

EFEITO DA FUNÇÃO DE ARRASTO NA INTERFACE SOBRE A DINÂMICA DE FORMAÇÃO, DISSIPAÇÃO E ROMPIMENTO DE ESTRUTURAS COERENTES NO ESCOAMENTO GÁS-SÓLIDO NUM LEITO FLUIDIZADO CIRCULANTE

Luben Cabezas Gómez

Núcleo de Engenharia Térmica e Fluidos - EESC-USP, Av. Trabalhador São-carlense, 400, 13566-590 - São Carlos - SP.

lubencg@sc.usp.br

Luciano Vieira de Souza

Núcleo de Engenharia Térmica e Fluidos - EESC-USP, Av. Trabalhador São-carlense, 400, 13566-590 - São Carlos - SP.

souzalv@sc.usp.br

Fernando Eduardo Milioli

Núcleo de Engenharia Térmica e Fluidos - EESC-USP, Av. Trabalhador São-carlense, 400, 13566-590 - São Carlos - SP.

milioli@sc.usp.br

Resumo. Neste trabalho apresenta-se avaliação comparativa do efeito de diferentes funções de arrasto na interface sobre a dinâmica de formação, dissipação e rompimento de estruturas coerentes, no escoamento bifásico gás-sólido num leito fluidizado circulante. Desenvolve-se simulação numérica utilizando o modelo hidrodinâmico B, e o código numérico MICEFLOW. A metodologia de caracterização de estruturas coerentes utilizada baseia-se na determinação de quatro características fundamentais, associadas ao seu tempo médio de duração, sua concentração média, fração de tempo de existência, e frequência de ocorrência. Aplica-se um critério de identificação de estruturas coerentes relacionado com o valor médio temporal da concentração de sólido. Através desta metodologia de identificação e caracterização, estabelece-se comparações entre resultados de simulação obtidos para diferentes correlações da função de arrasto. Desenvolve-se uma avaliação qualitativa da influência deste importante parâmetro na hidrodinâmica do escoamento, assim como um estudo detalhado dos processos associados às estruturas coerentes. Comparações dos resultados de simulação para as diferentes funções de arrasto com dados experimentais de perfis da velocidade axial para ambas as fases e da fração de sólido permitem análise adicional. Os resultados mostram que a escolha da função de arrasto requer estudo detalhado, e possivelmente o desenvolvimento de novas correlações, considerando que a maioria das correlações atuais foram obtidas para fluidização homogênea.

Palavras chave: Estruturas coerentes, função de arrasto, simulação numérica, escoamentos gás-sólido, leito fluidizado circulante.

1. Introdução

O arrasto estacionário expresso através da função de arrasto, β , é a única força na interface considerada no modelo tradicional das duas fases separadas. Equações empíricas são utilizadas para a formulação desta força, através da qual modela-se a transferência de quantidade de movimento na interface. De acordo com van Wachem *et al.* (2001) a força de arrasto na interface é a combinação, num único parâmetro empírico, dos arrastos de forma e do arrasto por fricção.

A maior parte dos dados utilizados na formulação da força de arrasto, em muitos sistemas multi-partículas, têm sido obtidos através de estudos de fluidização uniforme ou de sedimentação. Tipicamente a função de arrasto é determinada através de medições experimentais da queda de pressão em leitos fixos, fluidizados ou sedimentados. Estas medições experimentais podem ser utilizados para calcular β diretamente, $\beta = f(\Delta P)$, ou em função do coeficiente de arrasto de uma partícula numa suspensão C_{Ds} , o qual é determinado em função da queda de pressão, $\beta = f(C_{Ds}(\Delta P))$. Utilizando esta metodologia, várias correlações para β tem sido propostas na literatura. Por exemplo, Ergun (1952) realizou medições num leito fixo líquido-sólido para determinar a queda de pressão ΔP e correlaciona-la empiricamente. Esta correlação foi posteriormente utilizada para calcular β pelo método direto. Wen & Yu (1966) realizaram experimentos de sedimentação de partículas sólidas num líquido numa ampla faixa de valores da fração volumétrica de sólido, e correlacionaram seus dados e de outros trabalhos para concentrações de sólido $0,01 \leq \alpha_s \leq 0,63$, estabelecendo uma correlação para o coeficiente de arrasto C_{Ds} . Esta correlação foi utilizada para o cálculo de β pelo segundo método.

Como a força arrasto na interface gás-sólido é muito importante, estudos tem sido desenvolvidos na tentativa de determinar uma relação direta entre β e a formação de “clusters”. Chen *et al.* (1991) desenvolveram uma análise de similaridade para estudar a hidrodinâmica de um sistema multi-partículas suspensas num fluido. Foi estudada a similaridade da formação de “clusters” em sistemas líquido-sólido e gás-sólido. Estes autores reconheceram que o arrasto é a única fonte que promove o movimento relativo entre as partículas e consideraram que os dois sistemas podem ter a mesma tendência para a formação de “clusters” em condições de arrasto hidrodinamicamente similar.

Helland *et al.* (2002), com base em outros trabalhos da literatura, afirmam que têm sido observados dois efeitos opostos da formação de “clusters” sobre o arrasto na interface, em função da concentração de sólidos. Em regiões com algumas partículas distribuídas não uniformemente, observou-se que o movimento descendente de uma partícula pode criar um campo de velocidade através do fluido que tende a diminuir o arrasto de todas as outras partículas vizinhas, devido a um "bypass" do escoamento de retorno. Por outro lado, se as partículas estão distribuídas mais ou menos uniformemente no fluido, a restrição da área de escoamento entre as partículas em zonas densas resultara em maiores gradientes da velocidade da fase gasosa, criando-se um aumento das tensões de cisalhamento e por tanto um incremento da resistência ao escoamento do gás.

Neste trabalho realiza-se um estudo da influência da função de arrasto na interface sobre a dinâmica de formação, dissipação e rompimento dos “clusters” através da aplicação da metodologia de identificação e caracterização de "clusters" proposta por Sharma *et al.* (2000). Estes autores propõem três critérios para a identificação e definição de "clusters" com base em critérios propostos por Soong *et al.* (1993) apud Sharma *et al.* (2000). Além disso descrevem quatro características básicas dos "clusters" que permitem quantificar a influência de alguns parâmetros do escoamento sobre estas estruturas. Sharma *et al.* (2000) investigaram o efeito que o tamanho de partícula e a velocidade superficial do gás têm sobre os "clusters" a partir de dados experimentais de fração de sólido medidos com sonda capacitiva em leito circulante de 15 cm de diâmetro. A metodologia, originalmente estabelecida a partir de dados experimentais (Soong *et al.*, 1993; Tuzla *et al.* 1998 e Sharma *et al.*, 2000), foi recentemente aplicada por Helland *et al.* (2002) com resultados de simulação numérica. No presente trabalho são analisadas quatro correlações da função de arrasto com base nos trabalhos de Ergun (1952), Wen & Yu (1966), Di Felice (1994) e Gidaspow (1994). Este último autor assume um procedimento híbrido onde a correlação de Ergun (1952) é considerada para $\alpha_s \geq 0,2$ e a correlação de Wen & Yu (1966) para $\alpha_s < 0,2$. van Wachem *et al.* (2001) afirmam que este procedimento híbrido pode causar algumas instabilidades numéricas devido ao salto que ocorre na função de arrasto para $\alpha_s = 0,2$. Porém, segundo Sanyal & Cesmebasi (1994) este procedimento é o que melhor reproduz numericamente o crescimento de bolhas num leito fluidizado borbulhante.

