

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**ESTUDO DA FLUIDODINÂMICA EM LEITO FIXO
UTILIZANDO-SE MÉTODOS NUMÉRICOS DE SOLUÇÃO:
ESCOAMENTO MONOFÁSICO DE AR**

RODRIGO BÉTTEGA

São Carlos - SP

2006

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**ESTUDO DA FLUIDODINÂMICA EM LEITO FIXO UTILIZANDO-
SE MÉTODOS NUMÉRICOS DE SOLUÇÃO: ESCOAMENTO
MONOFÁSICO DE AR**

RODRIGO BÉTTEGA

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química, área de concentração em Pesquisa e Desenvolvimento de Processos Químicos

Orientador: Prof. Dr. Ronaldo Guimarães Corrêa

São Carlos - SP

2006

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária da UFSCar**

B565ef

Béttega, Rodrigo.

Estudo da fluidodinâmica em leito fixo utilizando-se métodos numéricos de solução: escoamento monofásico de ar / Rodrigo Béttega. -- São Carlos : UFSCar, 2006.
112 p.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2006.

1. Sistemas particulados. 2. Leito fixo. 3. Escoamento monofásico. 4. Simulação. 5. Métodos numéricos. I. Título.

CDD: 660.2842 (20^a)

*Aos meus pais, Margareth e Gilberto,
e à minha irmã Vanessa.*

AGRADECIMENTOS

Ao professor Ronaldo por sua orientação e dedicação, fundamentais para a conclusão deste trabalho.

Ao professor Freire, pela grande sua grande contribuição e por apresentar-se sempre disposto a ajudar.

Aos professores do Centro de Secagem: Prof. Maria do Carmo, Prof. Ana Maria e Prof. Demerval pelo incentivo e pelas sugestões ao longo deste trabalho.

Ao Prof. Armando Fortuna, pelo auxílio na implementação da rotina computacional.

À Vádila, pelo apoio, amor e amizade nestes anos.

Aos colegas do Centro de Secagem, pelo companheirismo nestes anos.

Aos amigos Adriana, Cristiane, Clóvis, Álvaro e Roger, pelo apoio, sugestões, contribuições e, sobretudo pela amizade.

À minha família, pelo grande apoio.

SUMÁRIO

AGRADECIMENTOS	i
SUMÁRIO	ii
LISTA DE TABELAS	iv
LISTA DE FIGURAS	v
NOMENCLATURA	x
SIMBOLOS GREGOS	xii
ABREVIATURAS.....	xiii
RESUMO	xiv
ABSTRACT	xvi
CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 2 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	4
2.1. O ESCOAMENTO EM LEITO FIXO	4
2.1.1. Porosidade.....	4
2.1.2. Medida da velocidade em leito fixo.....	7
2.2. MODELAGEM E SIMULAÇÃO APLICADA AO ESCOAMENTO EM LEITO FIXO	19
2.2.1. A equação de Darcy e equação de Ergun	20
2.2.2. Modelos obtidos a partir do tratamento analítico do problema	21
2.2.3. Métodos numéricos aplicados ao escoamento em leitos fixos	29
CAPÍTULO 3 – A DINÂMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL E O MÉTODO SOLA	46
3.1. DINÂMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (DFC).....	46
3.2. MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS.....	49
3.3. O MÉTODO MAC E O MÉTODO SOLA	51
CAPÍTULO 4 – METODOLOGIA	58
4.1. INTERIOR DO LEITO FIXO	60
4.2. REGIÃO DE SAÍDA DO LEITO FIXO	63

4.3. IMPLEMENTAÇÃO DA ROTINA COMPUTACIONAL	69
CAPÍTULO 5 – RESULTADOS E DISCUSSÃO	72
5.1. BASE EXPERIMENTAL.....	72
5.2. SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO DO AR NO INTERIOR DO LEITO	75
5.2.1. Propriedades do fluido	75
5.2.2 Equações de porosidade.....	76
5.2.3. O interior do leito.....	79
5.3. SIMULAÇÃO DA REGIÃO DE SAÍDA DO LEITO FIXO.....	84
5.3.1. Aspectos gerais	84
5.3.2. Obtenção do perfil de velocidades fora do leito fixo.....	87
CAPÍTULO 6 – CONCLUSÃO E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	107
6.1. CONCLUSÃO	107
6.2. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	108
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	109

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1. Comparação entre diversos modelos para o perfil de porosidade selecionados por KLERK (2003).....	44
Tabela 3.1. Comparação entre as três formas de tratamento na solução de um problema (FORTUNA, 2000).....	47
Tabela 5.1. Condições operacionais utilizadas por MORALES <i>et al.</i> (1951).....	73
Tabela 5.2. Condições operacionais usadas em SCHWARTZ e SMITH (1953).....	73
Tabela 5.3. Viscosidade e densidade para as diferentes temperaturas consideradas.....	76
Tabela 5.4. Erros verificados nas simulações apresentadas.....	92

