associada às grandes escalas (baixas freqüências). Na zona inercial os espectros são semelhantes.

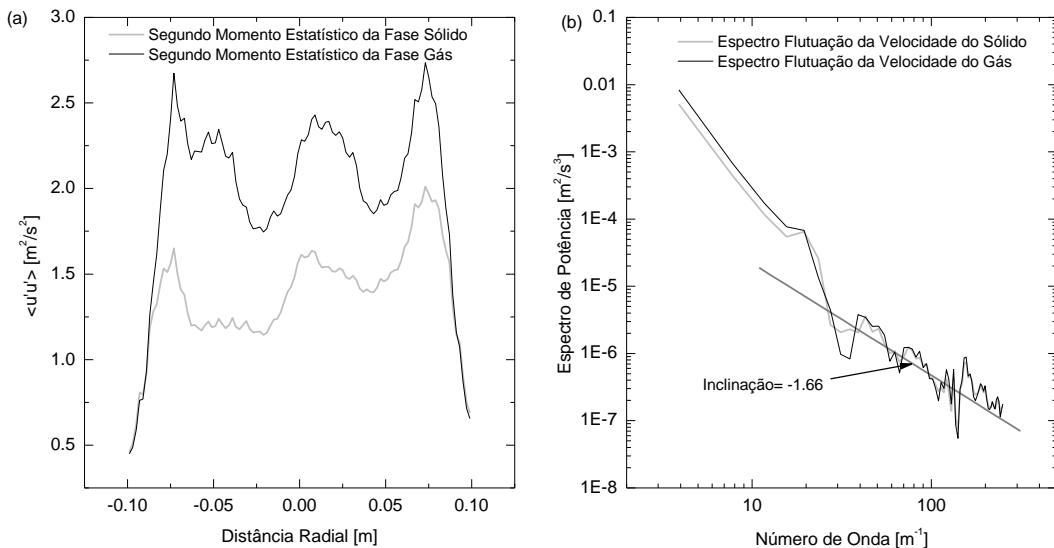


Figura 139. (a) Variação radial do segundo momento estatístico para a fase sólido e gás a 1 metro da entrada do reator; (b) Espectro de energia da flutuação da velocidade do sólido e do gás em função do número de onda, a 1 metro da entrada do reator, Caso 3.

A presença de *clusters* junto a parede, leva ao comportamento observado na Figura 139, onde há um aumento na intensidade turbulenta nas grandes escalas e uma maior

dissipação nas menores escalas. Estas diferenças são maiores para o Caso 3 do que o Caso 2, provavelmente devido à formação mais pronunciada de *clusters* como apresentado na Figura 134.

Pode-se concluir que as diferenças encontradas entre os resultados dos Caso 2 e 3 residem no fato de que no Caso 3 há uma quantidade maior de *clusters* do que no Caso 2 onde as partículas comportam-se mais como um escalar passivo, gerando flutuações de menor ordem do que no Caso 3. Os resultados para o Caso 3 mostram que há modificação da intensidade turbulenta nas grandes escalas e um aumento da dissipação da energia nas menores escalas, ambos fenômenos estão associados a presença de aglomerados de partículas. Este efeito fica claro quando comparam-se os resultados apresentados na Figura 139 com os apresentados na Figura 130. Há contudo, um aspecto importante associado aos resultados do Caso 2, onde observou-se que na região da parede, para as grandes escalas, havia maior energia do que no centro, efeito este não observado para o Caso 3. A energia presente nas grandes escalas para o Caso 2 é de em torno duas ordens de grandeza menor do que para o Caso 3 (Ver Figuras 130 e 139). Ou seja, a intensidade turbulenta é maior para o Caso 3 do que para o Caso 2.

Caso 6

A seguir serão apresentados os resultados para o Caso 6, onde a geometria é de base cilíndrica com o diâmetro de partículas $75 \mu\text{m}$ e $\rho_s=1250 \text{ kg/m}^3$, com a malha refinada. Neste estudo de caso utilizou-se um modelo sub-malha para a fase gás e para a fase sólido como apresentado anteriormente. A Figura 140 apresenta a variação temporal da velocidade do sólido a 1 metro de distância da entrada do reator, com valores para região central e a região junto a parede.

Os resultados apresentados na Figura 140 revelam que o regime pseudo estacionário começa a estabelecer-se em torno de 2 segundos. A velocidade média na região da parede é de $-0,31 \text{ m/s}$, quando para o Caso 2 o valor médio era $-0,58 \text{ m/s}$. Na região central o valor médio é de $1,57 \text{ m/s}$ enquanto para o Caso 2 era de $2,17 \text{ m/s}$. O comportamento em ambas as regiões para o Caso 6 é bastante diferente do apresentado para o Caso 2. A partir de 5 segundos a velocidade na região central mantém-se praticamente constante, o que não ocorreu nos resultados para o Caso 2. As flutuações são pequenas, tanto na parede como no centro.

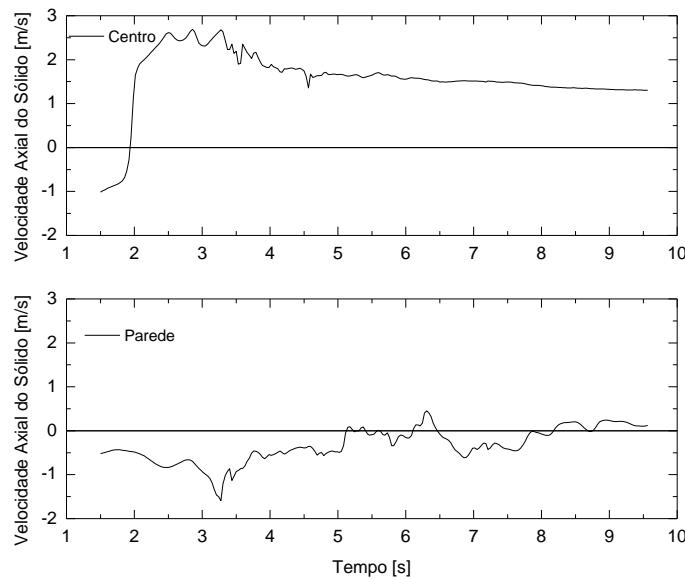


Figura 140. Variação temporal da velocidade axial do sólido, no centro e na parede, Caso 6.

A Figura 141 apresenta o espectro de potência da energia total e da flutuação da velocidade do sólido no centro e na parede. Observa-se na Figura 131 (a) o espectro da energia total para a velocidade do sólido que apresenta-se com maior energia na região central do que na parede para as grandes escalas (baixas freqüências).

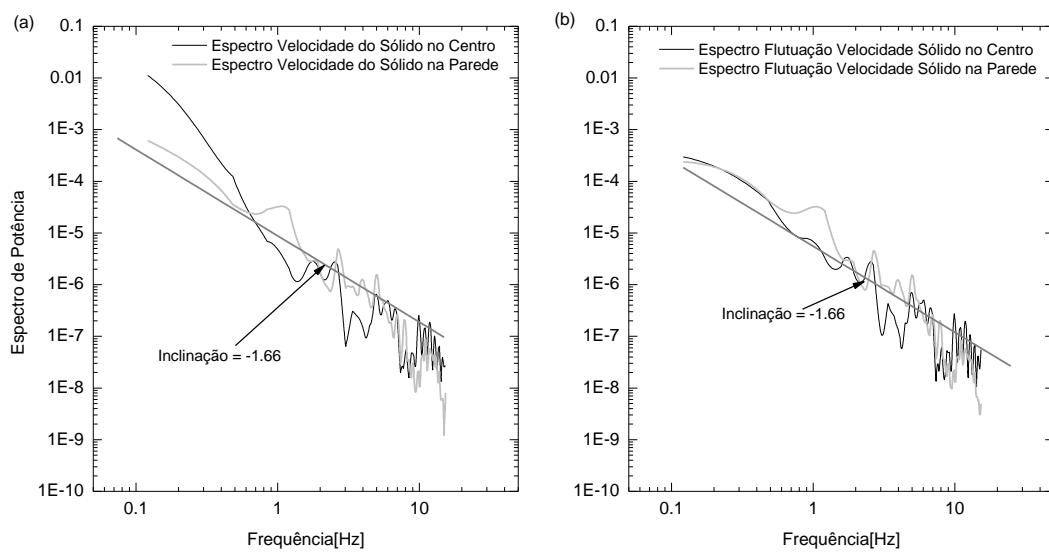


Figura 141. (a) Espectro de potência para a velocidade do sólido e (b) Espectro da flutuação da velocidade do sólido na região da parede e central, Caso 6.

Evidencia-se um aumento da energia na parede em torno de 1 Hertz que em seguida é dissipada com decaimento $-5/3$. Os espectros para o Caso 6 são diferentes dos apresentados para o Caso 2, contudo ambos apresentam a zona inercial com decaimento $-5/3$. O espectro da flutuação da velocidade do sólido na região da parede apresenta um pico de energia em 1,16 Hertz, suplantando a energia na região central. A exceção deste fato, ambos espectros assemelham-se com decaimento $-5/3$. No caso da Figura 141 (b), há diferenças qualitativas com os resultados apresentados para o Caso 2. No Caso 2 a diferença de energia presente nas grandes escalas entre a parede e o centro são maiores do que a diferença para o Caso 6. Outro aspecto importante o fato de que no Caso 2 a dissipação na região da parede é maior que no Caso 6. Considerando que os resultados para o Caso 6 representam de melhor forma a tendência experimental esperada para as propriedades utilizadas, pode-se dizer que a Figura 141 representa melhor a “realidade” física deste tipo de escoamento.

A Figura 142 (a) apresenta a variação do segundo momento estatístico para a fase sólida em função da variação radial. Observa-se que há maior intensidade turbulenta no centro do reator do que na parede, como pode-se observar nos resultados espectrais anteriores. A Figura 142 (b) apresenta o espectro de energia da flutuação da velocidade do sólido em função do número de onda. Observa-se que a zona inercial tem decaimento com inclinação $-5/3$, iniciando-se em torno de 50 Hertz. Observam-se três picos de energia a baixas freqüências, indicando a presença de estruturas coerentes.

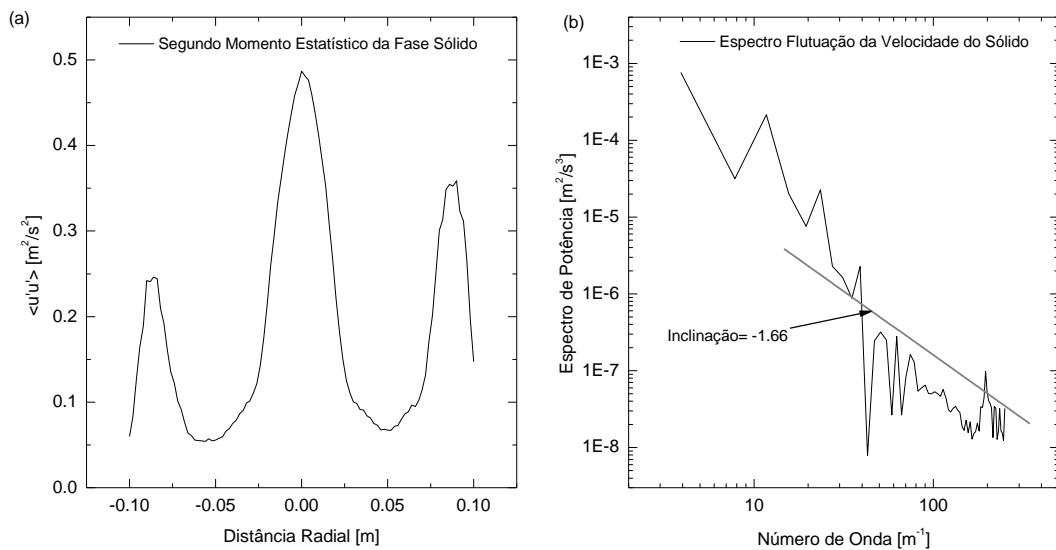


Figura 142. (a) Variação radial do segundo momento estatístico para fração de sólido em 1 metro da entrada do reator; (b) Espectro da energia flutuação fração de sólido em função do número de onda, a 1 metro da entrada do reator, Caso 6.

A Figura 143 apresenta a evolução temporal fração de sólido na região da parede e central. Observa-se um comportamento bastante diferenciado dos resultados para o Caso 2. Na região central as flutuações são de altas freqüências, com pequenas variações ao redor do valor médio da fração de sólido com valor de 0,16 e desvio padrão de 0,029, sendo que para o Caso 2 o valor médio no centro era de 0,18 e o desvio padrão de 0,040. A região da parede encontra-se com uma variação maior caracterizada por baixas freqüências, com valor médio da fração de sólido de 0,24 e desvio padrão de 0,065, enquanto para o Caso 2 o valor médio na parede tem o valor de 0,34 e desvio padrão de 0,062. A Fração de sólido na parede é maior para o Caso 2 do que para o presente Caso 6.

A Figura 143 ainda revela que para região central o regime estacionário fica estabelecido em torno de 2 segundos; contudo, na região da parede as flutuações persistem, com formação e destruição de *clusters*.

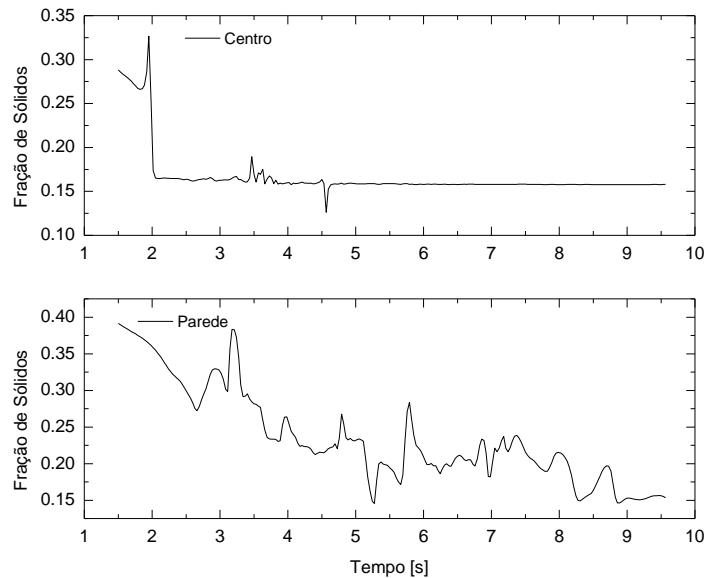


Figura 143. Evolução temporal da fração de sólido, no centro e na parede, Caso 6.

A Figura 144 apresenta os espectros de energia total e da flutuação da fração de sólido no centro e na parede. O espectro de potência da energia total (Figura 144 (a)) mostra que há maior energia na região da parede do que no centro, apenas observa-se uma modificação deste comportamento após 10 Hertz. O espectro da flutuação da fração de sólido (Figura 144 (b)) mantém o mesmo comportamento. Observa-se que há grande flutuação até 10 Hertz evidenciando a formação e destruição de estruturas coerentes, do tipo *clusters* e *strands*. Ambas as figuras apresentam decaimento da energia com inclinação -5/3. O comportamento

na região central apresenta-se com um comportamento associado a altas freqüências, pois o espectro da flutuação da fração de sólidos para esta região inicia o comportamento da zona inercial em torno de 0,6 Hertz enquanto para a região da parede esta zona inicia-se apenas a partir de 10 Hertz.

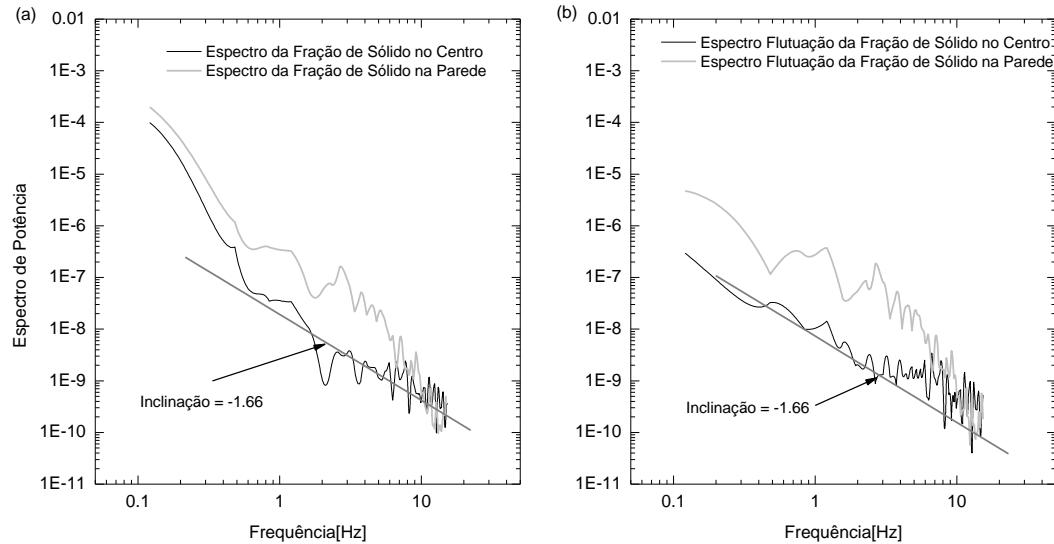


Figura 144. (a) Espectro de potência para fração de sólido na região da parede e central e (b) Espectro de potência para a flutuação da fração de sólido na parede e centro, Caso 6.

A Figura 145 (a) apresenta a variação do segundo momento estatístico da fração sólido em função da variação do raio. Observa-se que há de fato maior energia na região próxima a parede do que na central como evidenciado anteriormente. O espectro de energia da flutuação da fração de sólido (Figura 145 (b)) em função do número de onda apresenta um decaimento com inclinação $-5/3$. Encontram-se três picos de energia, um em torno de 10 Hertz e dois menores após 20 Hertz, quando estabelece-se o decaimento da energia na zona inercial. Os espectros do Caso 2 são substancialmente diferentes do presente Caso 6.

A Figura 146 apresenta a evolução temporal da velocidade axial do gás na região da parede e central. Observa-se que na região central as freqüências são maiores do que na região próxima a parede. A velocidade média na região próxima a parede é negativa e tem o valor de 0,35 m/s com desvio padrão de 0,25. Na região central a velocidade média é 1,56 m/s e o desvio padrão é 0,24. Os resultados para o Caso 2 apresentam velocidade na região central superior ao presente estudo de caso. Observe que a velocidade média axial do gás na região central é a mesma encontrada para a fase sólido, indicando que nesta região o sólido é

carregado pelo gás, gerando uma relação de forças na interface gás/sólido pequena, o mesmo ocorrendo na região próxima á parede.

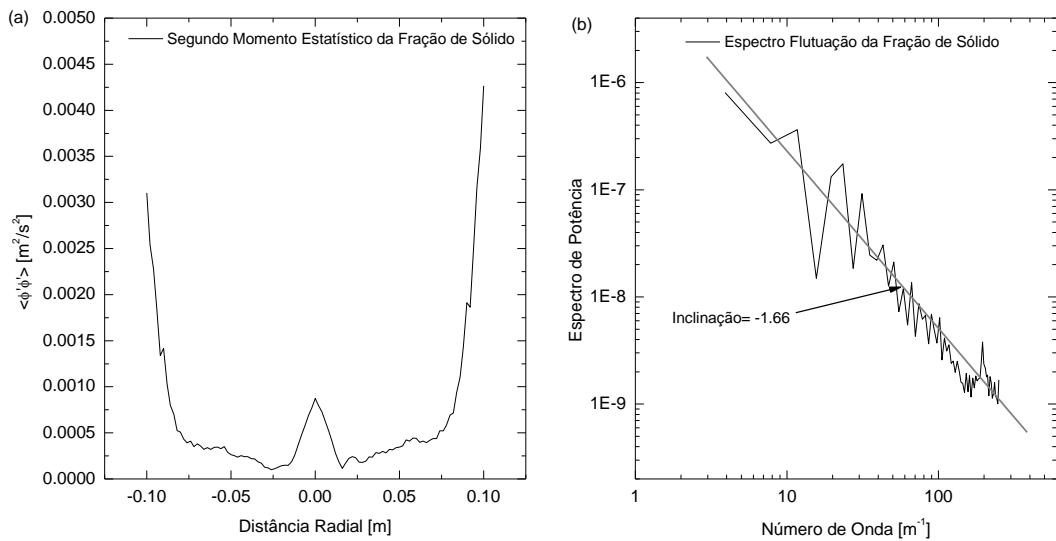


Figura 145. (a) Variação radial do segundo momento estatístico para fração de sólido em 1 metro da entrada do reator; (b) Espectro da energia flutuação fração de sólido em função do número de onda, a 1 metro da entrada do reator, Caso 6.

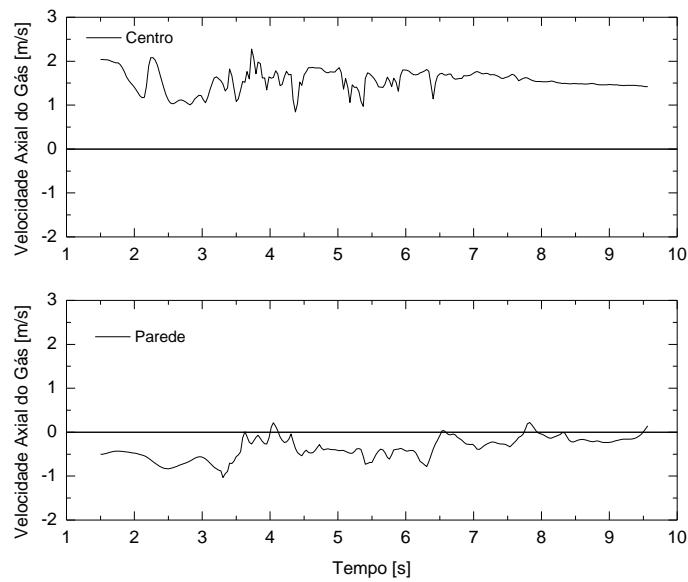


Figura 146. Evolução temporal da velocidade axial do gás, no centro e na parede, Caso 6.

A Figura 147 apresenta o espectro da energia total e da flutuação da velocidade do gás na região próxima à parede e central. Observa-se na Figura 147 (a) o espectro de potência da energia total para a velocidade do gás na região da parede e central, onde evidencia-se que há maior energia nas grandes escalas para a região central do que na parede. A energia cinética turbulenta na região da parede é maior nas grandes escalas do que na região central, como é possível observar na Figura 147 (b). Para ambos gráficos observa-se a região inercial com decaimento $-5/3$. Observa-se em ambos espectros a formação e destruição de estruturas coerentes, inclusive a baixas freqüências. A partir de 10 Hertz o decaimento da energia na região inercial para a parede tem menor energia que no centro, evidenciando uma maior dissipação da energia cinética turbulenta nesta região.

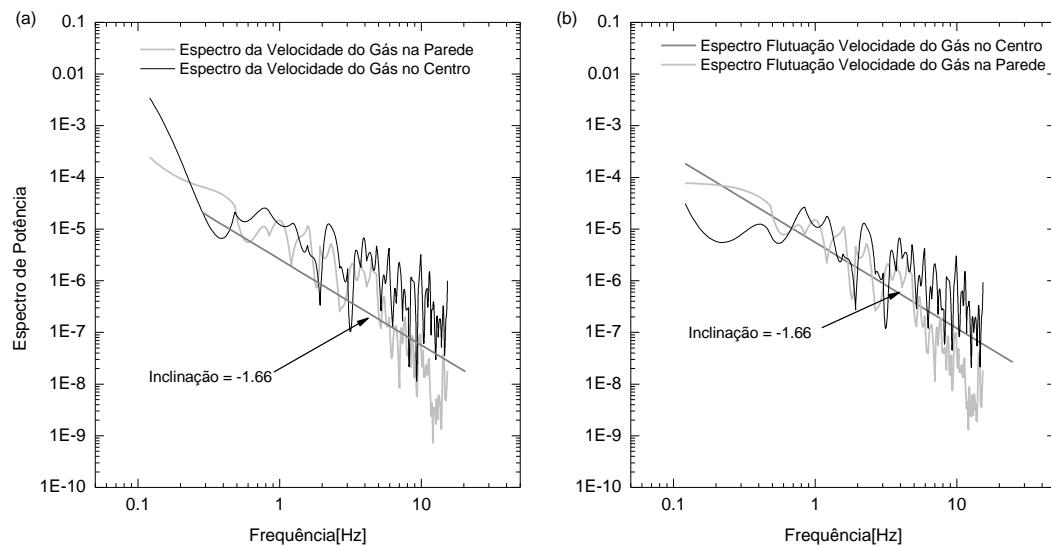


Figura 147. (a) Espectro de potência para a velocidade do gás na região da parede e central; (b) espectro de potência para a flutuação da velocidade do gás na parede e centro, Caso 6.

A Figura 148 (a) apresenta a variação radial do segundo momento estatístico para a velocidade do gás e do sólido a 1 metro da entrada do reator. Observa-se um comportamento diferenciado em relação ao Caso 2, onde a energia cinética turbulenta na região central era mínima. Neste estudo de caso observa-se que a energia cinética turbulenta no centro é maior do que na parede e na região intermediária a parede e centro. A fase gás apresenta maior energia cinética em praticamente toda região de estudo, a exceção da pequena região próxima ao centro.

O espectro de potência para flutuação da velocidade do sólido e do gás em função do número de onda é apresentado na Figura 148 (b). Evidencia-se que a faze sólido tem menor

energia em praticamente toda região do espectro, a exceção dá-se na região de dois picos em torno de 40 Hertz, quando inicia-se o decaimento da energia na zona inercial com inclinação -5/3. Nas grandes escalas (freqüências baixas) observam-se 3 picos de energia associados com estruturas coerentes do tipo bolhas de gás.

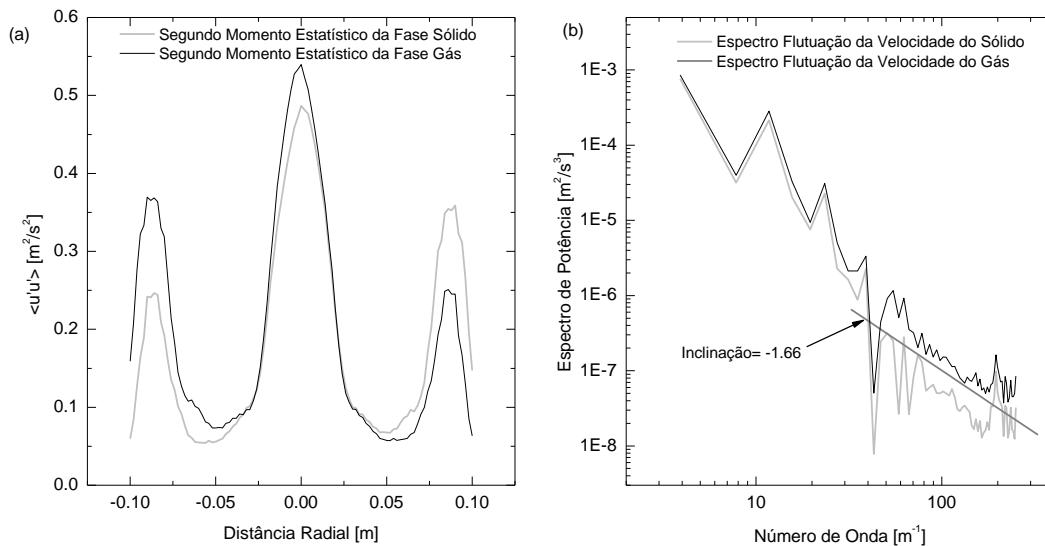


Figura 148. (a) Variação radial do segundo momento estatístico para a fase sólido e gás a 1 metro da entrada do reator; (b) Espectro de energia da flutuação da velocidade do sólido e do gás em função do número de onda, a 1 metro da entrada do reator, Caso 6.

Pode-se concluir através dos resultados apresentados que os resultados espectrais mostram que a energia decai das maiores escalas para as menores com inclinação -5/3, obedecendo a lei de Kolmogorov. Os Espectros em função do número de onda para o Caso 2 não revelam diferenças em relação ao comportamento da fase gás e sólido, oposto ao comportamento para o presente Caso 6 como revelado nos resultados para a Figura 148 (b). Além desta diferença, há ainda as diferenças com a evolução temporal já mencionadas anteriormente para cada um dos casos apresentados até o momento. Deve-se lembrar que os resultados para o presente Caso 6 ajustaram muito bem os resultados médios experimentais na região intermediária e central, com pobre ajuste junto a parede. Observa-se que a estrutura turbulenta é bastante diferenciada para os três casos estudados até o momento. Nos Casos 2 e 6 foram utilizadas partículas do tipo Geldart A enquanto no Caso 3 partículas do tipo Geldart B. O modelo sub-malha para o sólido modifica a estrutura turbulenta (Caso 6) gerando uma menor intermitênciam. Os resultados apresentados para o segundo momento da fase sólido e gás tem comportamento semelhante ao reportado por Ibsen (2002).

Caso 7

A seguir serão apresentados os resultados para o Caso 7 onde a geometria é de base quadrada o diâmetro de partículas $120 \mu\text{m}$ e $\rho_s=2400 \text{ kg/m}^3$, com a malha grosseira. Neste estudo de caso a viscosidade do gás e do sólido foram mantidas constantes. A Figura 149 apresenta a variação temporal da velocidade do sólido a 1 metro de distância da entrada do reator, com valores para região central e a região junto a parede. Observa-se que a evolução temporal da velocidade do sólido apresenta-se com freqüências maiores no centro do que na região próxima a parede. A velocidade média na parede é negativa e tem o valor de $1,09 \text{ m/s}$ enquanto no centro a velocidade é positiva com valor médio $1,95 \text{ m/s}$. A velocidade média encontrada para velocidade do sólido próximo a região da parede é consistente com a velocidade de *clusters* que descem pela parede reportada por Gidaspow (1994), com valor de $1,1 \text{ m/s}$ para partículas Gerdart B. O valor do desvio padrão para a velocidade na parede é de $0,84$ e para o centro é de $1,4$.

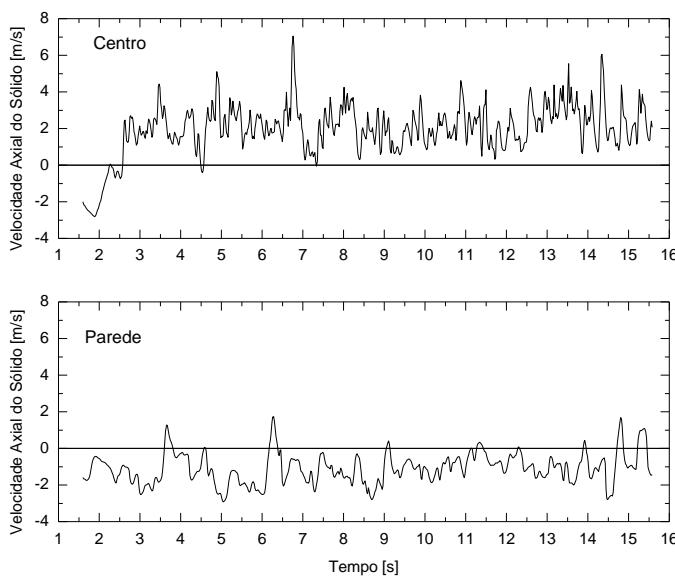


Figura 149. Evolução temporal da velocidade axial do sólido na central e parede, Caso 7.

Cabe ressaltar que os resultados médios apresentados anteriormente para este estudo de caso aproximam-se muito bem aos resultados experimentais junto a parede, contudo não representam adequadamente a região intermediária, com boa aproximação na região central, semelhante aos resultados médios para o Caso 3. A diferença para o Caso 3 e o presente Caso 7 encontra-se apenas na geometria. O valor da velocidade média do sólido para o Caso 3 na região da parede foi de 1,44 m/s com desvio padrão de 0,83, da mesma ordem de grandeza

que o obtido para o Caso 7. No centro as velocidades médias são muito próximas com 1,97 m/s para o Caso 3 e 1,95 m/s para o Caso 7. Esta comparação indica que o efeito da geometria é mais pronunciado na região da parede do que no centro. Os resultados comparados, levam a conclusão que os sólidos descem com maior velocidade na região da parede quando utiliza-se geometria cilíndrica do que para geometria de base quadrada na região estudada. Quando comparam-se os resultados médios para o Caso 3 e 7 observa-se que os perfis médios assemelham-se (Ver Figura 79), e as estruturas de *clusters* e *strands* são encontrados em ambos os casos.

A Figura 150 apresenta os espectros de potência para a velocidade do sólido e para a flutuação da velocidade do sólido no centro e na região próxima a parede. Evidencia-se na Figura 150 (a) que a região central tem maior energia total quando comparada à parede para as grandes escalas. O início da zona inercial com inclinação $-5/3$ encontra-se em torno de 0,4 Hertz para o centro e a 0,2 Hertz para a parede. A Figura 150 (b) apresenta o espectro de potência da flutuação da velocidade do sólido. Observa-se que a energia cinética turbulenta é maior na região central do que na parede. O início da zona inercial dá-se em torno de 0,4 Hertz para a velocidade no centro e em torno de 0,7 Hertz para a região da parede. A partir de em torno de 10 Hertz a inclinação para o espectro da velocidade do sólido na parede é aumentada significativamente indicando maior dissipação de energia cinética turbulenta nesta região.

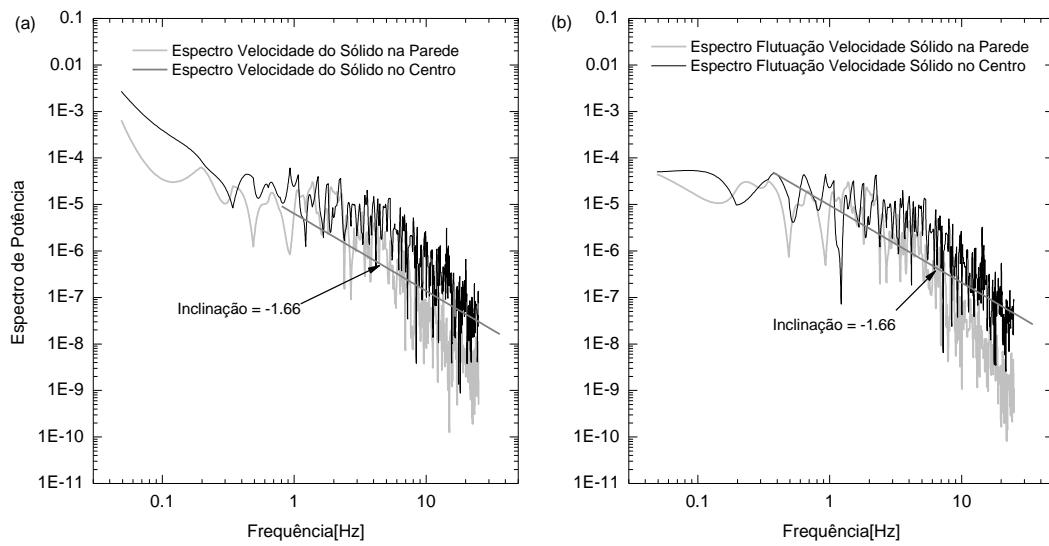


Figura 150. (a) Espectro de potência para a velocidade do sólido; (b) Espectro da flutuação da velocidade do sólido na região da parede e central, Caso 7.

A Figura 151 (a) apresenta a variação radial do segundo momento estatístico para a fase sólido. O comportamento da energia cinética turbulenta é semelhante ao resultado para o Caso 3. Observa-se a presença de regiões com intermitênciam na região central e intermediária, e um decaimento rápido da energia turbulenta junto à parede. Na Figura 151 (b) observa-se o comportamento do espectro de potência da flutuação da velocidade do sólido como função do número de onda. Observa-se a presença de três zonas bem distintas. A primeira inicia-se em baixas freqüências decresce até em torno de 12 Hertz onde a partir deste ponto a inclinação é modificada. A segunda inicia-se em 12 Hertz e decresce até 20 Hertz, e a terceira inicia-se em torno de 30 Hertz, evidenciando a zona inercial com inclinação $-5/3$ que se estende até 250 Hertz. Desta forma a zona inercial é captada por 8 décadas. Ou seja, o refino de malha utilizado para o presente caso é capaz de representar 8 décadas da zona inercial. Levando em conta que o início das menores escalas dá-se quatro décadas a frente da resolução da malha computacional utilizada, pode-se afirmar que a malha é capaz de resolver em torno de $2/3$ da zona inercial. Em torno de 80% da energia encontra-se presente nas grandes escalas; este fato mostra que a malha utilizada resolve as grandes escalas e as médias, sendo que as menores escalas devem ser modeladas via modelo sub-malha.