2. Formulação e procedimento teórico

2.1. Modelo matemático

No presente trabalho utiliza-se o modelo hidrodinâmico B para um escoamento gás-sólido desenvolvido no IIT (Illinois Institute of Technology), e incluído no código numérico MICEFLOW (Jayaswal, 1991). Um resumo do sistema de equações governantes do modelo é apresentado na Tabela 1. Descrições mais detalhadas da formulação são mostradas em Jayaswal (1991), Gidaspow (1994), Enwald *et al.* (1996) e Cabezas-Gómez e Milioli (2001). O modelo, denominado modelo tradicional das duas fases separadas, considera uma descrição Euleriana para cada fase, possibilitando o uso da teoria cinética dos escoamentos granulares (TCEG) com base no desenvolvimento de Gidaspow (1994). O código numérico considera a conservação de massa, quantidade de movimento e energia para todas as fases, e de energia cinética turbulenta para as fases sólidas. O programa computacional permite a descrição de escoamentos multifásicos que compreendem várias fases sólidas, caracterizadas cada uma delas por um diâmetro médio, pela sua densidade e fator de esfericidade, e duas fases fluidas diferentes. Neste trabalho considera-se um escoamento gás-sólido, que compreende uma fase gasosa (ar) e apenas uma fase sólida (bolinhas de vidro) com um diâmetro médio de partícula. Ambas as fases são consideradas laminares e isotérmicas a uma temperatura de 300 K e sem transferência de massa na interface. Assume-se modelo reológico Newtoniano para ambas as fases. A pressão do sólido é modelada em função do módulo de elasticidade, G , da fase sólido, através de correlação empírica proposta por Rietema & Mutsers (1973) apud Jayaswal (1991). São consideradas quatro correlações para a formulação da função de arrasto na interface. Estas são a correlação de Ergun (1952), a correlação de Wen & Yu (1966), a correlação de Di Felice (1994) e o procedimento misto proposto por Gidaspow e colaboradores (Gidaspow, 1994). Neste último considera-se a correlação de Ergun (1952) para $\alpha_s \geq 0,2$ e a correlação de Wen & Yu (1966) para $\alpha_s < 0,2$.

Na Tabela 1 os subscritos (g) e (s) representam as fases gasosa e sólida respectivamente, v_g e v_s são as velocidades médias (m/s), ρ_g e ρ_s são as densidades (kg/m^3), α_g e α_s as frações volumétricas, τ_g e τ_s são os tensores das tensões viscosas (Pa), P significa a pressão termodinâmica do gás (Pa), g a aceleração da gravidade (m/s^2), G o módulo de elasticidade do sólido (N/m^2), e β a função de arrasto na interface ($\text{kg/m}^2\text{s}$). C_{D_s} caracteriza o coeficiente de arrasto na interface para uma partícula num meio infinito, Re_s é o número de Reynolds com base no diâmetro da partícula d_p , ϕ_s é a esfericidade das partículas, μ representa a viscosidade dinâmica (kg/ms), R_g a constante dos gases ideais (kJ/kgK), e t é o tempo (s).

Tabela 1. Modelo matemático B (Gidaspow, 1994).

1. Equação da continuidade, fase k (k = g, s)	Ergun (1952):
$\frac{\partial(\rho_k \alpha_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \mathbf{v}_k) = 0$	$\beta = 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g^2 (d_p \phi_s)^2} + 1,75 \frac{\rho_g \alpha_s \mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s }{(\alpha_g d_p \phi_s)}$
2. Equação da Quantidade de movimento, Modelo B	Wen and Yu (1966):
Fase gasosa:	$\beta = \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{\rho_g \alpha_s \alpha_g \mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s }{(\alpha_g d_p \phi_s)} \alpha_g^{-2,65}$
$\frac{\partial(\rho_g \alpha_g \mathbf{v}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \alpha_g \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g) = -\nabla P$	Onde
$-\beta_B (\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s) + \nabla \cdot (\alpha_g \boldsymbol{\tau}_g) + \rho_g \mathbf{g}$	$C_{Ds} = \begin{cases} \frac{24}{Re_s} (1 + 0,15 \cdot Re_s^{0,687}) & Re_s < 1000 \\ 0,44 & Re_s \geq 1000 \end{cases}$
Fase sólida:	Procedimento de Gidaspow (1994):
$\frac{\partial(\rho_s \alpha_s \mathbf{v}_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s \alpha_s \mathbf{v}_s \mathbf{v}_s) = \beta_B (\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s)$	Utiliza-se a correlação de Ergun (1952) para $\alpha_s \geq 0,2$ e a de Wen & Yu (1966) para $\alpha_s < 0,2$.
$+ \nabla \cdot (\alpha_s \boldsymbol{\tau}_s) - G \nabla \alpha_s + (\rho_s - \rho_g) \alpha_s \mathbf{g}$	Di Felice (1994):
3. Tensor das tensões, fase k (k = g, s)	$\beta = \frac{3}{4 d_p} C_{Ds} \alpha_s \alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s \alpha_g^{-\eta}$
$\boldsymbol{\tau}_k = \mu_k \left[\nabla \mathbf{v}_k + (\nabla \mathbf{v}_k)^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}_k) \mathbf{I} \right]$	$C_{Ds} = \left(0,63 + 4,8 \sqrt{\frac{1}{Re_s}} \right)^2$
4. Modulo de elasticidade do sólido	$\eta = 3,7 - 0,65 \exp\left(-\frac{[1,5 - \log(Re_s)]^2}{2}\right)$
$G(\alpha_g) = 10^{-8,686\alpha_g + 6,385} \text{ dyn/cm}^2$	Onde $Re_s = \frac{\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s d_p \phi_s}{\mu_g}$
5. Definição da fração volumétrica	
$\alpha_g + \alpha_s = 1$	
6. Equação de estado (fase gasosa como gás ideal)	
$\rho_g = P/(R_g T) \text{ e } \rho_s = \rho_s \text{ (constante)}$	
7. Função de arrasto na interface, β , Modelo B	

2.2. Critérios de identificação e características dos "clusters"

Soong *et al.* (1993) apud Sharma *et al.* (2000) basearam-se nas seguintes diretrizes para definir os "clusters":

- A concentração de sólido no "cluster" deve ser significativamente maior que a concentração de sólido média no tempo na posição dada, para as condições de operação dadas.
- A perturbação na concentração de sólido devida aos "clusters" deve ser maior que as flutuações aleatórias de fundo da fração de sólido.
- Esta perturbação deve ser medida num volume de amostragem com um comprimento de escala característico uma ou duas ordens de grandeza maior que o diâmetro de partícula.

Considerando estas diretrizes Soong *et al.* propuseram o seguinte critério: a fração volumétrica de sólido local temporal para o "cluster" deve ser maior que a fração média no tempo em pelo menos duas vezes o desvio padrão (2σ). Desta maneira os "clusters" podem ser identificados, e considerados como tal, se a concentração instantânea de sólido excede este limite. Este critério foi utilizado por Tuzla *et al.* (1998) para detectar "clusters" num leito fluidizado tipo "downer". Sharma *et al.* (2000) modificaram ligeiramente o critério com base em evidências visuais. Segundo os autores o "cluster" detectado com o critério (2σ) torna-se uma entidade física diferenciada assim que a concentração de sólido instantânea torna-se maior que a fração de sólido média no tempo. Isto leva aos seguintes critérios de vida do "cluster":

- O "cluster" é detectado quando a concentração instantânea de sólido é maior que o seu valor médio no tempo mais duas vezes o desvio padrão (2σ).
- O momento inicial de vida do "cluster" é o último valor temporal para o qual a sua densidade excede a densidade média antes de satisfazer ao critério (2σ).
- O momento final de vida do "cluster" é o primeiro valor temporal para o qual a sua densidade é menor que a concentração média no tempo depois de ter satisfeito ao critério (2σ).

Este critério, denominado critério médio de referência, considera um tempo de duração dos "clusters" maior que o critério (2σ) de Soong *et al.* Os autores afirmam que o critério de detecção de "clusters" proposto é razoável porém um tanto arbitrário. Contudo, observam que o uso de um fator mais rigoroso que permita separar o ruído de fundo (e.g. 3σ) pode alterar quantitativamente os resultados, mas não deve alterar as características gerais da dinâmica dos "clusters".

O procedimento adotado é mostrado na Figura 1. A Figura 1a mostra um sinal temporal da fração volumétrica de sólido local típico resultante de simulação. São indicados a concentração de sólido média no tempo $\bar{\alpha}_s$ e o limiar $\bar{\alpha}_s + 2\sigma$. Na Figura 1b apresenta-se uma ampliação deste sinal temporal dos 20 aos 30 segundos, onde observa-se a existência de um "cluster" no intervalo de tempo de T_a a T_b .

