

INFLUÊNCIA DA ORDEM DO ESQUEMA DE DISCRETIZAÇÃO NOS RESULTADOS DE SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO GÁS-SÓLIDO NA COLUNA ASCENDENTE DE UM LEITO FLUIDIZADO CIRCULANTE

Renato César da Silva

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

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

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. Efeitos da ordem do esquema de discretização sobre resultados de simulação numérica para escoamentos monofásicos são amplamente discutidos na literatura. Entretanto, devido à complexidade do sistema de equações envolvido e dos métodos numéricos de solução, tais estudos tornam-se de difícil interpretação para escoamentos multifásicos. Neste trabalho avaliam-se os efeitos da ordem do esquema de discretização sobre os resultados de simulação para um escoamento gás-sólido no tubo ascendente de um leito fluidizado circulante (LFC). Desenvolve-se simulação numérica utilizando o modelo tradicional de dois fluidos calculando a viscosidade e pressão da fase sólida através de correlações empíricas. Nas simulações emprega-se o código MFIX desenvolvido no NETL (National Energy Technology Laboratory). Os resultados apresentados compreendem gráficos comparativos de perfis médios temporais locais e de perfis instantâneos das velocidades axial e radial, fração volumétrica e fluxo de massa de ambas as fases. Consideram-se os esquemas de discretização upwind de primeira ordem e esquemas TVD de segunda ordem. Comparações com dados experimentais também são apresentadas. No trabalho foram utilizadas três malhas computacionais em coordenadas cartesianas 2D. Os resultados mostram que a ordem do esquema de discretização exerce uma influência considerável no comportamento temporal e espacial do escoamento. Comparações considerando simulação tridimensional deverão esclarecer ainda mais as diferenças aqui apontadas.

Palavras chave: Escoamento gás-sólido, Leito fluidizado circulante, Esquemas de discretização, Difusão numérica.

1. Introdução

Muitos estudos de Dinâmica de Fluidos Computacional (DFC) têm sido desenvolvidos dando especial atenção à discretização das derivadas dos termos advectivos não lineares presentes nas equações de conservação. Diferentes tipos de aproximação têm sido propostas, entre as quais se destacam aproximações “upwind” de primeira ordem tais como FOUP - “First Order Upwind” (Courant *et al.*, 1952), HYBRID (Spalding, 1972) e PLDS - “Power-Law Differencing Scheme” (Patankar, 1980). Embora esses esquemas “upwind” de primeira ordem tenham sido muito empregados devido ao seu efeito de estabilização da solução numérica, muitos outros esquemas de ordem superior tem sido propostos visando a obtenção de resultados com menos influência da viscosidade numérica característica dos esquemas de primeira ordem. Entre esses esquemas podem-se destacar os seguintes: SUPERBEE (Sweby, 1984), SMART (Gaskell e Lau, 1988) e MINMOD (Harten, 1983), entre outros. Recentemente Guenther e Syamlal (2001) desenvolveram um estudo da influência do esquema de discretização sob o comportamento do escoamento gás-sólido num leito fluidizado borbulhante (LFB). De acordo com os resultados o esquema superbee foi o que produz os melhores resultados em relação à dados experimentais da literatura. No caso de um leito fluidizado circulante (LFC), no melhor conhecimento dos autores, ainda um estudo desta natureza não foi desenvolvido.

No presente trabalho pretende-se avaliar a influência qualitativa no escoamento num LFC, quando se varia a ordem dos esquemas de discretização dos termos convectivos presentes nas equações de conservação. A avaliação dos resultados de simulação numérica será efetuada comparando-se parâmetros médios experimentais (fração volumétrica de sólido, velocidade do sólido e do gás e velocidade mássica do sólido) em diferentes seções do leito. Uma análise do

comportamento instantâneo do leito, dando ênfase à velocidade mássica também se faz necessária para uma melhor compreensão do efeito da difusão numérica quando se emprega o esquema de primeira ordem na resolução do sistema de equações envolvido. Uma discussão mais aprofundada pode ser encontrada em Cabezas-Gómez *et al.* (2006) e Silva (2006).

Para desenvolvimento da análise proposta, são utilizados resultados de simulação numérica do escoamento gás-sólido no tubo ascendente de um leito fluidizado circulante (LFC). Considera-se o procedimento tradicional que faz uso de correlações empíricas para o cômputo da pressão e da viscosidade dinâmica da fase sólida. Esse procedimento foi aplicado com sucesso por Tsuo e Gidaspow (1990), Sun e Gidaspow (1999), Huilin e Gidaspow (2003), e Cabezas-Gómez e Milioli (2003, 2004, 2005a,b), entre outros. Nele 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. 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 (Guenther e Syamlal, 2001, Gelderbloom *et al.*, 2003, Gera *et al.*, 2004, Cabezas-Gómez *et al.*, 2006, entre outros). O modelo matemático usado apresenta-se na Tabela 1. Utiliza-se o denominado modelo hidrodinâmico B, inicialmente desenvolvido no IIT (Gidaspow, 1994).