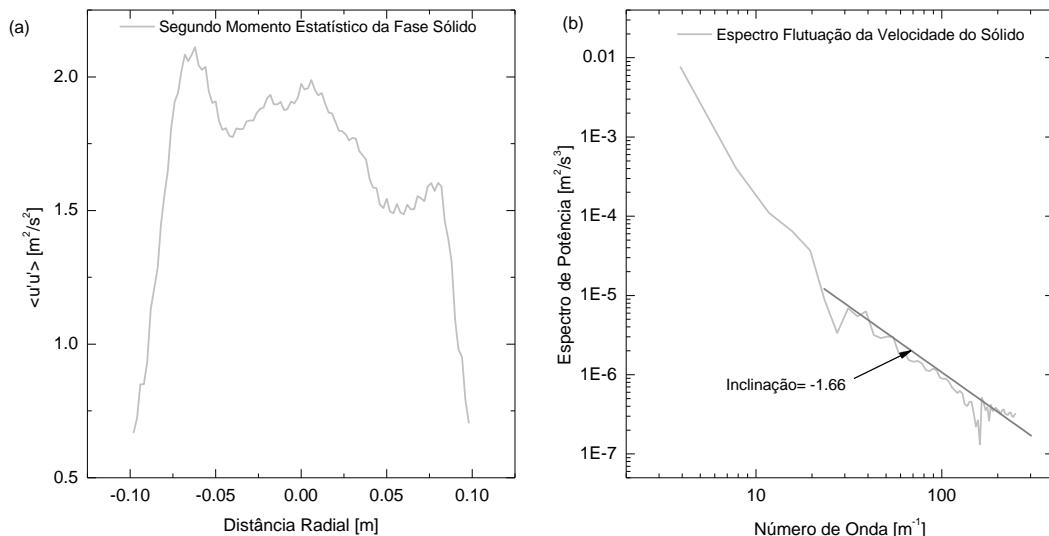


Figura 151. (a) Variação radial do segundo momento estatístico para a fase sólido a 1 metro da entrada do reator; (b) Espectro de energia da flutuação da velocidade do sólido em função do número de onda a 1 metro da entrada do reator, Caso 7.

A Figura 152 apresenta a variação temporal da fração de sólido junto a parede e no centro do reator. Observa-se que as freqüências são maiores no centro do que na parede. Na

região próxima a parede observa-se a formação e destruição de *clusters* com fração média de 0,44 enquanto na região central a fração média é 0,19, substancialmente menor que a encontrada na região próxima à parede. Para o Caso 3 o valor da fração de sólidos média na região central é de 0,21 e na parede de 0,52.

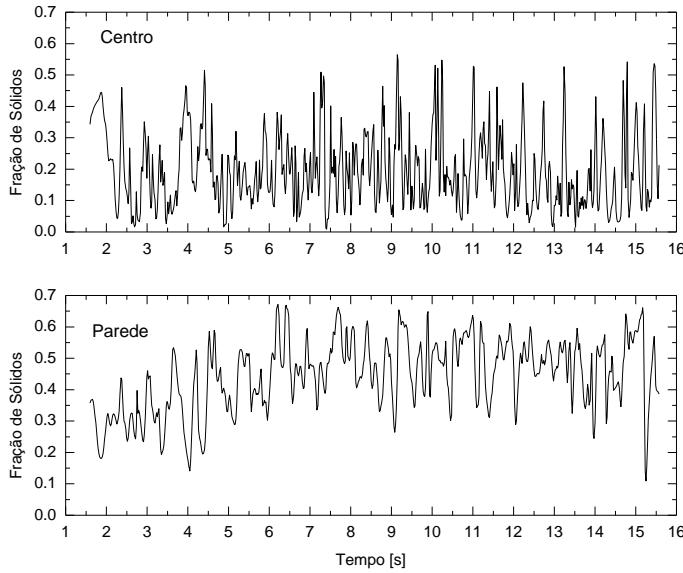


Figura 152. Evolução temporal da fração de sólidos no centro e parede, Caso 7.

O espectro de potência para a fração de sólido na região da parede e central são apresentados na Figura 153 (a) e o espectro para a flutuação da fração de sólido na Figura 154 (b). Observa-se na Figura 153 (a) que a região da parede tem maior energia que no centro para as maiores escalas. A zona inercial inicia em torno de 1 Hertz com inclinação $-5/3$. A partir de 10 Hertz o decaimento de energia na região da parede é modificado. Este aspecto pode ser melhor apreciado nos resultados apresentados na Figura 153 (b). O espectro de flutuação da fração de sólido (Figura 153 (b)) apresenta-se com maior energia turbulenta junto a parede para as maiores escalas do que na região central. Observa-se que a zona inercial com decaimento $-5/3$ inicia-se em 1 Hertz mantendo-se para região central até 25 Hertz. Para a parede, em torno de 10 Hertz inicia-se uma modificação na inclinação com valor de 5,7.

Observa-se na Figura 153 (b) que o comportamento das grandes escalas, para região da parede e central, apresenta a formação de estruturas coerentes de grande amplitude que a partir de 1 Hertz tornam-se menores quando entram na zona inercial. A maior inclinação observada para região da parede evidencia a presença de estruturas que aumentam a dissipação da energia turbulenta.

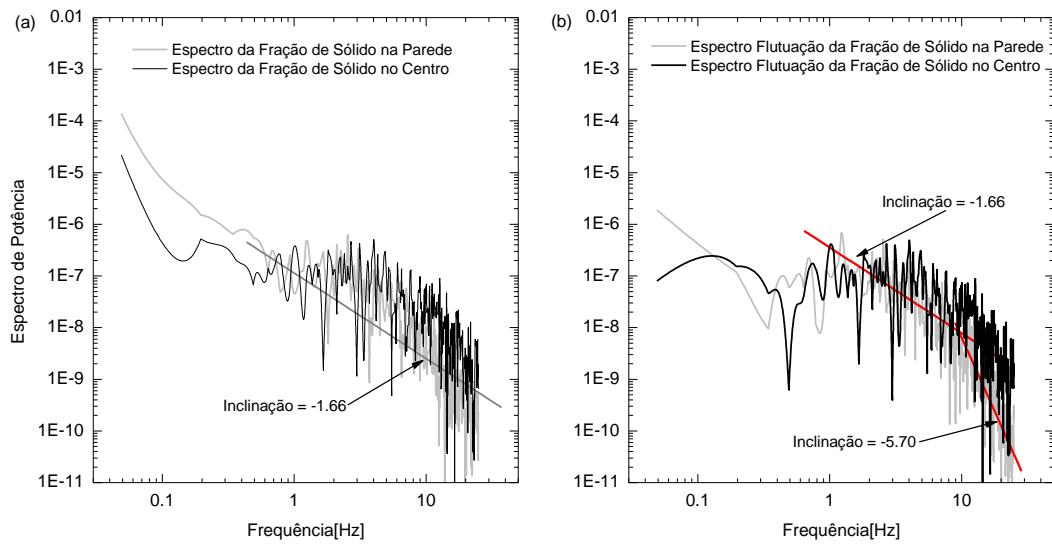


Figura 153. (a) Espectro de potência para fração de sólido na região da parede e central; (b) Espectro de potência para a flutuação da fração de sólido na parede e centro, Caso 7.

A Figura 154 (a) apresenta a variação radial do segundo momento estatístico para a fração de sólido a 1 metro de distância da entrada do reator. Observa-se na região central e intermediária à parede o fenômeno de intermitênciam. A energia cinética turbulenta decai junto a parede e no centro mantém-se com valor minimamente acima da parede. A região central tem menor energia turbulenta do que a região intermediária à parede, efeito observado na Figura 153 (b).

O espectro da flutuação da fração de sólido em função do número de onda (Figura 154 (b)) mostra que em torno de 20 Hertz inicia-se a zona inercial com inclinação $-5/3$. Observa-se que em torno de 100 Hertz a inclinação aumenta para em seguida diminuir mantendo os $-5/3$. Este comportamento foi observado na Figura 153 (b) onde o inclinação aumentou para região da parede a altas freqüências, provavelmente devido ao número de onda máximo que a resolução da malha é capaz de resolver.

A Figura 155 apresenta a evolução temporal para a velocidade do gás junto a parede e no centro do reator. Assim como nos casos apresentados anteriormente a região central apresenta freqüências maiores do que a região da parede com freqüências menores associadas a presença de *clusters*. Em torno de 13,5 segundos observa-se que a velocidade do gás alcança um pico com valor de 10 m/s. Neste mesmo tempo, o gráfico da evolução temporal da

fração de sólido apresenta-se com valor de 0,016 evidenciando a presença de uma bolha de gás ascendendo neste momento.

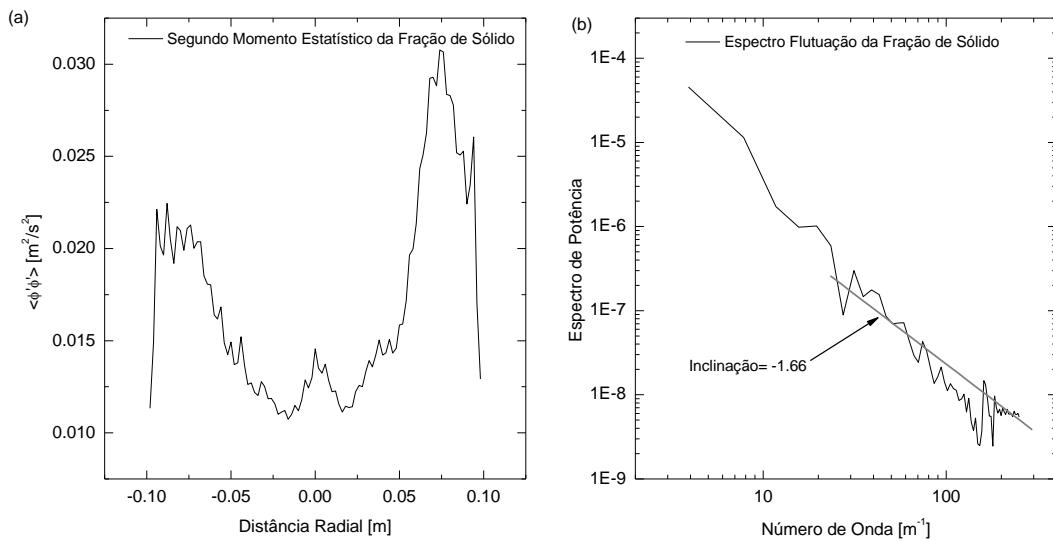


Figura 154. (a) Variação radial do segundo momento estatístico para a fração de sólido a 1 metro da entrada do reator; (b) Espectro de energia da flutuação da fração de sólido em função do número de onda, a 1 metro da entrada do reator, Caso 7.

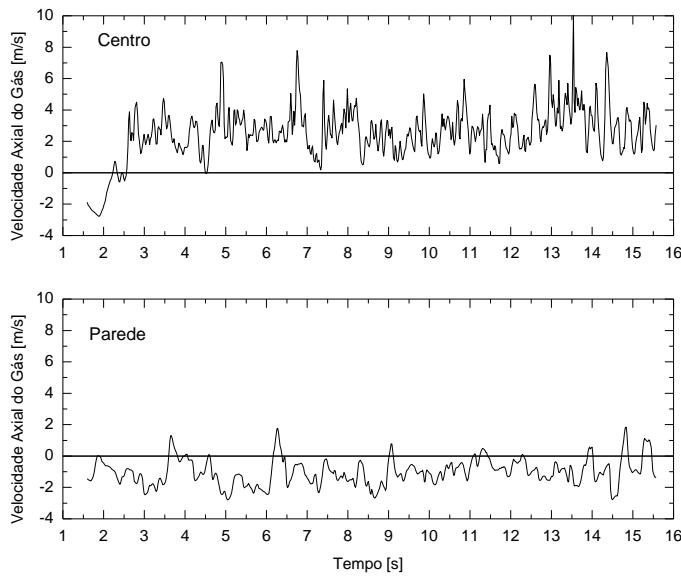


Figura 155. Variação temporal da velocidade axial do gás no centro e parede, Caso 7.

A velocidade média no centro é positiva com valor de 2,49 m/s enquanto que na parede é negativa e tem o valor de 1,01 m/s, velocidade muito próxima à velocidade do sólido na parede.

A Figura 156 (a) apresenta o espectro de potência da velocidade de gás na região central e parede. Observa-se que há mais energia no centro do que na parede que a partir de 1 Hertz inicia o decaimento com inclinação $-5/3$. A partir de 10 Hertz, o espectro para região da parede inicia um decaimento com inclinação maior que a presente na zona inercial. A Figura 156 (b) apresenta o espectro de potência para a flutuação da velocidade do gás. Evidencia-se que a região central tem maior energia nas grandes escalas. A região inercial com inclinação $-5/3$ inicia-se em torno de 1 Hertz. A partir de 10 Hertz a energia turbulenta na parede tem inclinação maior que $-5/3$ evidenciando uma dissipação maior, fenômeno não observado na região central. Provavelmente a dissipação maior deve-se a presença de *clusters* nesta região, que tendo dimensão maior que as menores escalas, aumenta a dissipação de energia.

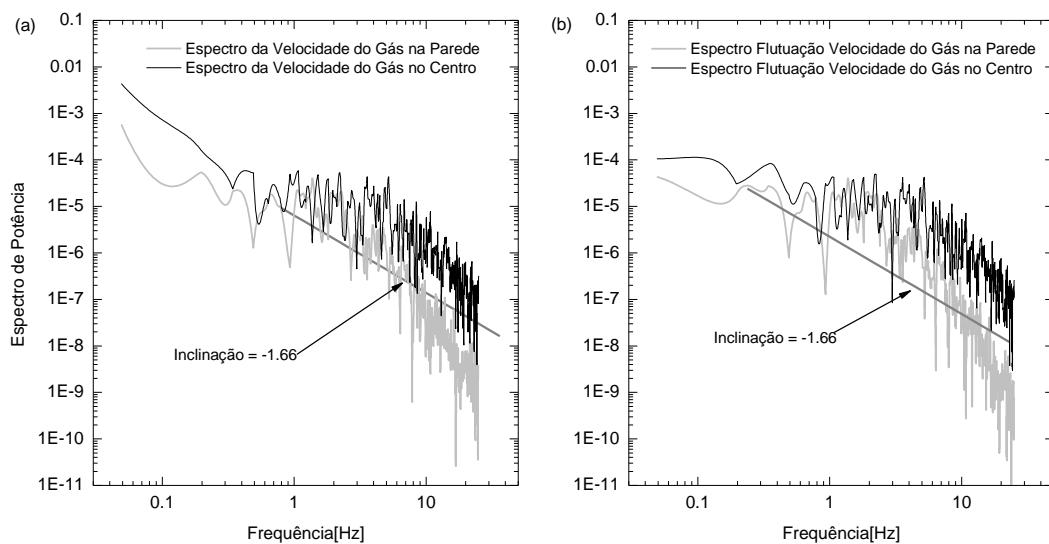


Figura 156. (a) Espectro de potência para velocidade do gás na região da parede e central; (b) Espectro de potência para flutuação da velocidade do gás na parede e centro, Caso 7.

A Figura 157 (a) apresenta a variação radial do segundo momento estatístico para a fase sólido e gás a 1 metro da entrada do reator. É possível observar que a energia cinética turbulenta é maior para fase gás do que para fase sólido, exatamente da mesma forma observada para o comportamento do segundo momento estatístico para o Caso 3. Observa-se ainda a presença de estruturas turbinhóreas intermitentes. A Figura 157 (b) apresenta o espectro da flutuação da velocidade do sólido e do gás a 1 metro de distância da entrada do reator em função do número de onda. Observa-se que o comportamento de ambas as fases é semelhante. A fase gás tem maior energia cinética turbulenta nas grandes escalas. A zona inercial inicia seu decaimento em torno de 30 Hertz para ambas as fases. Observa-se que esta

zona tem inclinação $-5/3$ para ambas as fases. A amplitude das flutuações nesta região é menor que as observadas para os Casos 7,6,3 e 2.

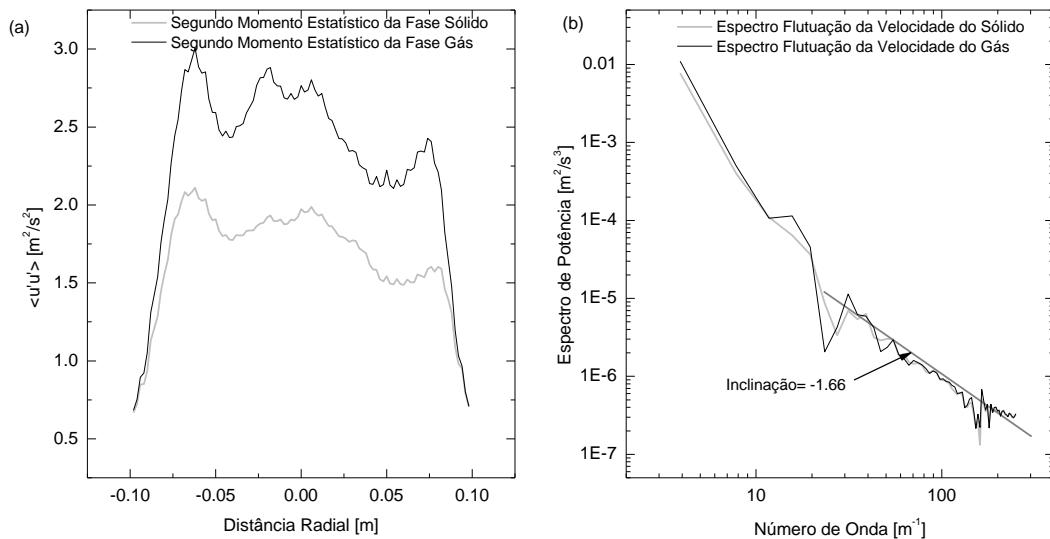


Figura 157. (a) Variação radial do segundo momento estatístico para a fase sólido e gás a 1 metro da entrada do reator; (b) Espectro de energia da flutuação da velocidade do sólido e do gás em função do número de onda a 1 metro da entrada do reator, Caso 7.

Caso 8

A seguir serão apresentados os resultados para o Caso 8 onde a geometria é de base quadrada o diâmetro de partículas $120 \mu\text{m}$ e $\rho_s=2400 \text{ kg/m}^3$, com a malha grosseira. Neste estudo de caso a viscosidade do gás e do sólido são corridas através de modelo sub-malha descrito anteriormente. Como mencionado anteriormente os resultados médios para este estudo de caso aproximam-se de forma excelente tanto na região central como na intermediária à parede e ao centro como na região próxima a parede.

A Figura 158 apresenta a variação temporal da velocidade do sólido a 1 metro de distância da entrada do reator, com valores para região central e a região junto a parede. Observa-se que a região central apresenta-se com freqüências maiores e a região próxima a parede com menores. A velocidade média na parede é negativa com valor de $0,55 \text{ m/s}$ enquanto para o estudo de caso anterior a velocidade média era de $1,09 \text{ m/s}$. O valor médio na região central para o presente caso é de $1,75 \text{ m/s}$, menor que a velocidade para o Caso 7 que era de $1,95 \text{ m/s}$. Tanto a velocidade média no centro como próximo a parede são inferiores ao Caso 7. O valor do desvio padrão para o presente estudo de caso na região da parede é $0,5$

enquanto para o anterior era de 0,84. No centro o valor do desvio padrão é de 0,87 para o presente estudo de caso e 1,4 para o Caso 7. Desta forma pode-se concluir que os resultados para a velocidade de sólido do Caso 8 (que utiliza modelo **LES** para o sólido e gás) tem flutuação menor quando comparado ao Caso 7 onde as viscosidades são mantidas constantes de ambas as fases.

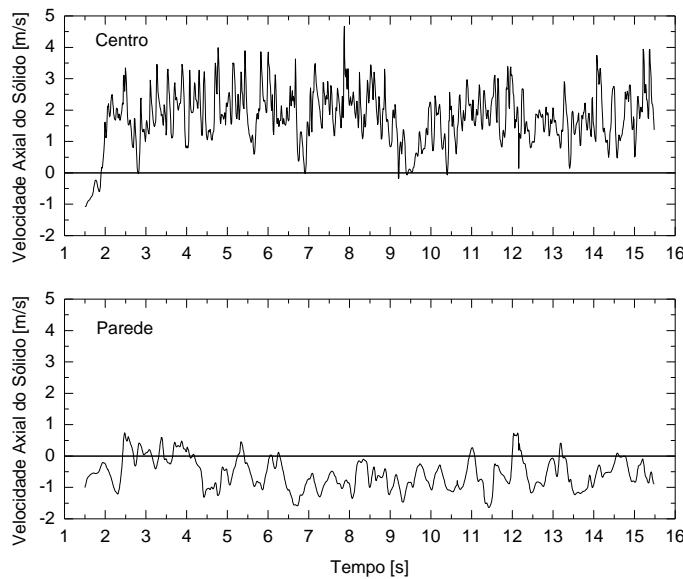


Figura 158. Evolução temporal da velocidade axial do sólido no centro e parede, Caso 8.

A Figura 159 (a) apresenta o espectro da energia total da velocidade do sólido junto a parede e no centro. Esta figura mostra que a região do central tem maior energia associada às grandes escalas. Para região central o início da zona inercial com inclinação $-5/3$ dá-se em torno de 0,45 Hertz e na região da parede em torno de 0,3 Hertz. A região da parede tem dissipação maior que a central a partir de 10 Hertz. O espectro da flutuação da velocidade do sólido (Figura 159 (b)) inicia com menor energia na região central e logo após há dois picos de energia, indicando a presença de estruturas coerentes que modificam a turbulência nesta região. Logo após inicia-se o decaimento da energia cinética turbulenta novamente com inclinação $-5/3$. A região da parede tem maior dissipação de energia a partir de 10 Hertz, quando a inclinação é modificada.

A Figura 160 (a) apresenta a variação radial do segundo momento estatístico para a fase sólido a 1 metro da entrada do reator. A energia cinética turbulenta é maior na região intermediária e central do que na região da parede. Observa-se fenômeno de intermitênciam na região central e intermediária à parede.

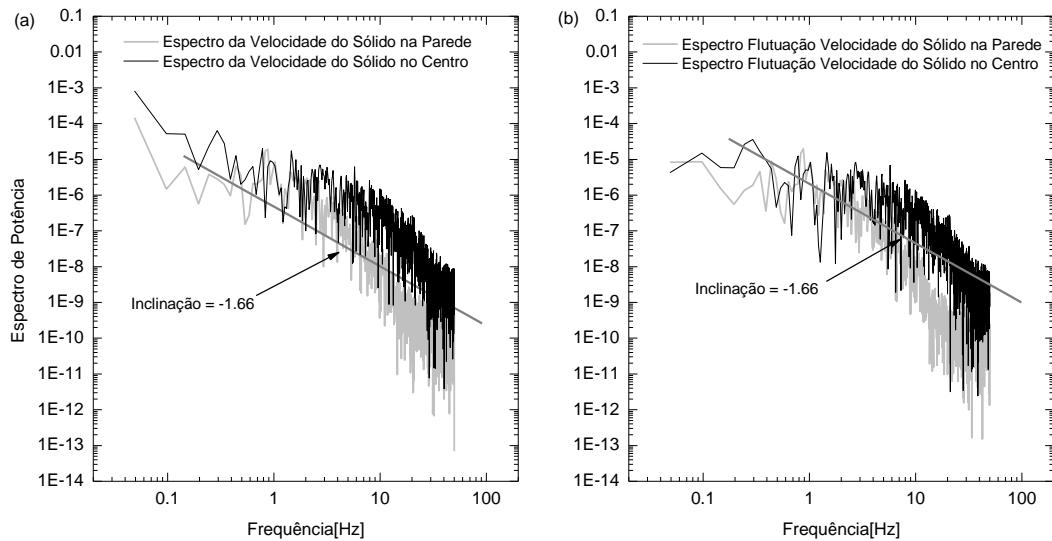


Figura 159. (a) Espectro de potência para velocidade do sólido; (b) Espectro da flutuação da velocidade do sólido na região central e da parede, Caso 8.

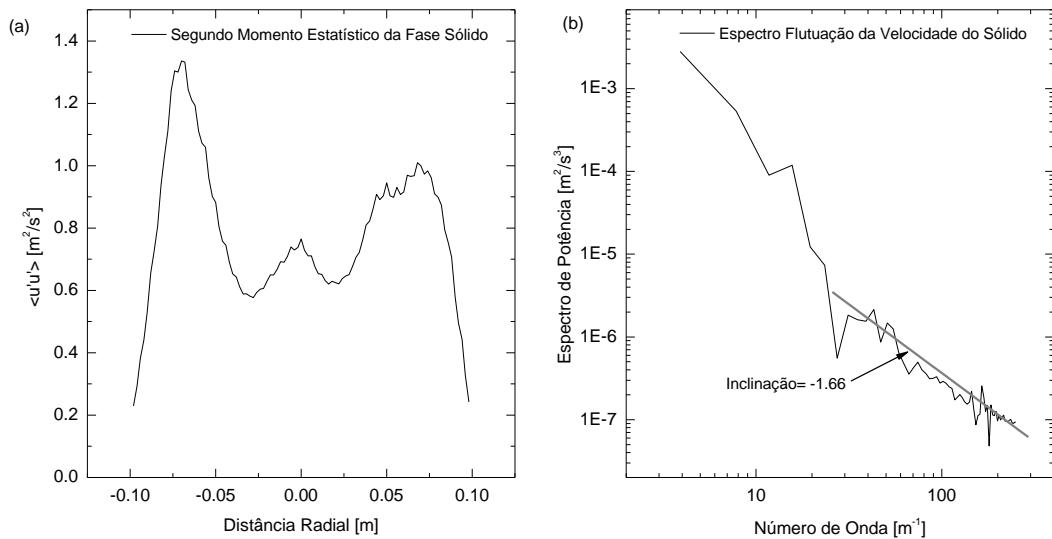


Figura 160. (a) Variação radial do segundo momento estatístico para a fase sólido a 1 metro da entrada do reator; (b) Espectro de energia da flutuação da velocidade do sólido em função do número de onda, a 1 metro da entrada do reator, Caso 8.

A Figura 160 (b) apresenta o espectro da flutuação da velocidade do sólido em função do número de onda a 1 metro da entrada do reator. O início da zona inercial dá-se em torno de

40 Hertz e tem inclinação $-5/3$. Em comparação com o resultado para o Caso 7, as grandes escalas tem menor energia.

A Figura 161 apresenta a evolução temporal para a fração de sólido junto a parede e no centro do reator. A região central apresenta-se com freqüências maiores quando comparada a região da parede. A fração de sólido média na parede é de 0,24 enquanto que no centro é de 0,13. Para o Caso 7 o valor médio da fração de sólido na parede é 0,44 e na região central de 0,19, valores maiores que os resultados para o presente estudo de caso. Nos resultados para o Caso 7 observam-se uma quantidade maior de *clusters* na região da parede e com fração de sólido maior do que no Caso 8. Entretanto os *clusters* para o Caso 8 sobrevivem por um tempo maior na região da parede do que os para o Caso 7.

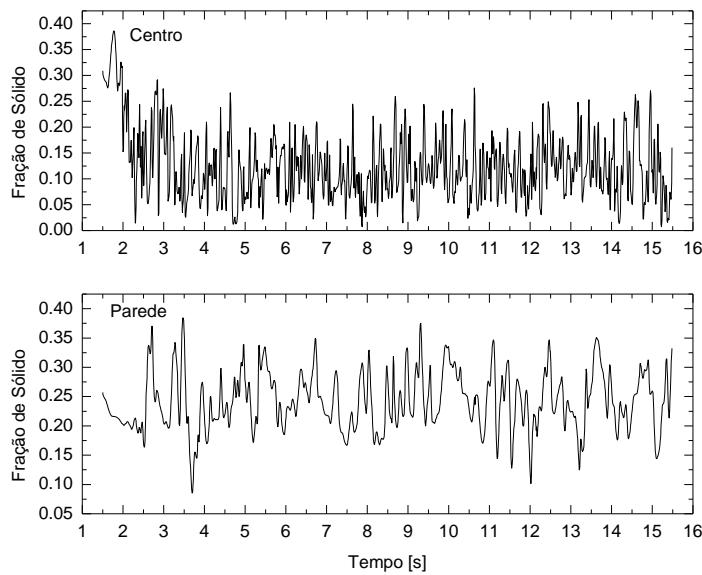


Figura 161. Evolução temporal da fração de sólido junto a parede e no centro, Caso 8.

A Figura 162 apresenta os espectros da energia total e da flutuação da fração de sólidos junto a parede e no centro do reator. O espectro da energia total, Figura 162 (a), mostra que há maior energia na região da parede associada às grandes escalas do que no centro. Observa-se que a partir 0,25 Hertz inicia-se a zona inercial com inclinação $-5/3$ e mantém-se até 50 Hertz, para ambas regiões em estudo.

A Figura 162 (b) apresenta o espectro da flutuação da fração de sólido, onde observa-se que há maior energia cinética turbulenta no centro do que na parede até 0,1 Hertz quando inicia-se uma queda da energia cinética turbulenta no centro para então seguir o decaimento da energia com inclinação $-5/3$. Observa-se que a altas freqüências a região da parede tem um

dissipação maior como observado para os estudos de caso anteriores. A região inercial inicia-se em torno de 1.5 Hertz e mantém sua inclinação até 50 Hertz.

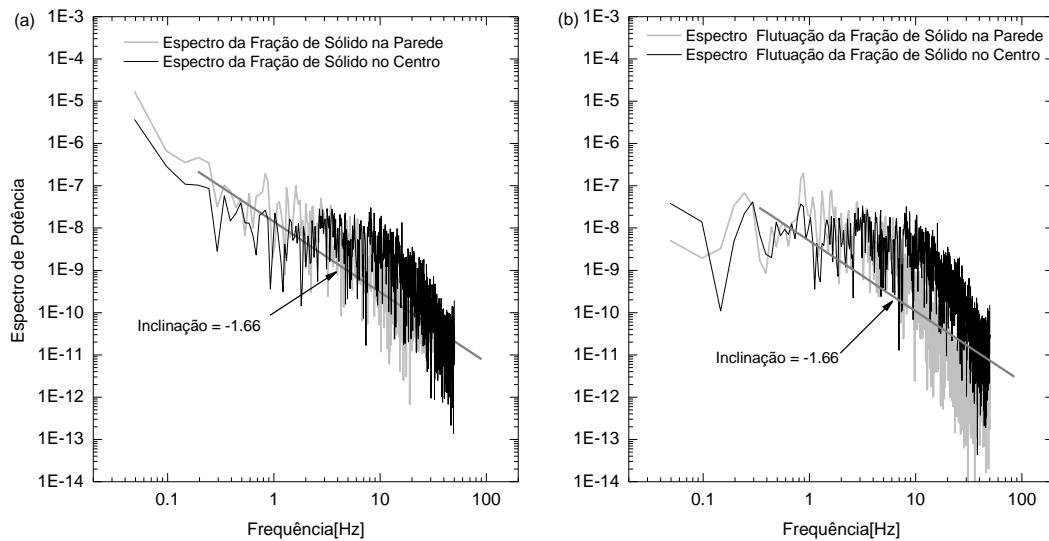


Figura 162. (a) Espectro de potência para a fração de sólido; (b) Espectro de potência para a flutuação da fração de sólido na região da parede e central, Caso 8.

A Figura 163 (a) apresenta a variação radial do segundo momento estatístico para a fração de sólido a 1 metro da entrada. Observa-se que a energia cinética turbulenta é menor nas paredes e maior na região central e intermediária. O perfil é muito diferente do apresentado para o Caso 7, e tem substancialmente menos energia cinética turbulenta em toda a região de estudo.

O espectro da flutuação da fração de sólido em função do número de onda a 1 metro da entrada do reator é apresentado na Figura 163 (b). Observa-se que em torno de 30 Hertz inicia-se a zona inercial com inclinação $-5/3$ semelhante ao apresentado para o Caso 7, contudo com energia menor nas maiores e menores escalas.

Na Figura 164 é apresentada a evolução temporal da velocidade do gás na região próxima a parede e no centro. Novamente observa-se que as freqüências são maiores no centro do que na parede. Na parede a velocidade do gás é semelhante a do sólido, contudo na região central a velocidade do gás é maior. A velocidade média do gás na parede é negativa e tem o valor de 0,49 m/s e a velocidade média do sólido é 0,55 m/s. No centro a velocidade média do gás é de 1,97 m/s e a do sólido é 1,75 m/s.

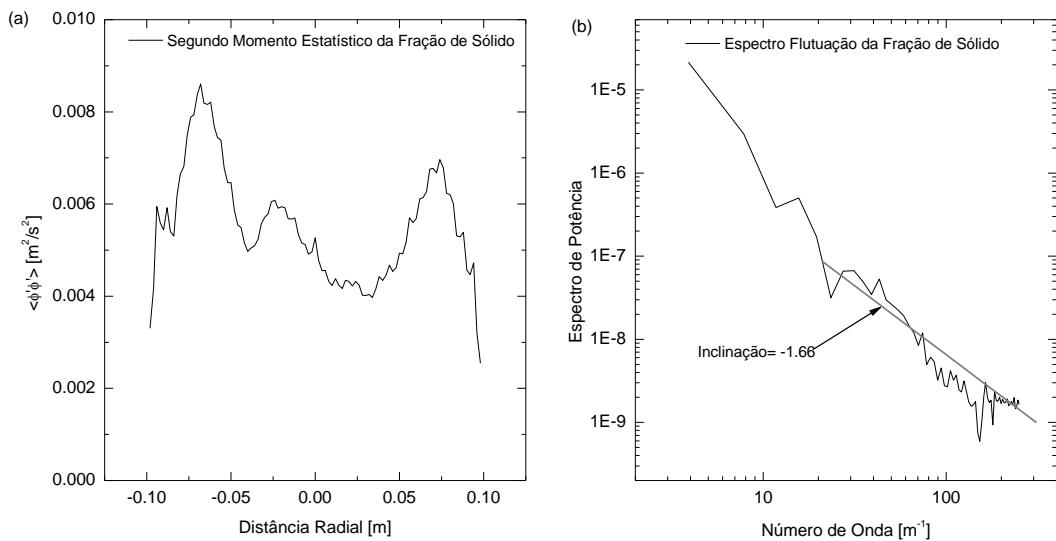


Figura 163. (a) Variação radial do segundo momento estatístico para a fração de sólido a 1 metro da entrada do reator; (b) Espectro da flutuação da fração de sólido em função do número de onda a 1 metro da entrada do reator, Caso 8.

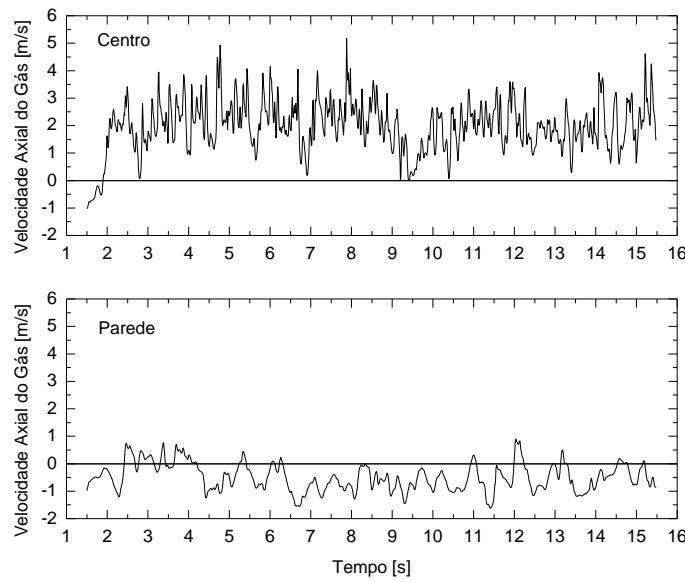


Figura 164. Evolução temporal da velocidade do gás próximo à parede e centro, Caso 8.

A Figura 165 apresenta a diferença instantânea da velocidade da fase gás e a da fase sólido a 1 metro de distância da entrada para a região próxima a parede e no centro. Com esta figura pode-se ter uma idéia de como o arraste instantâneo comporta-se na região central e junto a parede.