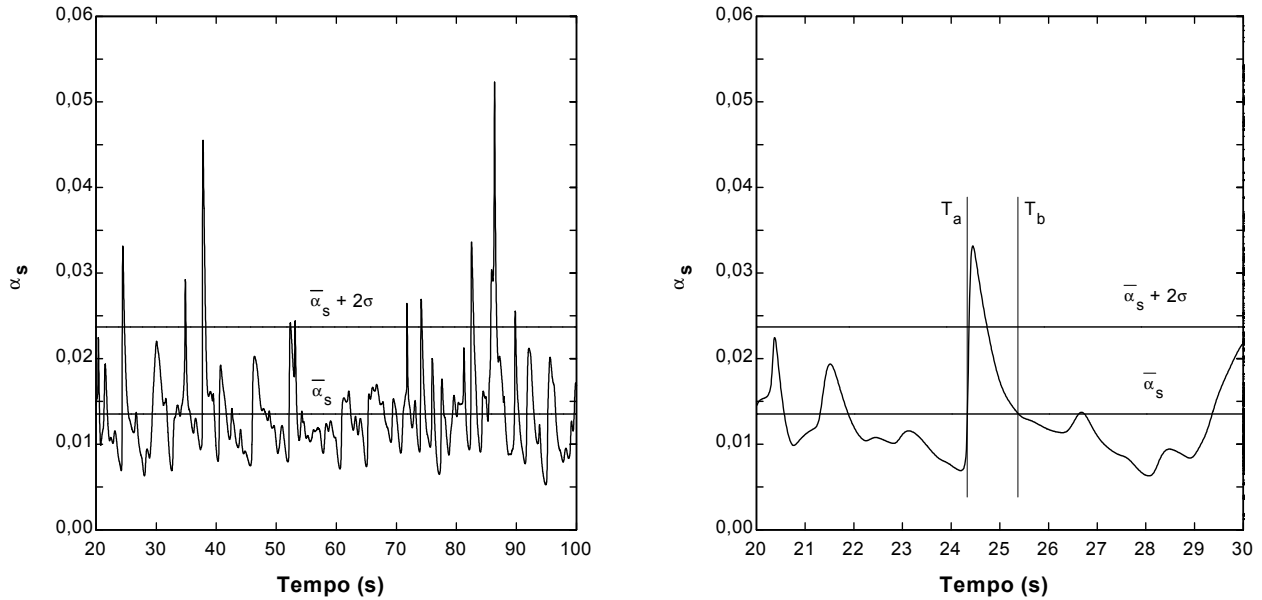


Figura 1. Variação temporal da fração volumétrica de sólido local típica resultante de simulação.

Uma vez que os "clusters" são identificados pelo critério médio de referência, as quatro características básicas dos clusters definidas em Tuzla *et al.* (1998) e Sharma *et al.* (2000) podem ser calculadas. Estas características são: o tempo médio de duração, a frequência de ocorrência, a fração temporal de existência e a concentração média de sólidos. As seguintes definições são utilizadas:

- Tempo médio de duração (τ_c): Tempo médio de duração de todos os "clusters" no volume de amostragem (no caso de Sharma, onde resultados experimentais são usados, trata-se do volume de abrangência da sonda capacitiva; quando resultados de simulação são usados, trata-se do volume de uma célula computacional). Considerando τ_i como o tempo de duração do cluster i , τ_c resulta

$$\tau_c = \sum_1^n \tau_i / n \quad (1)$$

onde n é o número total de "clusters" detectado no período de observação considerado (τ).

- Frequência de ocorrência (N_c): Frequência na qual os "clusters" são observados no volume de amostragem calculada como o número médio de "clusters" por segundo observados no tempo total de observação (τ).

- Fração temporal de existência (F_c): Fração do tempo total (τ) correspondente à existência de "clusters" no volume de amostragem, i.e.

$$F_c = \sum_1^n \tau_i / \tau \quad (2)$$

- Concentração média de sólidos (α_{sc}): Soma das frações médias de sólido para cada "cluster" sobre o número de clusters (n) detectados no tempo de observação, i.e.

$$\alpha_{sc} = \sum_1^n \bar{\alpha}_{s,i} / n \quad (3)$$

Em adição, são determinados valores médios dos parâmetros acima na seção transversal do tubo ascendente, i.e.

$$\langle f \rangle = \frac{1}{d} \int_0^d f(x) dx \quad (4)$$

onde x é a coordenada na direção horizontal e d é o comprimento da seção transversal do tubo ascendente.

3. Geometria de simulação, condições iniciais e de contorno

A Figura 2 mostra a geometria de simulação e as condições iniciais e de contorno consideradas na entrada e saída do tubo ascendente para ambas as fases. Na seção de entrada considera-se escoamento pistonado unidimensional e na seção de saída considera-se condição de continuidade para todas as variáveis, com exceção da pressão do gás. Nas paredes considera-se condição de não deslizamento para a fase gasosa, e de deslizamento parcial para a fase sólida seguindo Ding & Gidaspow (1990). Utiliza-se malha computacional (22x297) não uniforme na direção axial, e formulação em sistema cartesiano de coordenadas. O valor da viscosidade do sólido é tomado de Tsuo & Gidaspow (1990).

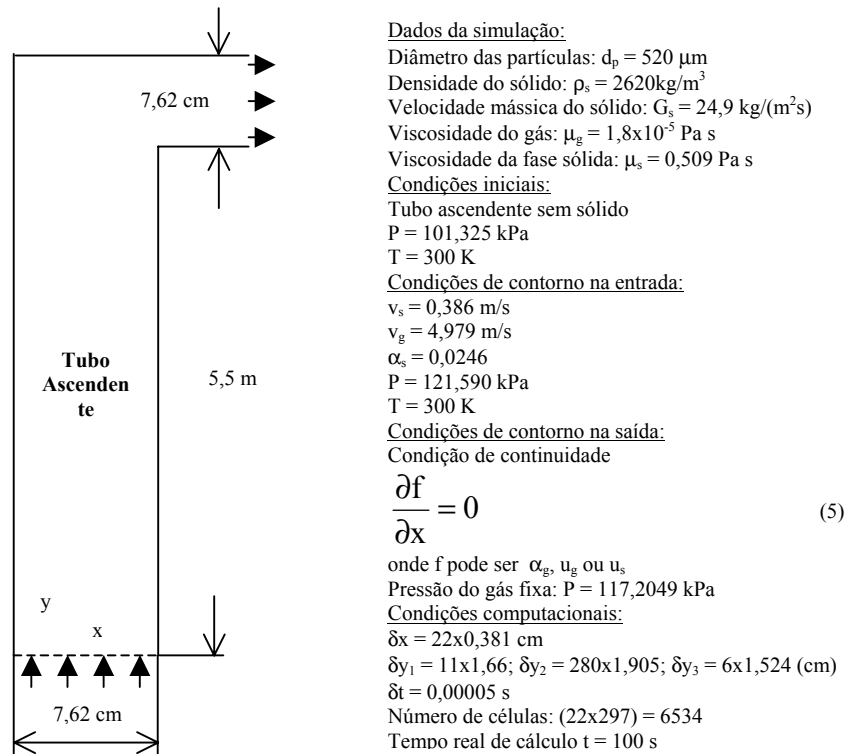


Figura 2. Geometria e condições iniciais e de contorno usadas na simulação da instalação do IIT (Luo, 1987; Tsuo, 1989) assumindo coordenadas cartesianas 2D.

4. Resultados

Nesta seção, primeiramente apresenta-se sucintamente uma comparação de resultados de simulação com dados experimentais médios, com relação aos perfis radiais da velocidade axial de ambas as fases e da fração volumétrica de sólido. Posteriormente os resultados de simulação numérica obtidos para as varias correlações da função de arrasto são comparados de forma qualitativa através da metodologia proposta por Sharma *et al.* (2000) com relação as características fundamentais das estruturas coerentes ("clusters"). Finalmente apresenta-se algumas considerações sobre a validade do critério médio de referência proposto por Sharma *et al.* (2000).