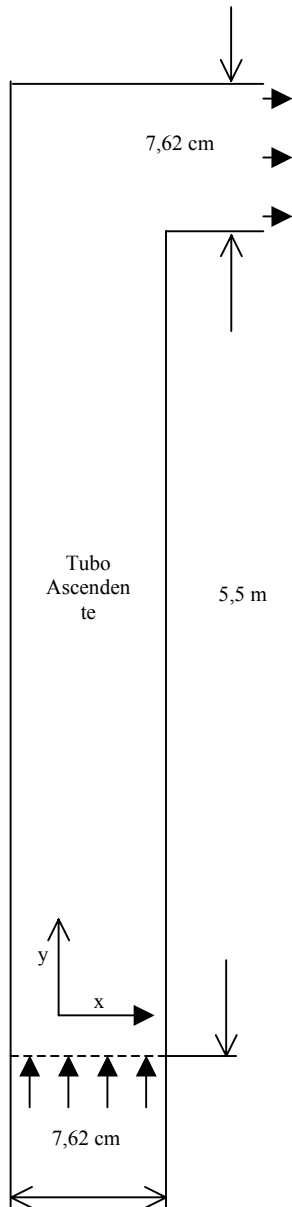
Na Tabela 1 os subscritos (g) e (s) são usados para as fases gasosa e sólida, respectivamente. v_g e v_s são as velocidades locais temporais (m/s), ρ_g e ρ_s são as densidades (kg/m^3), α_g e α_s representam as frações volumétricas, e τ_g e τ_s o termo viscoso do tensor das tensões (Pa). A variável, P representa a pressão termodinâmica do gás (Pa), g é a aceleração da gravidade (m/s^2), g_0 representa a função radial de distribuição, G é o módulo de elasticidade da fase sólida (N/m^2), e β é a função de arrasto na interface ($\text{kg/m}^2\text{-s}$). C_{Ds} caracteriza o coeficiente de arrasto na interface gás-sólido 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, μ e λ representam as viscosidades dinâmica e volumétrica, respectivamente (kg/m-s), e o coeficiente de restituição partícula-partícula, R_g a constante dos gases ideias para o gás (J/kg-K), e t o tempo (s).

Tabela 1. Modelo hidrodinâmico B utilizado nas simulações do presente trabalho.

1. Equação da continuidade, fase k (k = g, s) $\frac{\partial(\rho_k \alpha_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k v_k) = 0$	6. Definição da fração volumétrica $\alpha_g + \alpha_s = 1$
2. Equações da quantidade de movimento Fase gasosa: $\frac{\partial(\rho_g \alpha_g v_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \alpha_g v_g v_g) = -\nabla P - \beta_B (v_g - v_s) + \nabla \cdot (\alpha_g \tau_g) + \rho_g g$ Fase sólida: $\frac{\partial(\rho_s \alpha_s v_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s \alpha_s v_s v_s) = \beta_B (v_g - v_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \tau_s) - G \nabla \alpha_s + (\rho_s - \rho_g) \alpha_s g$	7. Equação de estado $\rho_g = P / (R_g T) \quad \text{e} \quad \rho_s = \text{constante}$
3. Tensor das tensões, fase k (k = g, s) $\tau_k = \mu_k \left[\nabla v_k + (\nabla v_k)^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot v_k) I \right]$	8. Função de arrasto na interface, β Ergun (1952) for $\alpha_s \geq 0.2$: $\beta = 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g^2 (d_p \phi_s)^2} + 1.75 \frac{\rho_g \alpha_s v_g - v_s }{\alpha_g d_p \phi_s}$ Wen e Yu (1966) for $\alpha_s < 0.2$: $\beta = \frac{3}{4} C_{Ds} \frac{\rho_g \alpha_s \alpha_g v_g - v_s }{(\alpha_g d_p \phi_s)} \alpha_g^{-2.65}$
4. Módulo de elasticidade da fase sólida $G(\alpha_g) = 10^{-8.76\alpha_g + 5.43} \text{ Pa/m}^2$	Onde $C_{Ds} = \begin{cases} \frac{24}{Re_s} (1 + 0.15 \cdot Re_s^{0.687}) & Re_s < 1000 \\ 0.44 & Re_s \geq 1000 \end{cases}$
5. Viscosidade dinâmica da fase sólida $\mu_s = 0,5 \alpha_s \quad \text{e} \quad \mu_s = 0,165 \alpha_s^{1/3} g_0$	e $Re_s = \frac{\alpha_g \rho_g v_g - v_s d_p \phi_s}{\mu_g}$

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.



Dados da simulação:

Diâmetro das partículas: $d_p = 520 \mu\text{m}$

Densidade do sólido: $\rho_s = 2620 \text{kg/m}^3$

Fluxo mássico da fase sólida: $G_s = 24,9 \text{kg/(m}^2\text{s)}$

Viscosidade do gás: $\mu_g = 1,8 \times 10^{-5} \text{Pa s}$

Condições iniciais:

Tubo ascendente sem sólido

$P = 101,325 \text{ kPa}$

$T = 300 \text{ K}$

Condições de contorno na entrada:

$v_s = 0,386 \text{ m/s}$

$v_g = 4,979 \text{ m/s}$

$\alpha_s = 0,0246$

$P = 120,6639 \text{ kPa}$

$T = 300 \text{ K}$

Condições de contorno na saída:

Condição de continuidade: $\frac{\partial f}{\partial n} = 0$

onde f pode ser α_g , u_g ou u_s .

Pressão do gás fixa: $P = 117,2049 \text{ kPa}$

Condições de contorno nas paredes:

Fase gasosa: não deslizamento

Fase sólida: deslizamento parcial $\vec{v}_{s,w} = -\frac{d_p}{\alpha_s^{1/3}} \frac{\partial \vec{v}_s}{\partial n}$

Fração de sólido e pressão do gás: deslizamento livre

Condições computacionais:

Malha 1: (10x146) 1460 nós: $\delta x = 0,762 \text{ cm}$, $\delta y = 3,81 \text{ cm}$

Malha 2: (15x146) 2190 nós: $\delta x = 0,508 \text{ cm}$, $\delta y = 3,81 \text{ cm}$

Malha 3: (20x146) 2920 nós: $\delta x = 0,381 \text{ cm}$, $\delta y = 3,81 \text{ cm}$

Tempo real de cálculo: $t = 100 \text{ s}$

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 primeira análise mostrada nesta seção relaciona-se com o estudo da influência do tamanho de malha nos resultados de simulação. No presente trabalho, são utilizados três tamanhos de malha diferentes como descrito na Figura 1. Comparam-se os resultados obtidos com o modelo tradicional considerando a correlação linear para a viscosidade do sólido, veja Tabela 1. Durante o estudo da influência do tamanho de malha, aborda-se também a influência da ordem do esquema numérico usado para a discretização do termo advectivo presente nas equações de transporte para ambas as fases.

