SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO GÁS-SÓLIDO NA COLUNA ASCENDENTE DE UM LEITO FLUIDIZADO CIRCULANTE APLICANDO DIFERENTES FORMULAÇÕES PARA VISCOSIDADE E PRESSÃO DA FASE SÓLIDA

Luben Cabezas Gómez

Departamento de Engenharia Mecânica, Escola de Engenharia de São Carlos, USP. Av. Trabalhador São-Carlense, N°400-Centro, São Carlos, SP. CEP 13566-590. lubencg@sc.usp.br

Renato César da Silva

Departamento de Ciências Exatas, Campus Três Lagoas, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Av. Ranulpho Marques Leal, 3484, CEP: 79620-080 - Três Lagoas - MS. rcsilva@ceul.ufms.br

Helio Aparecido Navarro

Departamento de Estatística, Matemática Aplicada e Computação, Instituto de Geociências e Ciências Exatas, Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", Av. 24-A, 1515, Cx. P 178, CEP 13506-700, Rio Claro, SP, Brazil. helio@rc.unesp.br

Fernando Eduardo Milioli

Núcleo de Engenharia Térmica e Fluidos, Escola de Engenharia de São Carlos, USP. Av. Trabalhador São-Carlense, N°400-Centro, São Carlos, SP. CEP 13566-590.

lubencg@sc.usp.br

Resumo. Aplica-se o modelo de dois fluidos para simular numericamente o escoamento gás-sólido no tubo ascendente de um leito fluidizado circulante (LFC). A viscosidade dinâmica e pressão da fase sólida são calculados através de dois procedimentos diferentes. No primeiro aplicam-se correlações empíricas. No segundo procedimento aplicam-se correlações desenvolvidas a partir da teoria cinética dos escoamentos granulares (TCEG). Utiliza-se o código MFIX desenvolvido no NETL (National Energy Technology Laboratory). O objetivo fundamental do trabalho é desenvolver uma análise comparativa dos resultados de simulação obtidos através dos dois procedimentos considerados para calcular as relações constitutivas para o cômputo do tensor das tensões da fase sólida. São apresentados perfis radiais médios temporais das velocidade axial de ambas as fases, fração volumétrica e o fluxo de massa da fase sólida. Os resultados são comparados com dados experimentais, mostrando comportamentos diferentes em função do modelo matemático utilizado. Em todas as simulações utiliza-se uma malha computacional uniforme em duas dimensões em coordenadas cartesianas. Os resultados mostram que a escolha do procedimento para avaliação de viscosidade e pressão da fase sólida influencia significativamente o comportamento do escoamento gás-sólido na coluna do CFB. No artigo propõe-se um modelo matemático inédito que parece ser bastante adequado para o desenvolvimento de futuras simulações dos escoamentos aqui abordados.

Palavras chave: Escoamentos gás-sólido, Leitos fluidizados circulantes, Teoria cinética dos escoamentos granulares, Simulação numérica.

1. Introdução

Neste trabalho apresentam-se resultados de simulação numérica do escoamento gás-sólido no tubo ascendente de um leito fluidizado circulante (LFC). São considerados dois procedimentos diferentes para o cômputo da pressão e da viscosidade dinâmica da fase sólida. Estes são: o denominado procedimento tradicional que faz uso de correlações empíricas e a versão algébrica da teoria cinética dos escoamentos granulares (TCEG), que utiliza correlações teóricas. Ambos os procedimentos têm sido utilizados em diversos trabalhos reportados na bibliografia. O procedimento tradicional foi aplicado por Tsuo e Gidaspow (1990), Sun e Gidaspow (1999), Huilin e Gidaspow (2003), e Cabezas-Gómez e Milioli (2003, 2004, 2005a,b), entre outros. Já a versão algébrica da TCEG foi utilizada por Syamlal *et al.* (1993), Boemer *et al.* (1995), van Wachem *et al.* (1998), Guenther e Syamlal, (2001), e Cabezas-Gómez, *et al.* (2006), entre outros.

No procedimento tradicional a viscosidade da fase sólida é calculada a partir de correlações obtidas de dados experimentais, basicamente apenas em função da fração volumétrica de sólidos. Já a pressão da fase sólida é calculada usando correlações empíricas em função do denominado módulo de elasticidade que considera as colisões entre as partículas. Recentemente este procedimento foi aplicado com sucesso por Cabezas-Gómez e Milioli (2003, 2004 e 2005a,b) para simular um escoamento gás-sólido num LFC.