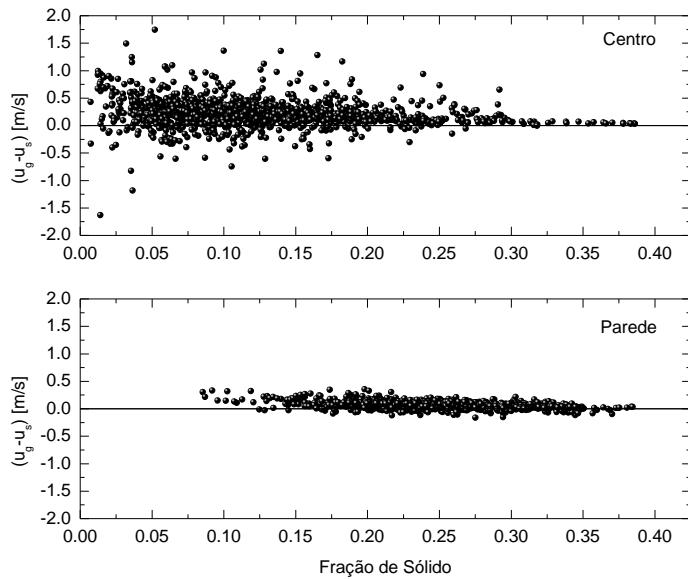


Figura 165. Diferença de velocidade entre a fase gás e sólido em função da fração de sólido instantânea na região da parede e no centro, Caso 8.

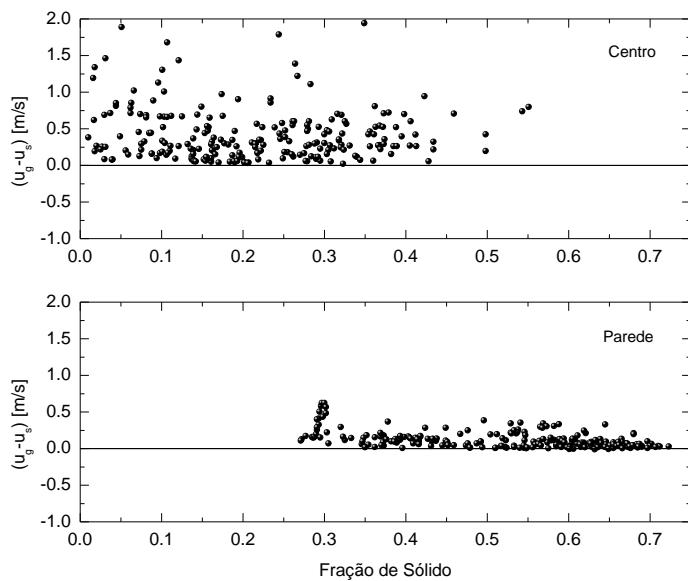


Figura 166. Diferença de velocidade entre a fase gás e sólido em função da fração de sólido instantânea na região da parede e no centro, Caso 7.

Observa-se na Figura 165 que a região central apresenta-se com a fração de sólido menor e o arraste instantâneo é maior quando comparado a região próxima a parede. Observe que mesmo no centro do leito há muitos eventos onde a diferença de velocidade é nula, evidenciando o balanço entre forças de arraste e empuxo. No centro a diferença média de

velocidade é 0,22 m/s enquanto na parede é de 0,064 m/s. Quando comparam-se os resultados para a diferença das velocidades do gás e sólido para o Caso 7 nas mesmas regiões observa-se que a diferença de velocidade média no centro para esse estudo de caso é 0,54 m/s enquanto na parede é 0,083 m/s. A Figura 166 e os resultados médios indicam que o arraste do Caso 8 foi modificado de alguma forma pela utilização do modelo sub-malha, tendo em vista que a função arraste utilizada nas simulações não foi modificada. As diferenças entre os Caso 8 e 7 são mais pronunciadas na região da parede do que no centro evidente na comparação dos resultados médios apresentados anteriormente.

A Figura 167 (a) apresenta o espectro de potência para a velocidade do gás no centro e próximo a parede. A energia total para o centro é maior que na parede para praticamente toda região do espectro, com diferença pronunciada nas grandes escalas (baixas freqüências). A zona inercial inicia-se em torno de 1 Hertz com inclinação $-5/3$. Para a região central esta inclinação mantém-se até 50 Hertz. Em torno de 10 Hertz a região da parede inicia uma dissipação de energia com inclinação maior que $-5/3$. Este aspecto é mais evidente no espectro para a flutuação da velocidade do gás na parede, Figura 167 (b). Nesta figura observa-se que nas grandes escalas há maior energia cinética turbulenta na parede, decaindo em torno de 0,07 Hertz, quando então há maior energia no centro. A zona inercial com inclinação $-5/3$ inicia-se em torno de 1 Hertz para ambas as fases. Observam-se estruturas coerentes sendo formadas e destruídas nas grandes escalas.

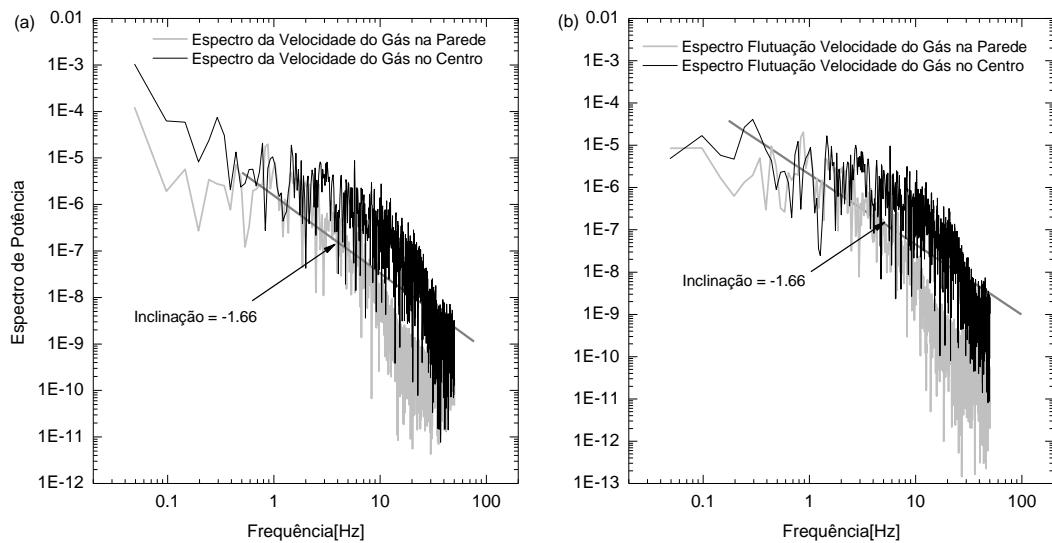


Figura 167. (a) Espectro de potência para a velocidade do gás na região da parede e central; (b) Espectro de potência para a flutuação da velocidade do gás na parede e centro, Caso 8.

Na Figura 168 (a) apresenta-se a variação radial do segundo momento estatístico para a fase gás e sólido a 1 metro de distância da entrada do reator. Observa-se que a energia cinética turbulenta é maior para a fase gás do que para o sólido com rápido decaimento junto a parede. A região central tem maior energia para ambas as fases.

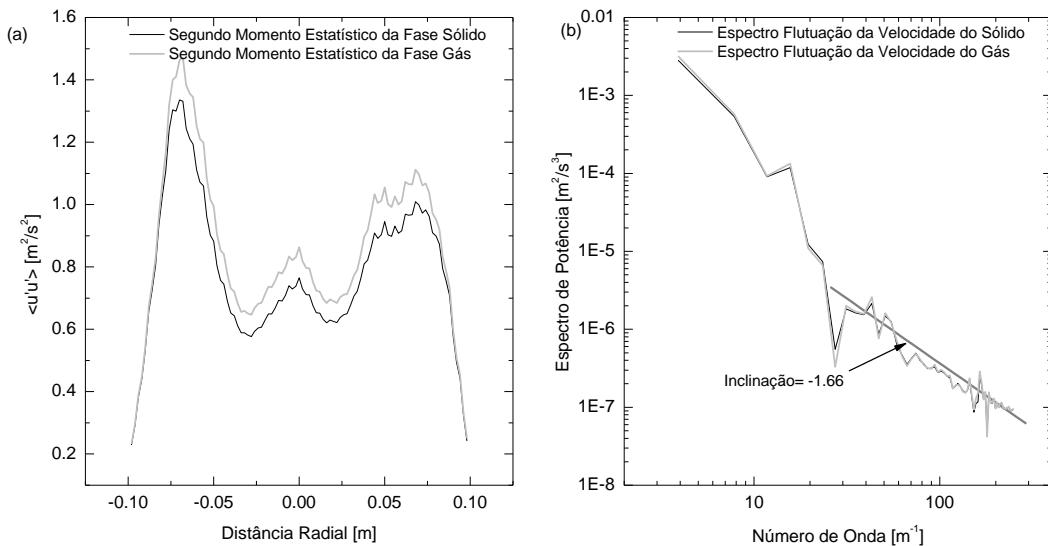


Figura 168. (a) Variação radial do segundo momento estatístico para a fase sólido e gás a 1 metro da entrada do reator; (b) Espectro de energia da flutuação da velocidade do sólido e do gás em função do número de onda a 1 metro da entrada do reator, Caso 8.

A Figura 168 (a) apresenta o espectro de potência para a flutuação da velocidade do gás e do sólido em função do número de onda. Observa-se como mencionado acima, que a fase gás tem maior energia para as grandes escalas tendo comportamento espectral semelhante ao da fase sólido com diferenças muito pequenas. A zona inercial está bem identificada iniciando em torno de 30 Hertz com inclinação $-5/3$. O espectro para o Caso 7 inicia com maior energia do que o presente caso, e as flutuações na zona inercial tem amplitudes semelhantes.

Neste item foram apresentadas a evolução temporal da velocidade do sólido, fração de sólidos e velocidade do gás na região próxima a parede e no centro do reator. Os dados foram analisados utilizando-se os espectros de energia. Em todos os resultados espectrais obteve-se a inclinação $-5/3$ para a zona inercial demonstrando que um leito fluidizado turbulento tem características semelhantes a estrutura turbulenta para uma fase. Algumas diferenças entre os diferentes estudos de caso foram apontadas e discutidas, revelando o comportamento físico

associado a cada uma das regiões estudadas. Observou-se que a presença de *clusters* aumenta a dissipação da região próxima a parede, fenômeno associado a modulação da turbulência.

De forma a concluir os aspectos discutidos neste item iremos resumir os aspectos mais importantes apontados com relação a evolução temporal e a análise espectral a seguir.

Comparação Caso 2 e 6

Velocidade do Sólido

Comparando a evolução temporal para o Caso 2 e 6 observa-se que o Caso 2 tem freqüências maiores no centro do que o Caso 6, o mesmo ocorrendo para a região próxima a parede. As velocidades para ambas as regiões são maiores para o Caso 2. Os resultados para o Caso 6 mostram-se mais homogêneos que o Caso 2.

O espectro de potência para energia total, Figura 123 (a), tem inicio com o mesmo montante de energia e ambos os casos tem maior energia no centro do que na parede. Observa-se que o Caso 2 tem uma quantidade maior de estruturas coerentes nas grandes escalas do que o Caso 6. Ambos os espectros obedecem à inclinação -5/3.

O espectro da flutuação da velocidade do sólido para o Caso 2 tem menor energia que no Caso 6 para ambas regiões. No Caso 2 a parede tem maior energia cinética turbulenta que o centro para as grandes escalas e zona inercial, o que não ocorre no Caso 6. No Caso 2 a amplitude das flutuações na zona inercial é maior que no Caso 6. O segundo momento estatístico dá uma idéia da energia cinética turbulenta. Evidente da comparação entre a Figura 124 (a) e 142 (a) que o Caso 2 tem maior energia na região intermediária à parede e na parede menor com menor energia cinética turbulenta no centro. Isto parece estar associado a presença da estrutura densa caindo na região central do leito como observado nos resultados qualitativos. Esta estrutura mantém-se por maior tempo no Caso 6 do que no Caso 2.

Os espectros das flutuações das velocidades do sólido e gás em função do número de onda, Figuras 143 (b) e 142 (b) mostram que há estruturas coerentes de maior amplitude para o Caso 6 do que no Caso 2 em todas as regiões dos espectros, evidenciando para o Caso 6 a presença de estruturas de baixa freqüência com maior número de onda que para o Caso 2.

Fração de Sólido

A evolução temporal do Caso 2 e 6, Figuras 125 e 143, mostram que no centro e na parede há eventos com maior freqüência para o Caso 2 do que para o Caso 6, em consonância

com o afirmado para a velocidade do sólido. No Caso 2 os *clusters* são mais densos, tanto na parede como no centro, do que no Caso 6.

Os espectros de potência mostram que a região da parede tem maior energia que a região central em todas as regiões do espectro para ambos os estudos de caso (Ver Figuras 126 (a) e 144 (a)).

A variação do segundo momento na direção radial é muito diferente de um caso para outro, apresentando menor energia cinética para o Caso 6 do que para o Caso 2. O espectro em função do número de onda apresenta um comportamento semelhante para ambos os estudos de caso, apresentando estruturas coerentes de grande amplitude nas grandes escalas e menores na zona inercial, com inclinação -5/3 para ambos os casos.

Os espectros das flutuações das velocidades do sólido e gás em função do número de onda, Figuras 124 (b) e 142 (b) mostram que há estruturas coerentes de maior amplitude para o Caso 6 do que no Caso 2 em todas as regiões dos espectros, evidenciando para o Caso 6 a presença de estruturas de baixa freqüência com maior número de onda que para o Caso 2.

Velocidade do Gás

A evolução temporal do Caso 2 apresenta-se com freqüências maiores do que no Caso 6, tanto na região da parede como no centro. Os espectros de potência, Figuras 129 (a) e 147 (a) mostram que ambos os casos tem maior energia no centro que nas paredes. O Caso 6 apresenta flutuações com maior amplitude na região inercial do que o Caso 2.

Os espectros da flutuação da velocidade do gás, Figuras 129 (b) e 147 (b), tem comportamento semelhante, mostrando que a estrutura da turbulência equipara-se. O espectro da flutuação da velocidade do gás e do sólido em função do número de onda são muito diferentes. No Caso 6 as amplitudes são maiores que no Caso 2 nas grandes escalas; na região inercial o espectro para o Caso 6 tem maior energia para a fase gás do que para a fase sólido, apresentando maior dissipação de energia para a fase sólido, provavelmente efeito do modelo sub-malha para a fase sólido. No Caso 2 os espectros são idênticos.

As principais diferenças entre os Casos 2 e 6 estão associados a presença de *clusters* maior no Caso 2 do que no Caso 6, levando a um comportamento mais homogêneo para o Caso 6, principalmente na região central. Isto é indicativo de que o modelo sub-malha modificou o mecanismo de formação e destruição de *clusters* para partículas Geldart A.

O Caso 6 aproxima melhor os resultados médios experimentais na região intermediária e central, com pobre aproximação na parede, mas muito semelhante ao resultado obtido para o Caso 2, que na região intermediária não tem aproximação tão boa quanto o Caso 6.

Comparação Caso 3 e 7

Velocidade do Sólido

A evolução temporal indica que a geometria cilíndrica (Caso 3) aumenta a velocidade do sólido na região da parede, provavelmente por não haver zonas de recirculação como as encontradas em escoamentos em geometria quadrada, tendo em vista que as velocidades no centro são iguais para ambos os estudos de caso.

A amplitude das flutuações nos espectros de potência é semelhante para ambos os casos. Ambos tem maior energia no centro para as grandes escalas assim como nas menores.

Fração de Sólido

A evolução temporal da fração de sólido mostra que no centro a freqüência é maior para o Caso 7 do que no Caso 3, o mesmo ocorrendo na região da parede. No Caso 3 observa-se a formação de *clusters* mais densos que no Caso 7.

Os espectros de potência têm comportamento semelhante, contudo o espectro de flutuação da fração de sólido para o Caso 7 tem amplitudes maiores do que no Caso 3. Os perfis do segundo momento estatístico para a fração de sólido são semelhantes, assim como o espectro da flutuação da fração de sólidos em função do número de onda.

Velocidade do Gás

A evolução temporal mostra que no Caso 7 a freqüência é maior tanto na região da parede como no centro. Os espectros são semelhantes, contudo o Caso 3 apresenta amplitudes maiores que o Caso 7. Para ambos os casos há maior energia no centro do que na parede. A fase gás tem maior energia que a fase sólido para ambos os casos e o comportamento do segundo momento é semelhante. Sendo assim, os resultados para os Casos 3 e 7 são muito semelhantes com pequenas variações já salientadas anteriormente. Ou seja, a geometria parece não trazer grandes modificações nos padrões locais e médios do escoamento gás-sólido, para as condições utilizadas.

Comparação Caso 7 e 8

Velocidade do Sólido

Os resultados temporais são semelhantes com freqüências maiores para o Caso 8. Como na comparação dos Casos 3 e 7, há maior energia no centro do que nas paredes para todas as regiões do espectro (Ver por exemplo Figuras 150 (a,b) e 140 (a,b). Observa-se inclinação -5/3 para ambos os casos. O segundo momento estatístico mostra que a energia cinética turbulenta é maior para o Caso 7 do que para o Caso 8. No centro o Caso 7 tem maior energia do que o Caso 8. O espectro da flutuação da velocidade do sólido em função do número de onda exemplifica bem este fato (Figuras 151 (b) e 160 (b)).

Observa-se que há maior energia cinética turbulenta nas grandes escalas para o Caso 7 do que para o Caso 8. A amplitude das flutuações nos espectros é semelhante.

Fração de Sólido

A evolução temporal mostra que há *clusters* mais densos tanto na parede como no centro para o Caso 7. A amplitude das flutuações espectrais é maior para o Caso 7 do que para o Caso 8. Observa-se que há maior energia cinética turbulenta para o Caso 7. Isto parece indicar que o modelo sub-malha suaviza as flutuações. Entretanto, os espectros da flutuação da fração de sólido em função do número de onda são semelhantes com amplitudes de flutuação muito próximas.

Velocidade do Gás

Os espectros para a fase gás do Caso 8 apresentam amplitude das flutuações maior que no Caso 7. Ambos tem maior energia no centro do que na parede para todas as regiões do espectro.

O espectro da flutuação do gás e do sólido em função do número de onda são semelhantes, contudo no Caso 7 há maior energia nas grandes escalas. A amplitude das flutuações é semelhante.

As diferenças não são grandes em relação a estes dois estudos de caso. O Caso 8 aproximou de forma excelente os resultados experimentais na região da parede e com boa aproximação na região central. Isto leva-nos a concluir que o apresentado com relação a análise espectral é de fato a representação fiel da realidade dos padrões de escoamento em um leito fluidizado turbulento e que o modelo sub-malha para o sólido incorpora informações físicas a este respeito.

Com a finalidade de complementar a presente análise será apresentado no item a seguir análise de estruturas intermitentes para os estudos de caso 2, 6, 7, 8.

6.5.2.3 Estruturas intermitentes

No subitem anterior foi mencionado a presença de estruturas intermitentes. Sistemas caóticos apresentam estruturas intermitentes que são reveladas no domínio do tempo apenas com um processo de filtragem do sinal temporal do tipo passa alta (Johnsson *et. al*, 2000). Series temporais tem períodos de imobilidade com ocasionais picos (*bursts*) na amplitude. O coeficiente de achatamento, ou Kurtosis, pode ser utilizado como uma medida da intermitência. O Kurtosis é o momento estatístico de quarta ordem e se a distribuição medida for Gaussiana o Kurtosis tem um valor 3. Com a variação do filtro para altas freqüências, o Kurtosis aumenta significativamente, sendo este indicativo que não linearidades e caos estão presentes. O principal objetivo deste sub-item é observar se há estruturas intermitentes e se estas podem ser correlacionadas com a presença de *clusters*. Outro objetivo é utilizar a análise de estruturas intermitentes como ferramenta comparativa para os estudos de caso 2-6, 7-8, e observar as diferenças. Para tanto serão utilizadas as series temporais das flutuações da velocidade do sólido e gás e da fração de sólido para cada um dos estudos de caso citados acima.

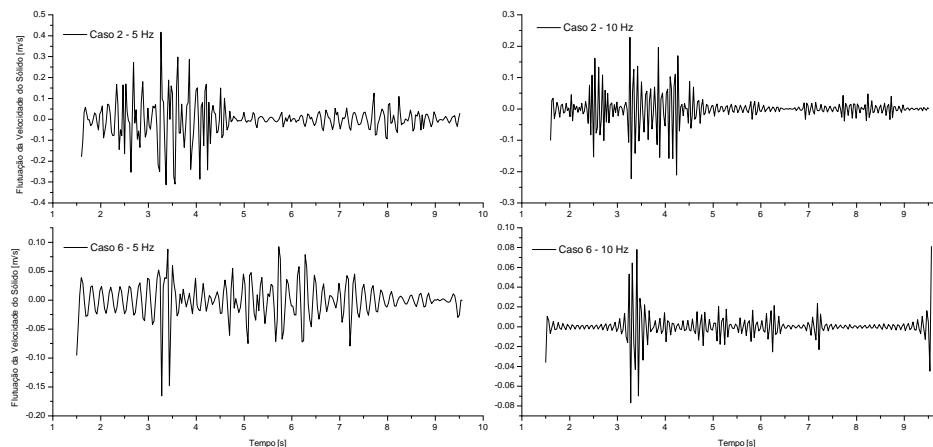


Figura 169. Filtro passa alta para a série temporal da flutuação da velocidade do sólido junto a parede para os Casos 2 e 6.

A Figura 169 apresenta a comparação de gráficos para a flutuação da velocidade do sólido junto a parede, com os filtros passa alta de 5 e 10 hertz. Observa-se que a amplitude das flutuações para o Caso 6 é menor que as do Caso 2. Observam-se estruturas intermitentes em ambos os estudos de caso. No Caso 6 observa-se a presença de estruturas coerentes em na freqüência de corte de 5 hertz que diminuem sua amplitude com o aumento da freqüência, evidenciando um efeito do tipo cascata, onde as maiores escalas são dissipadas em menores,

observado nos espectros de potência. Observa-se que a dissipação da energia é maior para o Caso 6 do que para o Caso 2.

A Figura 170 apresenta os resultados para a Kurtosis, que representa justamente o efeito cascata, onde a energia das maiores escalas é dissipada formando menores escalas. O valor da Kurtosis é uma medida da intermitênciam. O coeficiente de achatamento (Kurtosis) aumenta com a freqüência até alcançar a região inercial e então decai entrando na região de dissipação. O Kurtosis máximo representa a freqüência máxima da região de decaimento com inclinação $-5/3$ observada na análise espectral. Este resultado é muito importante, pois os resultados são significativamente diferentes para os Casos 2 e 6. O Caso 6 tem o valor máximo de coeficiente de achatamento de 15,2, enquanto o Caso 2 tem 6,53, indicando maior intermitênciam para o Caso 6, onde utilizou-se o modelo sub-malha. Fica claro a importância da análise do coeficiente de achatamento, que pode ser utilizado para diferenciar os estudos de caso e corroborar ou não a análise espectral.

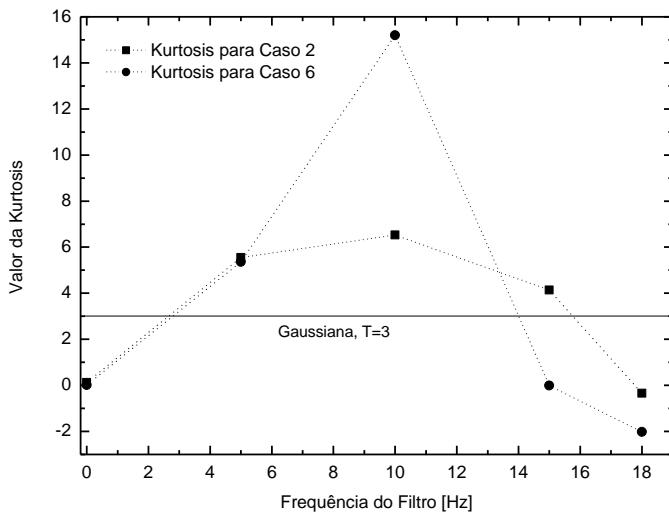


Figura 170. Kurtosis em função do filtro passa alta para a flutuação da velocidade dos sólidos próximo a parede, Casos 2 e 6.

Johnsson *et al.* (2000) compararam o valor experimental da Kurtosis para resultados em um leito fluidizado com os medidos para um regime turbulento de uma fase em um duto, com número de Reynolds de 60000. O resultado máximo encontrado para o escoamento turbulento de uma fase para o duto é exatamente o mesmo encontrado para o Caso 6. Estes autores realizaram análise espectral e de intermitênciam para seus resultados experimentais para escoamento em leito fluidizado em condições de fluidização de transporte, bolhas e ascensão de uma bolha. O valor máximo obtido para o coeficiente de achatamento (Kurtosis) para as

condições de transporte foi 80, e para o regime do tipo bolhas em torno de 40, para as flutuações de pressão.

A Figura 171 apresenta os resultados para a velocidade do sólido no centro. Observa-se que os resultados são substancialmente diferentes dos apresentados para a região da parede. O Caso 6 tem um comportamento do tipo Lorentz, mais organizado e com intermitênciamaior do que o Caso 2. As amplitudes são menores para o centro do que para a parede, revelando freqüências maiores. Na Figura 172, isto fica claro, onde observa-se que o valor do coeficiente de achatamento para o Caso 6 é substancialmente maior que para o Caso 2, representando assim uma maior intermitênciam. Os valores da região da parede para o coeficiente de achatamento são substancialmente menores que os encontrados para a região central. O valor máximo encontrado para o Caso 6 está muito próximo ao encontrado por Johnsson *et al.* (2000), para as flutuações de pressão nas condições de transporte em leito fluidizado. Os valores para a freqüência do filtro apresentados na Figura 172, mostram que os resultados para o Caso 2 assemelham-se com os encontrados por Johnsson *et al.* (2000) para o regime de bolhas até 10 hertz.

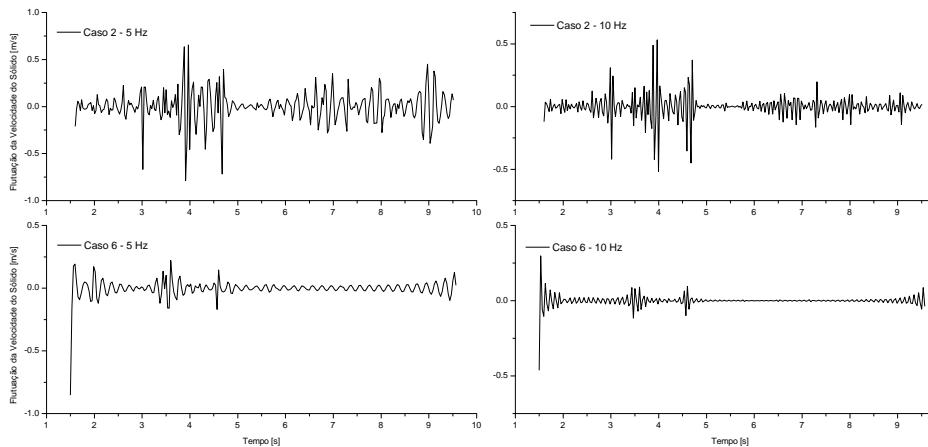


Figura 171. Filtro passa alta para a série temporal da flutuação da velocidade do sólido no centro para os Casos 2 e 6.

Neste momento serão apresentados os resultados para a velocidade do gás para os Casos 2 e 6 apenas para a região central. A Figura 173 mostra o coeficiente de achatamento para o centro, onde observa-se que o Caso 2 tem maior intermitênciam que o Caso 6. Os perfis são diferentes dos anteriores, mostrando que a fase gás tem menor valor de intermitênciam que a fase sólido. O valor máximo da intermitênciam é próximo mas inferior ao valor obtido experimentalmente para o escoamento turbulento de gás em um duto, como mencionado

anteriormente. Como na região central o sólido é carregado pelo gás, pode-se especular que grande parte da energia da fase gás é consumida para fazer ascender o sólido, que neste caso amortece as flutuações da fase gás.

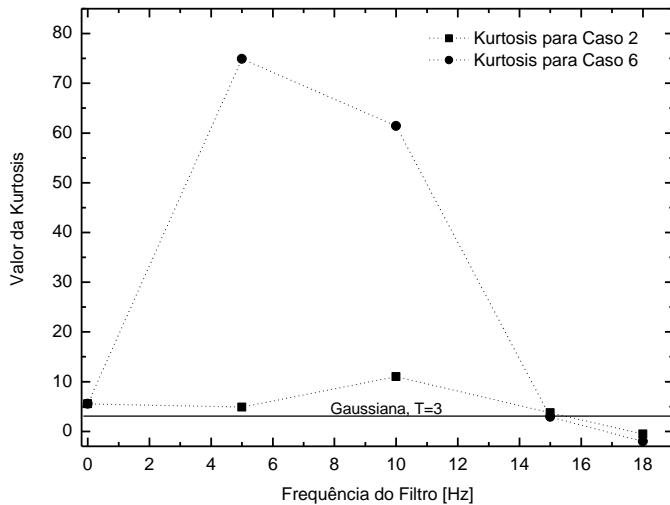


Figura 172. Kurtosis em função do filtro passa alta para a flutuação da velocidade dos sólidos no centro, Casos 2 e 6.

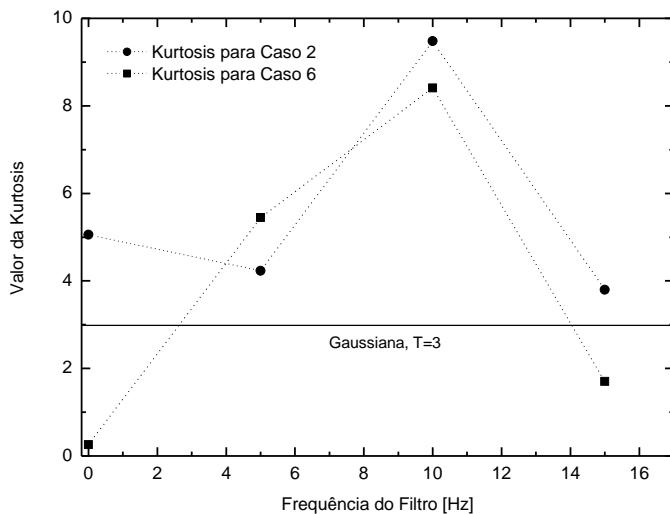


Figura 173. Kurtosis em função do filtro passa alta para a flutuação da velocidade do gás no centro, Casos 2 e 6.

Apresentamos os resultados comparados para a velocidade do sólido na região da parede para os Casos 7 e 8, na Figura 174. Na freqüência de 5 hertz os resultados mostram estruturas semelhantes, mas com amplitudes diferenciadas para cada um dos casos. Com o filtro de 10 hertz fica evidente que o Caso 8 tem amplitudes maiores com estruturas menores

que o Caso 7. O Caso 8 aparece como tendo maior intermitênciam já a 15 hertz do que o Caso 7. Ou seja, as estruturas encontradas no Caso 7 tem uma freqüência menor do que as estruturas encontradas no Caso 8. Os resultados para o Caso 2 e 6 quando comparados com os resultados para o Caso 7 e 8 observa-se que as amplitudes para o Caso 7 e 8 são maiores e com intermitênciam também maior. Nos estudos de caso 7 e 8 encontram-se mais estruturas coerentes do que nos Casos 2 e 6.

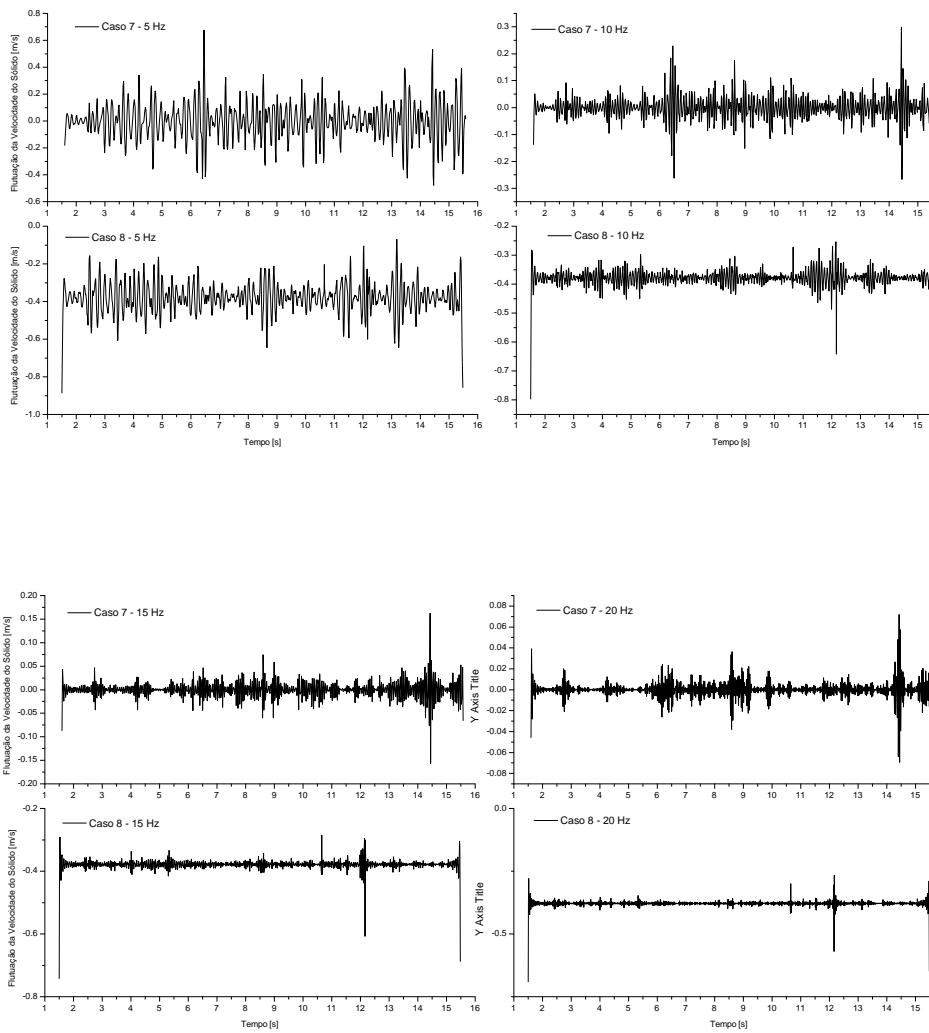


Figura 174. Filtro passa alta para a série temporal da flutuação da velocidade do sólido na região da parede para os Casos 7 e 8.

Os resultados para o coeficiente de achatamento (Figura 175) confirmam o descrito acima. Observa-se que o Caso 8 tem intermitênciam maior com o pico a 20 hertz com valor do coeficiente de achatamento de 222. O Caso 7 tem seu pico em 20 hertz também, mas o valor do coeficiente de achatamento é menor, com valor de 13, que é próximo ao valor obtido para o Caso 6 onde as partículas tem classificação Geldart A. Observa-se com estes resultados que

as estruturas encontradas na região da parede tem comportamento diferenciado com maior intermitênci para partículas Geldart B.

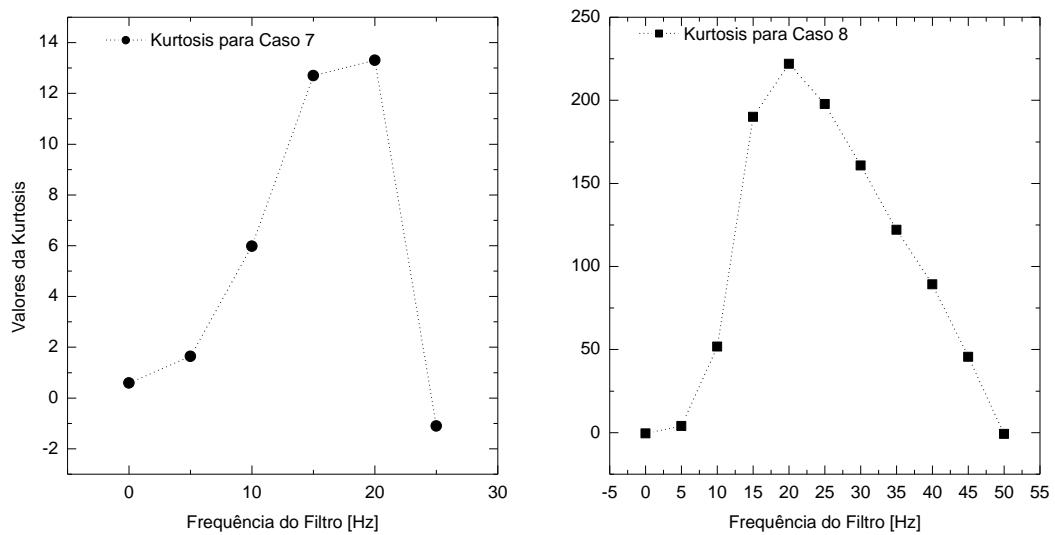


Figura 175. Kurtosis em função do filtro passa alta para a flutuação da velocidade do sólido na parede, Casos 7 e 8.