Nas Figuras 2, 3 e 4 mostram-se os perfis radiais médios no tempo da velocidade axial das fases sólida e gasosa e da fração volumétrica de sólido, respectivamente aos 3,4 metros acima da entrada do leito. Na Figura 5 mostram-se os perfis radiais médios no tempo do fluxo de sólido mássico aos 5,3 metros acima da entrada do leito. Em todas as figuras mostram-se os resultados para os três tamanhos de malha empregados no trabalho (ver Figura 1). Os resultados são comparados com os dados experimentais de Luo (1987), considerando o esquema “upwind” (Foup) e o esquema de segunda ordem Superbee. Em todas as figuras acima mencionadas observa-se que as soluções obtidas para as três malhas apresentam comportamento qualitativo semelhante, independentemente da ordem do esquema numérico utilizado para a discretização dos termos advectivos.

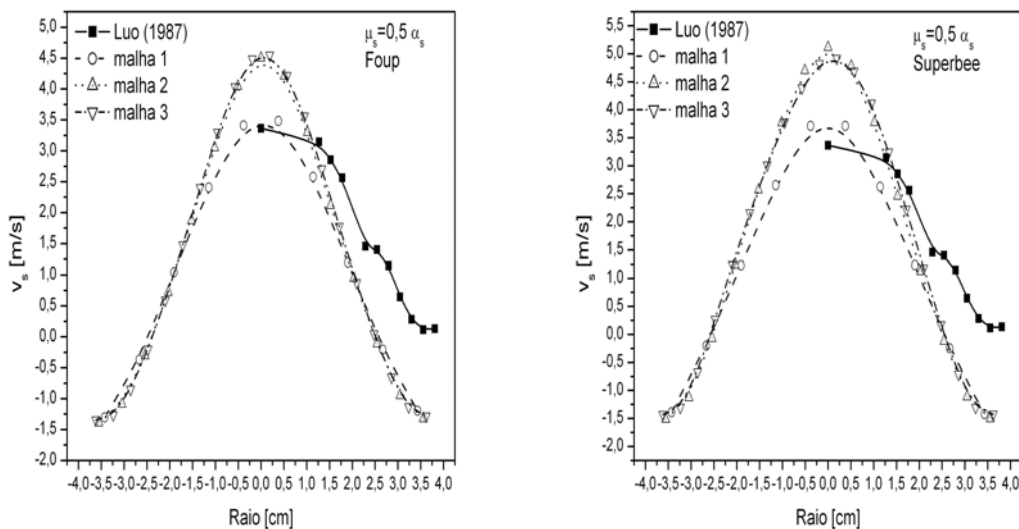


Figura 2. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo da fase sólida 3,4 metros acima da entrada. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].

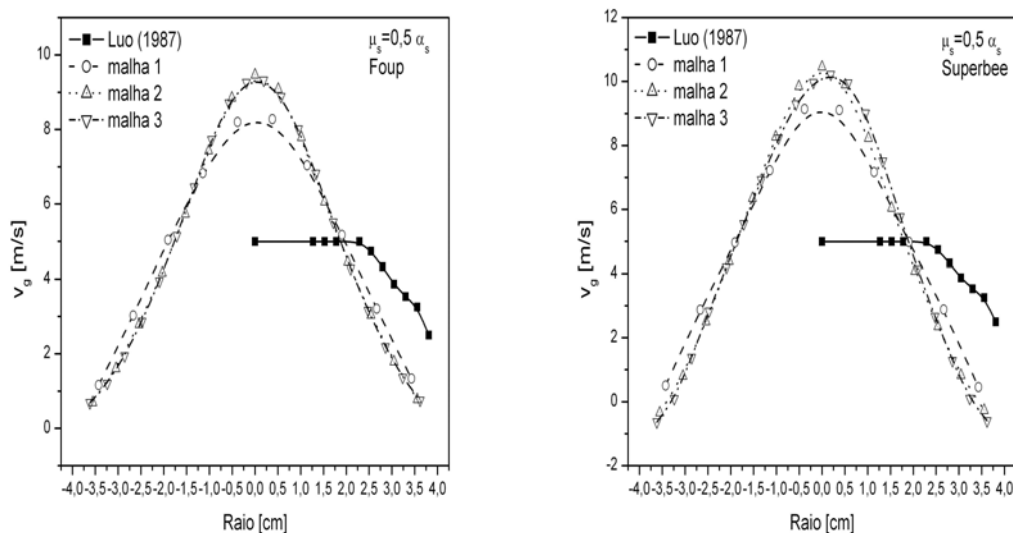


Figura 3. Perfis radiais da velocidade axial média no tempo da fase gasosa 3,4 metros acima da entrada. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].