Syamlal *et al.* (1993) desenvolveram a versão algébrica da TCEG oferecendo a possibilidade de acelerar a convergência da solução numérica calculando diretamente a temperatura granular através de uma expressão simples, em

vez de resolver a equação diferencial parcial complexa que representa o balanço de temperatura granular. Assim, a maior diferença entre a versão algébrica da TCEG e as outras versões é o uso de uma equação de balanço simplificada para o cômputo da temperatura granular. Nesse procedimento os processos de convecção e difusão são desprezados, considerando apenas a dissipação local estacionária de energia granular. Após o cálculo da temperatura granular a pressão e viscosidade dinâmica da fase sólida são calculadas usando as relações teóricas desenvolvidas por Lun *et al.* (1984). Segundo van Wachem *et al.* (1998), este procedimento é apenas válido para altas concentrações da fase sólida e valores relativamente baixos da velocidade da fase sólida. Num regime de escoamento desse tipo a energia granular é basicamente dissipada localmente. Desta forma o procedimento é mais apropriado para os escoamentos gás-sólido que acontecem em leitos fluidizados borbulhantes (LFB). Porém, seguindo a bibliografia, o procedimento é aplicado neste trabalho para simular o escoamento gás-sólido em LFC, mostrando resultados satisfatórios.

No presente trabalho, além da versão algébrica da TCEG apresentada por Syamlal *et al.* (1993) também se mostram resultados obtidos com uma versão modificada dessa teoria, proposta inicialmente por Silva (2006) e publicada recentemente em Cabezas-Gómez *et al.* (2006). Nessa versão modificada a viscosidade dinâmica do sólido é calculada como proposto na versão algébrica da TCEG, enquanto a pressão do sólido é calculada aplicando uma das correlações empíricas usadas no modelo tradicional. Os resultados mostrados no presente trabalho demonstram que este modelo híbrido permite obter resultados mais coerentes em relação aos dados experimentais quando comparado com a versão algébrica da TCEG comumente usada na literatura. Uma discussão mais aprofundada pode ser encontrada em Cabezas-Gómez *et al.* (2006) e Silva (2006). Todas as simulações numéricas foram desenvolvidas considerando a instalação descrita em Luo (1987).

2. Formulação matemática

As simulações apresentadas no presente trabalho foram desenvolvidas com o código MFIX (Syamlal *et al.*, 1993). Este código é amplamente utilizado para simulação de escoamentos multifásicos gás-sólido (Guenter e Syamlal, 2001, Gelderbloom *et al.*, 2003, Gera *et al.*, 2004, Cabezas-Gómez *et al.*, 2006, entre outros). Os modelos matemáticos usados são apresentados na Tabela 1. As equações de balanço da conservação de massa e de quantidade de movimento para o modelo tradicional e as duas versões usadas da TCEG algébrica, ou seja o modelo proposto inicialmente e o modelo modificado (híbrido), são iguais. A diferença fundamental radica no cálculo das relações constitutivas do tensor das tensões da fase sólida. Utiliza-se em todos os casos o modelo hidrodinâmico B desenvolvido no IIT (Gidaspow, 1994).

Na Tabela 1 os subscritos (g) e (s) são usados para as fases gasosa e sólida, respectivamente. $v_g e v_s$ são as velocidades locais temporais (m/s), $\rho_g e \rho_s$ são as densidades (kg/m³), $\alpha_g e \alpha_s$ representam as frações volumétricas, e $\tau_g e \tau_s$ o termo viscoso do tensor das tensões (Pa). A variável, P representa a pressão termodinâmica do gás (Pa), g é a aceleração da gravidade (m/s²), g_0 representa a função radial de distribuição, G é o modulo de elasticidade da fase sólida (N/m²), e β é a função de arrasto na interface (kg/m²-s). C_{Ds} caracteriza o coeficiente de arrasto na interface gássólido para uma partícula num meio infinito, Re_s é o número de Reynolds baseado no diâmetro de partícula médio d_p, ϕ_s é a esfericidade das partículas, $\mu e \lambda$ representam as viscosidades dinâmica e volumétrica, respectivamente (kg/m-s), θ é a temperatura granular (m²/s²), **e** o coeficiente de restituição partícula-partícula, R_g a constante do gás ideal para o Ar (J/kg-K), e t o tempo (s).

3. Geometria e condições de simulação

Na Figura 1 mostra-se o domínio computacional empregado nas simulações desenvolvidas. Considera-se sistema cartesiano de coordenadas. As dimensões geométricas e condições iniciais e de contorno de entrada estão especificadas na Figura. No caso da fase gasosa considera-se a condição de não deslizamento. Para a fase sólida utiliza-se a condição de deslizamento parcial na direção tangencial à parede de acordo com Ding e Gidaspow (1990) (esta condição de deslizamento parcial para a fase sólida foi implementada no MFIX para o desenvolvimento deste trabalho). Na direção normal considerou-se velocidade nula para ambas as fases. Para a pressão e a fração de sólido nas paredes considerou-se deslizamento livre, ou seja, gradiente nulo na direção normal à parede.