Outro aspecto importante é observado na Figura 175 associado a freqüência de transição do valor da Kurtosis máxima, que para os Casos 7 e 8 encontra-se em 20 hertz. Este valor de freqüência é exatamente o valor quando na Figura 140 (a) e (b) ocorre uma mudança na inclinação -5/3 para a velocidade e a flutuação da velocidade do sólido na parede. Johnsson *et al.* (2000) identificaram três regiões em seus espectros de potência retirados de dados experimentais para leito fluidizado borbulhante e de transporte. A primeira região identificada com as grandes escalas, que vai até 4 hertz. A segunda identificada com inclinação 1,9 a 2,9, que estende-se de 4 hertz a 10 hertz e a terceira região de 20 a 200 hertz com inclinação na faixa de 4 a 5,4. Ressalta-se que estes resultados são para medidas de queda de pressão, contudo estas regiões identificadas experimentalmente podem ser observadas nitidamente nos espectros de potência apresentados no item anterior. A segunda região identificada por Johnsson *et al.* (2000) é exatamente a região inercial identificada nos espectros de potência e a terceira é observada para os resultados espetrais para o Caso 8 e 7. Assim, pode-se concluir que a freqüência associada ao valor da Kurtosis máxima identifica o final da zona com inclinação -5/3, e a partir deste ponto entra-se na terceira região de 20 a 200 hertz.

A Figura 176 apresenta os resultados para a velocidade do sólido no centro do reator. Observa-se que no centro a 5 hertz a amplitude das flutuações para o Caso 7 são maiores que

as do Caso 8, e ambas são maiores que as encontradas para a região da parede, evidenciando a presença fenômenos de alta freqüência nesta região. Com o aumento da freqüência filtrada observa-se a presença de estruturas coerentes e de uma série de picos (*bursts*) evidenciando fenômeno de alta intermitênci. O Caso 8 apresenta maior intermitênci do que o Caso 7.

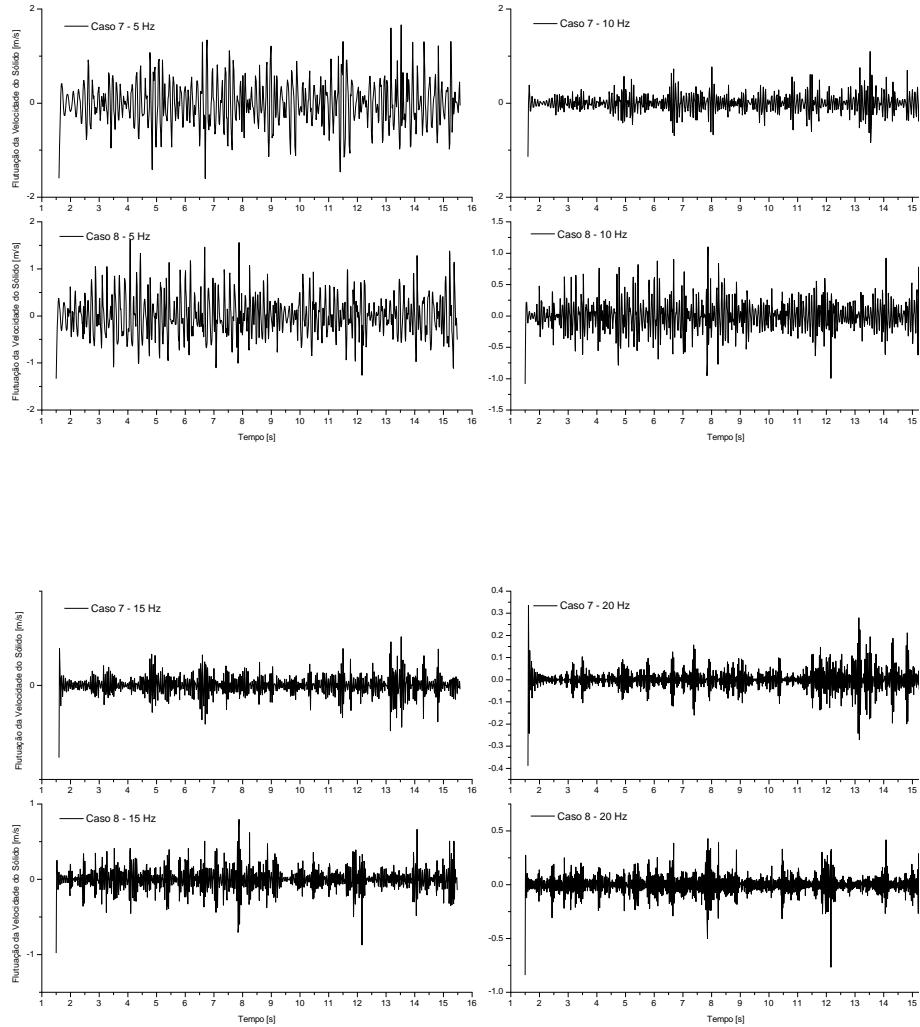


Figura 176. Filtro passa alta para a série temporal da flutuação da velocidade do sólido no centro para os Casos 7 e 8.

A Figura 177 apresenta os valores do coeficiente de achatamento em função da freqüência filtrada. O resultado para o Caso 7 apresenta um pico em 5.7 enquanto para o Caso 8 o pico tem o valor de 39. A freqüência de cada um destes picos é diferente para cada um dos casos. Para o Caso 7 o pico dá-se em 20 hertz e para o Caso 8 em 35 hertz significando neste caso que o Caso 7 encontra-se no final da região dois (inercial), enquanto o Caso 8 entra na região três. O valor máximo do coeficiente de achatamento para o Caso 8 tem valor abaixo do encontrado por Johnsson *et al.* (2000) para as flutuações da pressão e abaixo do encontrado

para o Caso 6. Com os valores apresentados na Figura 177 é evidente que o Caso 8 apresenta intermitênciamaior no centro do que o Caso 7.

Nos espectros de potência para a flutuação da velocidade do sólido (Figura 159 (b)) no centro não é claro que há uma zona de transição bem definida como mostra o resultado da Figura 177, contudo revendo a figura com cuidado, observa-se que há uma pequena mudança na inclinação, mas esta não está bem definida na figura. Para o Caso 7 a zona de transição está coerente com o resultado espectral (Figura 150 (b)). Importante salientar que a análise espectral de certa forma é subjetiva, pois a identificação das regiões de transição nem sempre é evidente.

Observa-se nos resultados para o centro, Figura 178, que a amplitude de flutuações é maior para o Caso 7 do que para o Caso 8. Observa-se a formação de estruturas coerentes a 15 hertz e 20 hertz com características diferentes de caso para caso. No Caso 7 observa-se a 15 hertz a presença de estruturas coerentes com menor ocorrência do que para o Caso 8, significando para o Caso 7 fenômenos de alta freqüência e menor intermitênciam. Para 20 hertz o padrão mantém-se, no Caso 8 observa-se a formação de estruturas em coerentes em freqüências maiores, e no Caso 7 em menores.

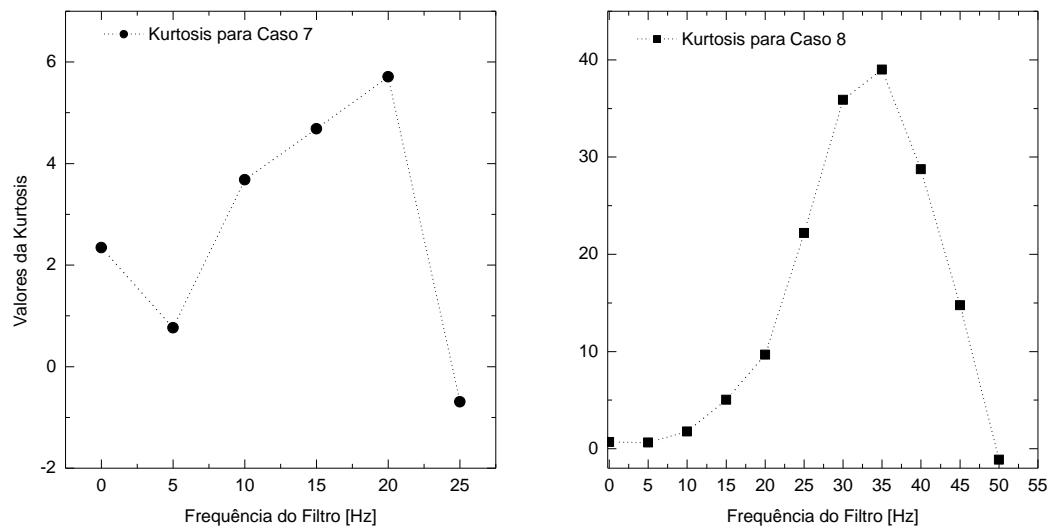


Figura 177. Kurtosis em função do filtro passa alta para a flutuação da velocidade do sólido no centro, Casos 7 e 8.

A Figura 179 apresenta a variação do coeficiente de achatamento (Kurtosis) para a velocidade do gás em função da freqüência filtrada. Observa-se novamente diferença dos

resultados obtidos para os Casos 2 e 6, como na comparação dos resultados para a parede, do que para o Caso 8, onde observa-se maior intermitênci para a fase gás do que para o Caso 7.

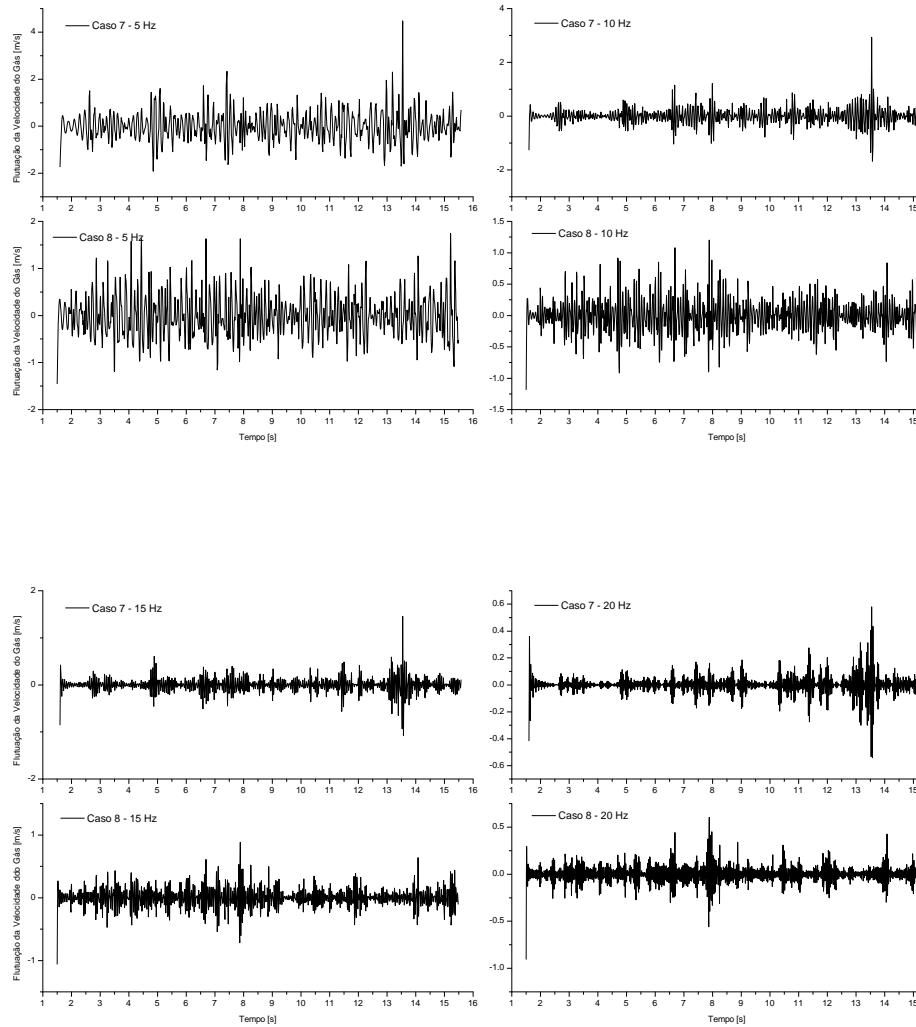


Figura 178. Filtro passa alta para a série temporal da flutuação da velocidade do gás no centro para os Casos 7 e 8.

O valor do coeficiente de achatamento para o gás no centro (Figura 179) não são próximos dos obtidos para a fase sólido (Figura 177), indicando que há maior intermitênci na fase gás do que na fase sólido. Este comportamento é o oposto observado para o Caso 2 e 6, onde observou-se que no Caso 6 (que utilizou **LES** para ambas as fases mas com partículas Geldart A, assim como o Caso 8) a fase gás tinha coeficiente de achatamento menor que o Caso 2 no centro e menor do que para a fase sólido. Na Figura 179 fica evidente que o Caso 7 (com viscosidade constante) tem menor coeficiente de achatamento que o Caso 8 e que a fase gás tem maior intermitênci para ambos os casos (7 e 8), quando comparados aos resultados para os Casos 2 e 6. Ou seja, para partículas Geldart A (Casos 2 e 6) a intermitênci da fase

gás é menor do que para as partículas Geldart B (Casos 7 e 8) e para a fase sólido o oposto é observado. Este aspecto é muito importante, pois Moran e Glicksman (2003) observaram experimentalmente que partículas Geldart B tem um comportamento onde a adição de partículas aumenta a intermitênciam da fase gás, em comparação com os resultados sem a adição de partículas, semelhante a observação ressaltada aqui na comparação entre os resultados para o Casos 2-6 e Casos 7-8. Ou seja, deve de fato haver um comportamento diferenciado em relação a partículas classificadas como Geldart A e B, no que se refere ao aspecto da turbulência e a inter-relação entre as fases gás-sólido.

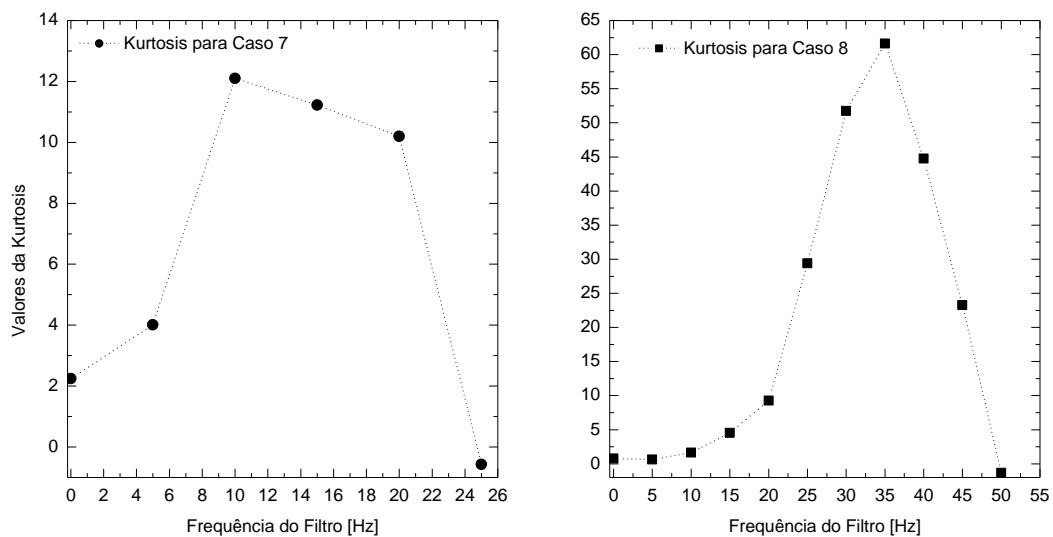


Figura 179. Kurtosis em função do filtro passa alta para a flutuação da velocidade do gás no centro, Casos 7 e 8.

E mais ainda, os resultados experimentais de Moran e Glicksman (2003) corroboram os resultados apresentados aqui para partículas Geldart A (Casos 2 e 6) assim como para partículas Geldart B (Casos 7 e 8); observa-se que na fase gás, para partículas Geldart A e B, ocorre modulação da turbulência da seguinte forma: no caso de partículas Geldart A o fenômeno é de supressão da turbulência da fase gás, e para partículas com classificação Geldart B o fenômeno é de aumento da turbulência da fase gás, como os experimentos de Moran e Glicksman (2003) mostram. Este comportamento é melhor observado da comparação para os Casos 6 e 8 onde foi utilizado o modelo sub-malha proposto na presente tese e da análise de escala apresentada anteriormente. Cabe ressaltar que Moran e Glicksman (2003) reportam que não esperavam o resultado experimental obtido, tendo em vista o

trabalho de Gore e Crowe (1989), onde as propriedades da partícula, e neste caso Geldart B, deveriam suprimir a turbulência.

De fato, o que observa-se nas simulações para partículas Geldart A e Geldart B é um comportamento fluido dinâmico muito distinto, como o observado nos resultados qualitativos e quantitativos apresentados até o momento (ver por exemplo os resultados para o Caso 9 e 10, para mesmas geometrias dos Casos 7 e 8, já discutidos anteriormente).

A partir deste momento apresentaremos os resultados para análise de intermitência para os Casos 7 e 8 da fração de sólido, objeto de nosso estudo, com a finalidade de compará-los com resultados experimentais para flutuação da queda de pressão obtidos por Johnsson *et al.* (2000) para partículas Geldart B. A comparação não é fortuita, pois a queda de pressão em um leito fluidizado depende da formação e destruição de *clusters* assim com da fração de sólidos. van Wachem (2000) observa que a inclinação do espectro de potência para a fração de sólidos obtida numericamente é semelhante a encontrada numericamente para a flutuação da queda de pressão. Desta forma é possível ter uma idéia quantitativa e qualitativa dos resultados obtidos para o Caso 7 e 8. Neste contexto está inserida a comparação que se fará a seguir.

Desta forma apresenta-se a Figura 180 onde é possível observar que a amplitude das flutuações da fração de sólido na região da parede para o Caso 7 são maiores do que as do Caso 8, revelando uma intermitência menor para o Caso 7. Observa-se a presença de estruturas coerentes com comportamentos diferenciados para cada caso.

Para 20 hertz observa-se que para o Caso 7 há a presença de um maior número de estruturas coerentes do que para o Caso 8, contudo não há como diferenciá-las de estruturas de *clusters* ou de bolhas de gás ou de vórtices.

A Figura 181 apresenta comparação do valor do coeficiente de achatamento para diferentes freqüências. De fato observa-se que o Caso 8 apresenta maior intermitência do que o Caso 7. O valor máximo para o Caso 8 do coeficiente de achatamento é 90 para uma freqüência de 25 hertz, enquanto que para o Caso 7 o valor máximo é 7.87 para a freqüência de 20 hertz. O valor máximo para o Caso 8 está muito próximo do medido experimentalmente para condições de transporte para partículas Geldart B obtidas por Johnsson *et al.* (2000) para as flutuações de pressão no leito. Contudo, o valor máximo obtido por estes autores está associado a freqüência de 55 hertz. Este aspecto será discutido mais a frente na comparação gráfica com o trabalho de Johnsson *et al.* (2000).

A Figura 182 apresenta os resultados para o centro do reator, onde não observam-se diferenças muito grandes para os resultados do Caso 7 e 8. As estruturas que se apresentam quando aumenta-se a freqüência do filtro são semelhantes. Não é possível identificar

estruturas de *clusters* ou *strands*, contudo observa-se a presença de estruturas coerentes com maior intermitênciam para o Caso 8 do que para o Caso 7.

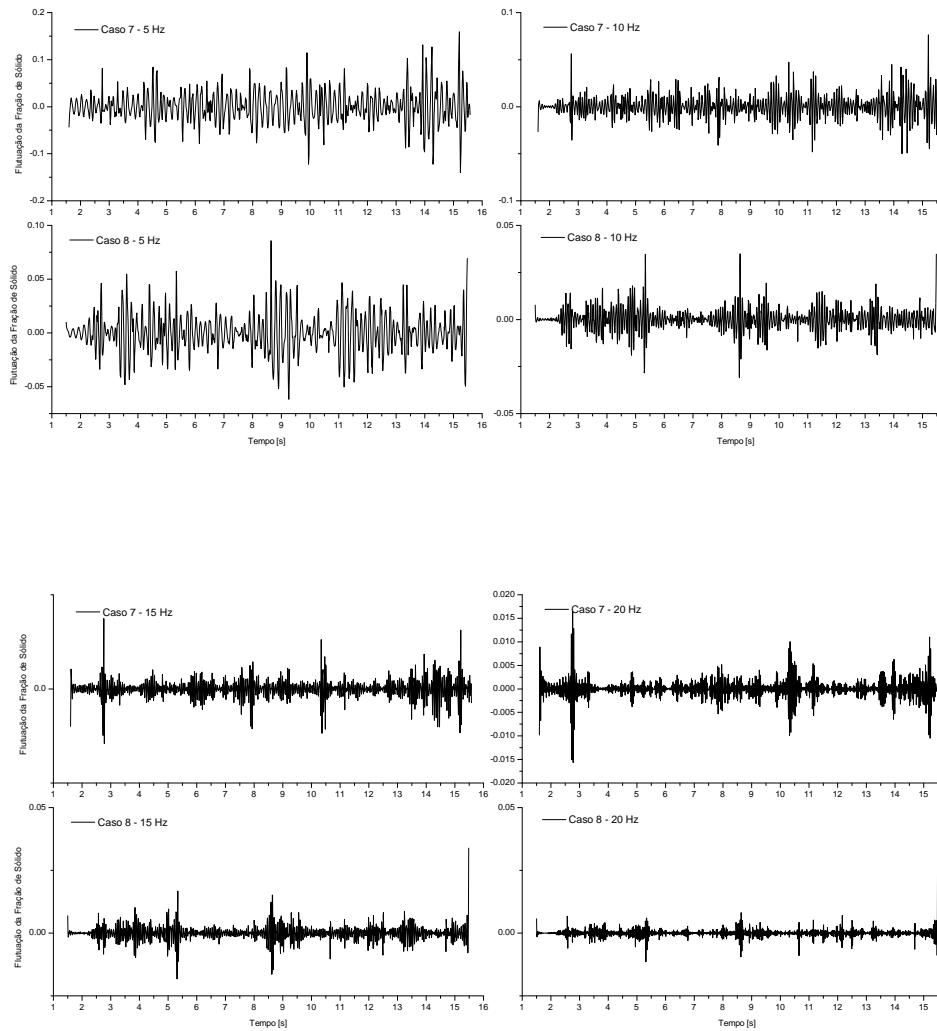


Figura 180. Filtro passa alta para a série temporal da flutuação fração de sólido na região da parede para os Casos 7 e 8.

A Figura 183 apresenta os valores do coeficiente de achatamento para a flutuação da fração de sólido no centro para os Casos 7 e 8. Observa-se que o Caso 8 tem maior intermitênciam que o Caso 7. O valor do coeficiente de achatamento para a região central é substancialmente menor do que na região da parede. Isto parece indicar que a intermitênciam maior na região da parede esteja associada a presença de *clusters* de partículas que são formados e destruídos.

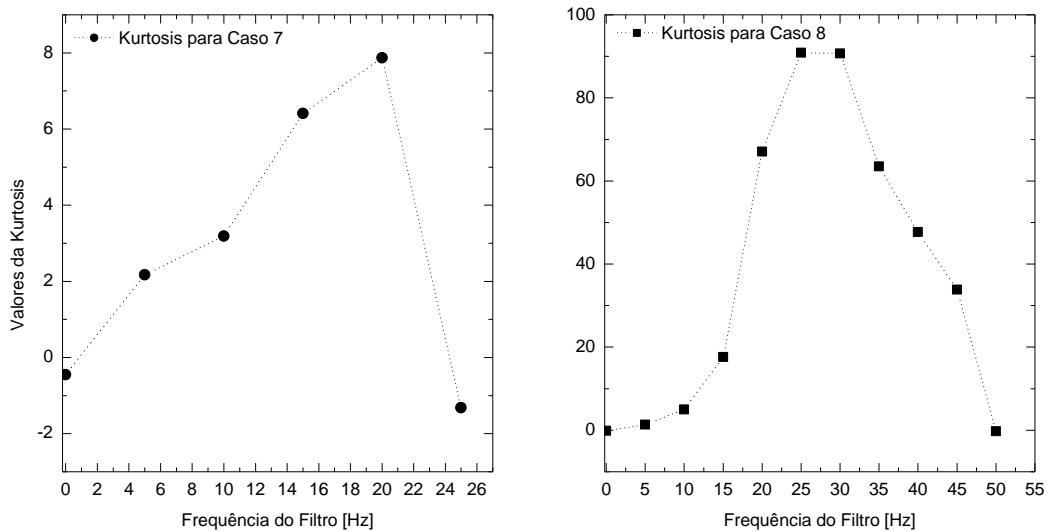


Figura 181. Kurtosis em função do filtro passa alta para a flutuação da fração de sólido na região da parede, Casos 7 e 8.

A Figura 184 compara os resultados para o coeficiente de achatamento encontrado experimentalmente para as condições de leito fluidizado de transporte para partículas Geldart B e escoamento de gás em um duto publicados por Johnsson *et al.* (2000). Os resultados experimentais para o leito em condições de transporte são para a flutuação de pressão e para o escoamento de gás em um duto para a flutuação da velocidade de gás. Observa-se que o resultado máximo para a parede do Caso 8 aproxima-se do resultado obtido experimentalmente. O comportamento da curva é diferente do experimental. Vale lembrar que os resultados experimentais são para as flutuações de pressão, que estão associadas às flutuações da fração de sólido, e de fato, as flutuações ou os *clusters* formados na região da parede são determinantes ao que se refere a queda de pressão no leito. Desta forma, tem-se uma visão muito próxima da realidade, quando comparam-se os resultados obtidos para a flutuação da fração de sólido na parede e as de flutuação da pressão no leito. As flutuações de pressão no leito estão intimamente ligadas a formação e destruição de *clusters* que se dão eminentemente na região próxima a parede.

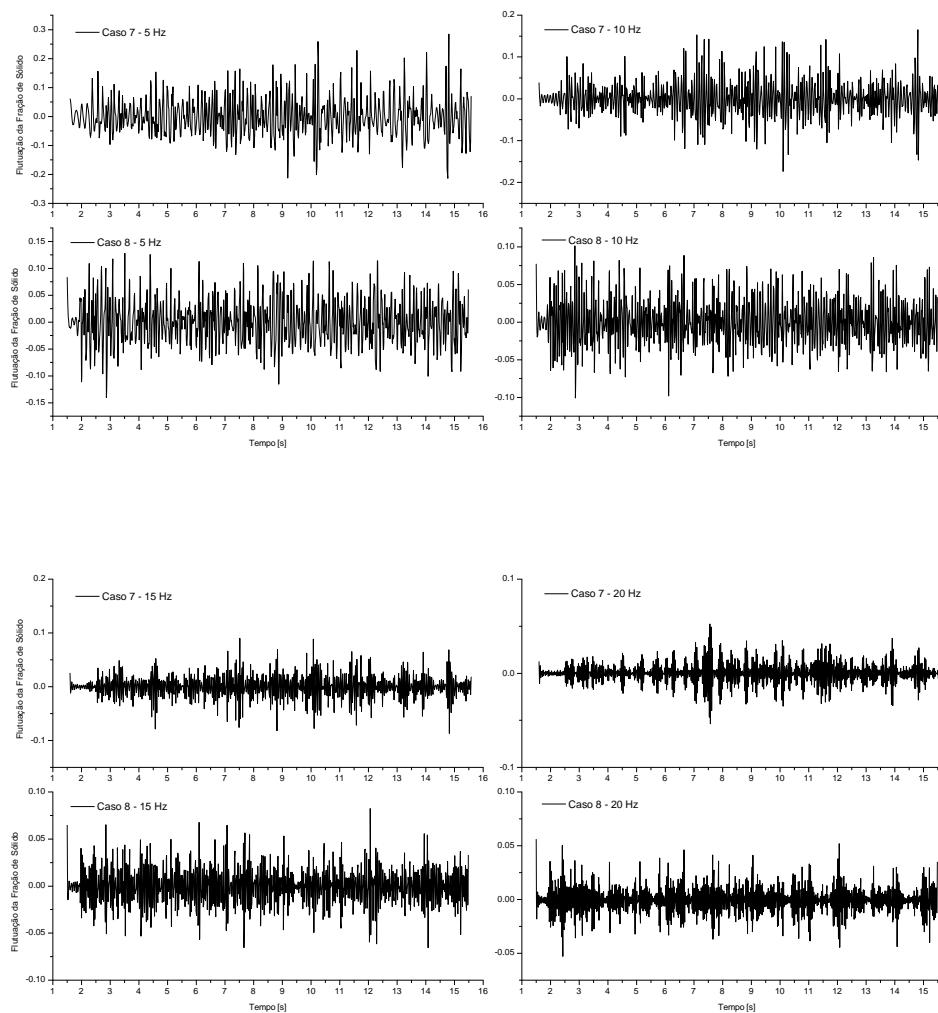


Figura 182. Filtro passa alta para a série temporal da flutuação fração de sólido no centro, Casos 7 e 8.

O resultado máximo para o centro do reator não aproxima-se dos resultados experimentais. Cabe ressaltar que os experimentos são para condições de transporte, enquanto os numéricos são para condições de leito fluidizado turbulento, portanto, o comportamento de um leito fluidizado turbulento não é representado por condições de transporte, mas as características de ambos assemelham-se. Pode-se concluir a partir dos resultados da análise de intermitência que a utilização do modelo sub-malha aumenta a intermitência do escoamento, representando adequadamente as características de intermitências máximas encontradas nos dados experimentais de Johnsson *et al.* (2000), contudo, o comportamento das curvas experimentais é diferenciado do numérico. Isto deve-se as diferenças das condições de escoamento experimentais quando comparadas as numéricas. A análise de intermitência pode ser utilizada como auxiliar da análise espectral, indicando o ponto onde iniciam as inclinações

associadas as leis de potência. Esperava-se que a análise com diferentes filtros pudesse revelar as estruturas de *clusters*, como associadas a estruturas coerentes, contudo este demanda um estudo mais aprofundado, que não foi realizado neste trabalho.

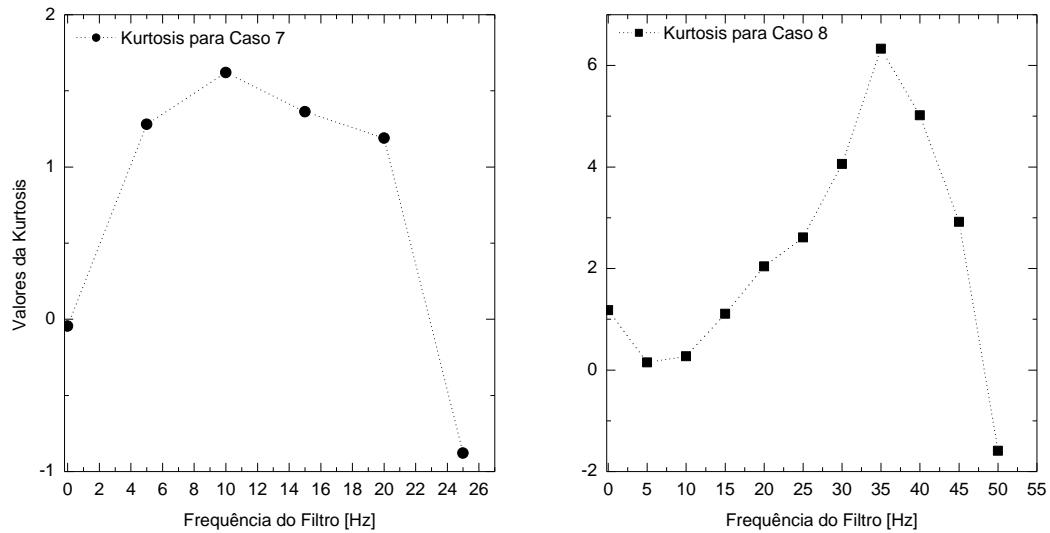


Figura 183. Kurtosis em função do filtro passa alta para a flutuação da fração de sólido no centro, Casos 7 e 8.

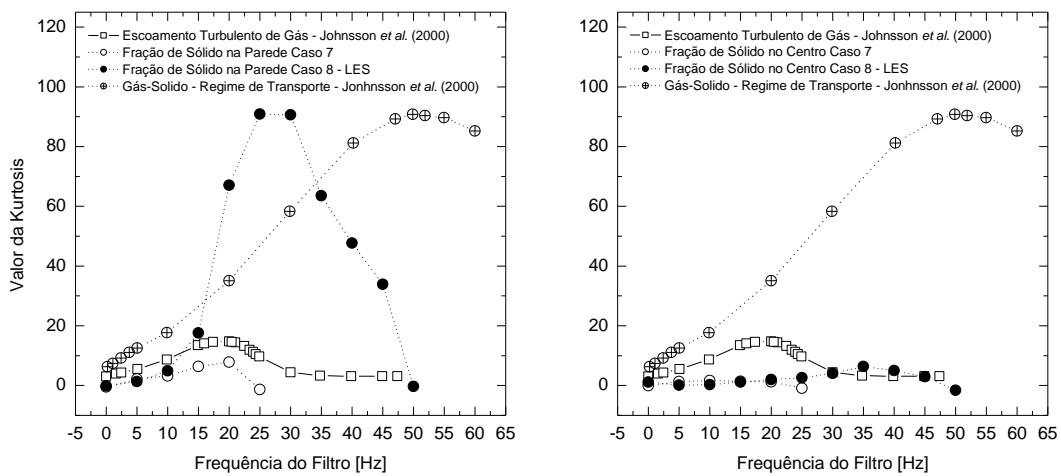


Figura 184. Comparaçao dos resultados experimentais (Johnsson *et al.* 2000) para a flutuação da pressão do leito com os numéricos (Casos 7 e 8) para a Kurtosis em função do filtro passa alta para a flutuação da fração de sólido na região da parede e no centro.

No item a seguir serão apresentados os resultados dos perfis transversais para os Casos 7 e 8 e comparado com os resultados experimentais de van den Moortel *et al.* (1998).

6.5.2.4 Perfis transversais

Neste sub-item são apresentados os perfis transversais da velocidade do sólido a 1 metro da entrada do reator. Na Figura 185 são apresentados os perfis para o Caso 7 e 8 comparados com os resultados experimentais de van den Moortel *et al.* (1998). van den Moortel *et al.* (1998) reporta que a velocidade média no centro do reator é de 0.0245 m/s. O Caso 7 apresenta uma velocidade negativa no centro com valor de 0.0052 m/s, enquanto para o Caso 8 a velocidade média é de 0.0476 m/s. Para o Caso 7 a velocidade média em toda a região de estudo é negativa com valor de 0.0034 m/s com desvio padrão de 0.0428 m/s, e para o Caso 8 a média é positiva com valor 0.0221 m/s com desvio padrão 0.0295.

O resultado apresentado na Figura 185 mostra que ambos os estudos de caso tem comportamento semelhante a tendência experimental, mas nenhum dos casos aproxima-se dos resultados experimentais. A velocidade transversal máxima experimental é 0.1 m/s enquanto o máximo para o Caso 8 é 0.068 m/s, que representa uma diferença percentual de 68 %. O desvio padrão reportado por van den Moortel *et al.* (1998) para a velocidade transversal é de 0.2 m/s. O comportamento qualitativo dos perfis é semelhante ao experimental. Nota-se que a região intermediária a parede e ao centro tem velocidades transversais maiores decrescendo na direção do centro. Esta região é a mesma apontada para os perfis axiais apresentados anteriormente. Observa-se que a velocidade transversal para o Caso 8 junto a parede é maior que para o Caso 7 e ambos são menores que o resultado experimental, indicando segregação menor para os estudos de caso quando comparado com os resultados experimentais.