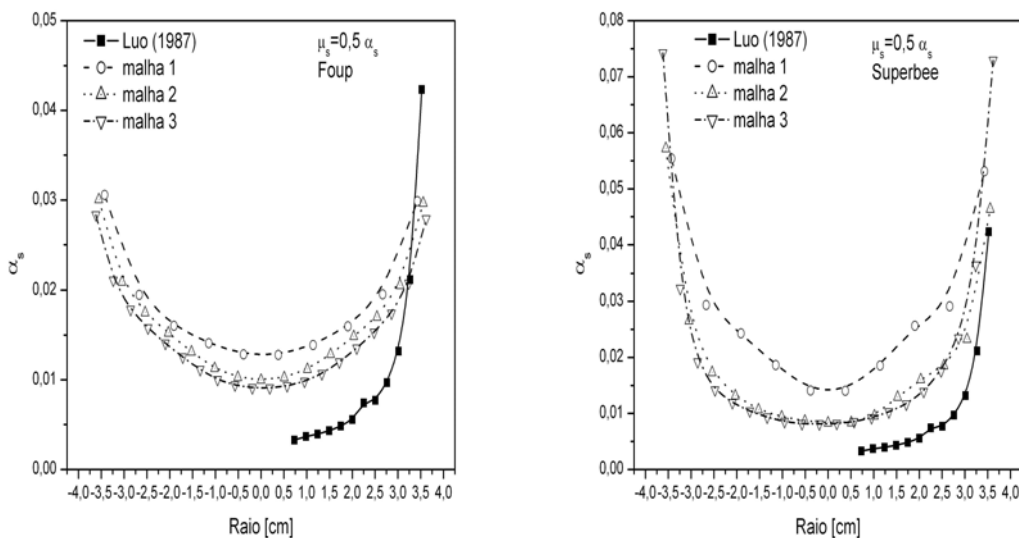


Figura 4. Perfis radiais da fração volumétrica de sólidos média no tempo, 3,4 metros acima da entrada. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].

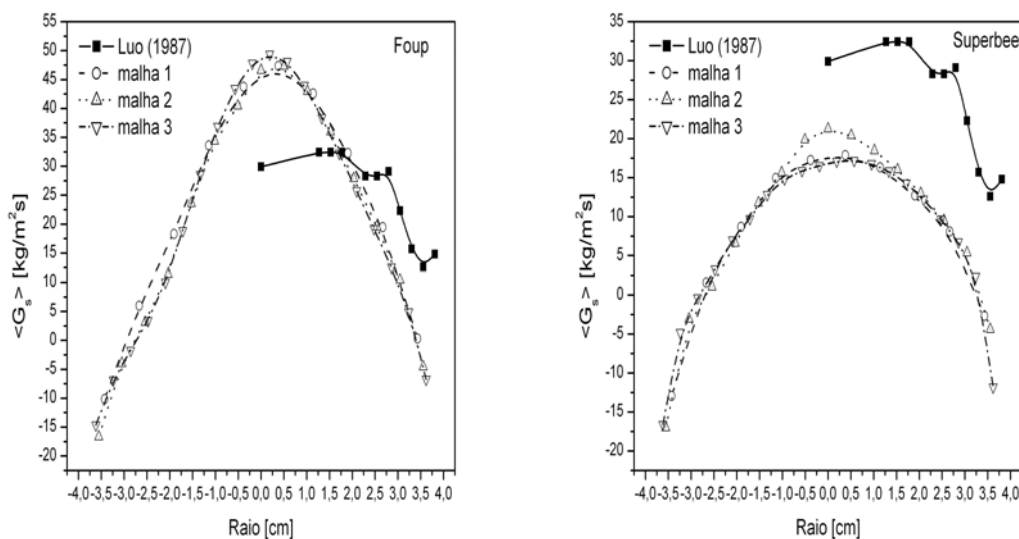


Figura 5. Perfis radiais da velocidade mássica da fase sólida média no tempo 5,3 metros acima da entrada para os três tamanhos de malha mostrados na Figura 4.1. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].

Os resultados de simulação obtidos com o emprego das malhas 2 e 3 apresentam pequenos desvios entre si e grandes desvios em relação à malha 1. Esta característica pode ser devida ao modelo matemático empregado (modelo tradicional com a correlação linear para a viscosidade do sólido). Caso seja considerado o comportamento instantâneo do leito, o tamanho de malha deverá continuar influenciando os resultados de simulação.

Comparando os resultados (perfis radiais de fração de sólido, e velocidade axial das fases sólida e gasosa) obtidos por simulação com os valores experimentais, nota-se de forma geral que as previsões apresentam um comportamento mais adequado perto das paredes e menos favorável no centro da coluna. Observa-se que os resultados obtidos na malha 1 apresentam em relação aos dados experimentais desvios menores para a velocidade do gás em toda a seção transversal da coluna e para a velocidade do sólido no centro da coluna. Para esta última variável, não se observa diferença no comportamento perto das paredes para as três malhas empregadas. No caso da fração volumétrica de sólido, as malhas 2 e 3 mostram um melhor comportamento em relação aos valores experimentais. Entretanto, em todos os casos o modelo superestima o valor médio temporal desta variável.

Observando-se a Figura 5, nota-se que os perfis do fluxo de sólido mássico local apresentam características qualitativas e quantitativas semelhantes para as malhas estudadas quando são considerados os esquemas de discretização de forma separada. Também se torna evidente uma diferença substancial nos resultados de simulação quando se compara o esquema numérico de discretização Foup e Superbee. Os resultados de simulação sugerem que para um esquema de segunda ordem necessita-se de mais tempo de simulação para estabelecer-se o fluxo mássico oscilante em torno do valor médio experimental de $24,9 \text{ kg/m}^2\text{s}$ obtido por Luo (1987).

Este fato é reforçado quando se analisa a Figura 6, onde se mostra o sinal temporal, médio na seção, do fluxo mássico 5,3 metros acima da entrada do leito. Nesta figura está claro que o padrão para o fluxo mássico (oscilante em torno do valor médio experimental de $24,9 \text{ kg/m}^2\text{s}$) estabelece-se após 70 segundos de simulação quando se emprega o esquema Superbee. No caso do esquema Foup não leva mais do que 25 segundos. Este fato é determinante para as diferenças observadas na Figura 5, pois as médias foram calculadas no intervalo de tempo entre 20 e 100 segundos para os esquemas considerados.