Tabela 1. Modelo hidrodinâmico B considerando os três procedimentos abordados no artigo para o cômputo das relações constitutivas da fase sólida.

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

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

2. Equações da quantidade de movimento Fase gasosa:

$$\frac{\partial(\rho_{g}\alpha_{g}\mathbf{v}_{g})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{g}\alpha_{g}\mathbf{v}_{g}\mathbf{v}_{g}) = -\nabla P$$
$$-\beta_{B}(\mathbf{v}_{g} - \mathbf{v}_{s}) + \nabla \cdot (\alpha_{g}\tau_{g}) + \rho_{g}\mathbf{g}$$

Fase sólida:

$$\frac{\partial(\rho_{s}\alpha_{s}\mathbf{v}_{s})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{s}\alpha_{s}\mathbf{v}_{s}\mathbf{v}_{s}) = \beta_{B}(\mathbf{v}_{g} - \mathbf{v}_{s}) + \nabla \cdot (\alpha_{s}\tau_{s}) - G\nabla\alpha_{s} + (\rho_{s} - \rho_{g})\alpha_{s}\mathbf{g}$$

3. Definição da fração volumétrica

$$\alpha_g + \alpha_s = 1$$

4. Equação de estado

$$\rho_{g} = P/(R_{g}T)$$
 e $\rho_{s} = cons tan t$

5. Função de arrasto na interface, β Ergun (1952) for $\alpha_s \ge 0.2$:

$$\beta = 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g^2 (d_p \phi_s)^2} + 1.75 \frac{\rho_g \alpha_s |\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s|}{(\alpha_g d_p \phi_s)}$$

Wen e Yu (1966) for $\alpha_s < 0.2$:

$$\beta = \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{\rho_g \alpha_s \alpha_g |\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s|}{(\alpha_g d_p \phi_s)} \alpha_g^{-2.65}$$

Onde

$$C_{Ds} = \begin{cases} \frac{24}{Re_s} (1 + 0.15 \cdot Re_s^{0.687}) Re_s < 1000\\ 0.44 Re_s \ge 1000 \end{cases}$$

e
$$Re_s = \frac{\alpha_g \rho_g |\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s| d_p \phi_s}{Re_s}$$

$$\mu_g$$

6. Tensor das tensões, fase gasosa (k = g)

$$\tau_{g} = \mu_{g} \left[\nabla \mathbf{v}_{g} + (\nabla \mathbf{v}_{g})^{T} - \frac{2}{3} \left(\nabla \cdot \mathbf{v}_{g} \right) \right]$$

7. Tensor das tensões, fase sólida (k = s) $\tau_{s} = 2\mu_{s} \left(\nabla \mathbf{v}_{s} + (\nabla \mathbf{v}_{s})^{T} \right) + \lambda_{s} \left(\nabla \cdot \mathbf{v}_{s} \right) I$

8. Pressão da fase sólida:

$$P_s = G\nabla \alpha_s$$
 (Modelos tradicional e híbrido)
 $P_s = K_1 \alpha_s^2 \theta$ (TCEG algébrica)

onde:
$$G(\alpha_g) = 10^{-8.76\alpha_g + 5.43} Pa/m^2$$

9. Viscosidades dinâmica e volumétrica da fase sólida:

a. Modelo tradicional.

$$\mu_{s} = 0.165 \alpha_{s}^{1/3} g_{0}, \quad \lambda_{s} = -\frac{2}{3} \mu_{s}$$

b. Modelos da TCEG algébrica e híbrido.

$$\mu_{s} = K_{3}\alpha_{s}\sqrt{\theta} , \qquad \lambda_{s} = K_{2}\alpha_{s}\sqrt{\theta}$$

10. Temperatura granular e relações:

$$\theta = \left(\frac{-(K_{1}\alpha_{s} + \rho_{s})tr(D_{s}) + \sqrt{[(K_{1}\alpha_{s} + \rho_{s})^{2}tr^{2}(D_{s})]}}{\frac{+4K_{4}\alpha_{s}[2K_{3}tr(D_{s}^{2}) + K_{2}tr^{2}(D_{s})]}{2\alpha_{s}K_{4}}}\right)$$