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1. Corte transversal no leito fixo	5
Figura 2.2. Comportamento da porosidade na direção radial	5
Figura 2.3. Perfil de porosidade obtido por ZOTIN (1985).....	6
Figura 2.4. Representação do leito fixo e indicação do local onde normalmente é realizada a medida da velocidade do fluido.....	8
Figura 2.5. Aparato experimental utilizado por MORALES <i>et al.</i> (1951).	9
Figura 2.6. Resultados experimentais obtidos por MORALES <i>et al.</i> (1951).	10
Figura 2.7. Esquema dos anemômetros posicionados na saída do leito utilizado por SCHWARTZ e SMITH (1953).....	11
Figura 2.8. Resultados obtidos por SCHWARTZ e SMITH (1953).	11
Figura 2.9. Velocidade adimensional em função da posição radial para $D/D_p=2,9$ e distância do sensor a 1,4cm da saída do leito fixo (SINGULANI, 2001).	12
Figura 2.10. Velocidade adimensional em função da posição radial para $D/D_p=2,9$ e altura do sensor a 10,1cm da saída do leito fixo (SINGULANI, 2001).	13
Figura 2.11. Velocidade adimensional em função da posição radial para $D/D_p=18,7$ e altura do sensor a 1cm da saída do leito fixo (SINGULANI, 2001).	13
Figura 2.12. Esquema do equipamento utilizado em SINGULANI (2001).	14
Figura 2.13. Extremidade do anemômetro de fio quente utilizado por SINGULANI (2001).....	14
Figura 2.14. Comparação do modelo de ZIÓŁKWOSKA e ZIÓŁKWOSKI (1993) com resultados experimentais para o leito de $D/D_p=2,9$ (SINGULANI, 2001).	15
Figura 2.15. Comparação do modelo de ZIÓŁKWOSKA e ZIÓŁKWOSKI (1993) com resultados experimentais para o leito de $D/D_p=18,7$ (SINGULANI, 2001).....	15
Figura 2.16. Resultados de MOISE e TUDOSE (1998) para um leito fixo seccionado.	17
Figura 2.17. Distribuição radial da velocidade relativa obtidas com o leito fixo seccionado (MOISE e TUDOSE, 1998).	18
Figura 2.18. Esquema do leito fixo tratado como duas regiões distintas.....	22
Figura 2.19. Comparação entre dados calculados por modelo e experimentais (ZIÓŁKOWSKA e ZIÓŁKWOSKI, 1993)	24

Figura 2.20. Resultados obtidos para medidas a 300mm da saída do leito e apresentados por SUBAGYO <i>et al.</i> (1998).	29
Figura 2.21. Comparação dos resultados obtidos pelo modelo proposto por SUBAGYO <i>et al.</i> (1998).	29
Figura 2.22. Resultados da comparação do modelo de BEY e EINGENBERGER (1993) com seus dados experimentais.	32
Figura 2.23. Velocidade em função da posição radial segundo o modelo de PAPAGEORGIOU E FROMENT (1995).	35
Figura 2.24. Perfil simulado de velocidade radial comparado com os dados de KRISCHKE (2001) para $D/D_p = 4$ e $Re_p = 50$ (FREUND <i>et al.</i> , 2003).	36
Figura 2.25. Perfil simulado de velocidade radial comparado com os dados de KRISCHKE (2001) para $D/D_p = 6,15$ e $Re_p = 50$ (FREUND <i>et al.</i> , 2003).	37
Figura 2.26. Distribuição de porosidade para um leito preenchido com esferas de razão $D/D_p = 10,0$, segundo o método de Boltzmann (ZEISER <i>et al.</i> , 2001).	38
Figura 2.27. Distribuição radial de velocidade para dois diferentes leitos. (ZEISER <i>et al.</i> , 2001).	38
Figura 2.28. Perfis de porosidade obtidos a partir do algoritmo desenvolvido por SCHINITZLEIN (2001).	39
Figura 2.29. Perfil de porosidade e vetores de velocidade para a região próxima ao eixo do leito (SCHINITZLEIN, 2001).	41
Figura 2.30. Resultados da comparação de modelos para a distribuição de porosidade em um leito fixo (MUELLER, 1997).	42
Figura 2.31. Perfis de porosidade obtidos em diversos trabalhos selecionados por KLERK (2003).	43
Figura 3.1. Quadro apresentando os métodos utilizados para a solução de um problema (MALISKA, 1995).	48
Figura 3.2. Balanço de massa no volume finito representativo de um problema (MALISKA, 1995).	50
Figura 3.3. Esquema de um elemento de volume típico, bi-dimensional, em coordenadas retangulares.	53
Figura 4.1. Esquema do leito fixo, com destaque para a região onde são realizadas as medidas experimentais.	59