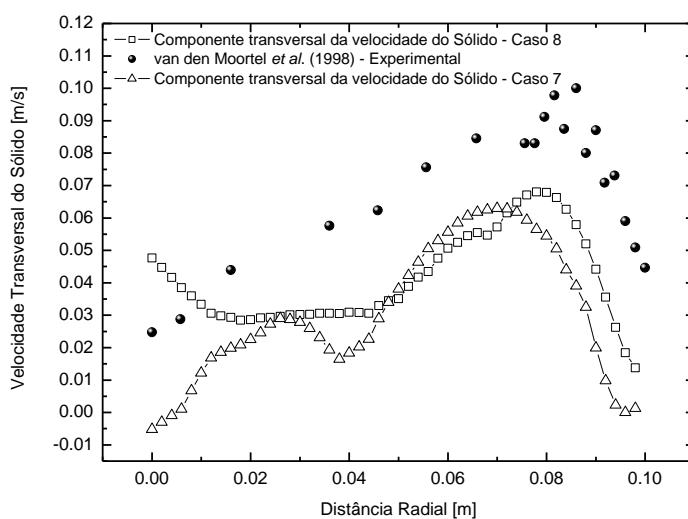


Figura 185. Perfis da velocidade transversal do sólido a um metro da entrada do reator para o Caso 7 e 8 e dados experimentais de van den Moortel *et al.* (1998).

Estes resultados indicam que o modelo sub-malha utilizado para a fase sólido (Caso 8) não modifica substancialmente os padrões de segregação. A Figura 185 revela também que as partículas para o Caso 8 movimentam-se em direção a parede com velocidade maior do que o Caso 7. Quando comparam-se os resultados para velocidade axial do sólido do Caso 7 e 8 (ver Figuras 78 e 91) observa-se que de fato o Caso 7 não representa adequadamente a região intermediária. Com os resultados da velocidade transversal fica claro que o Caso 7 tem menor velocidade transversal do que o Caso 8, sendo assim o Caso 8 prevê melhor a velocidade axial do sólido na região intermediária a parede e centro do reator. Desta forma, pode-se concluir que a utilização do modelo sub-malha melhora a aproximação aos dados experimentais tanto para as velocidades axiais como para as velocidades transversais.

Não serão apresentados resultados médios da velocidade transversal para os outros estudos de caso, por entendermos que os resultados do Caso 7 e 8 são representativos do estudo experimental, sendo que discussão pertinente em relação aos estudos de caso já foi realizada. A seguir serão apresentados os resultados médios para um estudo de caso onde foi reproduzido o experimento de Luo (1987).

6.6 Estudo de Caso referente ao trabalho experimental de Luo (1987) e numérico de Tsuo e Gidaspow (1990) e Cabezaz-Gómez (2003)

Os resultados que serão apresentados neste item referem-se a simulações numéricas do escoamento gás-sólido em um leito fluidizado circulante com uma razão entre a altura e o diâmetro de 72. Esta relação é diferente dos estudos de caso anteriores onde tinha-se uma razão de 10. O escoamento gás-sólido em um reator de craqueamento catalítico dá-se em unidades com alta razão de aspecto. Desta forma utilizou-se os resultados experimentais de Luo (1987) retirados de Cabezaz-Gómez (2003) para realizar comparação pertinente.

Tsuo e Gidaspow (1990) apresentam resultados numéricos para os resultados experimentais de Luo (1987), com boa aproximação dos perfis de fração de sólido e velocidade axial do sólido. Este autores utilizaram uma malha bidimensional com condição de deslizamento livre (*free-sleep*) para fase sólido e não deslizamento para fase gás. As simulações foram levadas até 18 segundos e os resultados médios apresentados em Gidaspow (1994). O *riser* com geometria cilíndrica encontrava-se inicialmente vazio, então o gás e sólido são injetados na base do reator, levando 4 segundos para ser preenchido completamente. As partículas utilizadas, tanto no experimento quanto nas simulações, são partículas Geldart B. A malha bidimensional tinha 10 volumes na direção radial e 72 na axial.

Cabezaz-Gomez (2003) realizou extenso estudo numérico da mesma forma que Tsuo e Gidaspow (1990). A malha computacional utilizada foi bidimensional com (12x75) perfazendo um total de 900 volumes, e seu segundo estudo com (22x297) dando um total de 6534 volumes. Na saída do reator construí-se um joelho de 90° da mesma forma que o encontrado no experimento e a mesma configuração utilizada por Tsuo e Gidaspow (1990), com condição de deslizamento livre para o sólido na parede.

Tsuji *et al.* (1998) realizam estudo numérico com o mesmo estudo de caso, comparando seus resultados numéricos com os resultados publicados por Tsuo e Gidaspow (1990). A finalidade deste estudo era comparar a formulação euleriana-euleriana com a formulação discreta desenvolvida por estes autores. Estes autores não utilizaram o joelho de 90° na saída do reator. As comparações são qualitativas de forma a observar as diferenças dos modelos na representação dos *clusters*. A malha utilizada por estes autores tinha 20x200 volumes na direção radial e axial respectivamente.

O presente estudo foi dividido em dois estudos de caso. O primeiro a ser apresentado manteve a viscosidade constante, e o segundo utilizou-se do modelo sub-malha apresentado anteriormente. Ambos estudos de caso foram realizados com a mesma malha tridimensional, com 16x16x600 volumes. Com esta resolução tem-se 9 partículas na direção radial e 18 na axial, tendo em conta que a partícula utilizada tem diâmetro de 520 µm, o mesmo utilizado por todos os autores citados acima.

A Tabela 9 apresenta as resoluções de malha utilizadas neste trabalho e nos citados acima. Observa-se que uma das resoluções utilizadas por Cabezaz-Gómez (2003), malha mais grosseira, é semelhante a utilizada por Tsuo e Gidaspow (1990). A resolução utilizada por Tsuo e Gidaspow (1990) não seria adequada para capturar *clusters* devido a resolução axial conter mais partículas do que espera-se encontrar num *cluster*, o mesmo ocorre com a resolução grosseira de Cabezaz-Gómez (2003). Contudo, a resolução radial apresentada para todos os autores é suficiente para captar *clusters*. Observe que a resolução adotada no presente trabalho é homogênea, no sentido de que não há grandes diferenças na quantidade de partículas capturada para cada uma das direções.

Nos dois estudos de caso que serão apresentados a seguir utilizou-se uma malha computacional sem o joelho de 90° na saída utilizado por Tsuo e Gidaspow (1990) e Cabezaz-Gómez (2003). Como salientado anteriormente, este tipo de modificação na saída do reator leva a soluções não homogêneas por efeito geométrico, com o intuito de minimizar este efeito, a saída é deixada livre, podendo-se então observar que a formação de *clusters* deve-se a fenômenos intrínsecos ao escoamento gás-sólido e não a efeitos geométricos.

Tabela 9. Comparação da resolução da malha computacional do presente trabalho com os trabalhos numéricos da literatura.

Tsuo e Gidaspow (1990)	Cabezas-Gómez (2003)	Tsuji <i>et al.</i> (1998)	Presente Trabalho
Resolução de (10x72) com (14x147) partículas	Resolução de (12x75) com (12x141) partículas e resolução de (22x297) com (7x36) partículas	Resolução de (20x200) com (7x53) partículas	Resolução de (16x16x600) com (9x9x18) partículas

6.6.1 Resultados de simulação para leito fluidizado do trabalho experimental de Luo (1987) – viscosidade constante

Este estudo de caso simula as condições experimentais de Luo (1987) onde tem-se um escoamento gás-sólido em um leito fluidizado com razão de aspecto na ordem de grandeza dos reatores de craqueamento catalítico. A partícula tem densidade de 2620 kg/m^3 e diâmetro de $520 \mu\text{m}$. Este particulado encontra-se na classificação de Geldart B. A velocidade de entrada do gás é de 5 m/s . Inicia-se a simulação com o leito a uma fração de sólidos de $0,0246$ com velocidade de sólido na entrada de $0,386 \text{ m/s}$, mesmo valor utilizado por Cabezas-Gómez (2003) e Tsuo e Gidaspow (1990). A única diferença é que estes autores iniciaram as simulações com o duto vazio. A viscosidade do sólido foi mantida constante assumindo o valor experimental reportado em Gidaspow (1994) de $0,509 \text{ kg/ms}$. Da mesma forma a viscosidade do gás foi mantida constante com o valor de $1,5 \times 10^{-5} \text{ kg/ms}$. A simulação foi conduzida até 18 segundos com passo de tempo de 0,004 segundos e a amostragem para realizar a média no tempo foi de 0,04 segundos.

A seguir são apresentados os resultados temporais da fração de sólido e velocidade do gás e do sólido a 3,4 metros da entrada do reator. A Figura 186 apresenta a variação temporal da velocidade do sólido na região central e próxima ao centro do reator. Observa-se que os eventos junto a parede tem freqüência menor do que no centro como observado para o estudo de caso anterior. As velocidades na região da parede são negativas enquanto no centro são positivas. A velocidade média na parede é de $0,2 \text{ m/s}$ e no centro $6,55 \text{ m/s}$ com desvio padrão de $0,03 \text{ m/s}$ e $2,21 \text{ m/s}$ respectivamente.

A Figura 187 (a) apresenta o espectro de potência para a velocidade do sólido na parede e no centro. Observa-se que a região central tem significativamente maior energia que a região próxima ao centro. O início da região inercial está bem definida para a velocidade na região próxima a parede, com início em torno de 1 Hertz, com inclinação $-5/3$ para ambas

regiões. Observa-se a formação de estruturas coerentes nas grandes escalas até o início da zona inercial.

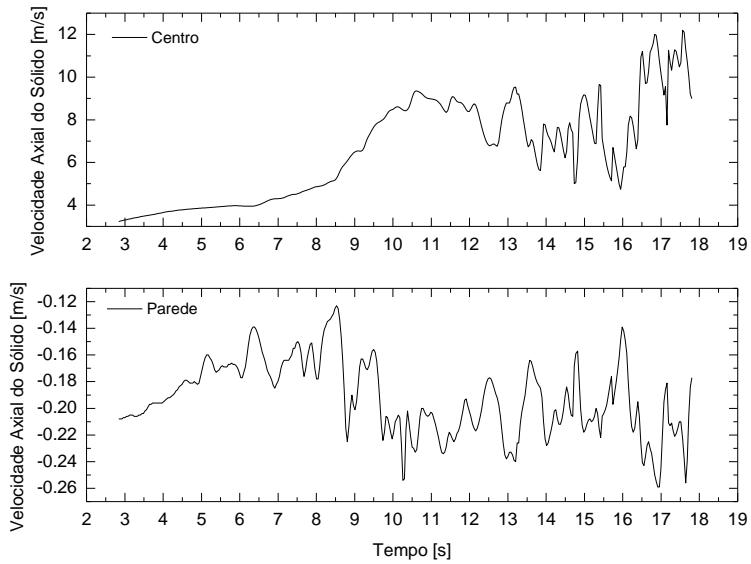


Figura 186. Evolução temporal da velocidade do sólido na região próxima a parede e central a 3,4 metros da entrada do reator. Obs: Viscosidade constante para ambas as fases.

A Figura 187 (b) apresenta o espectro da flutuação da velocidade do sólido na região próxima a parede e no centro. Observa-se que há maior energia turbulenta na região central do que na parede. O exato início da zona inercial não é visível, sendo que na região da parede, após 7 Hertz observa-se uma mudança na inclinação do espectro.

Em 0,13 Hertz observa-se um pico de energia, tanto na região central como na parede que pode ser identificado com a freqüência dominante. Gidaspow (1994) afirma que o fluxo de massa na saída oscila com um período médio de 5 segundos, levando a uma freqüência de 0,2 Hertz, afirmindo que esta freqüência está de acordo com a velocidade descendente de sólido na parede de 1 m/s. Em 0,24 hertz encontra-se no resultado da Figura 187 (b) o pico de um vale no espectro para velocidade do sólido na parede e no centro.

Os resultados médios para a velocidade axial do sólido são apresentados na Figura 188. Nesta figura são apresentados os resultados médios para a velocidade do sólido para dois períodos de média, um intervalo é de 10 segundos e outro de 15 segundos. Observa-se que com o intervalo maior da média o resultado médio da velocidade do sólido no centro distancia-se dos pontos experimentais. Os resultados da Figura 188 são comparados também com os resultados numéricos médios obtidos por Cabezas-Gómez (2003) para o mesmo valor de viscosidade. Observa-se que o resultado para 10 segundos de média aproxima-se muito

melhor aos dados experimentais do que os resultados de Cabezas-Gómez (2003), que utilizou geometria bidimensional e condição de escorregamento livre na parede. Os resultados numéricos para a velocidade de sólido apresentados em Gidaspow (1994) de Tsuo e Gidaspow (1990) não são apresentados nesta figura, mas é importante observar que os resultados médios de Tsuo e Gidaspow (1990) não convergem para o resultado experimental no centro do reator, como os resultados do presente trabalho e o trabalho de Cabezas-Gómez (2003). Gidaspow (1994) sugere que os resultados experimentais no centro do reator para a velocidade do sólido não são confiáveis. Mas isto parece não ser o caso, tendo em vista os resultados semelhantes de dois autores independentes (o presente trabalho e o trabalho de Cabezas-Gómez (2003). De qualquer forma, ambos resultados são dependentes do período que realiza-se a média, indicando que o regime pseudo estacionário ainda não foi alcançado para a velocidade do sólido.

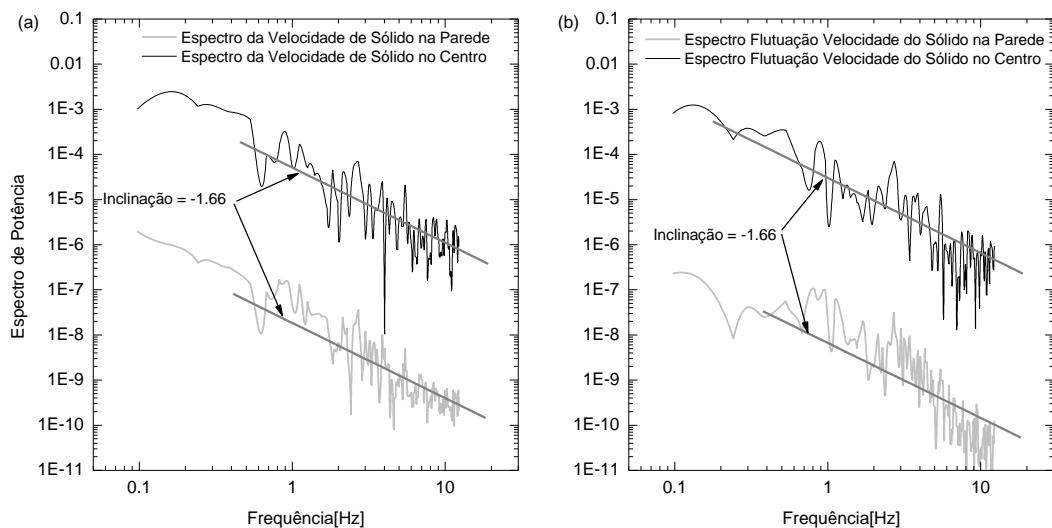


Figura 187. (a) Espectro de potência da velocidade do sólido na parede e no centro; (b) Espectro da flutuação da velocidade do sólido no centro e na parede.

Ainda observa-se na Figura 188 que o perfil médio para 10 segundos de média aproxima muito bem a tendência dos pontos experimentais na região da parede e intermediária a parede. Isto parece indicar que a utilização de geometria tridimensional para solução de problemas em leito fluidizado seja fortemente indicada. Cabe ressaltar que Tsuo e Gidaspow (1990) realizaram a média no período de 10 a 15 segundos, sendo que os melhores resultados obtidos na presente tese foram obtidos com a média de 2,84 a 12,84 segundos.

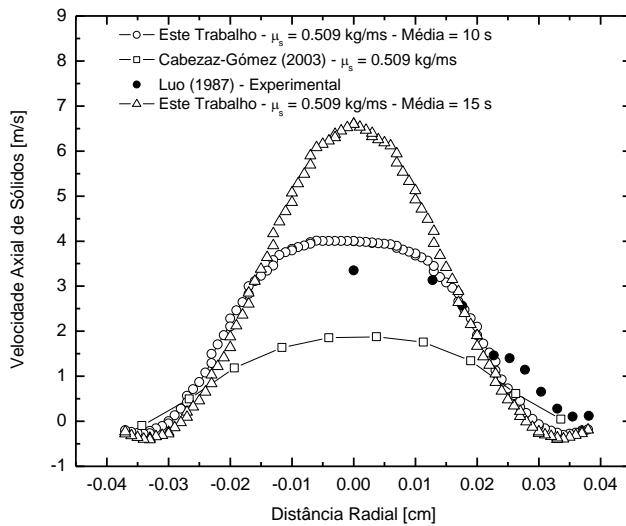


Figura 188. Perfil médio da velocidade do sólido a 3.4 metros da entrada do reator.

Cabezas-Gómez (2003), realizaram estudo paramétrico modificando a viscosidade do sólido. O melhor resultado obtido por este autor foi quando da utilização da viscosidade de sólido abaixo da experimental, com valor de 0,250 kg/ms. A comparação com este resultado e o do presente trabalho com a mesma viscosidade experimental é apresentada na Figura 189. Observa-se nesta figura que os resultados médios de Cabezas-Gómez (2003) aproximam-se melhor da região central, mas divergem na região próxima a parede, onde há formação de aglomerados de partículas. Os resultados da presente tese, com a viscosidade do sólido constante e igual ao experimental aproxima melhor a tendência dos resultados experimentais na região da parede e intermediária.

Vale lembrar que os resultados médios de Cabezas-Gómez, apresentados nas Figuras 188 e 189 são para a malha grosseira deste autor. Os resultados com malha mais refinada são muito semelhantes aos encontrados no presente trabalho, com valores médios no centro e na parede idênticos. Ou seja, mesmo utilizando geometria bidimensional, os resultados para a velocidade de sólido equiparam-se, bastando saber se o mesmo ocorre com os perfis médios de fração de sólido, que serão apresentados mais a frente.

A Figura 190 apresenta a evolução temporal da fração de sólido na região da parede e no centro do reator. Observa-se que a região central é mais diluída que a região da parede. Observa-se que a região junto a parede estruturas de *clusters* com fração de sólido pequena, com valor médio de 0,031 e no centro o valor médio é de 0,007 muito abaixo da região próxima a parede. Observa-se que as flutuações da fração de sólido na parede são de baixa

frequênci e no centro de alta frequênci. Os *clusters* presentes na região da parede tem fração de sólido substancialmente menores que os estudos de caso estudados anteriormente.

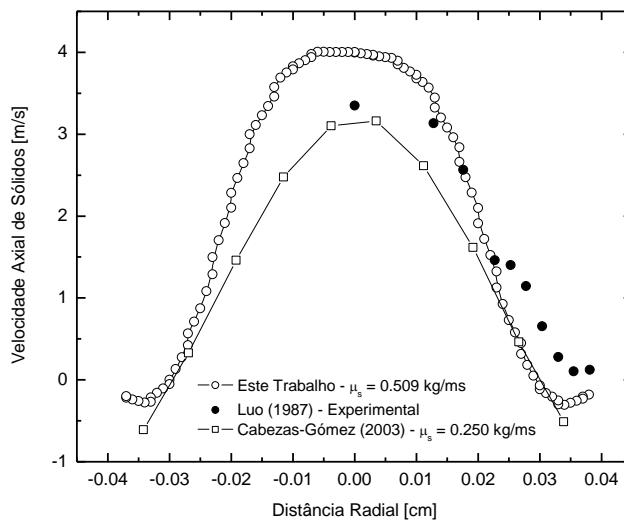


Figura 189. Comparação do perfil médio deste trabalho ($\mu_s=0,509 \text{ kg/ms}$) com o estudo numérico de Cabezas-Gómez (2003) ($\mu_s=0,250 \text{ kg/ms}$) e resultados experimentais de Luo (1987).

A Figura 191 apresenta a comparação dos resultados numéricos com os resultados experimentais de Tsuo (1987) e os resultados numéricos de Cabezas-Gómez (2003). Observa-se a boa concordância com os dados experimentais quando a média é realizada em um período de 10 segundos. Para períodos maiores não há praticamente modificação no perfil, apenas a fração de sólido máxima na região da parede é menor. Observe que a viscosidade é a mesma utilizada por Cabezas-Gómez (2003). Este autor apresenta resultados com viscosidade menor, não apresentados aqui, com resultados para o perfil de fração de sólido piores que os apresentados na Figura 191. Interessante notar, que diminuição do valor da viscosidade do sólido modifica o perfil de velocidade do sólido com boa aproximação aos dados experimentais, contudo, o mesmo comportamento não é observado para o perfil de fração de sólidos.

Quando a viscosidade é diminuída o ajuste é pobre em todas as regiões do *riser*, ou seja, na região central e intermediária e próxima a parede o ajuste com os dados experimentais para a fração de sólido é pobre. De fato as estruturas encontradas na meso-escala, *clusters* e *strands*, geram uma diminuição no arraste e um aumento da viscosidade, como observaram Agrawal *et al.* (2001). Este comportamento é possível de ser observado na comparação das Figuras 188,189 e 191. Com a diminuição da viscosidade do sólido o perfil de velocidade de

sólido aproxima-se do comportamento experimental, mas o perfil de fração de sólido não, devido a presença de aglomerados de partículas presentes tanto na região central como na parede, induzindo um aumento na viscosidade e uma diminuição no arraste.

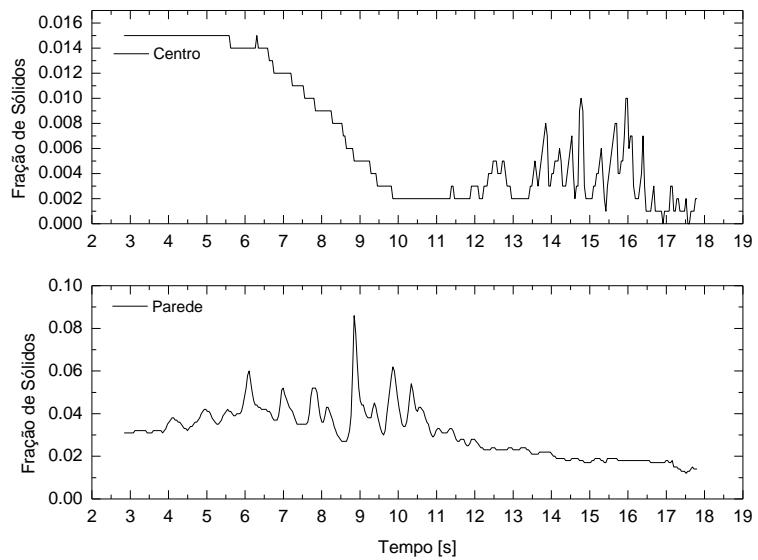


Figura 190. Evolução temporal da fração de sólido na região da parede e no centro. Obs: viscosidade constante para ambas as fases.

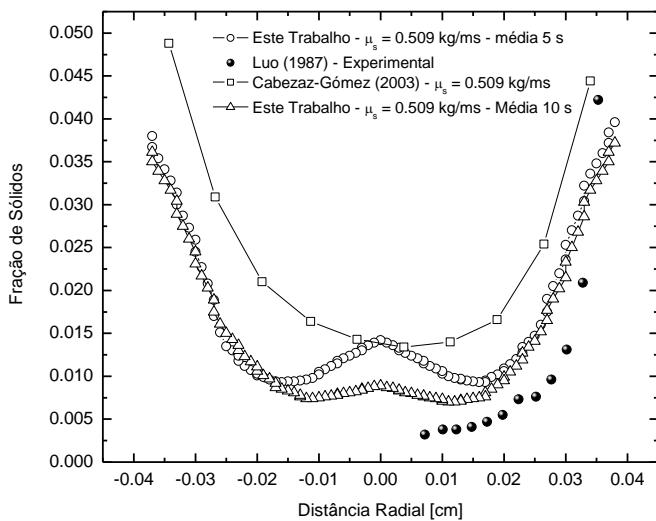


Figura 191. Comparação do perfil médio deste trabalho ($\mu_s=0,509 \text{ kg/ms}$) com o estudo numérico de Cabezas-Gómez (2003) ($\mu_s=0,509 \text{ kg/ms}$) e resultados experimentais de Luo (1987) para a fração de sólidos a 3,4 metros da entrada do reator.

A Figura 192 (a) apresenta o espectro de potência para a fração de sólido no centro e na região próxima a parede. Observa-se que a energia total é maior na parede do que no

centro por toda faixa de freqüências. O espectro de potência na região da parede tem inclinação -3,72, que inicia-se em torno de 3 hertz, enquanto o espectro de potência para o centro tem inclinação -5/3 na região inercial que inicia em torno de 3 hertz. O mesmo comportamento observa-se na Figura 192 (b) para o espectro de potência para a flutuação da fração de sólidos.

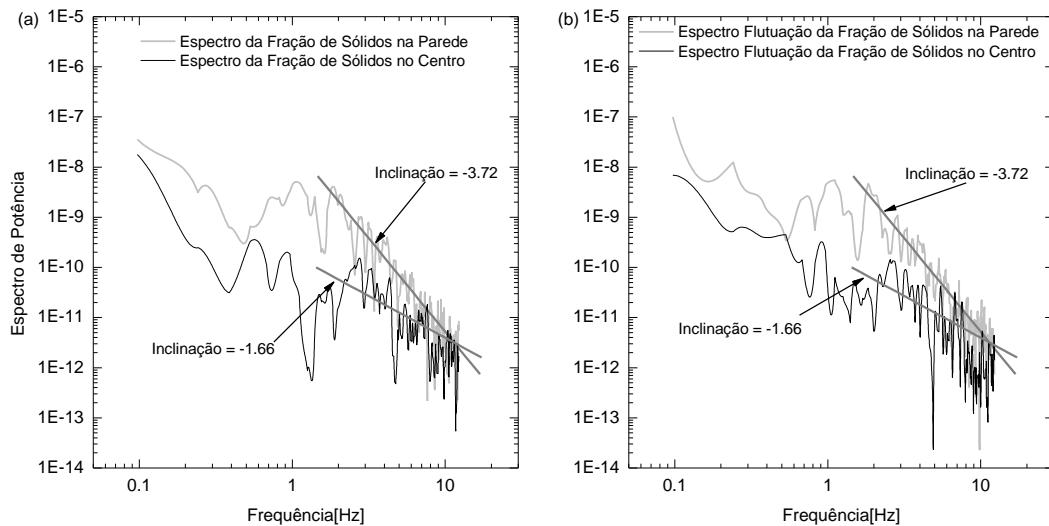


Figura 192. (a) Espectro de potência da fração de sólidos na parede e no centro; (b) Espectro de potência da flutuação da fração de sólidos na parede e no centro.

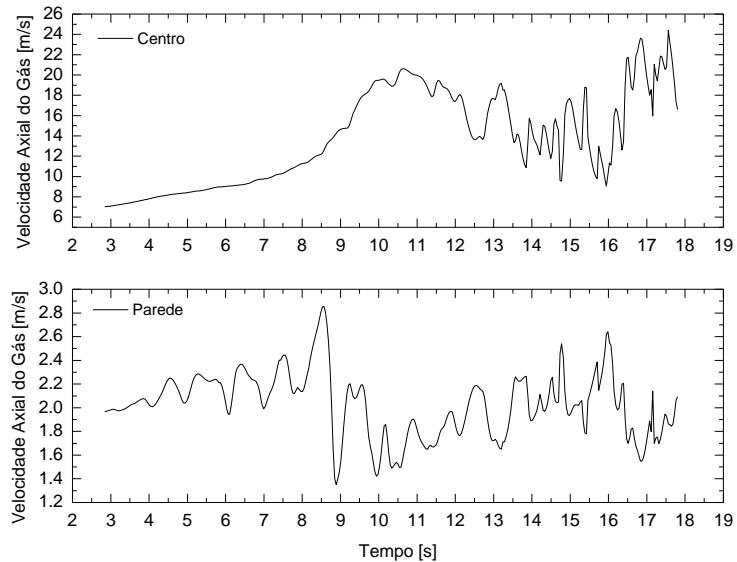


Figura 193. Evolução temporal da velocidade axial do gás na região da parede e no centro.

Obs: viscosidade constante para ambas as fases.

A evolução temporal da velocidade do gás é apresentada na Figura 193, onde observa-se que no centro as velocidades são muito maiores que na região próxima a parede. No centro as freqüências são maiores e na parede menores, evidenciando a presença de aglomerados de partículas. A velocidade média do gás no centro é 13,78 m/s com desvio padrão de 4,6 m/s enquanto junto a parede é 2,08 m/s com desvio padrão de 0,27 m/s.

A Figura 194 (a) apresenta o espectro de potência para velocidade do gás no centro e na parede. Observa-se que há maior energia no centro do que na parede e os espectros obedecem decaimento com inclinação $-5/3$ em ambas as regiões. A freqüência dominante para o centro encontra-se a uma freqüência de 0,18 hertz. Em 3 Hertz inicia-se a zona inercial estendendo-se até 12 Hertz. O espectro para flutuação da velocidade do gás, Figura 194 (b), tem comportamento semelhante. Observam-se a formação de estruturas coerentes nas grandes escalas. Observa-se que a fase sólido (Figura 168 (a) e (b)) tem menor energia nas grandes escalas do que a fase gás (Figuras 194 (a) e (b)).

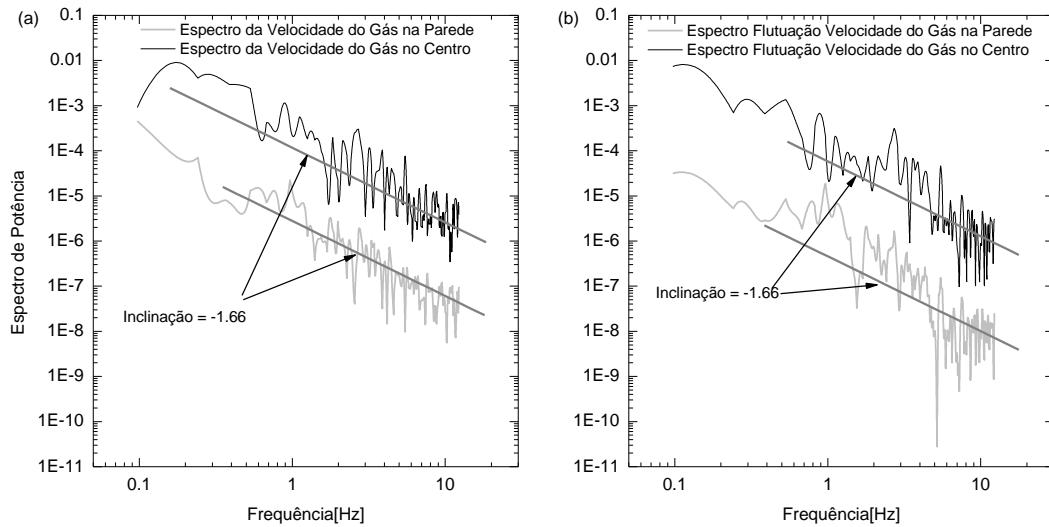


Figura 194. (a) Espectro de potência para velocidade do gás no centro e na parede; (b) Espectro de potência da flutuação da velocidade do gás no centro e na parede.

Na Figura 195 compara-se a média da velocidade do gás a 3,4 metros da entrada do reator. Observa-se que os resultados não se assemelham aos experimentais de nenhuma forma. Quando aumenta-se o tempo da média, o resultado no centro diverge. Resultado similar foi encontrado por Cabezaz-Gómez (2003), tanto para a malha grosseira com para a refinada.

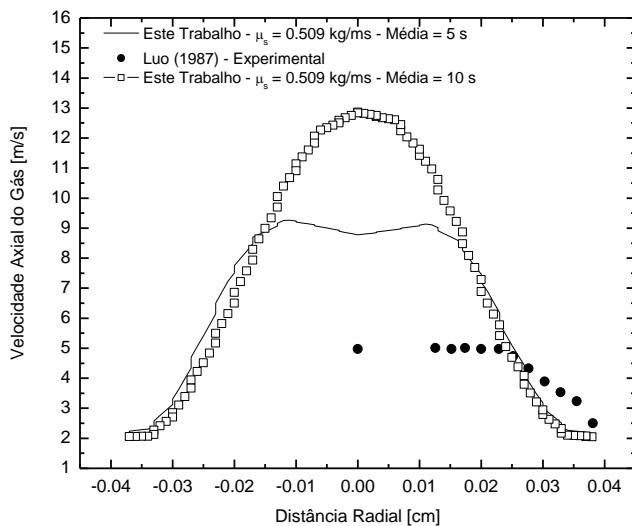


Figura 195. Comparação do perfil médio da velocidade do gás deste trabalho resultados experimentais de Luo (1987).

Estranhamente os resultados numéricos médios apresentados em Gidaspow (1994) para Tsuo e Gidaspow (1990) tem excelente concordância com os resultados experimentais. Os resultados de Tsuo e Gidaspow (1990) para a fração de sólidos e para a velocidade de sólido são piores dos obtidos pelo presente trabalho, mas para a velocidade de gás são muito melhores. Gidaspow (1994) justifica seu resultado para a velocidade axial de sólidos não concordar com os resultados experimentais questionando a validades destes em regiões diluídas como é o centro do reator. Contudo, Cabezaz-Gómez (2003) e o presente trabalho encontram resultados similares para a velocidade do sólido no centro do reator concordando com os resultados experimentais. Mas para o gás os resultados divergem no centro.

Desta forma, pode-se concluir que não são os resultados para a velocidade do sólido no centro do reator que estão errados, e sim os para a velocidade do gás, tendo em vista a boa aproximação obtida para os perfis de fração de sólidos e velocidade de sólido, principalmente para o presente trabalho, sendo que o trabalho de Cabezaz-Gómez (2003) apenas corrobora nossos resultados e vice-versa. As velocidades altas encontradas para a velocidade do sólido estão coerentes com a presença de *clusters*. Nos resultados de fração de sólido no plano central do reator observa-se a formação de *clusters* no centro do reator. Estes *clusters* geram caminhos preferenciais para a passagem de gás que tem uma área menor para escoar podendo desta forma gerar altas velocidades. Isto é possível de ser observado nos resultados da evolução da fração de sólido no centro, Figura 190, onde observa-se que a partir de 10 segundos iniciam-se flutuações de baixa freqüência, característica da presença de *clusters*.

naquela região, observado nos perfis de fração de sólido no plano central não apresentados aqui.

De qualquer forma não há como comprovar qual o resultado correto, pois não temos como comparar os resultados numéricos de Luo e Gidaspow (1990) com os nossos. Contudo deve-se salientar que Tsuji *et al.* (1998) observaram diferenças fundamentais na comparação com os resultados obtidos por Luo e Gidaspow (1990). Uma delas está associado aos resultados de fluxo de massa em função do tempo. Tsuji *et al.* (1998) observam que os resultados de Luo e Gidaspow(1990) apresentam comportamento não físico no que concerne ao tempo que os sólidos iniciam a saída do reator. Outro aspecto importante encontrado nos resultados de Tsuji *et al.* (1998) são os perfis de gás em um plano central do reator, onde observa-se nitidamente que a velocidade do gás tem o valor de 10 m/s, valor semelhante ao encontrado para a velocidade do gás no centro em nossos resultados e nos de Cabezas-Gómez (2003). O mesmo ocorre com a velocidade de sólidos, onde a velocidade de sólido é de 2,5 m/s, de acordo com os resultados obtidos neste trabalho.

6.6.2 Resultados de simulação para leito fluidizado do trabalho experimental de Luo (1987) – modelo sub-malha para a viscosidade do gás e do sólido

Este estudo de caso simula as condições experimentais de Luo (1987). A partícula tem densidade de 2620 kg/m^3 e diâmetro de $520 \mu\text{m}$. A velocidade de entrada do gás é de 5 m/s. Inicia-se a simulação com o leito a uma fração de sólidos de 0,0246 com velocidade de sólido na entrada de 0,386 m/s, mesmo valor utilizado por Cabezas-Gómes (2003) e Tsuo e Gidaspow (1990). A viscosidade do sólido é corrigida com modelo sub-malha, ou seja, utiliza-se a formulação LES para o sólido e para a fase gás como descrito anteriormente. A simulação foi conduzida até 18 segundos com passo de tempo de 0,001 segundos e a amostragem para realizar a média no tempo foi de 0,01 segundos.

A Figura 196 apresenta a evolução temporal da velocidade do sólido no centro e na parede do reator. A velocidade média na parede é negativa com o valor de 0,2 m/s enquanto no centro a velocidade é ascendente com valor médio de 9,72 m/s.