Onde:

$$\begin{split} D_{s} &= \frac{1}{2} \Big(\nabla \mathbf{v}_{s} + (\nabla \mathbf{v}_{s})^{T} \Big), \\ K_{1} &= 2(1+e)\rho_{s}g_{0}, \\ K_{2} &= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} d_{p}\rho_{s}(1+e)\alpha_{s}g_{0} - \frac{2}{3}K_{3}, \\ K_{3} &= \frac{d_{p}\rho_{s}\sqrt{\pi}}{6(3-e)} \Big[1 + \frac{2}{5}(1+e)(3e-1)\alpha_{s}g_{0} \Big] \\ &\quad + \frac{8d_{p}\rho_{s}\alpha_{s}}{10\sqrt{\pi}} g_{0}(1+e), \\ K_{4} &= \frac{12(1-e^{2})\rho_{s}g_{0}}{d_{p}\sqrt{\pi}}, \\ g_{0} &= \frac{1}{\alpha_{g}} + \frac{1.5\alpha_{s}}{\alpha_{g}^{2}} + \frac{0.5\alpha_{s}^{2}}{\alpha_{g}^{3}}. \end{split}$$



Figura 1. Geometria e condições iniciais e de contorno usadas nas simulações assumindo coordenadas cartesianas. (Dados para a instalação do IIT reportados em Luo, 1987).

4. Resultados de simulação

A seguir apresentam-se os resultados de simulação obtidos considerando o procedimento tradicional e a TCEG algébrica. Quando empregado o procedimento tradicional a viscosidade dinâmica e a pressão do sólido são calculadas respectivamente pelas correlações de Huilin e Gidaspow (2003) e Gidaspow e Ettehadieh (1983) mostradas na Tabela 1. No caso da TCEG algébrica, são consideradas duas versões. A primeira denominada no texto de TCEG_def considera o modelo inicialmente proposto onde as relações constitutivas são calculadas pelas relações teóricas da TCEG. A segunda versão baseia-se num modelo "ad-hoc" onde a viscosidade dinâmica é calculada por uma relação teórica da TCEG e a pressão do sólido é calculada usando a correlação empírica usada no modelo tradicional. Esta versão da TCEG algébrica é denominada como TCEG_mod. Embora este segundo modelo seja "ad-hoc", o mesmo tem-se mostrado bastante efetivo na obtenção de resultados mais representativos dos dados experimentais em relação à TCEG algébrica originalmente concebida e disponível no código MFIX. Em todas as simulações analisadas foi empregado o esquema Superbee para a discretização dos termos advectivos.

Nas Figuras 2 - 5 mostram-se os resultados de simulação obtidos no presente trabalho. Apenas estão sendo analisados perfis médios temporais, obtidos num intervalo temporal de 80 segundos (dos 20 aos 100 segundos de simulação), para os quais se tem disponibilidade de dados experimentais. Na Figura 2 observa-se os perfis radiais da

fração volumétrica de sólido média no tempo aos 3,4 metros de altura para os três modelos matemáticos empregados. Observa-se nitidamente que a TCEG_def superestima os valores da fração de sólido mostrando erros bastante significativos em relação aos dados experimentais em toda a extensão do raio do leito, exceto no ponto mais próximo da parede direita. Esse modelo também apresenta dois pontos de máximo da fração volumétrica de sólido media temporal, próximos a cada parede do leito. Este comportamento contradiz os resultados experimentais e aqueles obtidos com o modelo tradicional e a TCEG_def, e pode-se considerar fisicamente incoerente. Estima-se que a causa deste fenômeno radica no cálculo da pressão do sólido sem considerar os efeitos cinéticos e usando valores da temperatura granular computada através de uma metodologia simplificada. Cabezas-Gómez e Milioli (2005) mostraram que o gradiente da pressão do sólido tem uma influência considerável na solução numérica das equações de balanço considerando várias correlações empíricas para o cálculo de P_s e o modelo tradicional. Embora o uso de correlações empíricas para o cálculo da validade das mesmas, observa-se que quando estas são utilizadas corretamente, i.e., na sua faixa de aplicação, os resultados de simulação apresentam um comportamento adequado e fisicamente coerente. Os trabalhos de Tsuo e Gidaspow (1990), Sun e Gidaspow (1999) e Cabezas-Gómez e Milioli (2003), entre outros, mostram a validade dessa afirmação.



Figura 2. Perfis radiais da fração volumétrica da fase sólida média no tempo 3,4 metros acima da entrada considerando os modelos tradicional, TCEG_def e TCEG_mod.

Como podê-se observar na Figura 2 os resultados de simulação obtidos com o procedimento tradicional e com a TCEG_mod também mostram a validade da discussão anterior. De fato, no caso da TCEG_mod, os resultados de simulação são os que apresentam o melhor comportamento em relação aos dados experimentais. Embora neste procedimento a temperatura granular seja calculada pelo mesmo método que no modelo da TCEG_def, a pressão do sólido é calculada através da correlação empírica considerada no modelo tradicional (Tabela 1). Desta forma mostra-se que o cálculo correto da pressão do sólido é muito importante para obtenção de resultados de simulação coerentes. A falha do modelo da TCEG algébrica radica no cálculo simplificado da temperatura granular e na não inclusão dos termos cinéticos na relação da pressão do sólido. Ambos os parâmetros estão inter-relacionados e devem ser considerados para o uso da TCEG. Um modelo mais completo da TCEG, como aquele que calcula a temperatura granular resolvendo uma equação diferencial parcial, não apresenta esse tipo de problema. Resultados correntes de simulação, a serem publicados futuramente, demonstram que essas insuficiências da TCEG algébrica são sanadas totalmente usando esse tipo de modelo da TCEG.