Figura 4.2. Esquema das duas regiões do escoamento, com a indicação da região onde se aplica DFC.....	60
Figura 4.3. Malha de discretização aplicada para a simulação no interior do leito.....	62
Figura 5.1. Resultados experimentais de SCHWARTZ e SMITH (1953) em função do adimensional D/D_p ($D=0,1022$ m, $u_m=0,308$ m/s, $L=0,58$ m).....	74
Figura 5.2. Resultados experimentais de MORALES, <i>et al</i> (1951) em função do comprimento do leito ($D=0,0508$ m, $u_m=0,5334$ m/s, $D/D_p=15,97$).....	75
Figura 5.3. Perfil de porosidade radial obtido a partir do modelo de MULLER (1992), com $D/D_p=13,35$	77
Figura 5.4. Perfil de porosidade radial obtido a partir do modelo de MULLER (1992), com $D/D_p=8,34$	77
Figura 5.5. Perfil de porosidade radial gerado com o modelo de HAIDEEGER <i>et al.</i> (1989) e $D/D_p=13,35$	78
Figura 5.6. Perfil de porosidade radial gerado com o modelo de HAIDEEGER <i>et al.</i> (1989) e $D/D_p=8,34$	78
Figura 5.7. Comparação entre os perfis de velocidade simulados para o interior do leito utilizando a viscosidade efetiva de BEY e EINGENBERGER (1997) e a viscosidade do ar ($D=0,1022$ m, $D/D_p = 25,76$).....	80
Figura 5.8. Comparação entre os perfis de velocidade simulados para o interior do leito utilizando a viscosidade efetiva de BEY e EINGENBERGER (1997) e a viscosidade do ar ($D=0,1022$ m, $D/D_p=16,10$).....	80
Figura 5.9. Comparação entre os perfis de velocidade simulados para o interior do leito utilizando a viscosidade efetiva de BEY e EINGENBERGER (1997) e a viscosidade do ar ($D=0,078$ m, $D/D_p = 19,65$).....	81
Figura 5.10. Comparação entre os perfis de velocidade simulados para o interior do leito utilizando a viscosidade efetiva de BEY e EINGENBERGER (1997) e a viscosidade do ar ($D=0,078$ m, $D/D_p = 12,28$).....	81
Figura 5.11. Ilustração de como as oscilações na velocidade de escoamento aumentam com a diminuição do diâmetro da partícula para leitos de mesmo diâmetro.....	83
Figura 5.12. Ilustração do comportamento da velocidade em função da posição radial para diferentes posições axiais na região de saída do leito fixo ($Re=100$, $D=0,01022$ m, $D_p=0,00397$ m).....	85

Figura 5.13. Variação na velocidade média observada na região de saída do leito fixo (Re=100, D=0,01022 m, Dp=0,00397 m).....	86
Figura 5.14. Resultados simulados a 0,0508 m da saída do leito fixo comparados com resultados experimentais de SCHWARTZ e SMITH (1953) e o modelo de SUBAGYO <i>et al</i> (1998) (D=0,10226 m; D/Dp=25,76; Re=1409,82).	88
Figura 5.15. Resultados simulados a 0,0508 m da saída do leito comparados com resultados experimentais de SCHWARTZ e SMITH (1953) e o modelo de SUBAGYO <i>et al.</i> (1998) (D=0,10226 m; D/Dp=16,10; Re=1409,82).	89
Figura 5.16. Resultados simulados a 0,0508 m da saída do leito comparados com resultados experimentais de SCHWARTZ e SMITH (1953) e o modelo de SUBAGYO <i>et al</i> (1998) (D=0,078 m; D/Dp=19,65; Re=1724,76).	89
Figura 5.17. Resultados simulados a 0,0508 m da saída do leito comparados com resultados experimentais de SCHWARTZ e SMITH (1953) e o modelo de SUBAGYO <i>et al.</i> (1998) (D=0,078 m; D/Dp=12,28; Re=1724,76).	90
Figura 5.18. Resultados simulados a 0,0095 m da saída do leito comparados com resultados experimentais de MORALES <i>et al</i> (1951) e o modelo de SUBAGYO <i>et al.</i> (1998) (D=0,0513 m; D/Dp=16,13; Re=1253,33).....	90
Figura 5.19. Resultados simulados a 0,0095 m da saída do leito comparados com resultados experimentais de MORALES <i>et al</i> (1951) e o modelo de SUBAGYO <i>et al.</i> (1998) (D=0,0513 m, D/Dp=16,13, Re=1060,13).....	91
Figura 5.20. Comparação de resultados simulados obtidos utilizando a velocidade superficial e intersticial como condição de contorno em z=0 cm (D/Dp=13,35)...	93
Figura 5.21. Comparação de resultados simulados obtidos utilizando a velocidade superficial e intersticial como condição de contorno em z=0 cm (D/Dp=8,35).....	93
Figura 5.22. Esquema de como o efeito de saída, provocado pelo leito fixo, afeta a velocidade no tubo, para diferentes relações de D/Dp.....	94
Figura 5.23. Desenvolvimento do perfil de velocidades (L _s =0,0508 m; D=0,10226 m, D/Dp=25,76; Re=1409,82) relativo à figura 5.14.....	95
Figura 5.24. Desenvolvimento do perfil de velocidades (L _s =0,0508 m; D=0,10226 m; D/Dp=16,10; Re=1409,82) relativo à figura 5.15.....	96
Figura 5.25. Desenvolvimento do perfil de velocidades (L _s =0,0508 m; D=0,078 m; D/Dp=19,65; Re=1724,76) relativo à figura 5.16	96