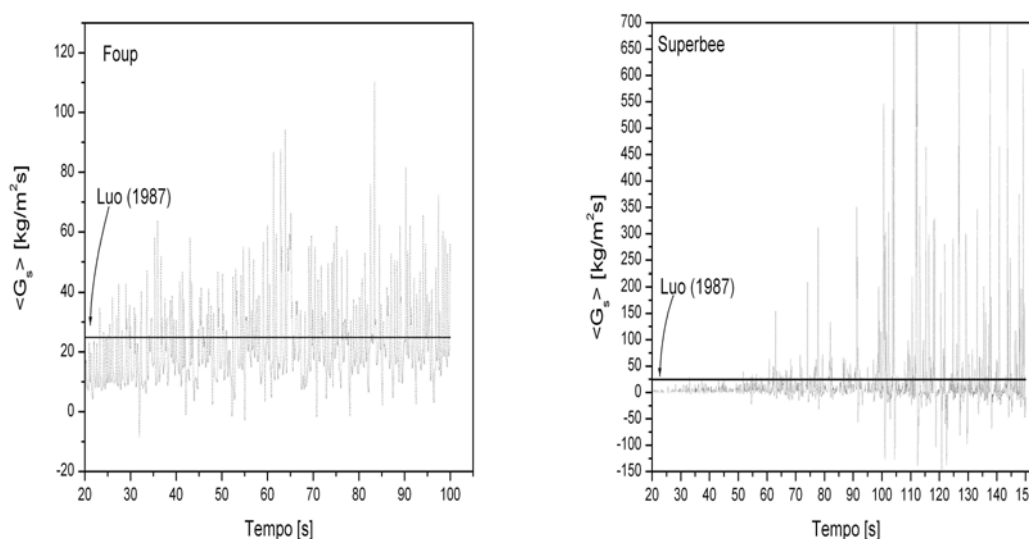


Figura 6. Variação temporal média na seção da velocidade mássica do sólido a 5,3 metros acima da entrada do leito para a viscosidade do sólido linear, considerando-se a malha 3 e esquemas Foup e Superbee.

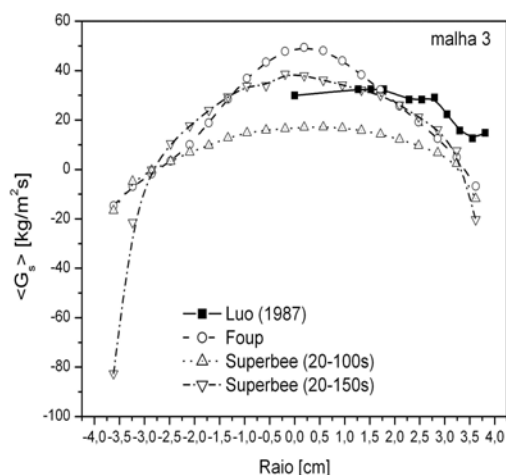


Figura 7. Perfis radiais do fluxo mássico de sólidos médio no tempo 5,3 metros acima da entrada. Considera-se os esquemas Foup e Superbee com médias calculadas entre 20 e 100 s e Superbee entre 20 e 150 s. [■ dados experimentais (Luo, 1987)].

Ao se calcular o valor médio entre 20 e 150 segundos para a velocidade mássica do sólido considerando-se o esquema Superbee, pode-se observar que os resultados de simulação tornam-se melhores quando comparados com os dados experimentais, como se mostra na Figura 7. A partir dos resultados apresentados nas Figuras 5, 6 e 7 pode-se ver que o esquema de primeira ordem, Foup, superestimou os valores médios para a velocidade mássica do sólido. Os resultados obtidos com o esquema Superbee são mais adequados em relação aos dados experimentais, além de capturar uma influência mais intensa da geometria do leito por meio do fluxo descendente na parede esquerda (valores negativos da velocidade mássica do sólido).

As diferenças apontadas nas Figuras 5, 6 e 7 sugerem que os resultados estariam sob considerável influência da difusão numérica típica dos esquemas de primeira ordem. Infelizmente uma afirmação taxativa não se torna possível com as simulações presentes, pois se necessitaria de simulações em malhas mais finas onde seja minimizada a influência da malha. Malhas mais finas reduzem a difusão numérica com qualquer esquema de interpolação. Contudo, variações mais significativas nos resultados devem ocorrer para esquemas interpolativos de primeira ordem.

A malha mais fina (malha 3) utilizada nas simulações presentes tem duas vezes mais células (2920 células) do que a malha mais grossa (malha 1 com 1460 células). Embora isto represente um certo grau de refinamento, a malha mais fina utilizada ainda é muito deficiente. As malhas utilizadas neste trabalho foram estimadas considerando limitações computacionais, e possivelmente estão distantes da precisão requerida para a independência de malha dos resultados preditos. Experimentos adicionais nesta linha são claramente necessários. Porém deve-se destacar que Agrawal et al. (2001) afirmaram que devido ao caráter instável de escoamentos gás-sólido é pouco provável achar soluções independentes do tamanho de malha, mesmo refinando bem o domínio computacional.

Nas Figuras 8 - 11 apresentam-se comparações adicionais com o intuito de observar a influência exercida pelos esquemas de discretização no comportamento médio do leito, quando consideradas separadamente duas correlações para o cálculo da viscosidade dinâmica do sólido. Para esta análise toma-se por base os resultados de simulação obtidos com a malha 3.

Segundo Peirano e Leckner (1998), num sistema típico de produção de energia elétrica o perfil axial da concentração média de sólidos divide-se em três zonas. Na base da coluna (zona inferior) tem-se uma região de entrada de gases e sólidos com fração volumétrica média de sólidos constante entre 0,2 e 0,4. Logo acima se forma uma região densa – “splash zone” caracterizada por uma variação exponencial da concentração de sólidos com a altura ($\alpha_s < 0,2$). Acima da região densa forma-se a região de transporte (ou região de arrasto) que domina o escoamento em colunas circulantes, caracterizada por fração volumétrica média de sólidos entre 0,02 e 0,05. Essa região também apresenta uma variação exponencial da concentração média de sólidos, porém mais suave com relação à zona anterior.