Desconsiderando o modelo da TCEG_def na Figura 2 observa-se que o modelo tradicional e a TCEG_mod apresentam perfis radiais da fração volumétrica de sólido qualitativamente adequados, mostrando uma boa concordância com os dados experimentais. As maiores diferenças quantitativas entre os resultados de simulação e os obtidos por Luo (1987) são detectadas nas regiões mais próximas à parede. Provavelmente estas diferenças se devem à condição de contorno empregada nas simulações, embora simulações desenvolvidas considerando a condição de deslizamento livre da fase sólida na parede apresentaram resultados piores quando comparados com os dados experimentais. Fazendo esse tipo de comparação com os presentes resultados de simulação, observa-se que o modelo da TCEG_mod apresentou os resultados mais favoráveis em toda a seção transversal do leito.

Na Tabela 2 apresentam-se os erros relativos dos valores simulados da fração volumétrica de sólido média no tempo em relação aos dados experimentais considerando os três modelos matemáticos empregados no trabalho. Pode-se

notar claramente que o modelo da TCEG_def é o que apresenta os maiores erros relativos em toda a seção transversal do leito excetuando apenas o ponto mais próximo da parede, onde o erro é menor do fornecido pelo modelo tradicional. Mesmo assim, isto está relacionado à um comportamento fisicamente incoerente, ver Figura 2 e discussão acima. Por outro lado o modelo da TCEG_mod é o que fornece menores erros, excetuando a região central onde o modelo tradicional apresenta resultados mais favoráveis, quando comparado com os dados experimentais. Deve-se destacar que os erros relativos foram calculados considerando os resultados simulados do lado direito da coluna ascendente, onde ocorreram as medições experimentais (Luo, 1987). Em todos os casos observa-se que os modelos superestimam consideravelmente os resultados experimentais, mostrando a necessidade de utilizar modelos mais sofisticados e obter dados experimentais mais exatos, sem considerar simetria na coluna ascendente.

Fração volumétrica de sólido (experimental)		Erro relativo [-]		
Raio	Valores medidos	Modelo_tradicional	TCEG_def	TCEG_mod
0,73000	0,00328	0,68287	0,9245120	0,7057583
0,98400	0,00369	0,65453	0,9137032	0,6721632
1,23800	0,00394	0,65009	0,9074779	0,6554468
1,49200	0,00431	0,64693	0,8998736	0,6333288
1,74600	0,00483	0,64726	0,8911373	0,6042119
2,00000	0,00555	0,65155	0,8816800	0,5660333
2,25400	0,00742	0,60890	0,8544007	0,4507487
2,50800	0,00771	0,66632	0,8638528	0,4675635
2,76200	0,00968	0,66830	0,8458773	0,3963733
3,01600	0,01319	0,66284	0,8262141	0,3912598
3,27000	0,02117	0,62731	0,7086602	0,2843742
3,52400	0,04232	0,43163	0,3324668	0,1572592

Tabela 2. Erros relativos dos valores experimentais da fração volumétrica de sólido em relação aos valores simulados.

Nas Figuras 3 e 4 apresentam-se os perfis radiais médios no tempo da velocidade axial para as fases sólida e gasosa respectivamente. Neste caso pode-se observar uma menor diferença quantitativa em relação aos dados experimentais dos perfis obtidos pelo modelo tradicional e pela TCEG_mod. No caso da TCEG_def os perfis de velocidade do sólido e do gás apresentam elevadas distorções caracterizando em termos médios um escoamento ascendente na parede direita e um descendente na parede esquerda do leito. Este comportamento é atípico em LFC e mostra que o uso da TCEG algébrica como proposto inicialmente não é recomendado para a simulação da dinâmica do escoamento gás-sólido num LFC. Embora devam ser desenvolvidas simulações 3D para demonstrar completamente essa deficiência desse tipo de modelo, os resultados aqui apresentados indicam fortemente que resultados de simulação de LFC devem ser analisados cuidadosamente.



Figura 3. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo da fase sólida 3,4 metros acima da entrada considerando os modelos tradicional, TCEG_def e TCEG_mod.



Figura 4. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo da fase gasosa 3,4 metros acima da entrada considerando os modelos tradicional, TCEG_def e TCEG_mod.