Figura 5.26. Desenvolvimento do perfil de velocidades ($L_s=0,0508$ m; $D=0,078$ m; $D/D_p=12,28$; $Re=1724,76$) relativo à figura 5.17.....	97
Figura 5.27. Desenvolvimento do perfil de velocidades ($L_s=0,0095$ m; $D=0,0513$ m; $D/D_p=16,13$; $Re=1253,33$) relativo à figura 5.18.....	97
Figura 5.28. Desenvolvimento do perfil de velocidades ($L_s=0,0095$ m; $D=0,0513$ m, $D/D_p=16,13$, $Re=1060,13$) relativo à figura 5.19.....	98
Figura 5.29. Comportamento radial do escoamento logo após a saída do leito.	99
Figura 5.30. Comportamento do escoamento na região central após a saída do leito, indicando a redução das oscilações.	99
Figura 5.31 - Representação do perfil de velocidades quando desenvolvido.	101
Figura 5.32. Comportamento da velocidade central ao longo do tubo para razões D/D_p diferentes ($Re=100$, $D_p=0,00397$ m).	102
Figura 5.33. Comportamento da velocidade central ao longo do tubo para razões D/D_p diferentes ($Re=500$, $D_p=0,00397$ m).	102
Figura 5.34. Comportamento da velocidade central ao longo do tubo para razões D/D_p diferentes ($Re=1000$, $D_p=0,00397$ m).	103
Figura 5.35. Desvio percentual da velocidade média central ao longo do tubo em relação à velocidade média central na interface ($Re=100$, $D_p=0,00397$ m).	104
Figura 5.36. Desvio percentual da velocidade média central ao longo do tubo em relação à velocidade média central na interface ($Re=500$, $D_p=0,00397$ m).	105
Figura 5.37. Desvio percentual da velocidade média central ao longo do tubo em relação à velocidade média central na interface ($Re=1000$, $D_p=0,00397$ m).	105

NOMENCLATURA

ΔP	Queda de pressão no leito	$[ML^{-1}T^{-2}]$
Δt	Intervalo de tempo	$[T]$
Δz	Comprimento do tubo	$[L]$
A_e	Função da porosidade	$[-]$
A	Área da seção transversal	$[L^2]$
A_p	Área superficial da partícula	$[L^2]$
c	Fator c	$[-]$
CONV	Função de termos convectivos discretizados	$[-]$
D	Diâmetro do leito	$[L]$
D_e	Diâmetro equivalente	$[L]$
$D_{i,j}$	Dilatação no volume de controle	$[-]$
D_p	Diâmetro de partícula	$[L]$
$\overline{D_p}$	Diâmetro médio de Sauter da partícula	$[L]$
f	Fator de atrito	$[-]$
F	Resistência do escoamento com as partículas e a parede	$[ML^{-2}T^{-2}]$
F_r	Queda de pressão radial no leito por unidade de comprimento	$[ML^{-2}T^{-2}]$
F_{sola}	Função F no método Sola	$[-]$
F_z	Queda de pressão axial no leito por unidade de comprimento	$[ML^{-2}T^{-2}]$
g	Intensidade do campo externo	$[LT^{-1}]$
G_{sola}	Função G no método Sola	$[-]$
h	Força	$[ML^{-2}T^{-2}]$
H	Força externa	$[ML^{-2}T^{-2}]$
J_0	Função Bessel	$[-]$
k	Permeabilidade do leito	$[L^2]$
L	Comprimento do leito	$[L]$
L_e	Comprimento equivalente	$[L]$
L_s	Comprimento da região de saída	$[L]$

m	Força resistiva	$[ML^{-2}T^{-2}]$
\hat{n}	Vetor unitário	$[-]$
np	Número de pontos da malha	$[-]$
p	Pressão	$[ML^{-1}T^{-2}]$
P	Pressão piezométrica	$[ML^{-1}T^{-2}]$
p_0	Pressão na entrada do leito	$[ML^{-1}T^{-2}]$
Pe	Número de Peclet	$[-]$
r	Posição radial	$[L]$
R	Raio do tubo	$[L]$
r^*	Raio adimensional $(r-R)/D_p$	$[-]$
R^*	Raio adimensional (r/R)	$[-]$
$r_{0,5}$	Posição radial onde $\varepsilon=0,5$	$[L]$
Re	Número de Reynolds	$[-]$
r_e	Raio do tubo equivalente	$[L]$
Re_p	Número de Reynolds na partícula	$[-]$
r_H	Raio hidráulico	$[L]$
S	Superfície	$[L^2]$
t	Tempo	$[T]$
u	Velocidade superficial do fluido	$[LT^{-1}]$
u_∞	Velocidade superficial para o escoamento desenvolvido	$[LT^{-1}]$
u^*	Velocidade superficial adimensional (u/u_m)	$[-]$
u_0	Velocidade na saída do leito	$[LT^{-1}]$
u_i	Velocidade no volume i	$[LT^{-1}]$
$u_{i,calc}$	Velocidade calculada na posição i	$[LT^{-1}]$
$u_{i,exp}$	Velocidade medida experimentalmente na posição i	$[LT^{-1}]$
u_m	Velocidade superficial média	$[LT^{-1}]$
u_{max}	Velocidade máxima do escoamento	$[LT^{-1}]$
u_c	Velocidade central	$[LT^{-1}]$
u_{c0}	Velocidade central na interface	$[LT^{-1}]$
\bar{u}	Velocidade média	$[LT^{-1}]$
U_R	Velocidade radial adimensional em função do raio adimensional	$[-]$

ϕ	Resistência calculada pela equação de Ergun	$[\text{ML}^{-2}\text{T}^{-2}]$
Φ	Esfericidade	[-]
ψ	Função corrente	$[\text{L}^3\text{T}^{-1}]$
ω	Vorticidade	$[\text{LT}^{-1}]$
ϑ	Posição axial adimensional (z/R)	[-]
κ	Fator de segurança	[-]
η	Fator de correção	[-]

ABREVIATURAS

CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
DFC	Dinâmica de Fluidos Computacional
LBA	<i>Lattice Boltzmann Automata</i>
EDPs	Equações Diferenciais Parciais
Desv	Desvio
Erro	Tolerância para o erro na iteração

RESUMO

Estudos realizados na estrutura de leitos fixos tubulares já comprovaram que a porosidade neste sistema apresenta um comportamento oscilatório na direção radial. A não-uniformidade da porosidade gera um comportamento do perfil de velocidades, no interior do leito, caracterizado por oscilações na região central e um pico de maior amplitude na região próxima à parede. Este perfil de velocidades determina o tempo de residência de reagentes, por exemplo, e apresenta uma forte influência na transferência de calor e massa no sistema.