O desvio padrão na parede é de 0,023 m/s enquanto no centro é de 1,97 m/s. Observa-se que na parede a velocidade média do sólido é similar ao caso anterior, onde não foi utilizado o modelo sub-malha, contudo no centro do leito a velocidade média é muito superior. A região da parede apresenta-se com flutuações de baixa freqüência e no centro de alta freqüência.

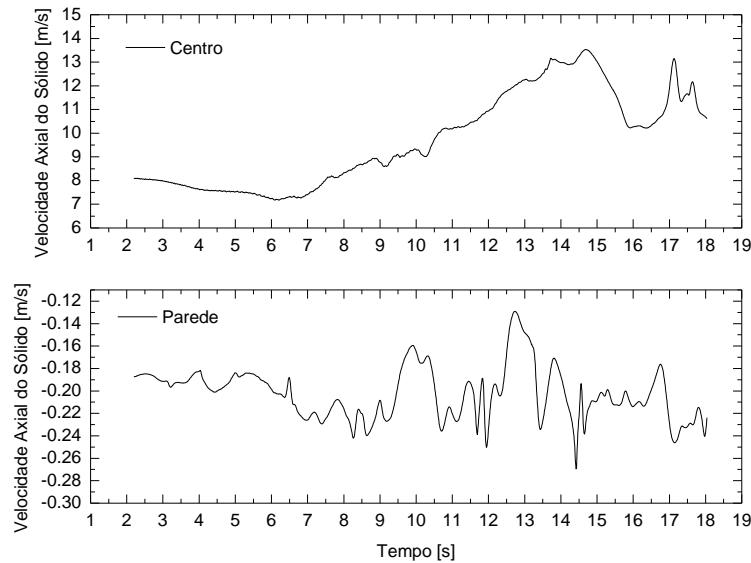


Figura 196. Evolução temporal da velocidade axial do sólido no centro e na parede a 3,4 metros da entrada. Obs: Modelo sub-malha para a fase gás e sólido.

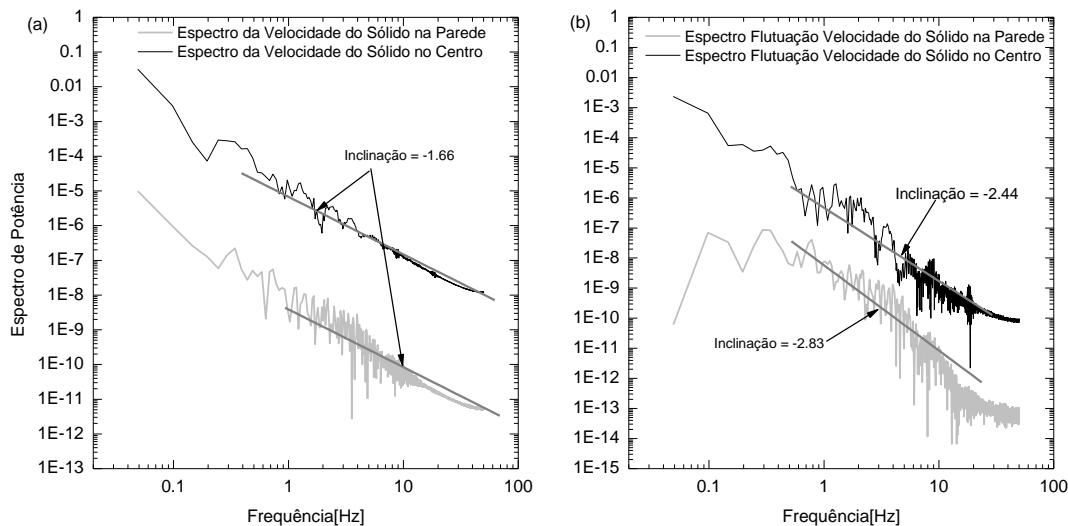


Figura 197. (a) Espectro de potência da velocidade do sólido na parede e no centro; (b) Espectro da flutuação da velocidade do sólido no centro e na parede.

A Figura 197 apresenta o espectro de potência para a velocidade do sólido e a flutuação da velocidade do sólido no centro e na região próxima a parede. O espectro de potência para a energia total (Figura 197 (a)) mostra que na região central encontra-se mais energia do que na região próxima a parede. Ambos espectros apresentam decaimento da energia com inclinação $-5/3$, com início em torno de 1 Hertz. A Figura 197 (b) apresenta o

espectro de potência para a flutuação da velocidade do sólido no centro e na parede. Observa-se que há maior energia cinética turbulenta na região central do que na parede. A inclinação para cada uma das regiões é diferente, com inclinação na zona inercial de 2,44 a 2,83. Observa-se que em torno de 20 Hertz inicia-se uma modificação substancial na inclinação, principalmente na região próxima a parede. Na região da parede observam-se estruturas coerentes nas grandes escalas até em torno de 1 Hertz, quando inicia-se o decaimento da energia. Em torno de 2 Hertz observa-se um vale no espectro de energia para a região próxima a parede.

Os resultados médios para a velocidade axial do sólido são apresentados na Figura 198. Nesta figura são apresentados os resultados médios para a velocidade do sólido para um período de média de 8 segundos (2,2 a 10,20 segundos). Observa-se que há uma excelente concordância com os dados experimentais na região próxima a parede, divergindo na região central. Os valores numéricos médios para a velocidade do sólido são substancialmente maiores no centro quando comparados com os resultados médios experimentais. O aumento do período da média não modifica este comportamento. Este comportamento foi observado anteriormente para os estudos de caso anteriores (Caso 8 por exemplo), onde observou-se que houve um arraste maior na região central (mais diluída) quando da utilização do modelo sub-malha. Nos estudos de caso presentes nesta seção a região central é extremamente diluída.

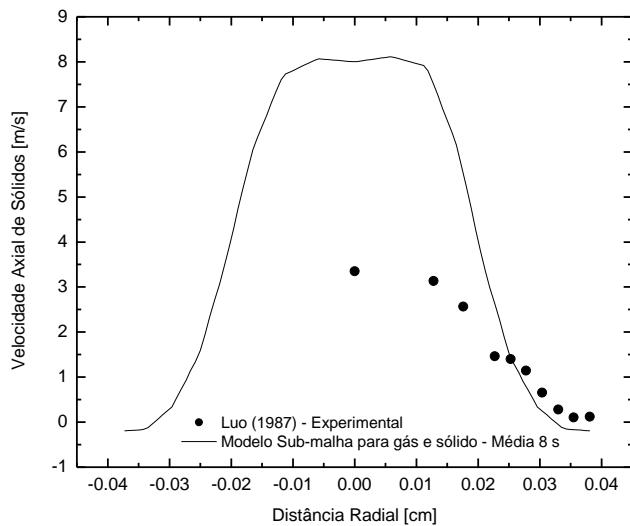


Figura 198. Comparação do perfil médio deste trabalho (modelo sub-malha para fase gás e sólido) e resultados experimentais de Luo (1987).

A evolução temporal para a fração de sólidos é apresentada na Figura 199. Observa-se que a fração de sólidos na região central é substancialmente menor que na região próxima a

parede. A fração de sólido média na parede é de 0,04 enquanto que no centro o valor médio é de 0,004, ou seja, dez vez menor. Este fato evidencia a presença de uma região anular densa e uma região central diluída bem definida.

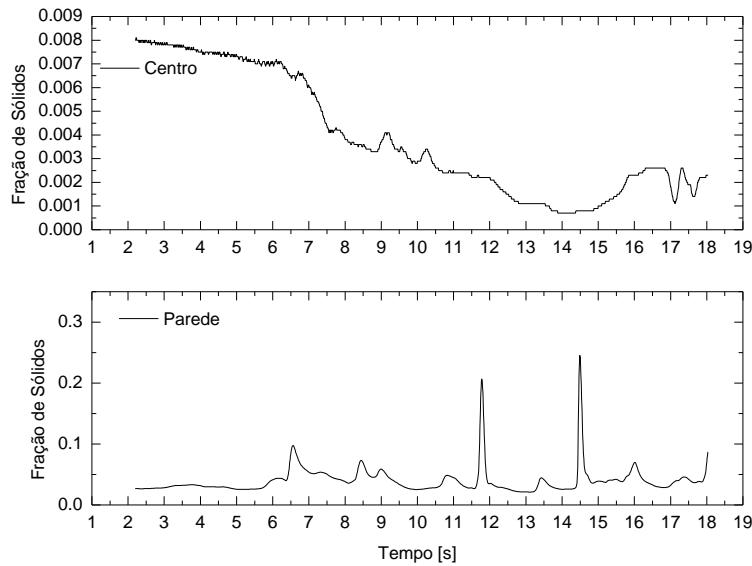


Figura 199. Evolução temporal da fração de sólido na região da parede e no centro. Obs: modelo sub-malha para ambas as fases.

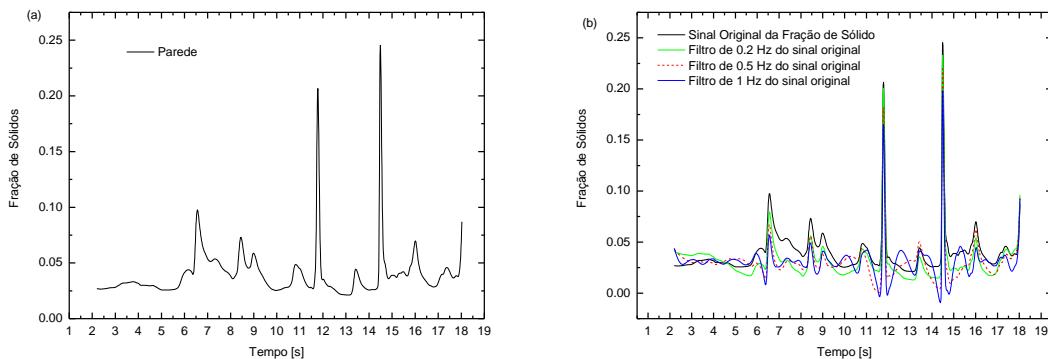


Figura 200. (a) evolução temporal da fração de sólidos na região junto a parede; (b) evolução temporal da fração de sólidos na parede com sucessivos filtros passa alta (0.2, 0.5 e 1 Hz).

Na região da parede observa-se a presença de picos de aumento de fração de sólido. O primeiro pico encontra-se em 6,5 segundos o próximo em 11,7 segundos e o terceiro em 14,5 segundos. De fato existem outros picos de fração de sólido que podem ser melhor observados na Figura 200 (a). Com o objetivo de observar as freqüências naturais apresenta-se a Figura 200 (b) onde é possível observar que as estruturas na região junto a parede são caracterizadas

por baixas freqüências, sendo que 0,2 Hertz é a freqüência natural correspondente as grandes escalas, possível de ser observado no espectro de potência apresentado na Figura 201 (a).

O espectro de potência da fração de sólido (Figura 201 (a)) evidencia que há maior energia nas grandes escalas próximo a parede do que no centro. O espectro de energia total mostra a região inercial com decaimento $-5/3$ iniciando-se em torno de 1 Hertz estendendo-se até em torno de 5 Hertz quando então a inclinação é modificada com valor de $-3,83$. A região central tem um comportamento diferenciado. Observa-se uma inclinação do espectro de potência de $-5/3$ e com menor energia que a região da parede.

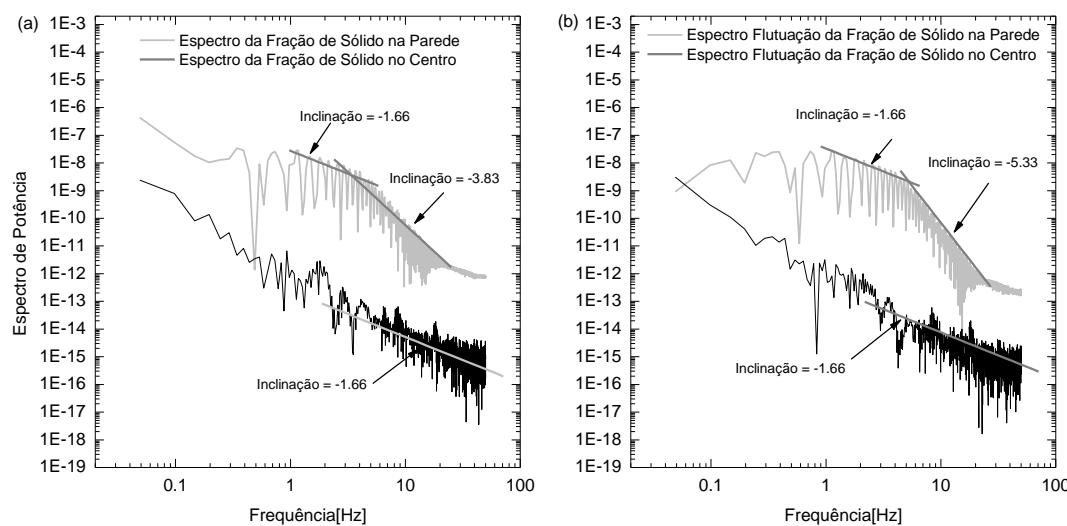


Figura 201. (a) Espectro de potência da fração de sólidos na parede e no centro; (b) Espectro de potência da flutuação da fração de sólidos na parede e no centro.

A Figura 201 (b) apresenta o espectro para a flutuação da fração de sólido no centro e na região da parede do reator. Observa-se que a parede tem maior energia cinética turbulenta em todas as regiões do espectro. A figura identifica uma região com decaimento $-5/3$ que inicia-se em torno de 1 Hertz estendendo-se até 5 Hertz quando a inclinação é modificada com valor de $-5,33$, valor semelhante ao reportado por Johnsson *et al.* (2000). Na região central o comportamento é diferenciado com decaimento $-5/3$. Nas grandes escalas observa-se a presença de estruturas coerentes de baixa freqüência, como mencionado anteriormente. Importante ressaltar que os resultados deste estudo de caso são para um leito fluidizado em condições de transporte, muito semelhantes ao utilizado experimentalmente por Johnsson *et al.* (2000).

Os resultados médios para a fração de sólidos são apresentados na Figura 202. A comparação com os dados experimentais é muito boa em todas as regiões do leito, com sensível melhora da predição quando comparado com os resultados numéricos para viscosidade constante. Este resultado evidencia a boa performance do modelo sub-malha para a fase gás e sólido no que concerne a distribuição média de fração de sólidos no interior do leito, o mesmo não ocorre para a velocidade média do sólido para a região diluída.

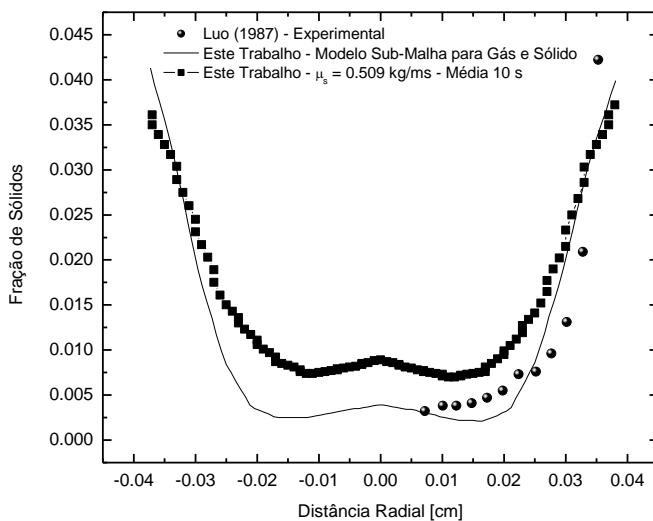


Figura 202. Comparação do perfil médio da fração de sólido com os dados experimentais de Luo (1987) e caso anterior com viscosidade constante a 3,4 metros da entrada do reator.

A Figura 203 apresenta a evolução temporal da velocidade do gás na região da parede e no centro do reator. A velocidade média na parede é positiva com valor de 1,38 m/s e na região central é 15,04 m/s. Na região central os valores médios numéricos são muito superiores aos experimentais.

Observa-se que o comportamento na região central apresenta-se com altas freqüências e na região da parede com baixas. O desvio padrão na região da parede é de 0,4 m/s enquanto que no centro o desvio é de 2,79 m/s.

A Figura 204 (a) apresenta o espectro de potência para energia total da velocidade do gás na região da parede e no centro do reator. Tanto na parede como no centro observa-se a tendência de decaimento com inclinação $-5/3$. Ao contrário do observado para a fase sólido a região central tem maior energia do que a região da parede.

A Figura 204 (b) apresenta o espectro de potência para a flutuação da velocidade do gás na região próxima a parede e no centro. Na região da parede observa-se um pico nas grandes escalas em 0,2 Hertz. Nesta região observa-se a formação de estruturas coerentes que

são formadas e destruídas levando ao decaimento com inclinação -2,13. O espectro de potência para a região central obedece a um decaimento $-5/3$ nas grandes escalas convergindo para -2.13 nas menores em torno de 4.4 Hertz. O comportamento da região próxima a parede e no centro confunde-se com decaimento semelhante a partir de 10 Hertz.

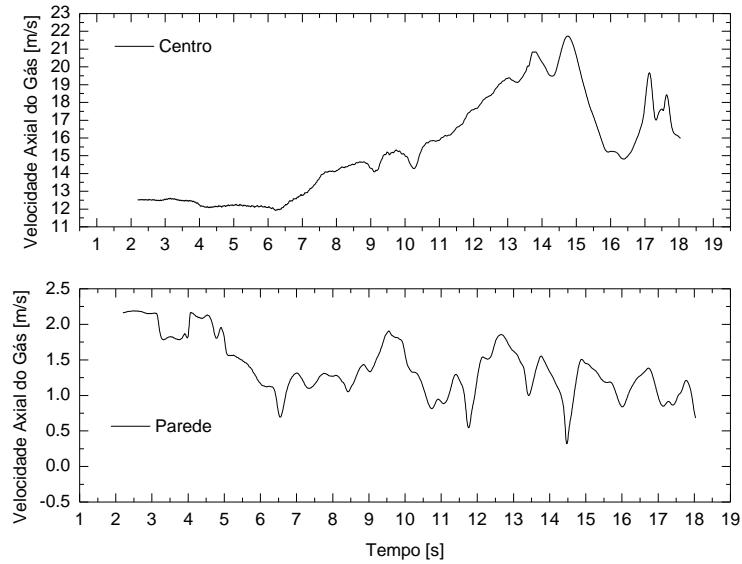


Figura 203. Evolução temporal da velocidade do gás na região da parede e no centro a 3,4 metros da entrada do reator.

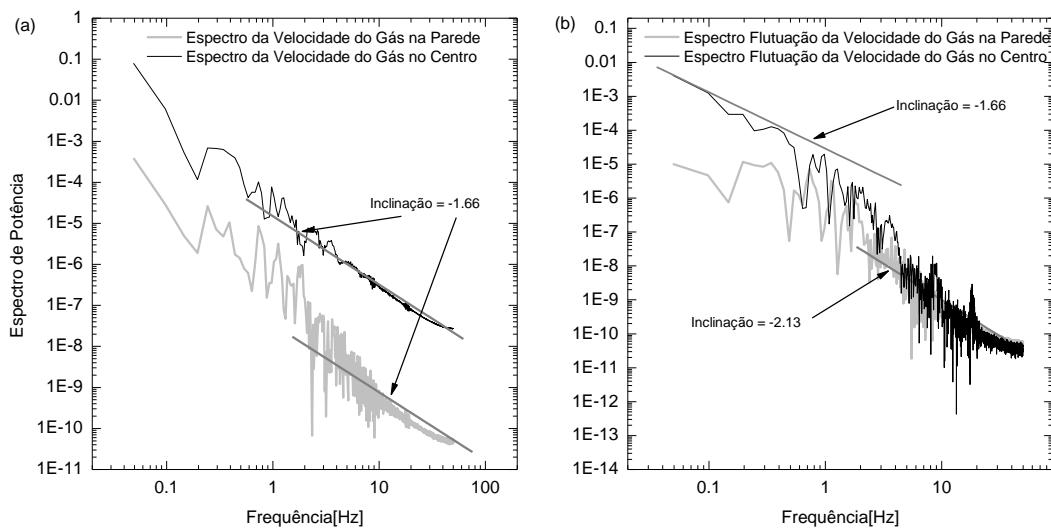


Figura 204. (a) Espectro da velocidade do gás na região próxima a parede e no centro; (b) Espectro da flutuação da velocidade do gás na região próxima a parede e no centro.

A Figura 205 apresenta a comparação do perfil numérico médio da velocidade do gás a 3.4 metros da entrada do reator com resultados numéricos para o caso laminar e resultados experimentais de Luo (1987). Observa-se uma grande discordância com os dados experimentais tanto para o modelo sub-malha como para o modelo laminar, como apresentado no caso anterior.

Interessante observar que os perfis numéricos médios para a velocidade do sólido e velocidade do gás diverjam substancialmente dos dados experimentais enquanto os perfis para a fração de sólidos converja para os dados experimentais.

No que concerne aos resultados numéricos médios para a velocidade do sólido para o modelo sub-malha, pode-se concluir que a região central (mais diluída) não é resolvida adequadamente. Os resultados do presente estudo de caso e dos anteriores mostram que o arraste é sobre estimado, e quanto mais diluído é o sistema maiores são as diferenças. Contudo um aspecto importante é que na região densa, próxima a parede e na região intermediária ao centro o modelo sub-malha aproxima muito bem os resultados experimentais. A seguir será apresentada uma breve discussão dos resultados encontrados neste item.

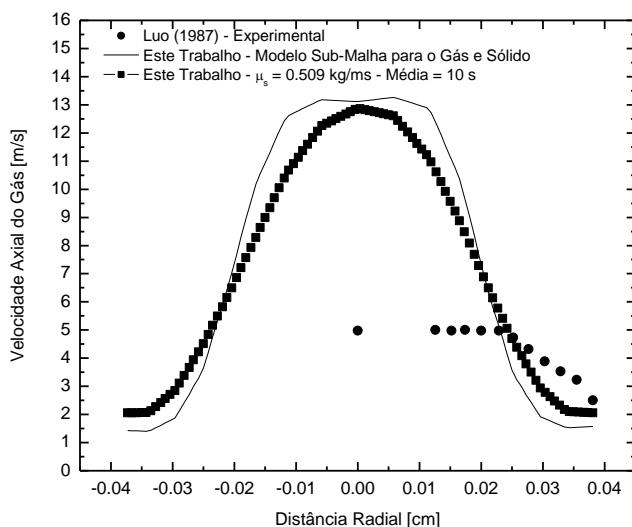


Figura 205. Comparação do perfil numérico médio da velocidade axial do gás com viscosidade constante, modelo sub-malha e resultados experimentais de Luo (1987) a 3,4 metros da entrada do reator.

Discussão

Observou-se que a solução numérica tridimensional sem a utilização do modelo sub-malha, apresentou melhores resultados para a velocidade do sólido do que os resultados

utilizando o modelo sub-malha. O perfil de fração de sólido médio é melhor resolvido pelo modelo sub-malha. O modelo sub-malha resolve melhor a região densa junto a parede e sobre estima o arraste na região central.

Os *clusters* são formados eminentemente na região próxima a parede e eventualmente na região central. Não são observadas em nenhuma das simulações a formação de estruturas heterogêneas da forma apresentada nos itens anteriores onde simulou-se partículas Geldart A e B. Aqui deve-se fazer uma comparação qualitativa dos resultados apresentados anteriormente com os encontrados neste item. Apesar de que as partículas utilizadas no presente item estarem classificadas como Geldart B observa-se que para condições muito diluídas, como é o caso, as estruturas de *clusters* mantêm-se junto a parede.

O número de Reynolds calculado em função do diâmetro do duto e da velocidade de entrada do gás é 27214. Desta forma é possível estimar a escala de comprimento das menores escalas da turbulência que neste caso é: $\eta \sim 0,00359$ cm. A partícula utilizada tem dimensão de 520 μm , ou seja 0,052 cm. Observa-se que a partícula utilizada é 14 vezes maior que as menores escalas da turbulência. Desta forma espera-se que a partícula, quando em contato com um vórtice presente nesta escala, dissipe sua energia.

Importante notar que para os estudos de caso anteriores as partículas eram menores que as menores escalas da turbulência. Ou seja, pode-se afirmar com confidencia que mesmo sendo classificada como Geldart B estas partículas irão comportar-se de forma diferente do apresentado anteriormente. O número de Stokes estimado utilizando a Equação 6.2 é de: $St = 2,1$, neste caso $St > 1$ levando a conclusão que as partículas pouco respondem aos vórtices. Note que este número de Stokes foi calculado em função das grandes escalas. Quando calcula-se o St com base nas menores escalas obtém-se $St = 347$. Ou seja, de fato as partículas não respondem as flutuações das menores escalas pois $St \gg 1$. Desta forma é possível concluir que as partículas não são influenciadas pelas menores escalas da turbulência e pouco influenciadas pelas grandes escalas. Outro fato curioso é que a resolução da malha computacional não resolve as menores escalas da turbulência pois é em torno de 130 vezes maior, mas com relação a fase sólida a resolução é excelente. Este aspecto parece não fazer diferença alguma para os perfis de fração de sólido, mas para os perfis de velocidade do gás sim.

A malha computacional utilizada neste estudo é mais refinada do que a utilizada por Tsuo e Gidaspow (1990), além disto, é tridimensional. Os resultados de Tsuo e Gidaspow (1990) são substancialmente melhores do que os apresentados aqui para a velocidade do gás e do sólido a exceção encontra-se na distribuição de fração de sólido, principalmente quando utiliza-se o modelo sub-malha para a fase gás e sólido.

Tendo em vista que a solução numérica realizada no presente trabalho sem utilizar modelo sub-malha obteve boa concordância com os dados experimentais da fração de sólido e velocidade axial do sólido, pode-se concluir que utilização do modelo sub-malha sobreestima o arraste levando a diferenças nos perfis de velocidade do sólido em regiões diluídas. Apesar destas evidências encontra-se necessário realizar estudo mais aprofundado sobre o efeito da viscosidade do sólido quando trata-se de escoamentos diluídos. Ou seja, os resultados apresentados nesta seção mostram que o modelo sub-malha utilizado no presente trabalho, onde utilizou-se modelo do tipo Smagorinsky, necessita ajuste para as condições aqui apresentadas.

CAPÍTULO 7

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Neste capítulo são apresentadas as considerações gerais relacionadas ao presente trabalho e a abordagem utilizada para solução do escoamento gás-sólido em um leito fluidizado turbulento. Ressaltam-se os problemas encontrados e apresentam-se as conclusões encontradas, e por final são apresentadas recomendações para trabalho futuros.

7.1 Considerações gerais

O presente trabalho utilizou-se da abordagem Euleriana-Euleriana para resolver o escoamento gás-sólido em um leito fluidizado turbulento seguindo as indicações apontadas por Agrawal (2000) e Agrawal *et al.* (2001). Estes autores propuseram a utilização de modelagem sub-malha com a finalidade de incorporar, na solução das equações do modelo de dois fluidos, a formação de estruturas encontradas experimentalmente denominadas *clusters* e *strands*. Estas estruturas encontram-se na meso-escala e levam a flutuações persistentes em diferentes escalas espaciais e temporais. A sugestão deste tipo de abordagem deve-se a impossibilidade de resolver um leito fluidizado turbulento industrial na escala espacial e temporal onde estas estruturas encontram-se.

Em seu estudo numérico Agrawal *et al.* (2001) encontraram que o coeficiente de arraste efetivo (Ver Apêndice A), obtido realizando uma média dos resultados em um pequeno domínio periódico, é apreciavelmente menor do correspondente no estado homogêneo e que este era dependente da dimensão do domínio computacional (refino da malha). Encontraram que o coeficiente de arraste depende da fração de sólidos. Eles também observaram que a viscosidade efetiva e as tensões normais na fase partícula, obtidas realizando-se uma média na meso-escala, são apreciavelmente maiores do que no estado de fluidização homogêneo (calculado pela teoria cinética granular) e que dependem da dimensão do domínio computacional. Baseados nestas observações concluíram que as estruturas não resolvidas da meso-escala poderiam contribuir significativamente com os resultados preditos por soluções numéricas com malha grosseira.

É importante ressaltar que quando da utilização das equações do modelo de dois fluidos para resolver problemas industriais o arraste é sobre estimado, fato este reconhecido na comunidade que utiliza esta formulação (Zhang e van der Heyden (2001); Zhang e Reese (2003); Yang *et al.* (2003) e Heynderickx *et al.* (2004)). Se um *cluster* tem dimensões de 10 a 100 partículas como mencionado anteriormente, espera-se que o coeficiente de arraste seja menor daquele obtido para as dimensões de uma partícula. Assim, pode-se olhar para o arraste como um arraste efetivo usando um modelo sub-malha que leva em conta a presença de *clusters* como apresentado por Yang *et al.* (2003) e Heynderickx *et al.* (2004).

Em nosso trabalho não foi utilizado modelo sub-malha para modelar o efeito da presença dos *clusters* no arraste, com a finalidade de observar se de fato este efeito persiste quando da utilização do modelo sub-malha para correção da viscosidade efetiva do sólido e do gás, para o refino de malha utilizado no presente trabalho. De fato nossos estudos mostram que há a necessidade de modificações na função arraste, principalmente na região mais diluída do leito. Contudo, Zhang e van der Heyden (2002) argumentam que as estruturas da meso-escala podem levar a uma apreciável correção da força de massa virtual. Este é um termo dinâmico que se provado sua real necessidade irá eliminar a utilização de uma correção no arraste. Sendo assim, este assunto ainda encontra-se em aberto e necessita de estudo adicional.

Zhang e van der Heyden (2001) realizaram estudo numérico utilizando uma malha com dimensão característica de 0,645 cm, enquanto Agrawal *et al.* (2001) utilizaram uma resolução de 0,016 cm. Mesmo com a resolução maior (malha grosseira) que Agrawal *et al.* (2001), Zhang e van der Heyden (2001) reportam a presença de estruturas de *clusters*. Em nosso estudo utilizou-se a resolução da malha computacional semelhante a utilizada por Zhang e van der Heyden (2001) e pôde-se observar que de fato esta resolução é capaz de representar os efeitos da meso-escala com a presença de *clusters* e *strands*. Contudo no presente estudo utilizou-se condições de contorno diferentes das utilizadas por Zhang e van der Heyden com resultados melhores que os obtidos por estes autores, como discutido anteriormente.

Certa controvérsia pode emergir com relação a condição de não deslizamento para a fase sólida utilizada no presente trabalho e discutido no Capítulo 6 e Apêndice B. De fato a condição de contorno na região da parede comumente utilizada é de livre deslizamento, no intuito de mimetizar o comportamento do particulado (que desliza sobre a parede) observado experimentalmente. Contudo, como apresentado no Apêndice B, a condição de contorno correta não é nem livre deslizamento e tão pouco a condição de não deslizamento e sim um balanço de energia, utilizando-se a Teoria Cinética Granular, que como mostra Jackson

(2000), tende em um dos limites para a condição de não deslizamento. Em nossos resultados comparamos os resultados numéricos com os reportados por Zhang e van der Heyden e Ibsen (2002). Pode-se observar em todas as comparações dos resultados numéricos de Zhang e van der Heyden com os de Ibsen (2002) que os mesmos são idênticos, sendo que os primeiros utilizaram condição de livre deslizamento e Ibsen (2002) utilizou condição de não deslizamento. De fato Agrawal (2000) realizou estudo com diferentes condições de contorno na parede, reportando que estas não são necessárias para a formação das estruturas encontradas na meso-escala. Tendo em vista os excelentes resultados obtidos junto a parede e na região intermediária a esta em nosso estudo, pode-se concluir que de fato a condição de contorno utilizada na parede pouco influencia no comportamento global da meso-escala, contudo nossos estudos evidenciam que a condição de não deslizamento, para as condições dos estudos realizados, captura de forma muito boa o comportamento junto a parede.

Os estudos de caso apresentados no presente trabalho podem ser divididos em dois grupos: Grupo A, onde as viscosidades do gás e do sólido foram mantidas constantes com valores reportados na literatura; e Grupo B, onde utilizou-se viscosidades efetivas para cada uma das fases corrigidas por um modelo sub-malha para ambas as fases. Este modelo sub-malha é o mesmo utilizado por Smagorinsky (1963) e não foi realizado qualquer ajuste no único parâmetro presente neste modelo. Observou-se que os resultados para o Grupo B melhoram a estimativa da velocidade média axial do sólido junto a parede e na região intermediária, quando comparado aos resultados obtidos para o Grupo A. Observou-se que os perfis médios de fração de sólido são melhor calculados em todas as regiões do leito (Caso experimental Luo (1987)) e que em regiões diluídas o arraste é sobre-estimado, como comentado anteriormente.

Um aspecto positivo com relação a utilização do modelo sub-malha (Grupo B) é a excelente predição do comportamento junto a parede e na região intermediária. Estas regiões são geralmente muito densas e normalmente não são capturadas adequadamente sem a inclusão de um modelo que leve em conta o choque entre partículas. Um fato curioso é que não houve a necessidade de qualquer ajuste de parâmetro para obter os resultados encontrados, como salientado anteriormente. Ou seja, o modelo sub-malha representa muito bem o comportamento na região próxima a parede e intermediária, sem qualquer ajuste paramétrico.

Outro aspecto positivo refere-se a análise do coeficiente de achatamento apresentado no Capítulo 6. Esta análise revelou que o modelo sub-malha acrescenta uma modificação que representa a física do problema, mostrando que o modelo captura o comportamento intermitente real encontrado em leitos fluidizados turbulentos, diferentemente dos resultados

para o Grupo A, em que o comportamento intermitente assemelha-se ao encontrado em escoamentos turbulentos de uma fase apenas (neste caso gás). Isto indica que o caminho escolhido para resolver o problema encontra-se na direção correta.

Mesmo obtendo resultados muito bons para as regiões densas, para os casos estudados, o modelo sub-malha apresentou sensibilidade com relação a classificação do particulado baseado em Geldart. As partículas Geldart A comportam-se diferentemente das partículas classificadas como Geldart B e estas diferenças são mais pronunciadas quando da utilização do modelo sub-malha. Importante ressaltar que Agrawal (2000), Agrawal *et al.* (2001) realizaram seu estudo para partículas classificadas como Geldart A, e suas conclusões estão limitadas a esta classificação, enquanto que Zhang e van der Heyden (2001) utilizaram partículas Geldart B. Sabe-se que há um grande problema de predição do comportamento de partículas classificadas como Geldart A (ver por exemplo Yang *et al.* (2003)), que são as partículas utilizadas no processo de craqueamento catalítico. Mesmo assim, o refino de malha (Caso 2) mostrou a capacidade do modelo de dois fluidos de capturar o comportamento junto a parede e intermediária (Grupo A). Contudo, o modelo sub-malha (Grupo B) mostrou grande sensibilidade a este tipo de partículas, haja vista os resultados apresentados para os Casos 6 e 10. Os estudos do presente trabalho indicam que para obter-se um comportamento correto para as partículas caracterizadas como Geldart A necessita-se de um refino de malha maior daquele apresentado. Importante fato em relação a este aspecto está associado a escala da turbulência. Como as partículas do tipo Geldart A tem, em geral, dimensão menor que as menores escalas da turbulência, espera-se um comportamento diferenciado em relação a partículas classificadas como Geldart B. Recentemente Hadinoto *et al.* (2005) mostraram experimentalmente que os critérios indicativos associados a modulação da turbulência sugeridos por Gore e Crowe (1989) e Hetsroni (1989) são inadequados para explicar o comportamento relacionado com os mecanismos da turbulência, no escoamento gás-sólido. Hadinoto *et al.* (2005), utilizando partículas com classificação Geldart A e Geldart B mostram que as escalas utilizadas por Gore e Crowe (1989), que definem quando há modulação ou aumento da turbulência da fase gás, não descreve os seus experimentos e tão pouco os de Maeda *et al.* (1980), o mesmo ocorrendo com o critério adotado por Hetsroni (1989). Hadinoto *et al.* (2005) observaram que com o aumento do número de Reynolds há um decréscimo nas flutuações da velocidade do gás postulando que este efeito está associado a difusão da turbulência na direção da parede e um efeito coletivo da presença de partículas. Ou seja, este estudo experimental indica que há a necessidade de modificar as escalas utilizadas para os cálculos das dimensões características, como indica nosso trabalho.

Além do trabalho experimental comentado acima, faz-se necessário relatar o estudo experimental de Moran e Glicksman (2003), já comentado no Capítulo 6 (ver pagina 231), que corrobora o estudo experimental de Hadinoto *et al.* (2005). Ou seja, para partículas Geldart B estes autores mostram que a turbulência da fase gás é aumentada desqualificando os critérios de Hetsroni (1989) e Gore e Crowe (1989) com conclusão semelhante a encontrada por Hadinoto *et al.* (2005); ou seja, o cálculo das escalas características devem ser modificadas, como mencionado anteriormente.