No caso dos modelos tradicional e da TCEG_mod na Figura 3 observa-se um perfil médio no tempo com um escoamento ascendente na região central do leito e um escoamento descendente nas regiões próximas das paredes, caracterizando totalmente o denominado escoamento anular tipicamente observado em LFC (Tsuo e Gidaspow, 1990; Sun e Gidaspow, 1999; Cabezas-Gómez e Milioli, 1993,1994,1995a,b; e Gidaspow, 1994; entre outros). Em ambos os casos os resultados de simulação mostram-se erros pequenos quando comparados com os dados experimentais, sendo a TCEG mod o modelo que apresenta os melhores resultados em toda a seção transversal do leito. Analisando os perfis radiais da velocidade axial do gás mostrado na Figura 4 e fornecido por estes dois modelos, observa-se um comportamento similar ao acima descrito, incluindo os valores negativos da velocidade axial da fase gasosa nas regiões próximas às paredes da coluna. Embora esse comportamento não seja o esperado, devido à condição de contorno de não deslizamento assumida para a fase gasosa nas paredes, estima-se que o mesmo é consequência da influência da alta concentração de sólido obtida nas paredes do leito. Neste caso devido ao arrasto na interface a fase gasosa é forçada a escoar perto das paredes no sentido da gravidade pela ação da fase sólida. Esta é uma conseqüência do modelo superestimar a fração volumétrica de sólidos e também do uso de uma malha computacional sem o refino necessário próximo às paredes. Futuras simulações deverão ser focadas no uso de malhas mais refinadas para elucidar melhor esta problemática. Note-se que ambos os modelos apresentam o mesmo resultado. Considerando à complexidade do escoamento estudado e, os trabalhos da bibliografia, podê-se afirmar que os presentes resultados são qualitativamente corretos e mostram o potencial de aplicação que a TCEG_mod possui.

Na Figura 5 mostra-se os perfis radiais do fluxo mássico de sólido médio no tempo na altura de 5,3 metros acima da entrada do leito. Neste caso todos os modelos apresentam um comportamento similar mostrando valores negativos do fluxo de massa nas paredes do leito, sendo estes os de maior módulo (parede esquerda na figura). Embora este comportamento não representado pelos dados experimentais de Luo (1987), estima-se que na saída do leito o fluxo mássico do sólido deve ser maior nas paredes onde a fração volumétrica de sólido média no tempo apresenta os maiores valores. Considerando ainda que a saída do leito neste caso se encontra no lado direito, estima-se que haja um acúmulo de sólido no lado contrario onde o sólido colide com a parte superior do leito e não encontra uma saída. O gás com menos inércia consegue se desviar e formar linhas de corrente em direção da saída na direita, já as partículas sólidas que apresentam uma inércia muito maior, não conseguem mudar a sua trajetória totalmente, acumulando-se mais na parte esquerda do leito como mostrado na Figura 5. Neste caso é importante notar que a medição experimental do fluxo de massa de sólidos localmente é uma tarefa complicada, sendo possível ter erros experimentais consideráveis nas medições desta grandeza, que envolve a medida direta da fração volumétrica e a indireta da quantidade de partículas por unidade de tempo. Entretanto, simulações mais detalhadas do escoamento na região de saída merecem ser desenvolvidas para um estudo mais aprofundado do escoamento e da formulação das condições de contorno nessa região.



Figura 5. Perfis médios no tempo para a velocidade mássica para a fase sólida, 5,3 metros acima da entrada, considerando o modelo tradicional, a TCEG_def e a TCEG_mod.

5. Conclusões

Considerando os resultados apresentados na seção anterior conclui-se que o modelo da TCEG_def produz resultados inconsistentes e não representativos da hidrodinâmica do escoamento gás-sólido na coluna ascendente de um LFC. Isto não significa que o uso da TCEG não seja adequado para a simulação deste tipo de escoamento e sim a necessidade de usar uma variante da TCEG que permita descrever satisfatoriamente a fenomenologia do escoamento. Uma solução é o uso da TCEG que resolve a equação completa do balanço de energia cinética das flutuações da velocidade das partículas, i.e., da temperatura granular. O uso da TCEG algébrica como proposta inicialmente por Syamlal *et al.* (1993) aconselha-se para simulação de LFB onde a fração volumétrica de sólido é alta e a velocidade do sólido é relativamente baixa, ou seja, onde a energia granular é dissipada localmente.