Apesar dos avanços nesse tema, ainda é muito difícil obter uma medida de velocidade de escoamento no interior do leito sem causar-lhe perturbações ou alterações de sua estrutura. Devido a esta restrição, formas indiretas de medida experimental da velocidade neste sistema têm sido propostas para avaliar a fluidodinâmica no interior do leito. Uma das formas mais comuns para obter experimentalmente essa velocidade é medi-la em regiões do escoamento fora do leito, a uma determinada distância da saída do mesmo, considerando-se que o escoamento nesse ponto de medida mantenha as características fluidodinâmicas da interface.

Frente aos questionamentos sobre a validade de inferir a velocidade de escoamento no interior do leito fixo a partir de medidas experimentais realizadas fora do mesmo, o presente trabalho aborda um estudo sobre a perda das características do escoamento a partir da saída do leito fixo até o ponto de medida experimental. Para a avaliação do problema, são realizadas simulações na região compreendida entre a interface leito-tubo e a posição de medida do perfil de velocidades, utilizando como condição de contorno na interface a resposta de um modelo proposto para o interior do leito fixo. As simulações foram realizadas utilizando-se um simulador desenvolvido em

linguagem FORTRAN, baseado em uma técnica numérica de Fluidodinâmica Computacional.

Utilizando-se condições semelhantes à literatura verificou-se a confiabilidade do modelo proposto para a fluidodinâmica no interior do leito, através da comparação de resultados experimentais medidos fora do leito com resultados simulados, para a posição de medida. Avaliou-se também a extensão do efeito do tubo vazio sobre o comportamento do escoamento na região de saída do leito, discriminando-se quanto do comportamento do escoamento no interior do leito é observado pela medida realizada fora do mesmo.

Observou-se melhores resultados em sistemas com um elevado adimensional D/D_p e baixos valores do número de Reynolds para as simulações do escoamento realizadas na região de saída do leito. Nestes resultados verificaram-se desvios variando entre 2,97% e 30,23% em relação a dados experimentais, para diferentes condições operacionais do sistema. Através da simulação da velocidade central ao longo da posição axial no tubo vazio, foi possível mapear a influencia do tubo vazio sobre o escoamento na região de saída do leito fixo, avaliando a diferença dessa velocidade média central com relação a mesma calculada à saída do leito.

ABSTRACT

Studies accomplished in the structure of tubular fixed beds proved that the porosity in these systems presents an oscillatory behavior along the radial direction. The non-uniformity of the porosity generates a behavior of the velocity profile, inside the bed, characterized by oscillations in the central region and a peak of larger width in the region close to the wall. This velocity profile determines the residence time of the reactants, for example, and presents a strong influence in the heat and mass transfer coefficients of these systems.

In spite of the progress obtained in that subject, it is still difficult to obtain the measure of flow velocity inside the bed without causing disturbances in its structure. Due to this restriction, indirect forms of experimental measure of the velocity distribution in these systems have been proposed to evaluate the fluid dynamics inside the bed. The most common way to obtain, experimentally, the velocity distribution inside the bed is to measure it outside the bed, at a certain distance from its exit, and then infer it inside the bed by considering that the flow measured at this point maintains the fluid dynamics characteristics at the interface.

Looking for an alternative way to infer the velocity profile inside the fixed bed, this work proposes a measure of the change in flow characteristics from the exit of the fixed bed to the point of experimental measurement. The measure proposed before takes into account the change in the radial mean velocity evaluated over an area close to the central part of the flow. This measure is based on simulated results accomplished between these two points, located outside the fixed bed, from an appropriated boundary condition at the interface. This boundary condition at interface is the result of other

simulations performed inside the fixed bed, from a convenient model proposed for this region. Both simulations were accomplished by using a simulator developed in FORTRAN language, based on a CFD numeric technique for outside and a standard finite difference method for inside the fixed bed.

The validity of the proposed procedure was verified by comparing the velocity distribution simulated at a position pointed out in an experimental measurement of the velocity distribution obtained in the literature, and with similar operational conditions. By doing this validation, it was established a relationship between the change in flow characteristics and the axial position of measurement. As a result, it was possible to infer how much of the flow characteristics in the interface are observed from the position chose for measurement along the axial direction of the flow.

Better results were observed in systems with a high dimensionless D/D_p relation and low values of Reynolds number for the flow simulations accomplished in the exit area of the bed. Deviations from experimental data, varying between 2,97% and 30,23%, were verified for different operational conditions of the system. Through the central velocity simulation along in the empty tube axial position, were possible to map the empty tube influences on the flow in the fixed bed exit area, evaluating the difference of that central medium velocity with the calculated for the bed exit.

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Na indústria química são encontradas diversas aplicações que utilizam leitos fixos de partículas aleatoriamente distribuídas, compreendendo desde equipamentos de separação a sistemas que envolvem reação química. Para o projeto e desenvolvimento destes processos é de fundamental importância o conhecimento das propriedades estruturais deste tipo de leito, bem como da fluidodinâmica, transferência de calor e transferência de massa envolvida nesta estrutura.