4.1. Comparação de resultados de simulação com dados experimentais médios

Nas Figuras 3a e 3b apresenta-se comparações de perfis radiais médios no tempo da velocidade axial para as fases gasosa e sólida, respectivamente, com resultados experimentais de Luo (1987), para varias correlações da função de arrasto. Na Figura 3a observa-se diferenças significativas dos perfis de V_g em relação aos dados experimentais para todas as correlações de β com exceção da correlação de Ergun (1952) na parede direita da coluna. As discrepâncias são ainda maiores no centro da coluna. Nota-se que a correlação de Wen & Yu (1966) e o procedimento de Gidaspow (1994) resulta num comportamento similar do perfil de V_g . Os resultados obtidos para a correlação de Di Felice (1994) também apresentam um comportamento qualitativamente semelhante com algumas diferenças quantitativas. Deve-se destacar que apesar da correlação de Ergun (1952) produzir resultados de V_g bastante próximos dos dados experimentais, quando considerada em toda a faixa de valores de α_s , esta apresenta um comportamento fisicamente incorreto do centro até a parede esquerda da coluna. A razão física deste comportamento é a distribuição homogênea de α_s (ver Figura 4) produzida pelo modelo, causando um efeito de homogeneização do sólido sobre a fase gasosa que impõe um perfil plano da velocidade do gás nessa zona do leito (Cabezas-Gómez & Milioli, 2002). Além desse fato, na Figura 3b percebe-se que a correlação de Ergun (1952) prediz um perfil de V_s bastante defasado com relação aos dados experimentais, em contraposição ao resultados obtidos para as outras correlações da função de arrasto. Nesta figura observa-se que todas as correlações de β , exceto a de Ergun (1952) quando considerada para toda a faixa de α_s , captam o padrão de escoamento pistonado anular característico do escoamento em tubos ascendente de leitos circulantes. Os resultados fisicamente incoerentes obtidos com a correlação de Ergun, indicam que a mesma não deve ser considerada para toda a faixa de valores de α_s .

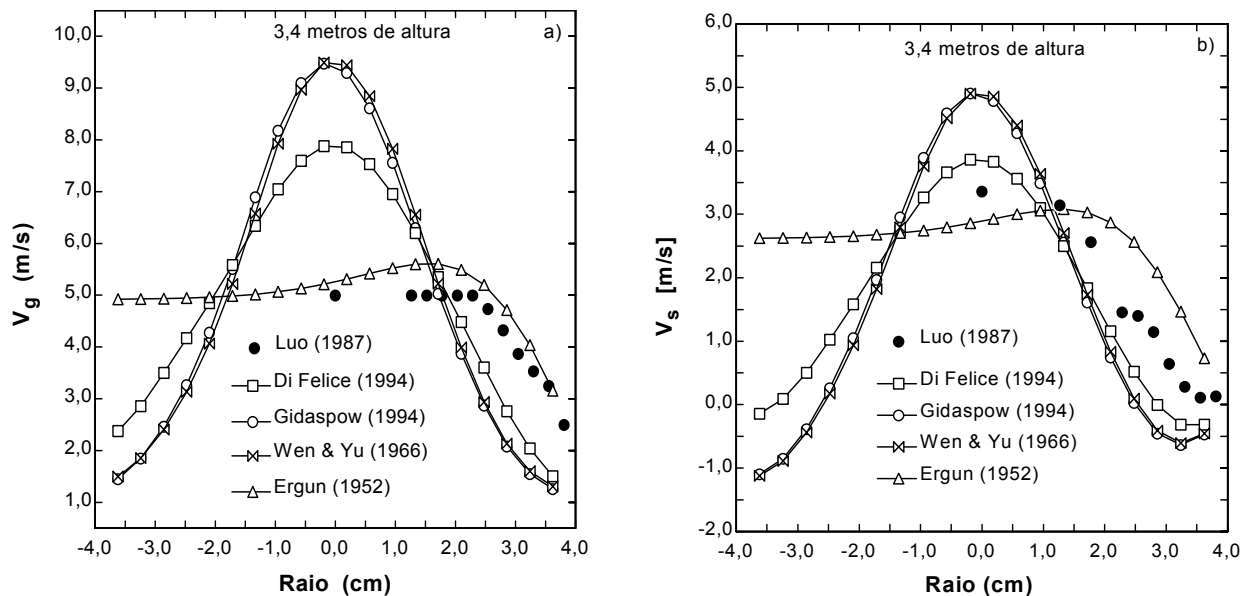


Figura 3. Perfis radiais médios no tempo da velocidade axial para ambas as fases 3,4 metros acima da entrada, em comparação com dados experimentais de Luo (1987) para várias correlações de β .

A Figura 4 apresenta o perfil radial de fração volumétrica de sólido média no tempo para as varias correlações de β . A exceção da correlação de Ergun (1952), os resultados apresentam um comportamento muito semelhante, qualitativamente correto, observando-se uma boa concordância com dados experimentais. As maiores diferenças quantitativas entre simulações e experimento são detectadas na região mais próxima à parede. Percebe-se claramente que quando a correlação de Ergun (1952) é considerada para toda a faixa de α_s o modelo falha na predição da hidrodinâmica do escoamento, não captando o padrão de escoamento pistonado anular próprio destas instalações. Isto não acontece com as outras correlações que apresentam resultados da fração de sólido coerentes, com concentração de sólido maior nas regiões próximas às paredes e menor no centro da coluna. Outras comparações de resultados de simulação obtidos com o mesmo modelo matemático e o mesmo procedimento numérico podem ser vistos em Cabezas-Gómez & Milioli (2001 e 2002). Salienta-se que nesses trabalhos outra malha computacional foi empregada. Entretanto, os resultados apresentaram o mesmo comportamento qualitativo. No caso da correlação de Ergun (1952) foram detectados os mesmos fenômenos, os quais foram discutidos tendo em vista os resultados disponíveis.

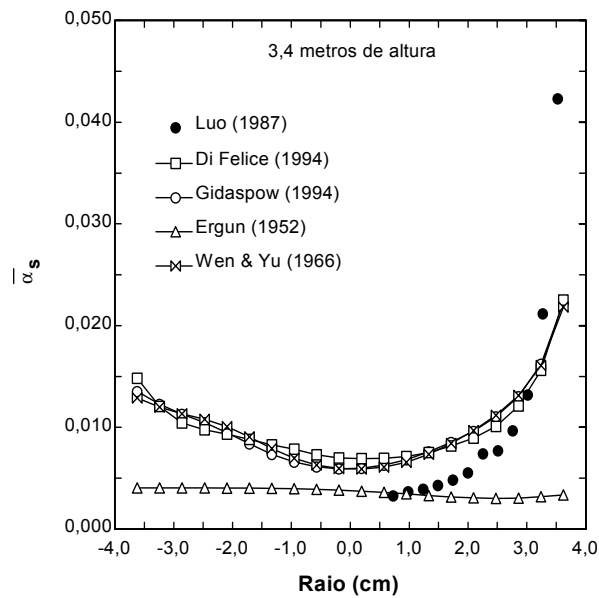


Figura 4. Perfil radial da fração volumétrica de sólido média no tempo 3,4 metros acima da entrada, em comparação com dados experimentais de Luo (1987) para várias correlações da função de arrasto.

4.2. Análise das características dos "clusters" a partir dos resultados de simulação para as várias correlações de β

Na Figura 5 mostra-se os perfis radiais da concentração média de sólido nos "clusters", α_{sc} . Nesta figura observa-se um comportamento similar ao mostrado na Figura 4 para $\bar{\alpha}_s$ para todas as correlações de β , exceto a de Di Felice (1994), que resulta num comportamento bastante diferente. Novamente a correlação de Wen & Yu (1966) e o procedimento de Gidaspow (1994) apresentam resultados muito semelhantes. Observa-se uma concentração média de sólido nos "clusters" maior nas regiões próximas às paredes, sendo que a correlação de Ergun mantém o seu perfil plano (distribuição homogênea de α_{sc}), qualitativamente e quantitativamente igual ao perfil de $\bar{\alpha}_s$. Este fato chama atenção, pois a concentração de sólido nos "clusters" deve ser, por definição, sempre maior que a concentração de sólido média no tempo, como percebe-se na Figura 5 para as outras correlações de β . Neste caso o critério médio de referência apresenta-se falho. Isso está em acordo com resultados anteriores mostrando que "clusters" não são observados quando a função de arrasto de Ergun é utilizada (Cabezas-Gómez & Milioli, 2002). Este fato será discutido com maior profundidade na seção 4.3 e reflete a necessidade de melhorar ou formular novos critérios que permitam caracterizar e quantificar melhor as estruturas coerentes.