Estes estudos mostram a grande complexidade associada à descrição correta do escoamento gás-sólido em um leito fluidizado turbulento, provando que as possíveis generalizações devem ser consideradas com cuidado. Encontram-se uma série de questões ainda não respondidas, como mostram os recentes resultados experimentais de Moran e Glicksman (2003) e Hadinoto *et al.* (2005). Nossa estudo numérico dá indicações precisas a este respeito, principalmente quando da análise espectral e da análise de intermitência. A análise espectral mostra que mesmo com um vetor numérico “experimental” pequeno, ou seja, baixas freqüências quando comparadas as freqüências associadas ao escoamento de uma fase, o espectro representa a zona inercial com decaimento -5/3, que é menor daquela encontrada para o escoamento de uma fase, corroborado pelos experimentos de Johnsson *et al.* (2000). Este efeito é representativo da presença de estruturas que dissipam energia turbulenta em uma escala intermediária entre as grandes escalas e as menores (dimensão da partícula).

Assim, pode-se obter uma conclusão muito satisfatória e indicativa de que a escala espacial e temporal utilizada para definir a malha computacional e o passo de tempo são diferentes das apresentadas no presente trabalho, requerendo assim um estudo profundo a este respeito. Ou seja, a malha computacional pode ser aumentada (malha grosseira), como indica o estudo numérico de Agrawal (2000) e em conjunto utilizar-se-á um modelo sub-malha como o utilizado na presente tese para representar os efeitos da meso-escala. Cabe ressaltar que o presente trabalho realizou estudo apenas para dois tipos característicos de partículas (e um regime de escoamento), e tendo em vista o mencionado acima, há indicações que mesmo a classificação de Geldart não seja correta para definir as escalas associadas ao problema do escoamento gás-sólido em leitos fluidizados turbulentos. De fato, o presente trabalho traz uma luz em relação a dependência associada não ao diâmetro da partícula (ver Gore e Crowe (1989)), mas muito mais a relação entre densidades, $\rho_{\text{sólido}}/\rho_{\text{gás}}$, quando da discussão apresentada no Caso 9 e no Capítulo 6 item 6.4. De fato, nossos estudos indicam que não é o arraste que deve ser modificado, mas a relação entre arraste e empuxo, sendo este um aspecto que pode ser visto como uma contribuição para a discussão, corroborada pelos experimentos acima citados, do presente trabalho.

Com o apresentado acima é possível observar e reconhecer as grandes dificuldades no que se refere a representação física de escoamentos gás-sólido em leito fluidizado turbulento, principalmente na caracterização das estruturas encontradas na meso-escala, *clusters* e *strands* (como apresentado no início do Capítulo 6). Neste contexto o autor do presente trabalho entende que deu um razoável passo para o melhor entendimento de alguns aspectos físicos associados a formação e destruição de *clusters* e *strands*, entendendo esta como uma das contribuições do presente trabalho. No Apêndice C encontra-se apresentada a proposta para caracterização de *clusters* e *strands* delineada nos Capítulos 3, 4 e 6. Esta proposta baseia-se nos trabalhos numéricos de Eaton e Fessler (1994), Fessler e Eaton (1999), que realizaram simulação **DNS**, observando que as partículas mantém-se em regiões de alta taxa de deformação e baixa vorticidade. Estes estudos numéricos foram realizados para condições extremamente diluídas, diferentemente dos estudos do presente trabalho. Recentemente Yang e Shy (2005) (artigo publicado no *Journal of Fluid Mechanics*) comprovaram experimentalmente as conclusões obtidas dos resultados numéricos de Eaton e Fessler (1994). Obviamente, a proposta de caracterização do presente trabalho também baseia-se nas observações encontradas nos estudos numéricos realizados no Capítulo 6. A caracterização é realizada através de um balanço de massa descrito no Apêndice C, que pioneiramente foi apresentado por Subbarao (1986). A diferença entre a abordagem utilizada no presente trabalho e no trabalho de Subbarao (1986) está apenas na forma de representar a freqüência de formação e destruição de *clusters* e *strands*. O presente trabalho utiliza-se da taxa de deformação da fase sólido e da fase gás para representar estas estruturas e desta forma caracterizar o diâmetro do *cluster* bem como seu tempo característico. Isto é possível, tendo em vista que tanto taxa de deformação como vorticidade tem unidades de freqüência, como mencionado anteriormente. No Capítulo 6 demonstrou-se que as estruturas de *clusters* estão associadas a altas taxas de deformação em todas as regiões do leito, assim como as estruturas denominadas *strands*, com vórtices contra-rotativos estirando-se. A validade destas caracterizações encontra-se confinado às condições utilizadas nas simulações. Contudo, mesmo restritas, estas caracterizações podem ser facilmente retiradas de experimentação adequada. Outro aspecto importante é que os parâmetros utilizados para caracterização das estruturas encontradas na meso-escala, podem ser utilizadas para escalonamento de unidades industriais, aspecto este não apresentado e nem discutido na presente tese, e por este motivo é apenas uma conjectura.

Agrawal (2000) reporta em sua tese que em seu estudo numérico tridimensional observa uma grande anisotropia nos resultados médios das tensões para a fase sólido. Em nosso trabalho observamos o mesmo efeito. A componente axial é significativamente maior

do que as componentes laterais. Este aspecto não foi apresentado e nem discutido no decorrer do texto, contudo apresentam-se resultados instantâneos (Ver Apêndice D) para os Caso 7 dos componentes das tensões, onde é possível observar o comportamento mencionado acima. Como aponta Agrawal (2000) existe a necessidade de estudar em detalhe este comportamento observado em simulações tridimensionais, contudo necessita-se de estudo extensivo o que requer um tempo computacional bastante grande, devido a grande flutuação das tensões. Este aspecto é importante tendo em vista que Agrawal (2000) reporta que este comportamento observado em simulações tridimensionais não foi observado em simulações bidimensionais.

A comparação com os perfis experimentais de velocidade lateral média do sólido mostra que o modelo sub-malha melhora o resultado junto a parede e que os resultados numéricos seguem a tendência experimental qualitativamente. Ambas simulações (Grupo A e B) sub-estimam o perfil lateral com velocidades menores que as encontradas no experimento, sugerindo que o mecanismo de segregação não é bem resolvido para as direções laterais. Este aspecto pode estar associado a grande anisotropia dos tensores na direção axial (Ver Apêndice D). Outro aspecto interessante mas não estudado no presente trabalho refere-se ao efeito da inclusão de outras forças interfaciais, tais como forças de sustentação e massa virtual. No conhecimento do presente autor, não existem estudos numéricos tridimensionais com a resolução utilizada neste trabalho que tenham estudado o efeito destas forças. Como apontado por Zhang e van der Heyden (2002) a força de massa virtual deve ter importância significativa no escoamento gás-sólido contribuindo com o aumento da influencia da meso-escala. A força de sustentação tem importância para a fase partícula pois esta age na direção normal a menor transferência de quantidade de movimento. Ou seja, esta força age em regiões de altos gradientes de velocidade (região da parede e junto aos *clusters*). Desta forma necessita-se realizar um estudo aprofundado da influencia destas forças nas estruturas da meso-escala e estabelecer sua real importância.

Para finalizar este item deve-se ressaltar que o modelo sub-malha utilizado neste trabalho inclui correções apenas no nível fluido-dinâmico. Em outras palavras, o modelo apenas corrige as tensões efetivas. Em adição aos efeitos fluido-dinâmicos há ainda os efeitos associados a transferência de calor e massa. Um modelo sub-malha completo deve incluir expressões para os fluxos efetivos de massa e energia. E finalmente, um modelo sub-malha completo deve levar em conta o efeito das flutuações encontradas na meso-escala devido as reações químicas. Apenas com a inclusão de todos estes efeitos poder-se-á obter um modelo sub-malha funcional que leva em conta os efeitos das flutuações da meso-escala no comportamento turbulento, não isotérmico e reativo multifásico na macro escala, objetivando assim resolver o problema encontrado em um reator de craqueamento catalítico em leito

fluidizado industrial. Neste contexto o presente trabalho vem contribuir para a discussão da necessidade de utilizar-se modelos sub-malha que incluam efeitos da meso-escala, mostrando que as correções sub-malha podem ser importantes, haja visto a excelente aproximação obtida para a regiões próxima a parede e intermediária.

Em consonância com Agrawal (2000), pode-se arrolar dois importantes aspectos da utilização desta abordagem: a abordagem é simples e direta e de uma forma transparente incorpora os efeitos das estruturas encontradas na meso-escala. Outro aspecto importante, como ressalta Agrawal (2000) é que esta abordagem não se restringe ao escoamento gás-sólido podendo ser adaptada para outros tipos de escoamentos multifásicos. De fato, ainda há um longo caminho a ser percorrido para que possamos ter um entendimento mais profundo dos fenômenos associados aos escoamentos multifásicos.

7.2 Sumário das Conclusões

De forma a resumir as conclusões do presente trabalho serão arroladas as principais conclusões de forma sucinta e descriptiva. Desta forma pode-se formular as seguintes conclusões:

- O escoamento gás-sólido em um leito fluidizado turbulento é caracterizado pela presença de estruturas de *clusters* e *strands* que são formados e destruídos na meso-escala e tem um comportamento dependente da taxa de deformação e vórtices contra rotativos estirando-se. Estas estruturas influenciam sobremaneira o comportamento da macro escala como mostra Agrawal (2000).
- Em regiões onde há baixa vorticidade as partículas são centrifugadas para a região externa do vórtice (alta taxa de deformação) e ai acumulam-se formando *clusters* que mantém-se como estrutura coerente até que a energia do vórtice seja dissipada.
- Utilizou-se um modelo sub-malha para correção das viscosidades efetivas baseado em Smagorinsky (1963). Este modelo assume que a viscosidade é função da taxa de deformação e de parâmetros associados a freqüência de corte (dimensões do volume da malha). Esta formulação foi implementada baseado em trabalhos anteriores com relação a dependência da presença de *clusters* em regiões com altas taxas de deformação. A formulação foi capaz de resolver de forma adequada o comportamento do particulado junto a parede e na região intermediária a esta. A região diluída não foi adequadamente resolvida com o modelo sub-

malha, necessitando estudo adequado para estabelecer a viabilidade da utilização do modelo sub-malha para a fase sólido, como apresentado no presente trabalho.

- A solução numérica com viscosidade constante mostrou boa aproximação na região diluída e ruim na região intermediária e junto a parede. Sendo assim, pode-se concluir que o modelo sub-malha é capaz de resolver regiões densas, e modifica o comportamento do modelo de dois fluidos na região diluída. Este aspecto merece estudo aprofundado, tendo em vista que não foi realizado estudo utilizando-se apenas a correção na fase sólido, tão pouco estudo paramétrico.
- A inclusão da correção sub-malha para as viscosidades efetivas revelou que o comportamento físico esperado para um leito fluidizado turbulento foi encontrado, o mesmo não ocorrendo para as soluções com viscosidade constante, tendo em vista os resultados apresentados quando da análise do coeficiente de achatamento e comparação com o trabalho experimental de Johnsson *et al.* (2000) para um leito fluidizado em condições de transporte.
- A análise espectral e das estruturas intermitentes revelou que o modelo de dois fluidos com correção sub-malha é capaz de captar as três regiões do espectro caracterizadas por Johnsson *et al.* (2000). Desta forma, pode-se concluir que as escalas utilizadas para definir as menores escalas e a inter-relação entre estas e as partículas devem ser modificadas, tendo em vista que os espectros mostram regiões com inclinação maior a observada para o escoamento para uma fase, com inclinação próxima a região dissipativa.
- A solução do modelo de dois fluidos mantendo a viscosidade constante mostrou que o comportamento intermitente assemelha-se aos encontrados para o escoamento turbulento para uma fase. Para o modelo sub-malha o comportamento intermitente assemelha-se ao encontrado experimentalmente para um escoamento multifásico gás-sólido. Disto conclui-se que o modelo sub-malha utilizado incorpora informação física importante não capturada pelo modelo sem a inclusão da correção sub-malha.
- A análise de estruturas intermitentes objetivou caracterizar as estruturas de *clusters*, contudo não foi possível reconhecer a relação entre intermitência e os *clusters*. Um estudo cuidadoso é necessário para estabelecer uma relação.

- O modelo sub-malha mostrou-se sensível a classificação de Geldart. Este aspecto merece estudo mais aprofundado para estabelecer a dependência do modelo em função da modificação entre a relação de densidades. Disto conclui-se que as escalas utilizadas não são adequadas.
- O perfil lateral de velocidade média dos sólidos é pouco sensível a utilização do modelo sub-malha, melhorando o comportamento junto a parede. A tendência dos dados experimentais foi capturada por ambos modelos, mostrando que há coerência física dos resultados numéricos.
- O estudo numérico baseado no trabalho experimental de Luo (1987), Tsuo e Gidaspow (1990) e Cabezas-Gómez (2003), revelou que o modelo sub-malha é capaz de representar adequadamente o perfil médio de fração de sólido. Observou-se que a correção sub-malha aumenta o arraste na região diluída quando compara-se a formulação com viscosidade constante. A utilização de malha tridimensional (viscosidade constante), melhorou a predição dos perfis médios de fração de sólido e velocidade do sólido quando comparado ao resultado numérico bi-dimensional de Cabezas-Gómez (2003). Pode-se concluir que o problema deve ser resolvido com geometria tridimensional, tendo em vista que o efeito junto a parede refere-se a presença de *clusters* que são estruturas tridimensionais.
- No estudo espectral realizado para o caso citado no item anterior, observou-se as mesmas regiões identificadas por Johnsson *et al.* (2000). Tendo em vista que o citado estudo refere-se a um leito fluidizado em condições de transporte (Luo (1987)), a análise espectral mostrou-se importante e adequada mostrando que o comportamento de um leito fluidizado em condições de transporte tem propriedades espetrais semelhantes as encontradas para o estudo realizado para condições de um leito fluidizado turbulento.
- Os estudos numéricos de Cabezas-Gómez (2003) e o presente, para o mesmo estudo de caso, mostraram que há inconsistência dos resultados numéricos reportados por Tsuo e Gidaspow (1990). Tsuji *et al.* (1998) também encontrou inconsistência semelhante.
- Os resultados apresentados para o item 6.5.2, onde utilizou-se o modelo sub-malha baseado em Smagorinsky (1963), não ajustou os dados experimentais para a velocidade do sólido e do gás na região central do reator. Este resultado é indicativo que o modelo sub-

malha não é capaz de resolver regiões diluídas adequadamente. Contudo, o perfil de fração de sólido aproximou-se do experimento.

➤ Estudos numéricos utilizando a modelagem sub-malha baseada em Smagorinsky (1963) são necessários para que se possa validar de fato (ou não) sua eficácia para a solução de problemas de escoamento gás-sólido como o apresentado no presente trabalho.

7.3 Sugestões para trabalhos futuros

Apresentamos algumas sugestões para trabalhos futuros com base no levantamento bibliográfico realizado até o momento e conclusões retiradas do presente trabalho.

Tendo em vista a boa performance do modelo sub-malha, sugere-se um estudo mais aprofundado de sensibilidade do modelo frente aos diversos regimes de escoamento encontrados em leitos fluidizados, principalmente ao que se refere a leitos densos. Para isto necessita-se de dados experimentais confiáveis.

Realizar estudo para malha mais grosseira daquela utilizada no presente trabalho, com o cuidado de escalar a malha adequadamente. Neste sentido este estudo tem importância fundamental para estabelecer as escalas adequadas para solução do problema.

Realizar um estudo da performance do modelo sub-malha utilizando-o apenas para a fase sólido, com a viscosidade constante para a fase gás. Este estudo poderia ser realizado utilizando como base os experimentos utilizados para comparação quantitativa para partículas Geldart B, como o realizado no presente trabalho. Com o trabalho realizado estenderia-se o estudo a partículas Geldart A, realizando escalonamento adequado.

Estabelecido o escalonamento adequado deve-se estudar o efeito da inclusão de outras forças de interface gás-sólido, principalmente as forças de sustentação e de massa virtual.

Estudar o efeito da condição de contorno junto a parede na performance do modelo sub-malha, e como esta comporta-se quando da solução em malha grosseira.

Estudar as possíveis causas do efeito tridimensional observado em nossas simulações, (Ver Apêndice D) associadas a anisotropia das tensões da fase sólido.

Todos estes estudos devem ser realizados com malha computacional tridimensional e transiente.

De posse destes dados numéricos, poder-se-á realizar modificações no modelo sub-malha de forma a corrigir sua deficiência na predição de regiões diluídas. E então a partir disto realizar estudo extenso da influencia dos parâmetros geométricos associados com o projeto de reatores de craqueamento. De fato, esta última etapa passa pelo desenvolvimento

de modelos sub-malha para os mecanismos de transferência de energia, massa e reações químicas, que seria o objetivo último a ser alcançado. Com isto observa-se que há um longo caminho a percorrer para que o problema do escoamento gás-sólido em leito fluidizado possa ser resolvido de forma precisa e que assim possa ser utilizado como ferramenta adequada para o projeto de unidades industriais.

REFERÊNCIAS BIBIOGRÁFICAS

- Andrews IV, A. T., Loezos, P. N., and Sundaresan, S. **Coarse-grid Simulation of Gas-Particle Flows in Vertical Risers.** *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 44(16), p. 6022-6037, 2005.
- Agrawal, K. **The role of Meso Scale Structures in Rapid Granular & Gas-Solid Flows.** Ph.D. Thesis at Department of Chemical Engineering, Princeton, November 2000.
- Agrawal, K., Loezos, P. N., Syamlal, M., Sundaresan, S. **The role of meso scale structures in rapid gas-solid flows.** *J. Fluid Mech.*, v. 445, p. 151-185, 2001.
- Ahmed, A.M. and Elghobashi, S. **On the mechanisms of modifying the structure of turbulent homogeneous shear flows by dispersed particles.** *Physics of Fluids*, v. 12, n. 11, November 2000.
- Anderson, J.D. **Computational Fluid Dynamics: The basics with applications. Mechanical Engineering Series.** McGraw-Hill, New York, 1995, apud, van Wachem, B. **Derivation, implementation, and validation of computer simulation models for gas-solid fluidized beds.** Ph.D. Thesis at Delft University of Technology, 2000.
- Anderson, T.B., Jackson, R. **A fluid mechanical description of fluidized beds.** *I&EC Fundamentals*, v. 6, n. 4, p. 527-539, 1967.
- Anderson, T.B., Jackson, R. **Fluid Mechanical Description of Fluidized Beds.** *I&EC Fundamentals*, v. 7, n. 1, pp. 12-21, February 1968.
- Anderson, T.B., Sundaresan, S., Jackson, R. **Instabilities and the formation of bubbles in fluidized beds.** *J. Fluid. Mech.*, v. 303, pp. 327-366, 1995.
- Boemer, A., Qi, H., and Renz, U. **Eulerian simulation of bubble formation at a jet in a two dimensional fluidized bed.** *Int. J. Multiphase Flow*, v. 23, pp. 927-944, 1997.
- Burns, A.D. **Computational Fluid Dynamics Modeling of Multi-Phase Flows. Alpha Beta Numerics**, Fulwood, Preston, PR2 8AT, UK, 2003.
- Cabezas-Gómez, L. **Modelagem Matemática e Simulação Numérica de Escoamentos Bifásicos Gás-Sólido em Colunas de Leito Fluidizado Circulante.** *Tese de Doutorado da Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo*, São Carlos, 2003.
- Caloz, Y.P. **Experimental Investigation of Local Solids Fluid Dynamics in Different Industrial-Scale Circulating Fluidized Beds with Optical Probes.** Ph.D. Thesis at Swiss Federal Institute of Technology Zurich, Zurich, 2000.

- Chen, J.C. **Experiments that address phenomenological issues of fast fluidization.** *Chemical Engineering Science*, v. 54, pp. 5529-5539, 1999.
- Chapman, S. and Cowling, T.G. **The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases.** *Cambridge University Press*, Cambridge, terceira edição, 1939.
- Crowe, C.T., Chung, J.N. and Troutt, T.R. **Particle Mixing in Free Shear Flows.** *Prog. Energy Combust. Sci.*, v. 14, pp. 171-194, 1998.
- Crowe, C.T. **On models for turbulence modulation in fluid-particle flows.** *International Journal of Multiphase Flow*, v. 26, pp. 719-727, 2000.
- Crowe, C.T. and Wang, P. **Towards a Universal Model for Carrier-Phase Turbulence in Dispersed Phase Flows.** *Proceedings of FEDSM2000: 2000 ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting*, Boston, Massachusetts, pp. 1-4, June 11-15, 2000.
- Dasgupta, S., Jackson, R., Sundaresan, S.A. **Gas-particle flow in vertical pipes with high mass loading of particles.** *Powder Technology*, v. 96, pp. 6-23, 1998.
- Davidson, J.F & Harrison, D. **Fluidized Particles.** *Cambridge University Press*, 1963, apud Kunii, D. and Levenspiel, O. **Fluidization Engineering.** *John Wiley & Sons, Inc.*, New York, 1969.
- Drew, D.A. **Averaged field equations for two-phase media.** *Stud. Appl. Math.*, v. 50, 133-166, 1971.
- Drew, D.A. **Mathematical modeling of two-phase flow.** *Annu Rev. Fluid Mech.*, v. 15, 261-291, 1983.
- Eaton, J.K. and Fessler, J.R. **Preferential Concentration of Particles by Turbulence.** *Int. J. Multiphase Flow*, v. 20, Suppl., pp. 169-209, 1994.
- Elghobashi, S. and Truesdell, G.C. **On the two-way interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles. I: Turbulence modification.** *Phys. Fluids A*, v. 5 (7), pp. 1790-1801, July 1993.
- Enwald, H., Peirano, E. and Almestedt, A.-E. **Eulerian Two-Phase Flow Theory Applied to Fluidization.** *Int. J. Multiphase Flow*, Suppl., v. 22, pp. 21-66, 1996.
- Ferrante, A. and Elghobashi, S. **On the physical mechanisms of two-way coupling in particle-laden isotropic turbulence.** *Physics of Fluids*, v. 15, n. 2, February 2003.
- Fallon, T., Rogers, C.B. **Turbulence-induced preferential concentration of solid particles in microgravity conditions.** *Experiments in Fluids*, v. 33, pp. 233-241, 2002.
- Fessler, J.R. and Eaton, J.K. **Turbulent modification by particle in a backward-facing step flow.** *J. Fluid. Mech.*, v. 394, pp. 87-117, 1999.
- Geldart, D. **Types of gas fluidization.** *Powder Technology*, v. 7, p. 285, 1973.

- Gennes, P.G. **Minireview: Reflections on the mechanics of granular matter.** *Physica A*, v. 261, pp. 267-293, 1998.
- Georg, C.I., Maliska, R.C., Porto, M.L. **Modelagem e Simulação Tridimensional de um Reator de Craqueamento Catalítico em Leito Fluidizado – Formação de Clusters.** *Anais do 2º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo & Gás.* Rio de Janeiro. 15 à 18 de junho de 2003.
- Gidaspow, D. & Ettehadieh, B. **Fluidization in two-dimensional beds with a jet, Part II: hydrodynamic modeling.** *Ind. Eng. Fundam.*, 1983, v. 22, pp. 193-201.
- Gidaspow, D., **Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions with applications.** Academic Press Limited, San Diego, California, 1994.
- Glasser, B.J., Kevrekidis, I.G. and Sundaresan, S. **Fully developed traveling wave solutions and bubble formation in fluidized beds.** *J. Fluid. Mech.*, v. 334, pp. 157-188, 1997.
- Glasser, B.J., Sundaresan, S., Kevrekidis, I.G. **From Bubbles to Clusters in Fluidized Beds.** *Physical Review Letters*, v. 81, pp. 1849-1852, (1998).
- Gore, R.A. and Crowe, C.T. **Effect of Particle Size on Modulating Turbulent Intensity.** *Int. J. Multiphase Flow, Brief Communication*, v. 15, n. 2, pp. 279-285, 1989.
- Grace, J.R. **High-velocity fluidized bed reactors.** *Chemical Engineering Science*, v. 45, p. 99 -1953, 1966.
- Hadinoto, K., Jones, N.E., Yurteri, C., Curtis, J.S. **Reynolds number dependence of gas-phase turbulence in gas-particles flows.** *International Journal of Multiphase Flow*, Article in Press, 2005.
- Harris, A.T., Davidson, J.F., Thorpe, R.B. **The prediction of particle cluster properties in the near wall region of a vertical riser (200157).** *Powder Technology*, v. 127, p. 128-143, 2002.
- Heynderickx, J.G., Das, A.K., De Wilde, J., Marin, G.B. **Effect of Clustering on Gas-Solid Drag in Dilute Two-Phase Flow.** *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 43, pp. 4635-4646, 2004.
- Hoomans, B.P.B., Kuipers, J.A.M., Briels, W.J., van Swaaij, W.P.M. **Discrete particle simulation of a two-dimensional gas-fluidized bed: a hard sphere approach.** *Chemical Engineering Science*, v. 51, p. 99 -118, 1996.
- Horio, M., Kuroki, H. **Three-Dimensional Flow Visualization of Dilutely Dispersed Solids in Bubbling and Circulating Fluidized Beds.** *Chemical Engineering Science*, v. 49, p. 2413 -2421, 1994.
- Hrenya, C.M. and Sinclair, J.L. **Effects of particle-phase turbulence in gas-solid flows.** *AIChE Journal*, v. 43, 853-869, 1997.

- Huilin, L. and Gidaspow, D. **Hydrodynamic Simulations of Gas-Solid Flow in a Riser.** *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 42, 2390-2398, 2003.
- Ibsen, C.H., Solberg, T. and Hjertager, B.H. **Evaluation of a Three-Dimensional Numerical Model of a Scaled Circulating Fluidized Bed.** *Ind. Eng. Chem. Res.* V. 40, pp. 5081-5086, 2001.
- Ibsen, C.H. **An Experimental and Computational Study of Gas-Particle Flow in Circulating Fluidized Reactors.** *P.h.D. Thesis at Faculty of Engineering and Science*, Aalborg University, Department of Chemistry and Applied Engineering Science, Esbjerg, Denmark, 2002.
- Jackson, R. **Locally averaged equations of motion for a mixture of identical spherical particles and a Newtonian fluid.** *Chemical Engineering Science*, v. 52, pp. 2457-2469, 1997.
- Jackson, R. **The Dynamics of Fluidized Particles.** Cambridge University Press, 2000.
- Joshi, B.J., Ranade, V.V. **Computational Fluid Dynamics for Designing Process Equipment: Expectations, Current Status, and Path Forward.** *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 42, n 6, 2003.
- Johnsson, F., Zijerveld, R.C. Shouten, J.C., van den Bleek, C.M, Leckner, B. **Characterization of fluidization regimes by time-series analysis of pressure fluctuations.** *International Journal of Multiphase Flow*, v. 26, pp. 663-715, 2000.
- Knowlton, T.M., Karri, S.B.R., Issangya, A. **Scale-up of fluidized-bed hydrodynamics.** *Powder Technology*, v. 150, pp. 72-77, 2005.
- Kunii. D., and Levenspiel, O. **Fluidization Engineering.** John Wiley & Sons, Inc., New York, 1969.
- Kunii, D. and Levenspiel, O. **Circulating fluidized-bed reactors.** *Chemical Engineering Science*, v. 52, number 15, pp. 2471-2482, 1997.
- Kunii. D., and Levenspiel, O. **Fluidization Engineering.** Butterworth-Heinemann. USA, (1991).
- Lackermeier, U., Rudnick, C., Werther, J., Bredebusch, A., Burkhardt, H. **Visualization of flow structures inside a circulating fluidized bed by means of laser sheet and image processing.** *Powder Technology*, v. 114, p. 71-83, 2001.
- Levenspiel, O. **Engenharia das Reações Químicas.** Editora Edgard Blucher Ltda. São Paulo, Brasil, 2000.
- Lun, C.K.K., Savage, S.B., Jeffrey, D.J., Chepurniy, N. **Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield.** *J. Fluid Mech.*, v. 140, pp. 223-256, 1984.

- Maliska, R.C. Georg, I.C., Porto, L.M. **Aplicações de CFD – Mecânica dos Fluidos Computacional para problemas de Refino na Indústria de Petróleo.** *Petro&Química*, edição 240, Junho de 2003.
- Maliska, R.C. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional, Fundamentos e Coordenadas Generalizadas.** Segunda Edição. *LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A.* Rio de Janeiro, Brasil. 2004.
- Martignoni, P.W. **Modelling and Simulation of FCC Riser Reactors: An Heterogeneous Approach.** Ph.D. Thesis at University of West Ontario, London, Ontario, Canada, April 1998.
- Mastellone, L. M., Arena, U. **The effect of particle size and density on solids distribution along the riser of a circulating fluidized bed.** *Chemical Engineering Science*, v. 54, pp. 5383-5391, 1999.
- Massoudi, M. **On the importance of material frame-indifference and lift forces in multiphase flows.** *Chemical Engineering Science*, v. 57, pp. 3687-3701, 2002.
- Massoudi, M. and Boyle, E.J. **On continuum-kinetic theory approach to the rapid flow of granular materials: the effects of volume fraction gradient.** *International Journal of Non-Linear Mechanics*, v. 36, pp. 637-648, 2001.
- McNamara, S. & Young, W. R., **Dynamics of a freely evolving two-dimensional granular medium.** *Phys. Rev. B*, v. 53, pp. 5089-5100, 1996.
- Moran, C.J., Glicksman, R.L. **Mean and fluctuating gas phase velocities inside a circulating fluidized bed.** *Chemical Engineering Science*, v. 58, pp. 1867-1878, 2003.
- Nagaosa, R., Handler, A. R. **Statistical analysis of coherent vortices near a free surface in a fully developed turbulence.** *Physics of Fluids*, v. 15, pp. 375-394, 2003.
- Nott, P. R., Alam, M. A., Agrawal, K., Jackson, R. & Sundaresan, S. **The effect of boundaries on the plane Couette flow of granular materials: a bifurcation analysis.** *J. Fluid Mech.*, v. 397, pp. 203-229, 1999.
- Peirano, E. **Modelling and Simulation of Turbulent Gas-Solid Flows applied to Fluidization.** Ph.D. Thesis at Department of Energy Conversion, Chalmers University of Technology, Goteborg, 1998.
- Prichett, J.W., Blake, T.R., Garg, S.K. **A numerical model of gas fluidized beds.** *AIChE Journal*, v. 176 (74), p. 134-148, 1978.
- Richardson, J.F. and Zaki, W.N. **Sedimentation and fluidization: Part I.** *Trans. Inst. Chem. Eng.*, v. 32, pp. 35-52, 1954.
- Rivlin, R. S. **On principles of equipresence and unification.** *Quarterly of Applied Mathematics*, v. 30, p.227, 1972.

- Sarma, R. L., Winkler, C.M., Vanka, S.P. **Numerical simulations of turbulence modulation by dense particles in a fully developed pipe flow.** *Powder Technology*, v. 141, pp. 80-99, 2004.
- Shirokar, J.S., Coimbra, C.F.M and McQuay, M.Q. **Fundamental Aspects of Modeling Turbulent Particle Dispersion in Dilute Flows.** *Prog. Energy Combust. Sci.*, v. 22 pp. 363-399, 1996.
- Shouten, J.C., van der Stappen, M.L.M., and van den Bleek, C.M. **Scale-up of chaotic fluidized bed hydrodynamics.** *Chemical Engineering Science*, v. 51, pp. 1991-2000, 1996.
- Silveira-Neto, A. **Fundamentos da Turbulencia nos Fluidos.** *III Escola de Primavera em Transição e Turbulência (Mini-cursos)*, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC. pp. 1-51, 23 a 27 de setembro de 2002.
- Syamlal, M., Rogers, W. and O'Brien, T.J. **Mfix documentation theory guide.** U.S. Dept of Energy, Office of Fossil Energy, DOE/METC-94/1004(DE94000087). Technical note, 1993.
- Slattery, J.C. **Flow of viscoelastic fluids through porous media.** *AIChE Journal*, v.13, p.1066-1071, 1967.
- Smagorinsky, J. **General circulation experiments with the primitive equations: Part I, the basic experiment.** *Mon. Wea Rev.*, v. 91 (3), pp. 99-164, march, 1963.
- Speziale, C.G. **A review of material frame-indifference in mechanics.** *Applied Mechanics Review*, v. 51, 489, 1998.
- Subbarao, D. **Clusters and Lean-Phase Behaviour.** *Powder Technology*, v.46, pp. 101-107, 1986.
- Sundaresan, S. **Instabilities in Fluidized Beds.** *Annu Rev. Fluid. Mech.*, v. 35, pp. 63-88, 2003.
- Tan, M. -L & Goldhirsch, I. **Intercluster interations in rapid granular shear flows.** *Phys. Fluids*, v. 9, pp. 856-869, 1997.
- Tennekes, H., & Lumley, J.L. **A First Course in Turbulence.** The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1987.
- Theologos, K.N., Nikou, I.D., Lygeros, A.I., Markatos, N.C. **Simulation and design of fluid catalytic-cracking riser-type reactors.** *AIChE Journal*, v. 43, n. 2, p. 486-494, 1997.
- Truesdell, C., & Noll, W. The non-linear field theories for mechanics. NewYork: Springer, 1992, apud, Massoudi, M. **On the importance of material frame-indifference and lift forces in multiphase flows.** *Chemical Engineering Science*, v. 57, pp. 3687-3701, 2002.

- Truesdell, C., Toupin, R. **The classical field theories.** In *Handbuch der physik*, v. III/1. Berlin: Springer, 1960.
- Tsuji, Y., Kawaguchi, T., Tanaka, T. **Discrete particle simulation of two dimensional fluidized bed.** *Powder Technology*, v. 77, pp. 79-87, 1993.
- van den Bleek, C.M. and Shouten, J.C. **Deterministic chaos: A new tool in fluidized bed design and operation.** *Chem. Eng. J.*, v. 53, pp. 75-87, 1993.
- van den Moortel, T., Azario, E., Santini, R., Tadrist, L. **Experimental analysis of the gas-particle flow in a circulating bed using a phase Doppler particle analyzer.** *Chemical Engineering Science*, v. 53, n. 10, pp. 1883-1899, 1998.
- van Wachem, B.G.M. **Derivation, implementation, and validation of computer simulation models for gas-solid fluidized beds.** Ph.D. Thesis at Delft University of Technology, 2000.
- van Wachem, B.G.M., Shouten, J.C., van den Bleek, C.M., Krishna, R. and Sinclair, J.L. **CFD Modeling of Gás-Fluidized Beds with Bimodal Particle Mixture.** *AIChE Journal*, v. 47, Issue 6, pp. 1292-1302, June 2001.
- Venkatram, A. **An interpretation of Taylor's statistical analysis of particle dispersion.** *Atmospheric Environment*, v. 22 (5), pp. 865-868, 1978.
- Wen, C.Y. and Yu, Y.H. **Mechanics of Fluidization.** *Chem Eng. Prog. Symp. Séries*, 62, 1966, apud, Gidaspow, D. **Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions with applications.** Academic Press Limited, San Diego, California, 1994.
- Whitaker, S. **Advances in the theory of fluid motion in porous media.** *Ind. Eng. Chem.*, v. 61, pp. 14-28, 1969.
- Wylie, J.J., and Koch, D. **Particle clustering due hydrodynamics interactions.** *Physics of Fluids*, v. 12, n. 5, pp. 964-970, 2000.
- Yang, N., Wang, W., Ge, W., Li, J. **CFD simulation of concurrent-up gas-solid flow in circulating fluidized beds with structure dependent drag coefficient.** *Chemical Engineering Journal*, v. 96, pp. 71-80, 2003.
- Yang, Y.C., and Lei, U. **The role of the turbulent scales in the settling velocity of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence.** *J. Fluid. Mech.*, v. 371, pp. 179-205, 1998.
- Yang, T.S., and Shy, S.S. **Two-way interaction between solid particles and homogeneous air turbulence: particle settling rate and turbulence modification measurements.** *J. Fluid. Mech.*, v. 526, pp. 171-216, 2005.