Em sistemas gasosos como, por exemplo, reações catalíticas, reações gás-sólido, secagem, adsorção e processos de transferência térmica, pode-se afirmar que a fluidodinâmica do processo é um fator determinante para o bom funcionamento do mesmo como um todo. O perfil de velocidade determina o tempo de residência de reagentes, por exemplo, e apresenta uma forte influência na transferência de calor e massa no sistema. Entretanto, apesar dos avanços obtidos nesse tema, ainda é muito difícil tomar uma medida de velocidade de escoamento no interior do leito, sem causar grandes perturbações no mesmo ou alterações de sua estrutura. Devido a esta restrição, análises de formas alternativas de medida experimental da velocidade neste sistema tem sido propostas, na tentativa de contornar esse problema e obter uma boa representação da fluidodinâmica no interior do leito. Uma das formas mais comuns de aproximação para essa velocidade é medi-la em regiões do escoamento fora do leito, tomando-se uma determinada distância a partir de sua interface, na qual considera-se que o comportamento da velocidade nesta posição seja conservado até o ponto de medida. Diversos trabalhos que utilizam esta técnica são citados na literatura.

Com relação à modelagem e simulação do perfil de velocidade em leito fixo, verifica-se na literatura uma gama muito ampla de modelos sobre o assunto. Porém, todos estes modelos possuem particularidades e restrições, não podendo prever ainda o comportamento do escoamento no interior do leito para diferentes relações de geometria e de empacotamento. Um dos fatores limitantes para a obtenção de modelos mais robustos e generalizados é a maior complexidade do equacionamento obtido, visto que o escoamento de fluidos é regido pelas equações de Navier-Stokes, praticamente inviabilizando a solução analítica do mesmo.

A utilização de técnicas numéricas para a solução de problemas complexos de engenharia é hoje uma realidade devido à presença em nosso meio de computadores cada vez mais velozes e com maior capacidade de armazenamento. A simulação numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor, conhecida como CFD – *Computational Fluid Dynamics*, apresentou um crescimento acelerado nos últimos 20 anos. Partindo inicialmente de uma ferramenta de análise de problemas físicos ao nível de investigação científica, hoje, a Fluidodinâmica Computacional é uma ferramenta poderosa para a solução de problemas de engenharia, sendo atualmente utilizada também por pesquisadores na área de medicina, meteorologia, entre outras. A CFD complementa estudos em que análises teóricas ou testes em laboratório não são suficientes, por razões de complexidade, custo e/ou tempo, para possibilitar o entendimento adequado dos fenômenos físicos envolvidos (FORTUNA, 2000).

Afora os erros associados às medidas de velocidade fora do leito fixo, não se tem conhecimento de trabalhos que façam uma verificação e quantificação sobre a perda de representatividade dessas medidas realizadas afastadas do leito, no tubo vazio. Com esse intuito, o presente trabalho apresenta resultados simulados, baseados em

procedimentos de análise que quantificam a perda de representatividade da medida do perfil de velocidades realizada fora do leito, em relação às condições reais no interior do mesmo.

Os dados experimentais utilizados para verificar a confiabilidade dos resultados simulados foram obtidos a partir da literatura, e seguem a metodologia de medida experimental fora do leito fixo. Os resultados experimentais e simulados são comparados no exato ponto de medida experimental, utilizando-se para isto um simulador desenvolvido para o escoamento de ar em tubo vazio, que possibilita a avaliação do perfil de velocidade da região fora do leito, tendo como condição de contorno o perfil de velocidade obtido através de uma simulação realizada para o interior do leito.

CAPÍTULO 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo são analisados alguns trabalhos referentes à fluidodinâmica em leito fixo, com ênfase a uma abordagem generalizada sobre a representação e o tratamento numérico de tais sistemas. Inicialmente são apresentadas as características mais relevantes relacionadas ao escoamento em leito fixo. Estas características, quando aliadas a alguns estudos experimentais aqui apresentados, demonstram com maior clareza a sua importância, bem como os problemas inerentes ao sistema em questão.

2.1. O ESCOAMENTO EM LEITO FIXO

2.1.1. Porosidade

Um dos fatores que apresenta grande influência sobre o perfil de velocidade para o escoamento em leito fixo é a porosidade. Estudos, como por exemplo o realizado por ZOTIN (1985), já comprovaram experimentalmente, a presença de um perfil oscilatório de porosidade para o interior do leito, na direção radial. A amplitude destas oscilações varia conforme as características geométricas do leito, das partículas e a forma de empacotamento utilizado. Além disso, observa-se para a porosidade a presença de variações de amplitude menores na região próxima ao centro do leito, aumentando-se esta variação até que a porosidade atinja o valor 1,0 (quando a posição radial coincide com a parede do leito). Esse comportamento da porosidade é justificado pela diferença no empacotamento quando o leito encontra-se em contato com a parede do tubo. O

contato com a parede proporciona uma maior organização das partículas e, conseqüentemente, uma maior porosidade. A partir deste ponto, a ordenação diminui gradativamente quando se distancia da parede em direção ao centro do tubo, resultando em um leito com alta porosidade e alta permeabilidade próximo à parede, ao contrário da região central, que se apresenta menos porosa (SINGULANI, 2001).