Outra solução é o uso da versão algébrica da TCEG denominada neste artigo de TCEG_mod. Esta alternativa mantêm a característica de baixo custo computacional obtido com o modelo da TCEG_def e permite considerar o efeito cinético na contabilização do gradiente de pressão do sólido usando uma correlação empírica oriunda do modelo tradicional (ver Tabela 1). De maneira geral os resultados de simulação para a instalação de LFC estudada por Luo (1987) obtidos com o modelo "ad-hoc", TCEG_mod, mostram-se claramente superiores aos obtidos com a TCEG_def, não apresentando perfis distorcidos e irreais. Além disso, esse modelo apresenta resultados mais representativos (quantitativamente) em termos médios aos obtidos com o modelo tradicional.

A grande vantagem deste modelo reside no fato de utilizar a formulação algébrica para a TCEG na predição do escoamento gás-sólido em uma coluna ascendente de um LFC. Isto favorece o desenvolvimento de uma variedade de testes com as mais diversas correlações para as leis constitutivas da TCEG disponíveis na literatura, com a expectativa de um baixo custo computacional. Simulações em três dimensões teriam um custo computacional mais baixo e permitiram realizar estudos mais profundos do tipo de escoamento abordado. Evidentemente novas investigações neste modelo "ad-hoc" são necessárias, principalmente testes em outras instalações para verificar a sua eficiência na predição do escoamento gás-sólido em um LFC, onde o modelo da TCEG algébrica é reconhecidamente falho. Mais detalhes, relacionados ao uso deste modelo híbrido, podem ser consultados em Cabezas-Gómez *et al.* (2006) e Silva (2006). Esses trabalhos apresentam resultados complementares que comprovam os resultados e discussões apresentadas na presente investigação.

6. Agradecimentos

O primeiro e segundo autores agradecem o suporte recebido da FAPESP (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo) através de uma bolsa de estudo de pós-doutorado (processo 02/12038-8), e da CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) através de uma bolsa de estudo de doutoramento PICDT, respectivamente. As simulações numéricas foram desenvolvidas com o código MFIX fornecido pelo NETL

(National Energy Technology Laboratory - www.mfix.org). Os autores agradecem a disponibilidade do código e o suporte fornecido pelos pesquisadores que desenvolvem o MFIX.

7. Referências

- Boemer, A., Qi, H., Renz, U., Vasquez, S. and Boysan, F.,1995, "Eulerian computation of fluidized bed hydrodynamics
 A comparison of physical models", Proceedings of the 13th International Conference on Fluidized Bed Combustion, Vol. 2, pp. 775-787.
- Cabezas-Gómez, L., 2003, "Modelagem matemática e simulação numérica de escoamentos bifásicos gás-sólido em colunas de leito fluidizado circulante", Tesis de doutorado, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, Brasil, 208 p.
- Cabezas-Gómez, L. e Milioli, F.E., 2003, "A Parametric Study of the Gas-Solid Flow in the Riser of a Circulating Fluidized Bed Through Continuous Eulerian Modeling", Powder Technology, Vol.132, No. 2-3, pp. 216-225.
- Cabezas-Gómez, L. e Milioli, F. E., 2004, "A numerical simulation analysis of the effect of the interface drag function on cluster evolution in a CFB riser gas-solid flow", Brazilian J. of Chemical Engng., Vol.21, No. 4, pp. 569-583.
- Cabezas-Gómez, L. e Milioli, F. E., 2005a, "Collisional solid's pressure impact on numerical results from a traditional two-fluid model", Powder Technology, Vol.149, No. 2-3, pp. 78-83.
- Cabezas-Gómez, L. e Milioli, F. E., 2005b, "Numerical simulation of fluid flow in CFB risers a turbulence analysis approach", Journal of the Braz. S oc. of Mech. Sci. & Eng., Vol.XXVII, No. 2, pp. 141-149.
- Cabezas-Gómez, L. Silva, R.C. e Milioli, F. E., 2006, "Some modeling and numerical aspects in the two-fluid simulation of the gas-solids flow in a CFB riser", Accepted for publication in Brazilian J. of Chemical Engineering.
- Ding, J. e Gidaspow, D., 1990, "A Bubbling Model Using Kinetic Theory of Granular Flow", AIChE Journal, Vol.36, No. 4, pp. 523-538.
- Ergun, S., 1952, "Fluid Flow through Packed Columns", Chemical Engineering Progress, Vol.48, No. 2, pp. 89-94.
- Gelderbloom, S. J., Gidaspow, D. e Lyczkowski, R. W., 2003, "CFD Simulations of bubbling/collapsing fluidized beds for three Geldart Groups", AIChE Journal, Vol.49, No. 4, pp. 844.
- Gera, D., Syamlal, M. e O'Brien, T.J., 2004, "Hydrodynamics of particle segregation in fluidized beds", International J. of Multiphase Flow, Vol.30, pp. 419-428.
- Gidaspow, D. e Ettehadieh, B. 1983, "Fluidization in two-dimensional beds with a jet: 2. Hydrodynamic modeling", Industrial Engng. Chemistry Research, Vol.22, No. 2, pp. 193-201.
- Gidaspow, D., 1994, "Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions", Academic Press, Boston, 467 p.
- Guenther, C. e Syamlal, M., 2001, "The effect of numerical diffusion on simulation of isolated bubbles in a gas-solid fluidized bed", Powder Technology, Vol.116, pp. 142-154.
- Huilin, L. e Gidaspow, D., 2003, "Hydrodynamic Simulations of Gas-Solid Flow in a Riser", Industrial Engng. Chemistry Research, Vol.42, pp. 2390-2398.
- Lun, C.K.K., Savage, S.B., Jeffrey, D.J. e Chepurniy, N., 1984, "Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in coquette flow and slightly inelastic particles in a general flow field", Journal of Fluid Mechanics, Vol.140, pp. 223-256.
- Luo, K.M., Dilute, Dense-Phase and Maximum Solids-Gas Transport. Ph.D. Thesis., Illinois Institute of Technology, Chicago (1987).
- Silva, R.C., 2006, "Modelagem euleriana do escoamento gás-sólido em leito fluidizado circulante: análise da influência de parâmetros físicos e numéricos nos resultados de simulação", Tesis de doutorado, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, Brasil, 186 p.
- Syamlal, M., Rogers, W., e O'Brien T.J., MFIX Documentation Theory Guide. U.S. Department of Energy, Morgantown Energy Technology Center, Technical Note DOE/MET-94/1004 (1993).
- Sun, B. e Gidaspow, D., 1999, "Computation of Circulating fluidized bed riser flow for the Fluidization VIII benchmark test", Industrial Engng. Chemistry Research, Vol.38, pp. 787-792.
- Tsuo, Y.P. e Gidaspow, D., 1990, "Computation of Flow Patterns in Circulating Fluidized Beds", AIChE Journal, Vol.36, No. 6, pp.885-896.
- van Wachem, B.G.M., Schouten, J.C., Krishna, R. e van den Bleek, C.M., 1998, "Eulerian Simulations of Bubbling Behavior in Gas-Solid Fluidized Beds", Computers Chemical Engng., Vol.22, Suppl. pp. S299-S306.
- Wen, C.Y. e Yu, Y.H., 1966, "Mechanics of Fluidization", Chemical Engineering Progress Symposium Series, Vol.62, No. 62, pp. 100-111.