Na Figura 8 (a) e (b) observa-se que da base do leito até à sua metade, ocorre uma acentuada variação da fração volumétrica de sólido para todos os μ_s e ambos os esquemas de interpolação. Em todos os casos, os resultados são coerentes com o comportamento experimental. O esquema de alta ordem (Superbee) prediz maiores α_s em relação ao de primeira ordem. Acredita-se que essa diferença deva-se à difusão numérica.

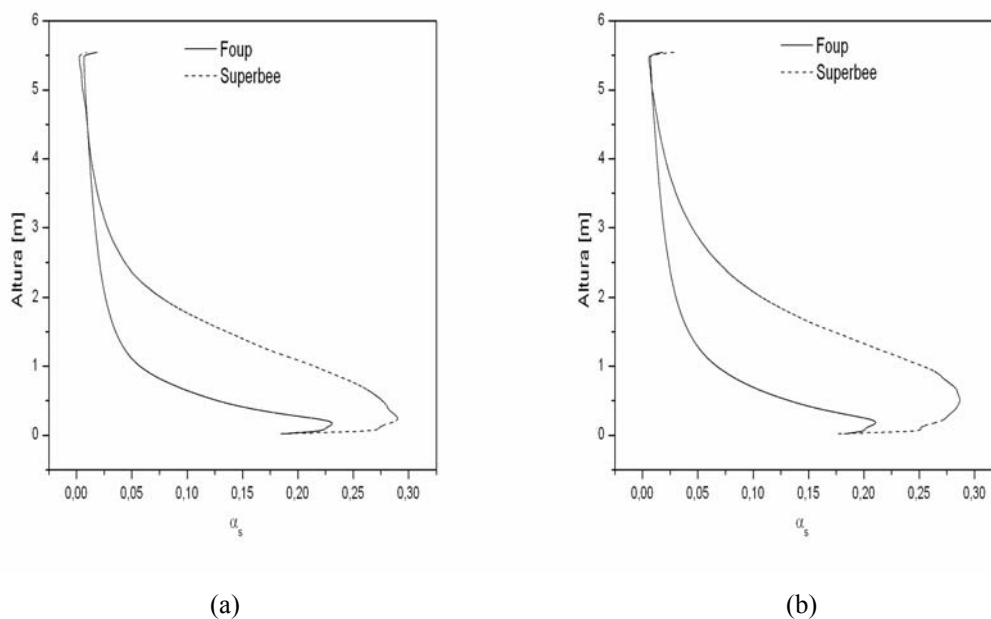


Figura 8. Perfis axiais da fração volumétrica da fase sólida média no tempo para: (a) correlação linear para a viscosidade do sólido e (b) correlação baseada na TCEG para a viscosidade do sólido. Considerando os esquemas Foup e Superbee para os termos advectivos.

A Figura 9 ilustra o comportamento da componente radial da velocidade do sólido, 3,4 metros acima da entrada do leito. Nesta figura observa-se que apesar dos resultados apresentarem valores absolutos baixos e da mesma ordem de grandeza, há uma diferença notável dos resultados obtidos para os diferentes esquemas. A principal consequência que pode ser deduzida dos resultados apresentados é a expectativa que o fluxo de sólido nas paredes deve ser maior para os esquemas de ordem elevada. Este comportamento observa-se parcialmente na Figura 10 onde se mostra uma comparação do fluxo de sólido médio no tempo na seção 5,3 metros acima da entrada do leito. Nesta figura mostra-se que o esquema de interpolação dos termos advectivos afeta menos os resultados quando se calcula μ_s baseado na teoria cinética dos escoamentos granulares (TCEG). Isso sugere que, nesse caso, a difusão numérica torna-se menos significativa diante da difusão física.

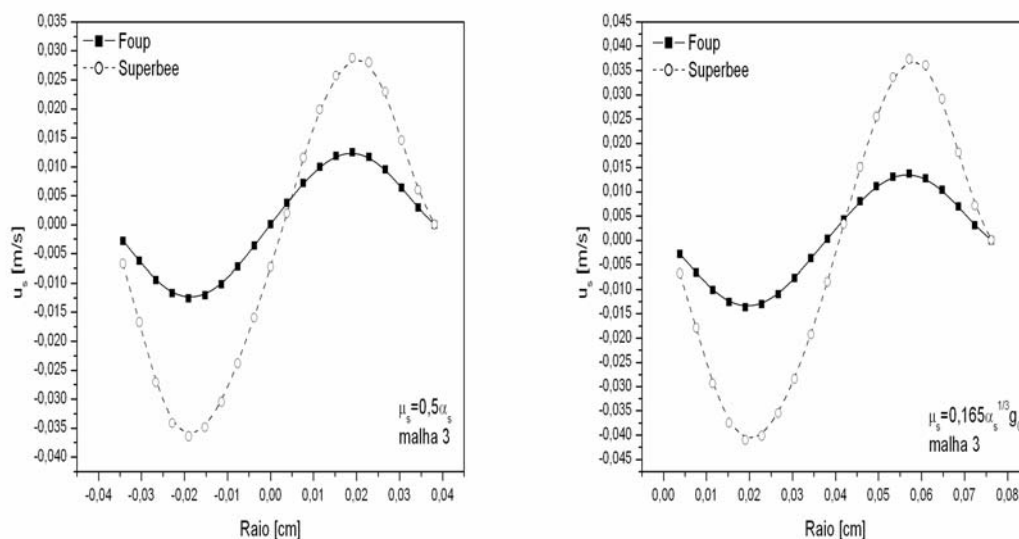


Figura 9. Perfis médios no tempo para a componente radial da velocidade para a fase sólida, 3,4 metros acima da entrada, considerando as duas correlações para a viscosidade do sólido e esquemas Foup e Superbee para os termos advectivos.