As figuras 2.1 e 2.2 representam um corte transversal em um leito fixo e uma representação qualitativa da relação entre a porosidade e a distância radial. É possível visualizar a presença de um maior espaçamento entre partículas na região próxima à parede, pois a mesma impossibilita a aglomeração de várias partículas na mesma região, como ocorre no centro do leito. Esta maior aglomeração proporciona menores porosidades, pois reduz o espaçamento vazio por onde o fluido deverá escoar.

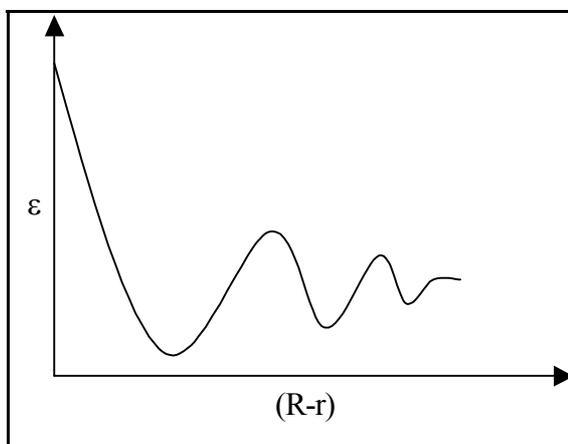
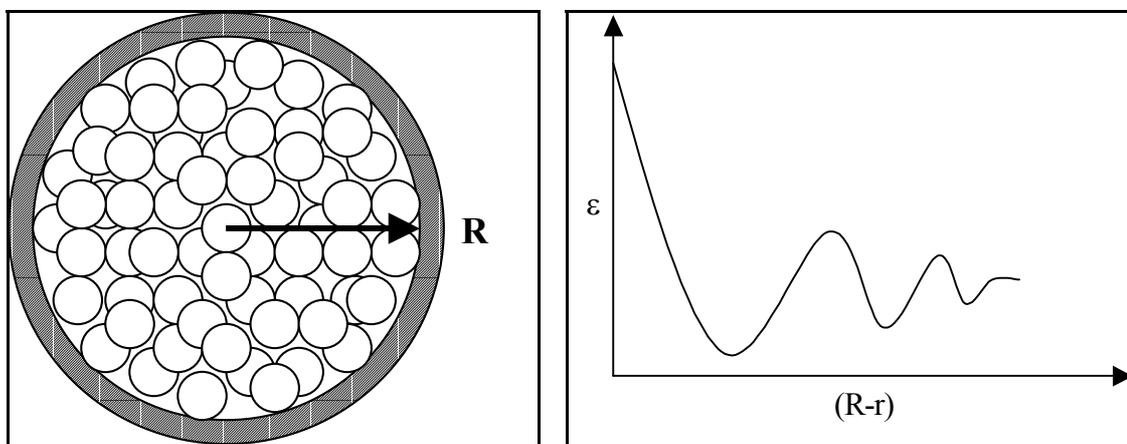


Figura 2.1. Corte transversal no leito fixo. Figura 2.2. Comportamento da porosidade na direção radial.

O trabalho de ZOTIN (1985) apresenta um estudo detalhado sobre o comportamento da porosidade no interior de leitos de recheio. Neste trabalho é avaliado o comportamento da porosidade para leitos empacotados com esferas de diferentes

diâmetros, cilindros, anéis de Raschig e lascas, possibilitando uma análise mais completa da relação entre o perfil de porosidade e as características estruturais do leito. Na figura 2.3 é possível verificar alguns resultados obtidos pelo autor.

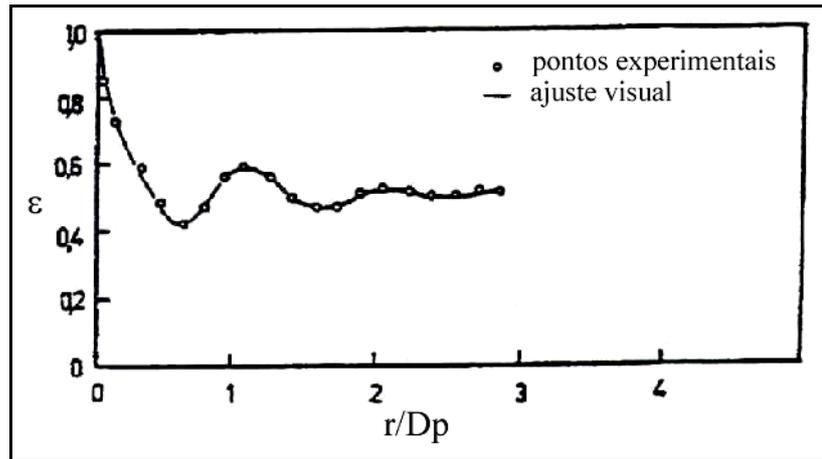


Figura 2.3. Perfil de porosidade obtido por ZOTIN (1985).