- Yonghao, Z., and Reese, J.M. **The drag force in two-fluid models of gas-solid flows.** *Chemical Engineering Science*, v. 58, pp. 1641-1644, 2003.
- Zhang, W., Johnsson, F. e Leckner, B. **Fluid-dynamic boundary layers in CFB boilers.** *Chemical Engineering Science*, v.50 (2), pp. 201-210. 1995.
- Zhang, D.Z. & Prosperetti, A. **Averaged equations for inviscid disperse two-phase flow.** *Journal of Fluid Mechanics*, v.267, pp. 185-219. 1994.
- Zhang, D.Z. & Prosperetti, A. **Momentum and energy equations for disperse two-phase flows and their closure for dilute suspensions.** *Int. J. Multiphase Flow*, v.23, pp. 425-453. 1997.
- Zhang, D.Z., VanderHeyden, W.B. **High-resolution three-dimensional numerical simulation of a circulating fluidized bed.** *Powder Technology*, v.116, pp. 133-141, 2001.
- Zhang, Y., Reese, J.M. **Particle-gas turbulence interactions in a kinetic theory approach to granular flows.** *International Journal of Multiphase Flow*, v. 27, pp. 1945-1964, 2001.
- Zhang, D.Z., VanderHeyden, W.B. **The effects of mesoscale structures on the macroscopic momentum equations for two-phase flows.** *Int. J. Multiphase Flow*, v.28, pp. 805-822, 2002.

APÊNDICE A

O ARRASTE NO MODELO DE DOIS FLUIDOS

Neste apêndice apresenta-se uma discussão com relação a forma de calcular o arraste do modelo de dois fluidos e as possíveis implicações nos resultados numéricos.

A.1 Como o arraste é calculado no modelo de dois fluidos

Há uma série de controvérsias em relação a aplicação da força de arraste no que se refere ao “modelo de dois fluidos”, no entendimento do autor deste trabalho. Recentemente, alguns autores tem sugerido a modificação da força de arraste, mais precisamente, da função arraste. Yang *et al.* (2003) e Heynderickx *et al.* (2004), propuseram modificações na função de arraste na premissa de que a modificação seja necessária para levar em conta a presença de *clusters* em escoamentos em leitos fluidizados resolvidos com malha grosseira. Estes autores “demonstram” que modificando a função arraste (função dependente da fração de sólidos), seus resultados numéricos aproximam-se com maior fidelidade aos dados experimentais. Para tanto há necessidade de entender como o modelo de dois fluidos foi construído e quais suas premissas, o que será ressaltado a seguir.

Desta forma, com a finalidade de expor nosso ponto de vista em relação a este assunto, iniciamos com a definição de arraste no que se refere ao modelo de dois fluidos. A Força de arraste experimentada por uma partícula esférica de diâmetro d , movendo-se num fluido infinito de densidade ρ_g é dada por

$$f = \frac{\pi}{8} C_D \rho_g d^2 |\mathbf{v} - \mathbf{u}|(\mathbf{v} - \mathbf{u}), \quad (\text{A.1})$$

onde \mathbf{u} é a velocidade da partícula \mathbf{v} é a velocidade do fluido no infinito e C_D é o coeficiente de arraste.

Se a partícula está próxima de outras partículas, e a fração de sólido local é ϕ_s , a força de arraste média sobre um volume contendo apenas uma partícula é descrito da seguinte forma

$$\bar{f} = \beta(\mathbf{v} - \mathbf{u}) = \frac{3}{4} C_D \frac{\phi_s \rho_g}{d} |\mathbf{v} - \mathbf{u}|(\mathbf{v} - \mathbf{u}), \quad (\text{A.2})$$

onde o volume elementar é $\delta V_1 = \frac{1}{6\pi d^3 \phi_s}$, apresentado na Figura A.1. δV_1 é o volume

elementar característico de uma mistura de duas fases contendo uma única partícula e um fluido associado, que em nosso caso é gás. Importante notar que \mathbf{v} , é a velocidade média do fluido em δV_1 .

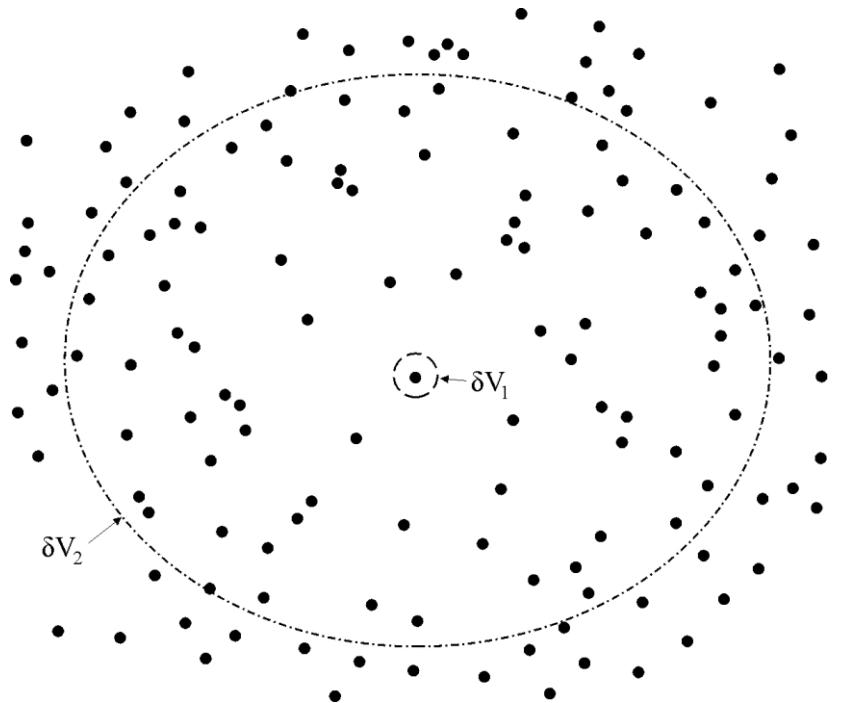


Figura A.1. Volume elementar δV_1 (para uma partícula) e δV_2 (para um conjunto de partículas) em um escoamento gás-sólido. Pontos escuros circulares representam partículas. Linhas pontilhadas os respectivos volumes elementares, Adaptado de Zhang e Reese (2003).

Anderson e Jackson (1967) derivaram rigorosamente, como apresentado anteriormente no Capítulo 2, o modelo de dois fluidos, realizando a média volumétrica das equações da quantidade de movimento e massa para o ponto, de um fluido e um conjunto de partículas. Com a finalidade de amortecer as altas freqüências, o elemento de volume escolhido foi δV_2 e não δV_1 . Wen e Yu (1966) apresentam o coeficiente de arraste, descrito anteriormente da seguinte forma

$$\beta = \frac{3}{4} C_D \frac{\phi_s \rho_g}{d} |\mathbf{v} - \mathbf{u}| f(\phi_s), \quad (\text{A.3})$$

onde $f(\phi_s) = \phi^{-2.65}$.

$f(\phi_s)$ é a correção do coeficiente de arraste como função da fração de sólido. Comumente a comunidade científica associada ao escoamento gás-sólido utiliza as Equações (2.57) e (2.58), Capítulo 2, as quais utilizam a velocidade relativa $|\mathbf{v} - \mathbf{u}|$, onde \mathbf{v} é a

velocidade média do fluido e tomada em relação a δV_1 e não δV_2 . Mas δV_1 contém gás e uma única partícula. Quando realiza-se uma média, o volume é δV_2 . Sendo assim, a flutuação correspondente a δV_1 não está presente. Ainda mais, δV_1 não contém qualquer informação pontual do comportamento do gás.

De forma sucinta, temos que o volume usado no processo de média que dá origem ao modelo de dois fluidos, utiliza δV_2 , que contém muitas partículas, e assume-se que estas são estatisticamente representativas. De fato, neste caso, as equações (2.57) e (2.58) não são utilizadas e sim as que se seguem

$$f_D = \beta_1 = \frac{3}{4} \frac{C_D}{d_p} \phi_s \rho_g |V - U| \phi_s^{-2.65}, \quad \phi \geq 0.8, \quad (\text{A.4})$$

$$f_D = \beta_1 = 150 \frac{\phi_s^2 \mu_g}{\phi_g d^2} + 1,75 \frac{\phi_s \rho_g}{d} |V - U|, \quad \phi_s < 0.8. \quad (\text{A.5})$$

onde V e U são as velocidades médias do gás e das partículas no volume elementar δV_2 . Se assumirmos que $V \sim v$ para o gás (o que é uma aproximação), então a única diferença fica com velocidade das partículas U ; ou seja, assumo a velocidade instantânea ou a média das partículas? Fica claro que o processo de média exige que a velocidade das partículas seja a média, por causa do processo de média e do volume da malha utilizada.

Importante observar que o modelo de dois fluidos utiliza-se da velocidade média das partículas, ou melhor dizendo, de um conjunto representativo estatisticamente de partículas. Presume-se que a correção para um conjunto de partículas, um *cluster* por exemplo, já encontra-se na Equação (A.5). Desta forma, não há porque corrigir esta expressão, a menos que se queira trazer informações físicas associadas a δV_1 . Como numericamente (ver Capítulo 5) a função arraste utilizada é a média de partículas no volume da malha computacional, e a velocidade do gás e das partículas também são médias; a correção já existe. Ainda importante ressaltar que a função arraste já incorpora a presença de partículas através da função $f(\phi_s) = \phi_s^{-2.65}$.

Como apresentado no Capítulo 6, o problema não reside na forma da função arraste, mas no balanço de forças da equação da quantidade de movimento do modelo de dois fluidos. A força de arraste pode ser vista como um termo dissipativo, assim como o tensor tensão. Ambos devem ser modelados de forma a trazer as informações físicas relevantes, seja através de correlações empíricas (caso da força de arraste) ou modelo fenomenológico. A modificação fortuita de um dos termos da equação da quantidade de movimento para dois fluidos não traz nenhuma informação relevante sobre os fenômenos físicos relevantes. Esta

modificação resulta apenas em um ajuste empírico. Na verdade, como apontado no Capítulo 2 item 2.3.2, há grandes incertezas associadas aos termos representados pelo tensor tensão e o arraste. Como a correlação para o arraste baseia-se em experimentos para uma partícula, e uma correção para a presença de outras partículas, contendo em seu cerne as informações pertinentes a escala da partícula e a um aglomerado, não há porque modificá-la, no entendimento do autor do presente trabalho. O mesmo não pode ser afirmado com relação ao tensor tensão, que no modelo de dois fluidos não carrega informação sobre os efeitos da turbulência por exemplo, efeito este já incorporado na função arraste, tanto na fase gás como na fase sólido.

Contudo, a Figura A.1 coloca luz na forma como o arraste é calculado no modelo de dois fluidos e as equações do modelo deveriam representar o limite diluído. Contudo, como observado no Capítulo 6, quando utiliza-se o modelo sub-malha, este sobre-estima o arraste, evidenciando a necessidade de algum ajuste. Resta saber se o ajuste deve ser feito no arraste ou o acréscimo de outra força que resloverá o problema.

Outro aspecto importante a ressaltar é que os resultados para o Caso 7 mostram justamente o contrário, ou seja, que não há necessidade de modificar a função arraste para o caso estudado. De fato, é o modelo sub-malha (Caso 8) que mostrou sensibilidade em regiões diluídas e não o modelo de dois fluidos resolvido em sua forma original. Sendo assim, deve-se ter cuidado na proposição de modificações da função arraste sem antes ter certeza de que isto é necessário, pois nossos estudos indicam que não é o arraste que deve ser modificado, mas o balanço de forças. Ou seja, um estudo mais aprofundado é necessário.

Importante lembrar que a proposição de modificar o arraste refere-se a utilização do modelo de dois fluidos aplicado a malhas grosseiras. Neste caso o volume elementar da malha não será representativo da presença de uma partícula e os estudos citados acima mostram que o arraste deve ser modificado neste caso.

O autor do presente trabalho entende que antes de realizar modificações na função arraste dever-se realizar estudo com malhas computacionais refinadas e ai estabelecer a real necessidade desta correção, bem como a necessidade de inclusão de outras forças já mencionadas anteriormente. Neste contexto o autor entende que as forças de interface tem um papel importante com relação aos aspectos fundamentais associados a física presente em escoamentos multifásicos.

APÊNDICE B

CONDIÇÃO DE CONTORNO NA PAREDE

Neste apêndice apresenta-se uma discussão com relação as possíveis condições de contorno na parede para a fase sólido no modelo de dois fluidos.

B.1 Condição de contorno na parede para a fase sólido

A hipótese de completa aderência na parede implica na condição de contorno denominada condição de não deslizamento na parede. Este tipo de condição estabelece que as componentes normal e tangencial do vetor velocidade são nulas. Para a fase continua não há controvérsia na literatura. Contudo, no caso da fase sólido o estabelecimento das condições de contorno na parede é mais complexo, devido a dificuldade de estabelecer a interação do particulado com as paredes. Cabe ressaltar que encontra-se na literatura uma série de formulações para o estabelecimento da condição de contorno na parede, contudo este aspecto ainda está em aberto nos dias de hoje. De fato, a velocidade na direção tangencial na parede oscila entre a condição de não deslizamento e a condição de deslizamento livre, Massoudi e Boyle (2001). A seguir apresentaremos a proposta de condição de contorno mais aceita na literatura, baseado em Jackson (2000).

O modelo proposto para condição de contorno mais próximo da condição de contorno correta necessita do conhecimento do valor da pseudo temperatura granular. Johnson e Jackson (1987) mostraram que a condição de contorno na parede advém de um balanço de forças e energia. Assim, se n_a é o numero médio de partículas adjacentes a uma área unitária da parede, a freqüência média de colisões entre partículas e a área unitária da parede é

$$c/s = n_a (3\Theta)^{1/2} / s. \quad (\text{B.1})$$

Na média, cada partícula chegando na parede carrega quantidade de movimento na direção axial, e supõem-se que a natureza da parede é tal que a flutuação da fração de sólido é transferida no impacto. Assim, segundo Jackson (2000), o balanço de força assume a seguinte forma

$$-S_{rz}^P = \frac{n_a (3\Theta)^{1/2}}{s} \phi' \rho_s \frac{\pi d^3}{6} v_z. \quad (\text{B.2})$$

Formas aproximadas para n_a e s podem ser encontradas da seguinte forma: modifica-se a distribuição randômica das partículas por uma matriz simples com uma partícula por célula de um lattice cúbico com espaçamento l . Assim

$$\phi = \frac{\pi d^3}{6l^3}. \quad (\text{B.3})$$

Desta forma, a área de cada camada ocupada por uma partícula é l^2 e desta forma temos

$$n_a = \frac{1}{d^2} \left(\frac{\phi}{\phi_m} \right)^{2/3}. \quad (\text{B.4})$$

O espaço entre as superfícies das partículas em camadas adjacentes é $l-d$ provendo assim uma estimativa de s da seguinte forma

$$s = d \left[\left(\frac{\phi_m}{\phi} \right)^{2/3} - 1 \right]. \quad (\text{B.5})$$

Introduzindo estes resultados na equação do balanço de força temos a condição de contorno requerida para solução do problema que toma a seguinte forma

$$S_{rz}^P + \left(\frac{\phi \sqrt{3} \pi \rho_s (\phi / \phi_m) \Theta^{1/2}}{6 [1 - (\phi / \phi_m)^{1/3}]} \right) v_z = 0. \quad (\text{B.6})$$

Há um fluxo de energia $-n \cdot q$ de energia do seio da fase particulada até a interface com a parede. A pseudo energia é gerada devido o escorregamento na parede a uma taxa $-v_z S_{rz}^P$. S_{rz}^P representa a força por unidade de área exercida na direção z sobre as partículas na parede, tem sinal oposto a v_z , desta forma o termo acima é positivo. A soma destes termos devem ser balanceadas pela taxa de dissipação D devido a colisões inelásticas partícula-parede, assim o balanço de energia toma a seguinte forma segundo Jackson (2000)

$$q_r - v_z S_{rz}^P = D. \quad (\text{B.7})$$

A perda de pseudo energia de uma colisão simples entre uma partícula e a parede é $\frac{1}{4} \pi \rho_s d^3 \Theta (1 - e_w^2)$, onde e_w é o coeficiente de restituição para uma colisão partícula-parede, assim tendo a taxa de dissipação total por unidade de área e por unidade de tempo é encontrada com a seguinte forma

$$D = \left[\frac{1}{4} \pi \rho_s d^3 \Theta (1 - e_w^2) \right] n_a \frac{(3\Theta)^{1/2}}{s}. \quad (\text{B.8})$$

Introduzindo estas expressões acima para n_a e s a condição de contorno torna-se

$$q_r - v_z S_{rz}^P = \frac{\sqrt{3} \pi (\phi / \phi_m) \rho_s \Theta^{3/2} (1 - e_w^2)}{4 [1 - (\phi / \phi_m)^{1/3}]}.$$
(B.9)

As Equações B.6 e B.9 são as condições de contorno para a fase sólido e para equação do balanço da teoria cinética granular respectivamente. Para partículas pequenas, tais como as que foram utilizadas na presente tese, Jackson (2000, pg. 281) mostra que a Equação B.6 reduz-se aproximadamente a condição de não deslizamento. Como em nosso trabalho não resolvemos o balanço de pseudo temperatura a Equação B.9 não é necessária.

Com o auxilio de Jackson (2000), mostrou-se que a condição de livre deslizamento e de não deslizamento na parede para a fase sólido não são corretas. Um balanço de energia é necessário para obter-se a condição correta. Contudo, a condição correta tende para a condição de não deslizamento quando tem-se partículas pequenas, como as utilizadas no craqueamento catalítico em leito fluidizado (Jackson (2000, pg. 281)) e no presente trabalho. De fato, em sua tese de doutorado, Ibsen (2002) utiliza a condição de não deslizamento em todos seus estudos de caso. Como ressaltado anteriormente, em nosso trabalho comparou-se os resultados de Ibsen (2002) com os de Zhang e van der Heyden (2001), sendo que estes últimos utilizaram condição de deslizamento livre. Pode-se observar em nossos gráficos comparativos que a solução de Ibsen (2002) é semelhante a de Zhang e van der Heyden (2001). O mesmo pode ser observado quando dos resultados comparados do trabalho de Cabezaz-Gómez (2003) e os nossos, mostrando que a condição de não deslizamento e a de deslizamento livre dão resultados muito semelhantes. Por este motivo, o autor da presente tese não observa qualquer inconsistência física no que se refere a utilização da condição de não deslizamento para a fase sólido e neste contexto, para os estudos de caso estudados, mostrou-se uma condição adequada. Para finalizar indicamos a leitura de Massoudi e Boyle (2001) e Andrews *et al.* (2005) e as referencias citadas nestes trabalhos para o leitor interessado nas controvérsias associadas a este tema.

APÊNDICE C

CARACTERIZAÇÃO DE CLUSTERS E STRANDS

Neste apêndice apresenta-se contribuição para a caracterização de *clusters* e *strands* de acordo com os resultados encontrados na presente tese.

C.1 Caracterização de clusters e strands

Apresenta-se neste apêndice uma proposta a contribuir com a caracterização de *clusters* e *strands* em escoamentos gás-sólido em leito fluidizado turbulento. O que será apresentado a frente está baseado no trabalho de Subbarao (1986). A seguir são apresentadas as premissas para caracterização e suas limitações.

O modelo proposto por Subbarao (1986) é baseado em um balanço de massa em uma estrutura de *clusters*. Este autor considerou que os *clusters* estão presentes ao redor de bolhas de gás e considera o diâmetro da bolha de gás a relação descrita pela equação obtida por Davidson e Harrison (1963)

$$D_b = \frac{2u_t^2}{g}; \quad (\text{C.1})$$

onde u_t é a velocidade terminal das partículas. Neste caso considera-se que as bolhas são estáveis, mantendo sua identidade. Desta forma Subbarao (1986) apresenta a seguinte relação para um balanço na região de vazio para cada uma das fases

$$u = \frac{\pi D_v^3}{6} \frac{4}{\pi D_v^2} f_v + \frac{\pi D_c^3 \phi_c}{6} \frac{4}{\pi D_v^2} f_c; \quad (\text{C.2})$$

$$W = \rho_s \phi_g \frac{\pi D_c^3}{6} \frac{4}{\pi D_v^2} f_c. \quad (\text{C.3})$$

Nas equações acima u é a velocidade do gás, D_v é o diâmetro de uma bolha de gás, f_v é a freqüência de bolhas, f_c a freqüência de *clusters* e D_c o diâmetro do *cluster*. Subbarao (1986) considera que $f_c = f_v$. Em nosso trabalho não seguimos a consideração de Subbarao (1986) e identificamos a freqüência de *clusters* e de fração de vazios com a taxa de deformação da fase sólido e a vorticidade da fase gás respectivamente, exatamente a relação descrita em todo

texto da tese, onde a taxa de deformação é relacionada com a presença de aglomerados de partículas e a alta vorticidade com a presença de gás. Manipulando apenas a Equação C.2 é possível encontrar uma relação para o diâmetro de *clusters* em função do diâmetro de bolhas, em conjunto com a Equação C.1. A equação utilizada para caracterização do diâmetro de *clusters* é dada por

$$\frac{3D_v^2 u}{2\phi_c f_c} - \frac{D_v^3 f_v}{\phi_c f_c} = D_c^3. \quad (\text{C.4})$$

Desta forma, com a equação C.4 é possível caracterizar o diâmetro de *clusters* em função da tensão da fase sólido e da vorticidade da fase gás, onde o diâmetro da bolha de gás é dado pela Equação C.1. A Figura C.1 apresenta a distribuição de diâmetro de *clusters* calculada através da Equação C.4. Nesta figura (a) é possível observar que a dimensão de *clusters* no plano central varia de 2,9 cm a 1,4 cm. Observa-se com suficiente clareza que onde a fração de sólido é máxima (0.64) o diâmetro de *cluster* é máximo, representando assim esta estrutura. De fato para uma representação adequada haveria a necessidade de estabelecer uma faixa de fração de sólido (Figura C.1 (c)), onde é possível observar que tanto *clusters* como *strands* estão adequadamente representados quando utiliza-se uma fração de sólido variável. As dimensões de *clusters* encontradas na Figura C.1 (c) variam de 5,4 cm a 1,4 cm. Estes valores concordam com os encontrados experimentalmente por Lackermeier *et al.* (2001) e Kuroki e Horio (1994). Além do diâmetro, o formato das estruturas de *clusters* e *strands* assemelham-se as reportadas por estes autores.

Com o exemplo apresentado neste apêndice pode-se concluir com muita certeza que as estruturas de *clusters* e *strands* estão associadas a taxa de deformação e vorticidade como mencionado no Capítulo 3, 4 e 6. Contudo, apesar dos excelentes resultados, observa-se que deve haver uma faixa adequada para a caracterização correta destas estruturas. Ou seja, a aplicação da Equação C.4 fica restrita as condições de escoamento utilizadas na presente tese. Extrapolações para regimes de escoamento diferentes devem ser realizadas com cuidado.

Como sugestão para caracterização das estruturas de *clusters* e *strands*, pode-se utilizar o conhecido fator Q (Nagaosa e Handler (2003)), utilizado para caracterização de estruturas coerentes no campo da turbulência. Este método é baseado no segundo invariante do tensor tensão. Não apresentaremos resultados utilizando esta metodologia, pois trata-se de um estudo preliminar, necessitando ainda de estudo aprofundado para encontrar a faixa adequada para então utilizá-la para caracterização de *clusters* e *strands*. Contudo os resultados preliminares são promissores, mas não serão apresentados neste momento.

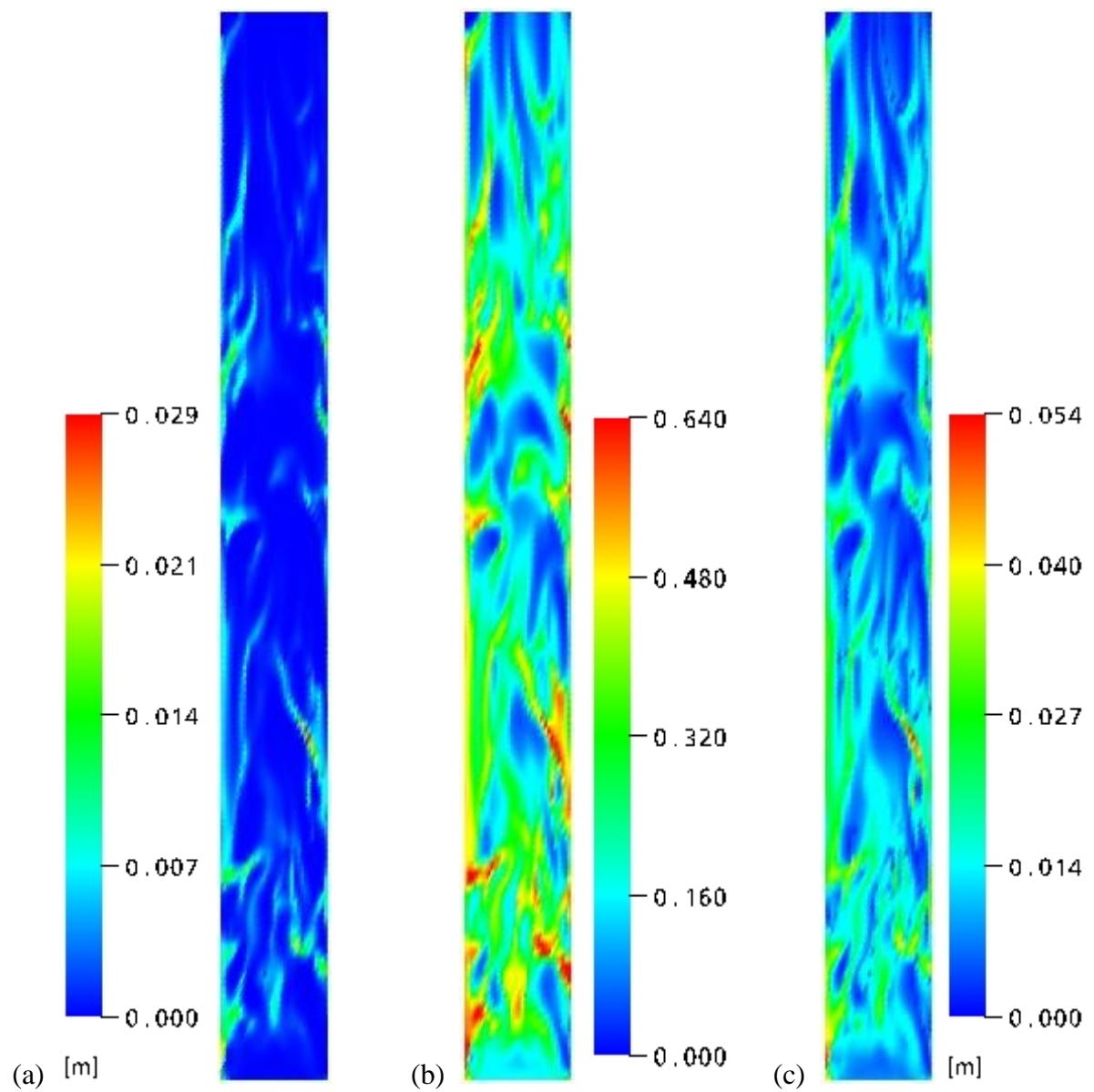


Figura C.1. (a) Distribuição de diâmetro de clusters no plano XZ no centro do leito (fração do cluster com valor constante (0.64)); (b) distribuição de fração de sólido; (c) distribuição de diâmetro de clusters com fração de cluster variável (0.64-0.1).

Neste apêndice foi apresentado um método de caracterização da dimensão característica de *clusters* e *strands* baseado no trabalho de Subbarao (1986) utilizando o conhecimento adquirido no desenvolvimento do trabalho de tese. Ou seja, a freqüência de formação e destruição de *clusters* e *strands* está intimamente ligada a taxa de deformação e a vorticidade, como mencionado anteriormente e podem ser utilizadas para caracterizar estas estruturas como demonstrado na Figura C.1. Estudo mais aprofundado a este respeito é necessário, tendo em vista a necessidade de variação de um parâmetro (fração de sólido do *cluster*). Para tanto sugere-se a utilização da metodologia baseada no Fator Q, pois esta define criteriosamente as faixas onde um elemento de fluido é afetado pela rotação ou pela taxa de

deformação, Nagaosa e Handler (2003). Estudos preliminares, não apresentados no momento, indicam que esta metodologia pode ser utilizada para a melhor caracterização das mencionadas estruturas, auxiliando e contribuindo com a apresentada neste apêndice.

APÊNDICE D

ANISOTROPIA DAS TENSÕES PARA FASE SÓLIDO

Neste apêndice apresenta-se os campos de tensão para a fase sólido de forma a demonstrar a anisotropia reportada por Agrawal (2000).

D.1 Anisotropia das tensões para a fase sólido

Agrawal (2000) reporta em sua tese que em seu estudo numérico tridimensional a presença de anisotropia nos resultados médios das tensões para a fase sólido. Nossos resultados apresentam o mesmo efeito reportado por Agrawal (2000). A Figura D.1 apresenta os perfis de tensão para a fase sólido no plano central do leito nas três direções, para o estudo de Caso 7. Observa-se a grande anisotropia das tensões, como reportado por Agrawal (2000). A componente na direção axial Z tem maior valor, como esperado, tendo em vista que o escoamento é ascendente. As componentes laterais tem valores máximo e mínimo substancialmente diferentes. As tensões da fase sólido na direção Y são menores das encontradas para a direção X. Os resultados apresentados são instantâneos, para o tempo de 9.75 segundos. Os resultados médios não são apresentados, contudo pode-se observar claramente que há grande anisotropia. Agrawal (2000) reporta que em seus resultados bidimensionais este efeito não foi observado nos resultados médios, apenas para os resultados tridimensionais. Nossos resultados corroboram o observado por Agrawal (2000), contudo deve-se ressaltar que este autor não apresentou estudo detalhado sobre este aspecto, tendo em vista a necessidade de estudo extensivo o que demandaria um tempo computacional e de análise maior. A intenção aqui é mostrar que mesmo não utilizando a resolução da malha computacional comparável com a utilizada por Agrawal (2000), o efeito de anisotropia foi observado no presente trabalho. Este aspecto tem grande importância, pois o entendimento dos mecanismos que levam a este comportamento poderiam revelar aspectos associados a segregação.

Na opinião do autor da presente tese, esta anisotropia deve-se de certa forma ao cálculo do arraste, que no modelo de dois fluidos, não prevê adequadamente o arraste em regiões diluídas. Contudo esta afirmação é apenas uma especulação, e devido as dificuldades

de análise, não temos como avançar sobre este tema. Deve-se ressaltar que a compreensão deste aspecto é de suma importância no desenvolvimento de modelos sub-malha.

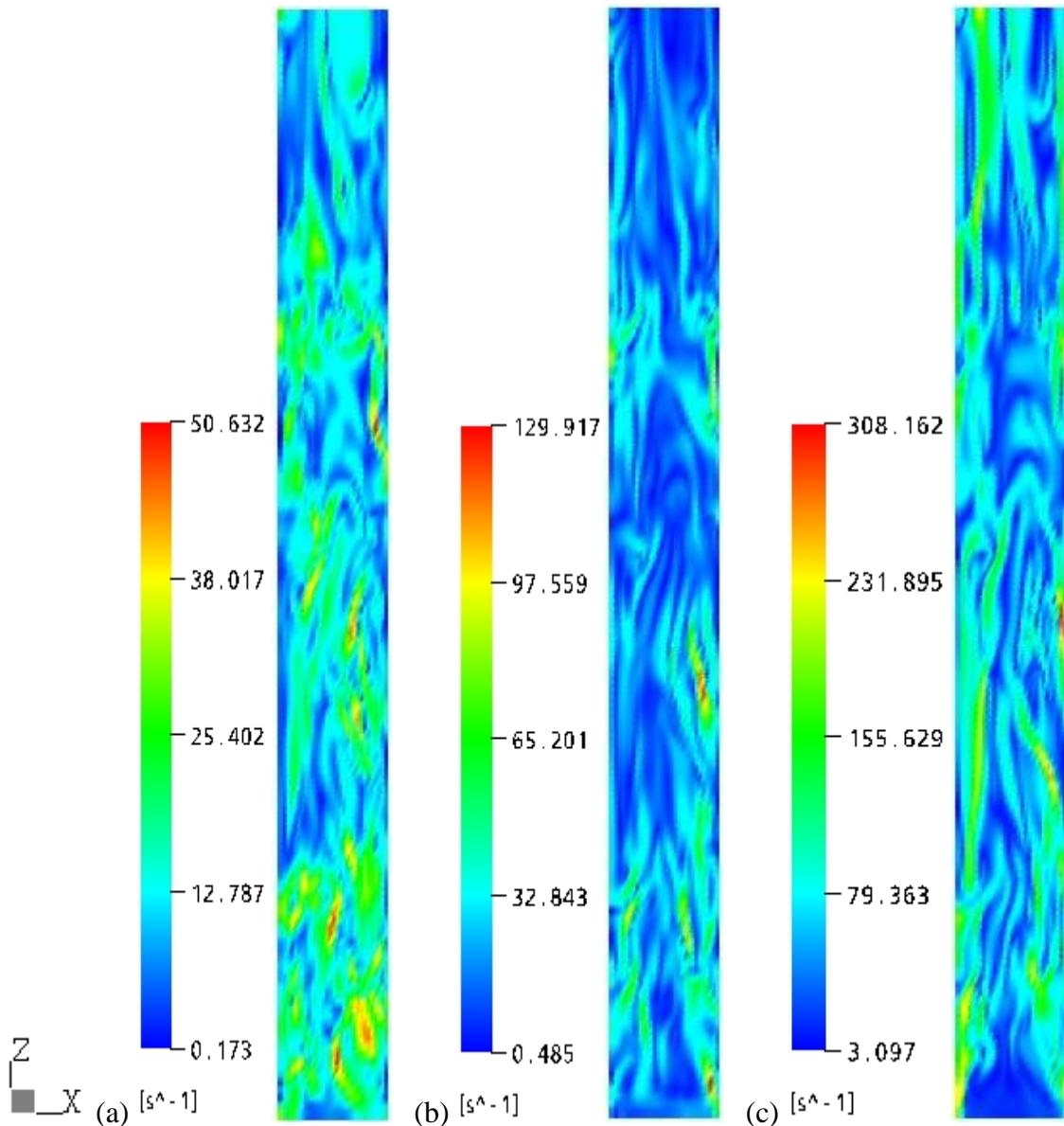


Figura D.1. (a) Tensão da fase sólido no plano central do leito na direção Y; (b) Tensão da fase sólido no plano central na direção X; (c) Tensão da fase sólido no plano central na direção Z; Caso 7.

Outro aspecto importante refere-se a afirmação de Agrawal (2000) de que este comportamento não foi observado em simulações bidimensionais. Sabe-se que simulações bidimensionais podem gerar efeitos de cascata inversa de energia, o que não ocorre em simulações tridimensionais e não observado em nossas simulações, como a análise espectral demonstrou. Nos resultados comparados da presente tese com os resultados experimentais, observou-se que a velocidade média axial de sólido é sobre estimada em regiões diluídas.

Uma das explicações refere-se ao cálculo do arraste, discutido no Apêndice A. Uma outra explicação poderia ser imputada a anisotropia observada em simulações tridimensionais. A Figura D.1 mostra que as tensões axiais são praticamente dobradas ou triplicadas em relação as tensões laterais. Os perfis laterais apresentaram comparação qualitativa muito boa com os experimentos, contudo sub estimando os valores. Interessante observar que para o Caso 7, a região diluída tem boa concordância com os dados experimentais, contudo, junto a parede o efeito é contrário. O oposto ocorreu quando da utilização do modelo sub-malha (Caso 8). Os perfis laterais de ambos estudos de caso assemelham-se qualitativamente assim como quantitativamente. Isto nos leva a crer que de fato, o balanço entre arraste e tensões é de fundamental importância para a predição do comportamento médio da velocidade axial, assim como dos perfis médios laterais.

As comparações de simulações tridimensionais com bidimensionais foram realizadas na presente tese no Capítulo 6 no sub-ítem 6.5. Observou-se que o perfil médio da velocidade do sólido é melhor capturado quando a simulação é tridimensional, assim como os perfis de fração de sólido, para simulação sem a utilização de modelo sub-malha. Contudo, quando da utilização do modelo sub-malha os resultados sobre estimaram o arraste na região diluída. Isto pode estar associado a anisotropia observada em nossas simulações, assim como nas de Agrawal (2000). De qualquer forma, não há como afirmar categoricamente que esta seja a causa, necessitando assim de um estudo mais detalhado sobre este aspecto, como sugerido por Agrawal (2000), e que não foi realizado na presente tese.