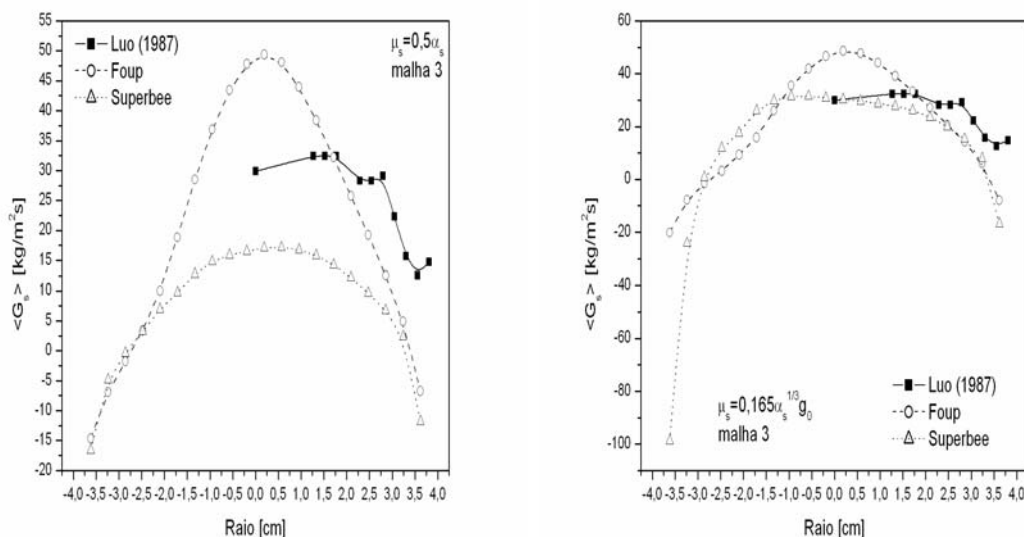


Figura 10. Perfis médios no tempo do fluxo mássico de sólidos, 5,3 metros acima da entrada. Considera-se a correlação linear e a baseada na TCEG para a viscosidade do sólido, assim como os esquemas Foup e Superbee.

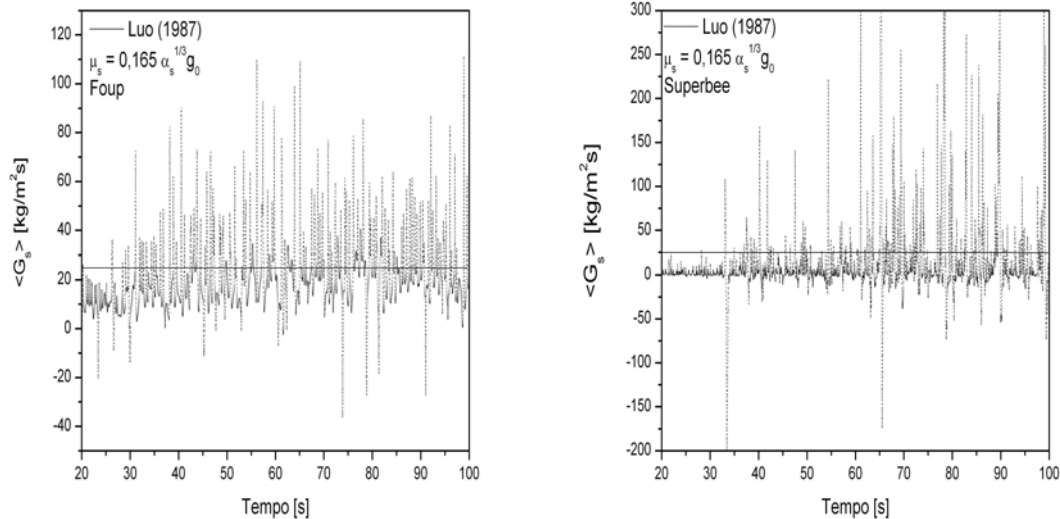


Figura 11. Variação temporal média na seção da velocidade mássica do sólido a 5,3 metros acima da entrada do leito para a correlação da viscosidade do sólido baseada na TCEG, considerando-se a malha 3 e esquemas Foup e Superbee.

O resultado mostrado na Figura 11 contribui para esta evidência. Pode-se adicionar que a viscosidade numérica intrínseca aos esquemas de discretização atenua este fenômeno.

Na Tabela 2 apresenta-se o custo computacional considerando o tempo de processamento para as duas correlações empíricas da viscosidade do sólido. A razão tempo de processamento é tomada a partir do quociente entre o tempo de processamento para a viscosidade linear e a parcialmente baseada na TCEG, isto é:

$$R_{\text{temp}} = \frac{t_{\mu_s=0,5\alpha_s}}{t_{\mu_s=0,165\alpha_s^{1/3}g_0}} \quad (1)$$

Na Tabela 2 nota-se que o modelo que utiliza a viscosidade linear apresenta um menor custo computacional, considerando-se o tempo de processamento para os esquemas Foup e Superbee. Este comportamento era esperado devido ao número de operações necessárias para o computo de μ_s com o modelo baseado na TCEG em relação ao modelo linear.