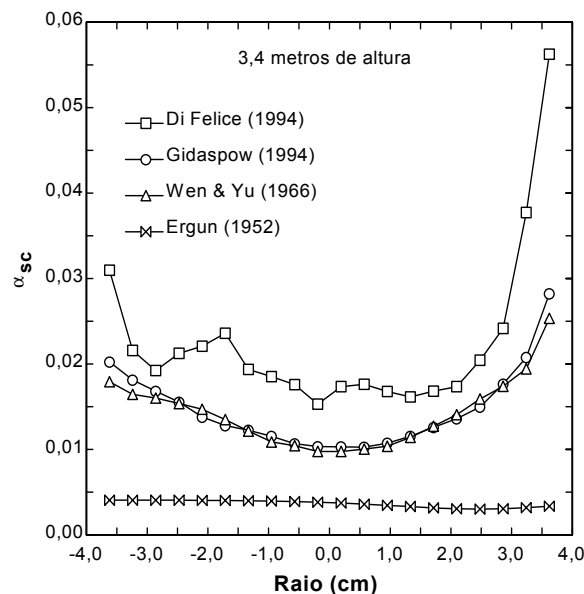


Figura 5. Perfis radiais da concentração média de sólido nos "clusters", α_{sc} , para várias correlações da função de arrasto.

As Figuras 6a e 6b mostram os valores médios na seção transversal da coluna, da fração volumétrica de sólido média no tempo, $\bar{\alpha}_s$, e a concentração média de sólido nos "clusters", α_{sc} , respectivamente. Para a correlação de Wen & Yu (1966) e o procedimento de Gidaspow (1994), $\langle \alpha_{sc} \rangle$ e $\langle \bar{\alpha}_s \rangle$ apresentam comportamento similar, com uma pequena diferença na altura de 5,5 metros onde se percebe um leve aumento de $\langle \alpha_{sc} \rangle$ enquanto $\langle \bar{\alpha}_s \rangle$ diminui. Isto reflete o acúmulo de sólidos com formação de "clusters" na região de saída do leito. Para a correlação de Di Felice (1994) o perfil axial de $\langle \alpha_{sc} \rangle$ apresenta algumas variações bruscas em comparação com o perfil de $\langle \bar{\alpha}_s \rangle$, sendo notável um aumento brusco em torno de 3,5 metros de altura. Acima dessa altura $\langle \bar{\alpha}_s \rangle$ diminui, voltando a ter um leve aumento na saída do leito. Nota-se que o valor de $\langle \alpha_{sc} \rangle$, depois de 1,5 metros de altura, é maior que os valores correspondentes às outras correlações. Este fato reflete a formação de "clusters" mais densos no uso desta correlação, como percebe-se na Figura 5. Observa-se novamente que a correlação de Ergun (1952) prevê uma distribuição homogênea da fração volumétrica de sólido média no tempo, também ao longo da altura da coluna. Esta observação pode ser estendida para dados temporais de α_s como mostra-se em Cabezas-Gómez & Milioli (2002). Mais uma vez, nota-se que os valores de $\langle \alpha_{sc} \rangle$ e $\langle \bar{\alpha}_s \rangle$ obtidos através desta correlação resultam iguais. Estes fatos indicam que a correlação de Ergun não reproduz as variações da fração volumétrica de sólido e as características dos "clusters", e portanto não capta a formação destas estruturas. Este fato sugere uma revisão do critério médio de referência de Sharma *et al.* (2000). Na região inferior do leito a concentração de sólido resulta alta para todas as correlações, exceto a de Ergun (1952). Nesta região mais densa, "clusters" também são detectados pelo critério médio de referência, porém podem não existir de fato. Esse aspecto deve ser pesquisado com mais profundidade. Há consideráveis diferenças nos perfis axiais de $\langle \alpha_{sc} \rangle$ para as várias correlações de β consideradas, evidenciando a necessidade de verificação experimental.

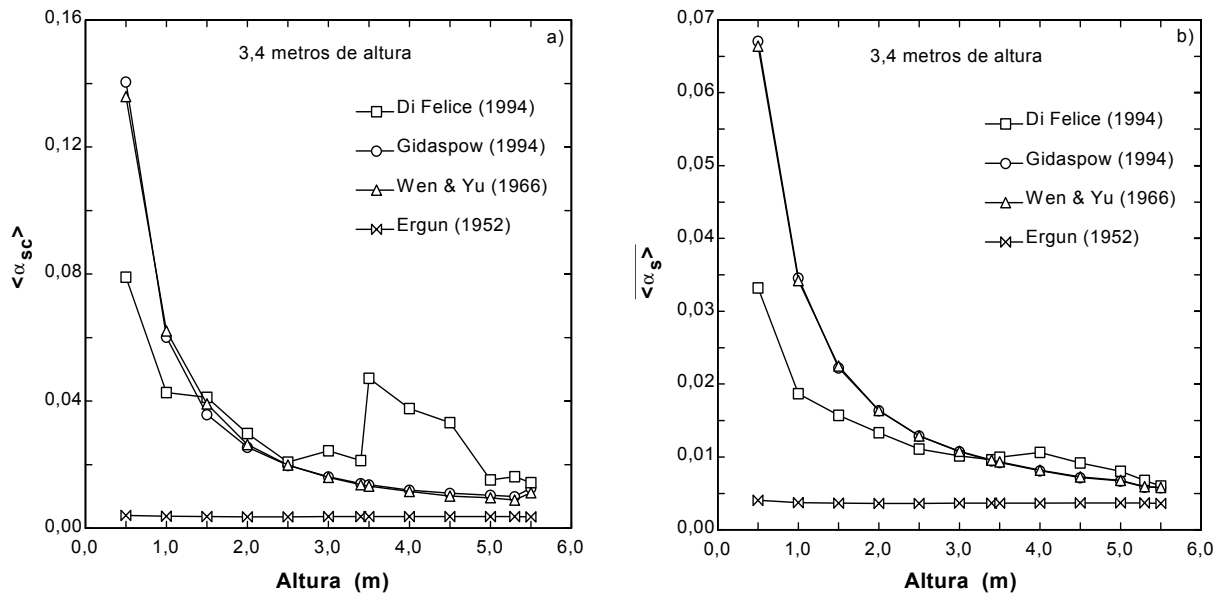


Figura 6. Comparação dos perfis médios na seção transversal da concentração média de sólido nos "clusters", $\langle \alpha_{sc} \rangle$, e da fração volumétrica de sólido média no tempo, $\langle \bar{\alpha}_s \rangle$, ao longo da coluna, para as várias correlações da função de arrasto.

Os perfis radial do tempo de duração dos "clusters", τ_c , e axial médio na seção do tempo de duração dos "clusters", $\langle \tau_c \rangle$, para as várias correlações de β são mostrados nas Figura 7a e 7b, respectivamente. Para todas as funções de arrasto, percebe-se uma grande variação relativa entre os perfis radiais através do leito observando-se valores elevados de τ_c nas regiões próximas à parede direita da coluna. Isto acontece em menor grau do centro até a parede esquerda onde os perfis oscilam um pouco, mostrando um leve crescimento perto da parede em alguns casos. Esse comportamento deve-se, possivelmente, à condição de contorno de saída, que provoca um direcionamento do escoamento para a parede direita causando uma concentração de sólidos maior nessa região. Porém a causa física deste comportamento não está clara, pois é razoável esperar um tempo de duração maior também na parede direita onde os "clusters" devem ser maiores, em função da película anular de sólido que normalmente observa-se nestas instalações, e como evidenciado na Figura 4. É interessante notar que no caso da correlação de Ergun (1952), são captados "clusters" na faixa de τ_c de 1,0 a 1,75 segundos, aproximadamente. Isto contradiz as observações da literatura (Cabezas-Gómez & Milioli, 2002) e os perfis mostrados nas Figuras 4, 5 e 6, que criticam a inexistência de "clusters". Não é possível comparar os resultados de τ_c aos de Sharma *et al.* visto terem assumido condição de simetria radial, além das condições de contorno de saída serem diferentes. Entretanto os resultados são contrários aos apresentados por estes autores. Para Sharma *et al.* o maior valor de τ_c foi de 0,15 segundos a 4,5 metros de altura. No presente trabalho o maior valor de τ_c na altura de 3,4 metros foi de aproximadamente 4,0 segundos.