SIMULATION OF THE GAS-SOLID FLOW IN A CFB RISER APPLYING DIFERENT FORMULATIONS FOR THE SOLID PHASE VISCOSITY AND PRESSURE

Luben Cabezas Gómez Departamento de Engenharia Mecânica, Escola de Engenharia de São Carlos, USP. Av. Trabalhador São-Carlense, N°400-Centro, São Carlos, SP. CEP 13566-590. lubencg@sc.usp.br

Renato César da Silva

Departamento de Ciências Exatas, Campus Três Lagoas, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Av. Ranulpho Marques Leal, 3484, CEP: 79620-080 - Três Lagoas – MS. rcsilva@ceul.ufms.br

Helio Aparecido Navarro

Departamento de Estatística, Matemática Aplicada e Computação, Instituto de Geociências e Ciências Exatas, Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", Av. 24-A, 1515, Cx. P 178, CEP 13506-700, Rio Claro, SP, Brazil.

helio@rc.unesp.br

Fernando Eduardo Milioli

Núcleo de Engenharia Térmica e Fluidos, Escola de Engenharia de São Carlos, USP. Av. Trabalhador São-Carlense, N°400-Centro, São Carlos, SP. CEP 13566-590. lubencg@sc.usp.br

Abstract

In this paper is applied the two-fluid model to simulate the gas-solid flow in a riser of a CFB. The pressure and dynamic viscosity of the solid phase are computed using two different approaches. In the first one are applied empirical correlations. In the second approach are applied relations obtained from the kinetic theory of granular flow (KTGF). It is used the MFIX code developed in the National Energy Technology Laboratory (NETL). The main aim of this work is to perform a comparative analysis of the simulation results obtained from the different procedures considered to compute the constitutive relations of the solid phase stress tensor. Are presented mean time simulation results comprehending the radial profiles of the axial velocities of both phases, the solid volumetric fraction and the solid mass flow. The results are compared with the available experimental data showing a different behavior as a function of the mathematical model used. In all the simulations is used an uniform two-dimensional computational mesh and a second order scheme for the discretization of the advective terms. The results show that the procedure for the computation of the solid phase pressure and viscosity influences in a significant way the behavior of the gas-solid flow in a riser. In the work is proposed a new mathematical model which seems to be very good for future simulations of this kind of flows.

Keywords: Gas-solid flows, Circulating fluidized beds, Kinetic theory of granular flows, Numerical simulation