Tabela 2: Análise de custo para o tempo de processamento em relação às correlações empíricas para a viscosidade do sólido

Esquemas	Foup	Superbee
Razão tempo de processamento	0,855783563	0,9522673

5. Conclusões

Com base nos resultados apresentados na seção de resultados pode-se concluir que a correlação para a viscosidade do sólido dada por: $\mu_s = 0,165 \alpha_s^{1/3} g_0$ com $g_0 = [1 - (\alpha_s/\alpha_{s,max})^{1/3}]^{-1}$ apresentou resultados mais consistentes em relação à correlação dada pela relação: $\mu_s = 0,5 \alpha_s$. Estas diferenças foram evidenciadas quando se empregou o esquema de discretização de segunda ordem de precisão para ambas as correlações e comparando com os resultados experimentais. Adiciona-se a isto que a difusão numérica presente em maior grau no esquema Foup “suavizou” a solução de tal forma que ambas as correlações proporcionaram resultados qualitativamente e quantitativamente iguais. As diferenças foram notadas quando se utilizou o esquema Superbee, culminando na necessidade de um maior tempo de simulação para o estabelecimento do fluxo mássico oscilante em torno do valor médio experimental obtido por Luo (1987) para o modelo de viscosidade linear com o esquema Superbee. Este procedimento não se torna necessário quando se emprega a correlação baseada na TCEG.

6. Agradecimentos

O primeiro e segundo autores agradecem o suporte recebido da CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) através de uma bolsa de estudo de doutoramento PICDT, a FAPESP (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo) através de uma bolsa de estudo de pós-doutorado (processo 02/12038-8),

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.
- Cabezas-Gómez, L., 2003, "Modelagem matemática e simulação numérica de escoamentos bifásicos gás-sólido no tubo ascendente de leitos fluidizados circulantes", Tese 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.
- 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.
- 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.
- Cabezas-Gómez, L. e Milioli, F. E., 2005b, "Numerical simulation of fluid flow in CFB risers - a turbulence analysis approach", Journal of the Braz. Soc. of Mech. Sci. & Eng., Vol.XXVII, No. 2, pp. 141.
- 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 the Brazilian J. of Chemical Engineering.
- Courant, R., Isaacson, E., and Reeves, M., 1952, "On the solution of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences". *Comm. Pure and Applied Mathematics*, 5, pp. 243-255. 1952.
- Ding, J. e Gidaspow, D., 1990, "A Bubbling Model Using Kinetic Theory of Granular Flow", AIChE Journal, Vol.36, No. 4, pp. 523.
- Ergun, S., 1952, "Fluid Flow through Packed Columns", Chemical Engineering Progress, Vol.48, No. 2, pp. 89.
- Gaskell, P. e Lau, A., 1988, "Curvature-compensated Convective Transport: Smart, A New Boundedness – Preserving Transport Algorithm", International J. Numerical Methods in Fluids, Vol.8, pp. 617-641.
- Gelderblom, 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.
- Gidaspow, D., 1994, "Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions", Academic Press, Boston, 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.
- Huilin, L. e Gidaspow, D., 2003, "Hydrodynamic Simulations of Gas-Solid Flow in a Riser", Industrial Engng. Chemistry Research, Vol.42, pp. 2390.
- Lun, C.K.K., Savage, S.B., Jeffrey, D.J. e Chepuriniy, 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.
- Luo, K.M., Dilute-Phase and Maximum Solids-Gas Transport. Ph.D. diss., Illinois Institute of Technology, Chicago (1987).
- Patankar, S. V., 1980, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow". *Hemisphere, New York*.
- Peirano, E.; Leckner, B., 1998, "Fundamentals of turbulent gas-solid flows applied to circulating fluidized bed combustion". *Progress in Energy and Combustion Science*, v.24, n.4, p.259-296.
- Raithby, D.D., 1976, "Skew upstream differencing schemes for problems involving fluid flow". *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 9, 153-164.
- 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", Tese de doutorado, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, Brasil, 186 p.
- Spalding, D.B., 1972, "A novel finite-difference formulation for differential expressions involving both first and second derivatives". *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, 4, 551-559.
- 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.
- Tsuo, Y.P. e Gidaspow, D., 1990, "Computation of Flow Patterns in Circulating Fluidized Beds", AIChE Journal, Vol.36, No. 6, pp.885.

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.
Wen, C.Y. e Yu, Y.H., 1966, "Mechanics of Fluidization", Chemical Engineering Progress Symposium Series, Vol.62, No. 62, pp. 100.

INFLUENCE OF THE DISCRETIZATION SCHEME ORDER ON NUMERICAL RESULTS OF THE GAS-SOLID FLOW IN A RISER OF A CFB

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

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

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

Effects of the order of discretization schemes on numerical simulation results for single phase flows are widely argued in the literature. However, due to the complexity of system equations and of the numerical solution methods, such studies become of difficult interpretation for multiphase flows. In this work is studied how the order of the discretization schemes of the advective terms influences the numerical simulation results of the gas-solid two-phase flow in a riser of a circulating fluidized bed (CFB) system. The numerical simulations are developed using the traditional two-fluid model where the solid phase pressure and dynamic viscosity are computed using empirical correlations. For this purpose is used the MFIX code developed in the NETL (National Energy Technology Laboratory). The numerical results are compared with the available experimental data, considering the mean time radial profiles of the axial velocity of both phases, solid volumetric fraction and mass solid flow. Other simulations results are also shown comprehending axial profiles of the solid volumetric fraction and temporal variation of the mass solid flow at the riser outlet. All the numerical results ere obtained considering discretization schemes of the first (upwind) and second order (TVL type schemes) and using three computational meshes in a bi-dimensional domain employing a Cartesian system of coordinates. The obtained results show that the order of the discretization schemes exerts a considerable influence over the temporal and mean time spatial flow behavior. Future comparisons considering tri-dimensional numerical comparisons should help to understand better the appointed differences in the present work.

Keywords: Gas-solid flow, Circulating fluidized bed, Discretization schemes, Numerical diffusion.