Esta diferença significativa pode ser devido à natureza turbulenta do escoamento não considerada no presente trabalho. Há também que se considerar as incertezas nas medições experimentais, e as diferenças nas condições operacionais experimentais comparadas às de simulação. Percebe-se que τ_c é maior em quase toda a seção para a correlação de Di Felice (1994). Da Figura 7b percebe-se que o tempo de duração dos "clusters" médio na seção, $\langle \tau_c \rangle$, é inversamente proporcional às concentrações de sólido média no tempo e nos "clusters". Ou seja, quanto mais densos os "clusters" são, menor é o seu tempo de duração em termos dos valores médios na seção transversal. Isto acontece para todas as correlações de β , excetuando a de Ergun (1952). Por outro lado, na direção radial observa-se, em média, um comportamento inverso, i.e. quanto maior a concentração de sólido, maior o tempo de duração do "cluster" (ver Figuras 5 e 7a). Isto nota-se claramente para a correlação de Di Felice, a qual apresenta os resultados de maior módulo de α_{sc} e de τ_c na seção transversal do leito.

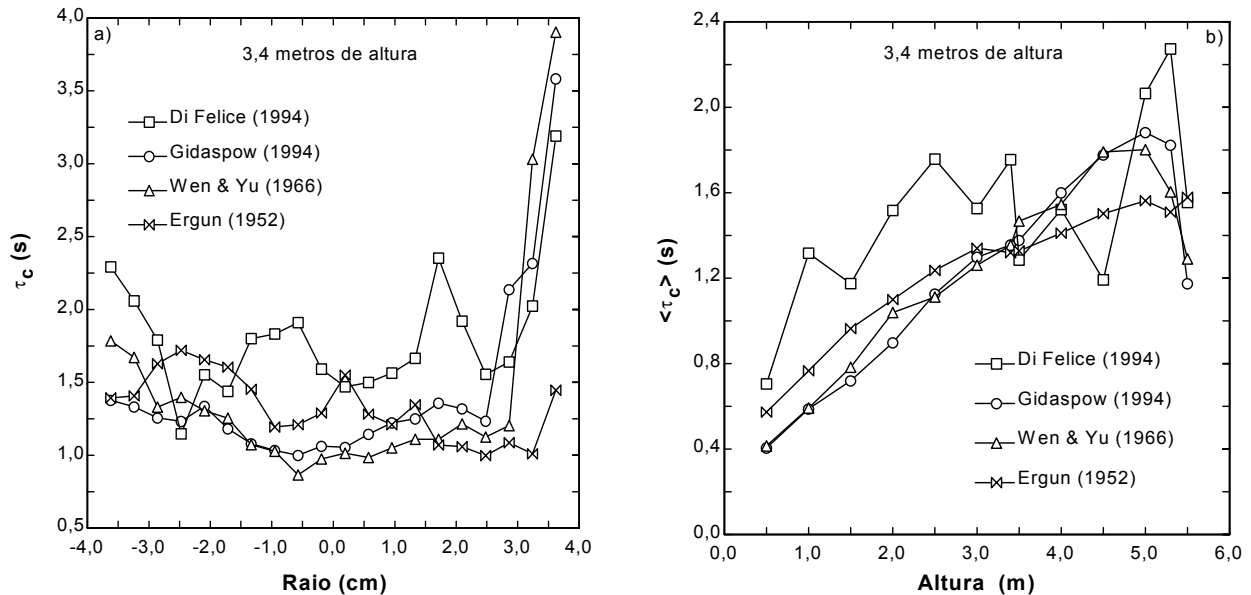


Figura 7. Perfis radiais do tempo de duração dos "clusters", τ_c e perfis axiais do tempo de duração dos "clusters", médio na seção transversal, $\langle \tau_c \rangle$, para as várias correlações da função de arrasto.

As Figuras 8a e 8b mostram a fração de tempo de existência de "clusters" em cada posição radial, F_c , aos 3,4 metros de altura e fração de tempo de existência de "clusters", média na seção, $\langle F_c \rangle$, ao longo da altura da coluna. Pode-se observar uma diferença máxima de aproximadamente 4 vezes entre os valores de F_c obtidos (mínimo de 0,06 e máximo de 0,25), sendo que a maioria dos pontos oscilam entre 0,12 e 0,20. Não se vislumbra qualquer padrão de variação funcional de F_c com o raio. Porém pode-se destacar que F_c é menor para valores maiores de α_{sc} e τ_c , sobre tudo no caso da correlação de Di Felice (1994). Na Figura 8b observa-se que o parâmetro $\langle F_c \rangle$ oscila numa faixa entre 0,07 e 0,23, em torno do valor médio de aproximadamente 0,17, desconsiderando a correlação de Di Felice (1994). Este valor médio de $\langle F_c \rangle$ também foi obtido por Sharma *et al.* (2000). Segundo estes autores esta característica apresenta uma constância inexplicável até o momento, mesmo quando a velocidade superficial de entrada do gás e o diâmetro de partícula médio são variados consideravelmente. O valor médio por eles calculado foi de 0,17, o qual poderia ser assumido aqui também, desconsiderando a correlação de Di Felice (1994). Nas Figuras 9a e 9b apresenta-se a frequência de ocorrência dos "clusters" N_c em função do raio aos 3,4 metros de altura e o valor médio na seção desta frequência de ocorrência $\langle N_c \rangle$ em função da altura do leito, respectivamente. Nestes casos observa-se uma variação um pouco maior desta propriedade em comparação com a fração de tempo de existencia dos "clusters", sobre tudo em relação à $\langle F_c \rangle$. A maior quantidade de "clusters" em função da altura, foi observada na parte inferior do leito, sendo de cerca de 0,10 na metade e na parte superior da coluna. A correlação de Di Felice (1994) foi a que resultou em uma quantidade menor de "clusters" ao longo da coluna. Na seção transversal, observou-se a maior quantidade de "clusters" no centro da coluna, com exceção da correlação de Di Felice (1994), a qual capta os menores valores de N_c . Da Figura 9b pode-se notar que a frequência maior de ocorrência dos "clusters" para a metade superior da coluna acontece aos 5,5 metros de altura, para as correlações de β consideradas, sendo de aproximadamente 0,15 "clusters" por segundo em média. Este valor é muito baixo quando comparado aos dados de Sharma *et al.* (2000), que obtiveram quase 12 "clusters" por segundo para um valor da velocidade superficial do gás na entrada de 4,9 m/s. Novamente, essa discrepância pode estar relacionada ao fato de se ter utilizado modelo laminar, à incertezas nos resultados experimentais de Sharma *et al.*, e as diferenças entre as condições operacionais experimentais e de simulação. Na presente simulação laminar, a frequência de ocorrência é baixíssima e o tempo de existência é elevado em comparação com as

medições experimentais de Sharma *et al.* (2000), e em comparação com resultados de simulação numérica de Helland *et al.* (2002), onde foi considerada turbulência nas equações da fase gasosa.

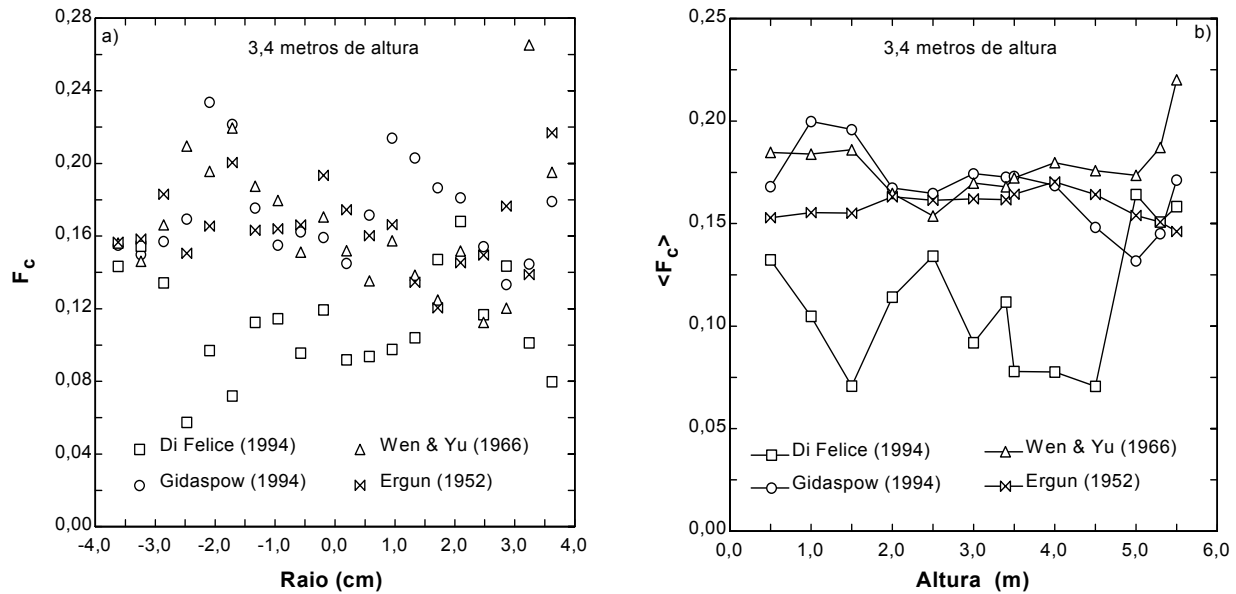


Figura 8. Fração de tempo de existência dos "clusters" em cada posição radial aos 3,4 metros de altura, F_c , e fração de tempo de existência dos "clusters", média na seção, $\langle F_c \rangle$, em função da altura da coluna, para as várias correlações de β .

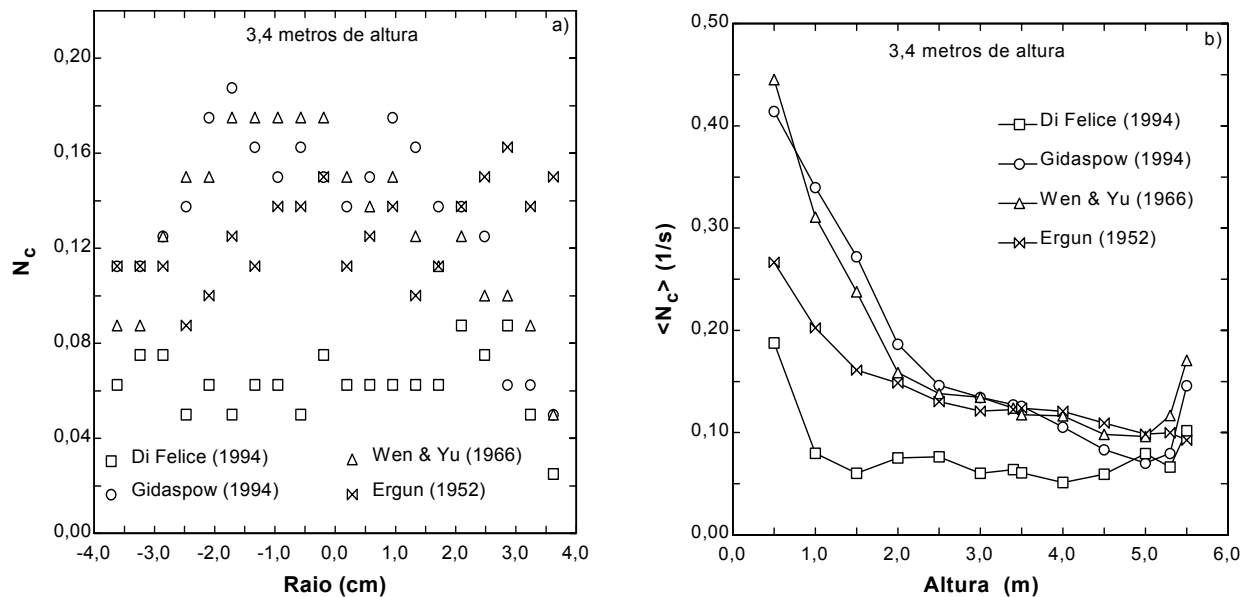


Figura 9. Variação radial da frequência de ocorrência de "clusters", N_c , aos 3,4 metros de altura e da frequência de ocorrência de "clusters", média na seção transversal, $\langle N_c \rangle$, ao longo da coluna, para as várias correlações de β .

4.3. Análise da validade do critério de referência médio proposto por Sharma *et al.* (2000)

Nas Figuras 10a e 10b mostra-se a variação temporal da fração volumétrica de sólido na altura de 3,4 metros acima da entra e na célula computacional mais próxima à parede esquerda do leito considerando a correlação de Ergun (1952) em toda a faixa de α_s . Como se percebe destas figuras o critério 2σ capta "clusters". A diferença entre o valor médio de α_s e o valor de $\alpha_s + 2\sigma$ é da ordem de 10^{-7} , sendo esta diferença insignificante e maior que os erros envolvidos em medições experimentais e também nas aproximações numéricas utilizadas no presente trabalho. Isto indica que a análise estatística na qual se baseia o critério médio de referência de Sharma *et al.* (2000) vai captar "clusters" independentemente do comportamento do parâmetro α_s analisado, já que qualquer sinal que se analise terá necessariamente alguns picos fora do

limite 2σ . Partindo desta afirmação pode-se afirmar que este critério precisa ser modificado de forma tal que seja considerado um limite inferior de α_s , tanto ao longo do tempo, quanto na seção transversal que se analisa. Este limite também deve considerar a influência que as condições de operação e a geometria vão impor sobre o escoamento em análise. Outra questão a ser elucidada com respeito ao critério médio de referência ou qualquer outro é a sua aplicação nas diferentes regiões do leito. Nos leitos circulantes pode-se considerar que a região inferior comporta-se como um leito borbulhante (Johnsson *et al.*, 2000), razão pela qual compromete-se a consideração de "clusters" nesta região.

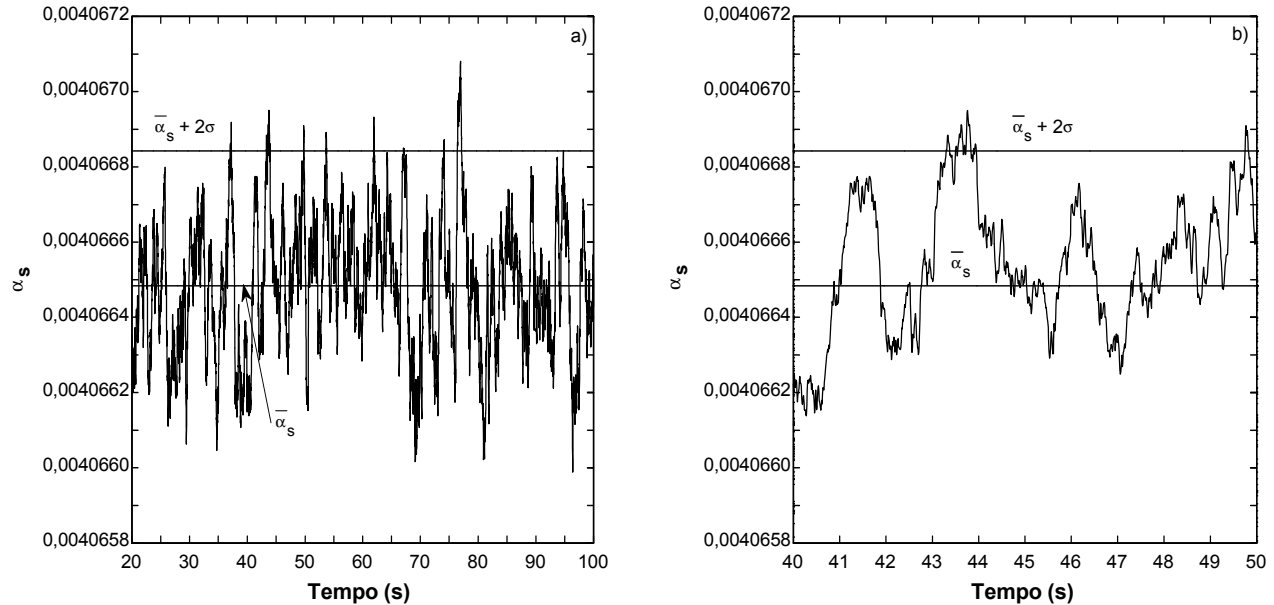


Figura 10. Variação temporal da fração volumétrica de sólido local na coordenada, $r = -3,62$ cm, aos 3,4 metros de altura utilizando a correlação de Ergun (1952) para toda a faixa de α_s .

5. Conclusões

Os resultados de simulação apresentados mostram que o modelo matemático empregado é capaz de prever o comportamento hidrodinâmico do escoamento médio em comparação com os dados experimentais de forma razoável. Comprovou-se que o uso da metodologia de identificação e caracterização das estruturas coerentes permite analisar qualitativa e quantitativamente fenômenos importantes destes escoamentos. Entretanto, comprovou-se que o critério considerado precisa ser modificado pois mostrou-se incoerente na análise dos resultados obtidos para a correlação de Ergun (1952). Foi mostrado que o modelo laminar capta uma quantidade de clusters muito menor caracterizados por um tempo de duração muito maior em comparação com dados experimentais da literatura. As discrepâncias podem estar relacionadas a incertezas experimentais e a diferenças de condição operacionais entre experimento e simulação. Porém, avalia-se que a razão principal destas diferenças parece ser a natureza turbulenta deste tipo de escoamento que não foi incorporada no modelo. Isto parece indicar na necessidade de utilização de modelos de turbulência na formulação de escoamentos gás-sólido em colunas de leito circulante. Finalmente mostrou-se a incorreção do uso da equação de Ergun (1952) para toda a faixa de α_s , e também a necessidade de realização de uma escolha criteriosa da função de arrasto.

6. Agradecimentos

Este trabalho recebeu o suporte da FAPESP através da bolsa de doutorado (processo 98/13812-1) para o primeiro autor.

7. Referencias Bibliográficas

- Cabezas-Gómez, L. e Milioli, F.E., 2002, "A Parametric Study of the Gas-Solid Flow in the Riser of a Circulating Fluidized Bed Through Continuous Eulerian Modeling", Submitted to the Powder Technology.
- Cabezas-Gómez, L. and Milioli, F.E., 2001, "Gas-Solid Two-phase Flow in the Riser of Circulating Fluidized Bed: Mathematical Modeling and Numerical Simulation", RBCM- J. of the Brazilian Soc. Mechanical Sciences, Vol.19, No. 3, pp. 332-340.
- Chen, Y-M., Jang, C-S., Cai, P and Fan, L-S., 1991, "On the formation and disintegration of particle clusters in a liquid-solid transport", Chemical Engineering Science, Vol.46, No. 9, pp. 2253-2268.

- Di Felice, R., 1994, "The voidage function for fluid-particle interaction systems", *International Journal of Multiphase Flow*, Vol.20, No. 1, pp. 153-159.
- Ding, J. and Gidaspow, D., 1990, "A Bubbling Model using Kinetic Theory of Granular Flow", *AIChE Journal*, Vol.36, No. 4, pp. 523-538.
- Enwald, H., Peirano, E. and Almstedt, A.-E., 1996, "Eulerian Two-phase Flow Theory Applied to Fluidization", *International Journal of Multiphase Flow*, Vol.22, Supplement, pp. 21-66.
- Ergun, S., 1952, "Fluid Flow through Packed Columns", *Chemical Engineering Progress*, Vol.48, No. 2, pp. 89-94.
- Gidaspow, D., 1994, "Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions", Academic Press, Boston, 468p.
- Helland, E., Occelli, R. and Tadriss, L., 2002, "Computational study of Fluctuating Motions and Cluster Structures in Gas-Particle Flows", *International Journal of Multiphase Flow*, Vol.28, pp. 199-223.
- Jayaswal, U., 1991, "Hydrodynamics of Multiphase Flows: Separation, Dissemination and Fluidization", PhD Thesis, Illinois Institute of Technology, Chicago.
- Johnsson, F., Zijerveld, R.C., Schouten, J.C., van den Bleek, C.M. and Leckner, B., 2000, "Characterization of fluidization regimes by time-series analysis of pressure fluctuations", *International Journal of Multiphase Flow*, Vol.26, pp. 663-715.
- Luo, K.M., 1987, "Dilute, Dense-Phase and Maximum Solids-Gas Transport", PhD Thesis, Illinois Institute of Technology, Chicago.
- Sanyal, J. and Cesmebasi, E., 1994, "On the effect of various momentum transfer coefficient models on bubble dynamics in a rectangular gas fluidized bed", *Chemical Engineering Science*, Vol.49, No. 23, pp. 3955-3966.
- Sharma, A.K., Tuzla, K., Matsen, J. and Chen, J.C., 2000, "Parametric effects of particle size and gas velocity on cluster characteristics in fast fluidized beds", *Powder Technology*, Vol.111, pp. 114-122.
- Tsuo, Y., 1989, "Computation of Flow Regimes in Circulating Fluidized Beds", PhD Thesis, Illinois Institute of Technology, Chicago.
- Tsuo, Y.P. and Gidaspow, D., 1990, "Computation of Flow Patterns in Circulating Fluidized Beds", *AIChE Journal*, Vol.36, No. 6, pp. 885-896.
- Tuzla, K., Sharma, A.K., Chen, J.C., Schiewe, T., Wirth, K.E. and Molerus, O., 1998, "Transient dynamics of solid concentration in downer fluidized bed", *Powder Technology*, Vol.100, pp. 166-172.
- van Wachem, B.G.M., Schouten, J.C., van den Bleek, C.M., Krishna, R. and Sinclair, J.L., 2001, "Comparative analysis of CFD models of dense gas-solid systems", *AIChE Journal*, Vol.47, No. 5, pp. 1035-1051.
- Wen, C.Y. and Yu, Y.H., 1966, "Mechanics of Fluidization", *Chemical Engineering Progress Symposium Series*, Vol.62, No. 62, pp. 100-111.

A NUMERICAL SIMULATION ANALYSIS REGARDING THE EFFECT OF THE INTERFACE DRAG FUNCTION ON THE DYNAMICS OF FORMATION, DISSIPATION AND BREAKING OF COHERENT STRUCTURES IN THE GAS-SOLID FLOW OF A CIRCULATING FLUIDIZED BED

Luben Cabezas Gómez

Group of Thermal and Fluids Engineering - EESC-USP, Av. Trabalhador São-carlense, 400, 13566-590 - São Carlos - SP.

lubencg@sc.usp.br

Luciano Vieira de Souza

Group of Thermal and Fluids Engineering EESC-USP, Av. Trabalhador São-carlense, 400, 13566-590 - São Carlos - SP.

souzalv@sc.usp.br

Fernando Eduardo Milioli

Group of Thermal and Fluids Engineering EESC-USP, Av. Trabalhador São-carlense, 400, 13566-590 - São Carlos - SP.

milioli@sc.usp.br

Abstract. *An evaluation is presented regarding the effect of different interface drag function correlations over the dynamics of formation, dissipation and breaking of coherent structures in the gas-solid flow of a circulating fluidized bed through numerical simulation. The numerical simulation is performed using the MICEFLOW code, which includes the two-fluids IIT's hydrodynamic model B. The methodology for cluster characterization that is used is based in the determination of four characteristics, related to average life time, average volumetric fraction of solid, existing time fraction and frequency of occurrence. The identification of clusters is performed applying a criterion related to the time average value of the volumetric solid fraction. This methodology is applied to results of simulation obtained using different drag function correlations, and a qualitative analysis is performed regarding the influence of this important parameter over the hydrodynamics of the flow including the evolution of coherent structures. The simulation predictions obtained using the different drag function correlations are also compared to experiment, providing an additional analysis related to the behavior of gas and solid axial velocity profiles and solid fraction. The analyses indicate that the choice of a correlation for the drag function should be quite judicious, and that the development of new correlations is required since most of the existing correlations were developed for homogeneous fluidization.*

Keywords. *coherent structures, drag function, numerical simulation, gas-solid flow, circulating fluidized bed.*