Tratando-se da modelagem e simulação da porosidade em leitos de recheio, atualmente verifica-se uma grande variedade de correlações para descrever o comportamento da mesma nestes sistemas. Para leitos compostos de esferas, uma das correlações mais citadas é a de MUELLER (1992), que propôs o seguinte equacionamento para descrever a distribuição radial de porosidade:

$$\varepsilon = \varepsilon_b + (1 - \varepsilon_b) J_0(ar^*) e^{-br^*}, \text{ para } D/D_p \geq 2,02 \quad (2.1)$$

onde:

$$a = 7,45 - \frac{3,15}{D/D_p} \text{ para } 2,02 \leq D/D_p \leq 13,0 \quad (2.2)$$

$$a = 7,45 - \frac{11,25}{D/D_p} \text{ para } D/D_p \geq 13,0 \quad (2.3)$$

$$b = 0,315 - \frac{0,725}{D/D_p} \quad (2.4)$$

$$\hat{r} = \frac{r}{D_p} \text{ para } 0 \leq \frac{r}{D_p} \quad (2.5)$$

$$\varepsilon_b = 0,365 + \frac{0,220}{D/D_p} \quad (2.6)$$

Como a velocidade de escoamento em leito fixo é influenciada diretamente pela porosidade do mesmo, o perfil radial da velocidade também apresenta um comportamento oscilatório, com amplitude e frequência de oscilações fortemente ligadas ao perfil de porosidade.

Ainda sobre o perfil de porosidade, HAIDEGER *et al.* (1989) propõe uma expressão baseada em uma exponencial simples para descrever o comportamento radial da porosidade no leito fixo. A equação proposta pelos autores é apresentada a seguir:

$$\varepsilon = 0,4 \left[1 + 0,55 \exp \left(1 - 2 * \frac{R-r}{D_p} \right) \right] \quad (2.7)$$

No subitem a seguir são apresentados maiores detalhes sobre o escoamento em leito fixo. O problema da dificuldade de medida experimental da velocidade no interior do leito é abordado, apresentando-se os fatores que geram este problema e trabalhos presentes na literatura que buscaram formas de tratá-lo.

2.1.2. Medida da velocidade em leito fixo

A medida da velocidade no interior do leito fixo é de difícil realização. As características estruturais do leito não permitem a inserção de um medidor no interior do mesmo sem grandes alterações na sua estrutura ou nas características do escoamento.

Devido a esta dificuldade, verifica-se na literatura formas alternativas de medida da velocidade, na tentativa de contornar o problema e obter uma representação satisfatória do comportamento do escoamento no interior do leito.

É possível observar na literatura que a forma mais comum de medida de velocidade em leitos fixos é tomá-la a uma pequena distância, na direção axial, a partir da saída do leito fixo, supondo que nesta região o perfil de velocidade na interface entre o leito e a saída seja conservado. A tomada experimental na posição exata da interface também é questionável, devido ao distúrbio provocado no escoamento quando o fluido deixa o leito fixo para escoar no tubo vazio. Na figura 2.4 a seguir é possível verificar a estrutura do sistema apresentado.

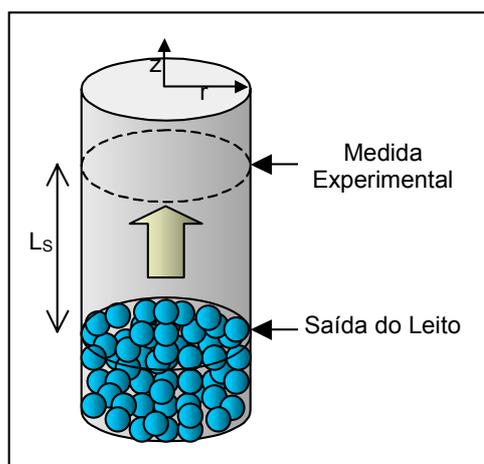


Figura 2.4. Representação do leito fixo e indicação do local onde normalmente é realizada a medida da velocidade do fluido.

Na figura 2.4 é possível qualificar o local “Ls”, onde comumente supõe-se que o comportamento do escoamento na saída do leito é conservado (ponto de medida experimental), em uma posição mais adiantada em relação à superfície do leito.

MORALES *et al.* (1951) determinaram experimentalmente o perfil de velocidade em leito fixo através de medidas realizadas fora do mesmo, utilizando-se de um anemômetro de fio quente circular. Um esquema do aparato utilizado pelo autor pode ser visualizado na figura 2.5.

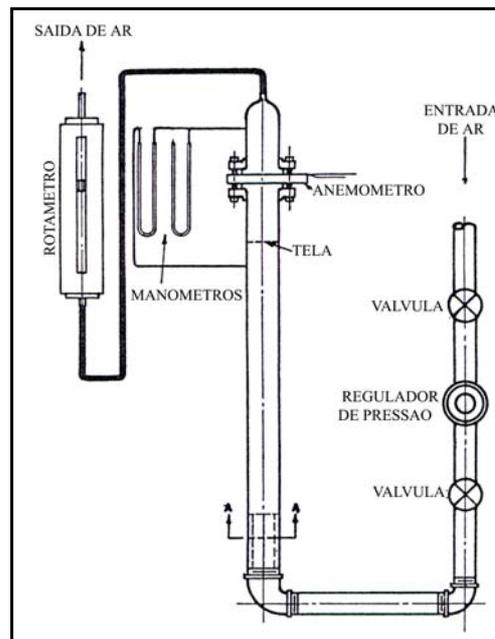


Figura 2.5. Aparato experimental utilizado por MORALES *et al.* (1951).

No trabalho de MORALES *et al.* (1951), a distância tomada entre o final do leito e o ponto de medida foi de 9,52 mm. Neste trabalho é avaliado o comportamento do escoamento para diferentes geometrias de leitos fixos e diferentes valores do número de Reynolds. Alguns dos resultados obtidos pelos autores são apresentados na figura 2.6 a seguir.

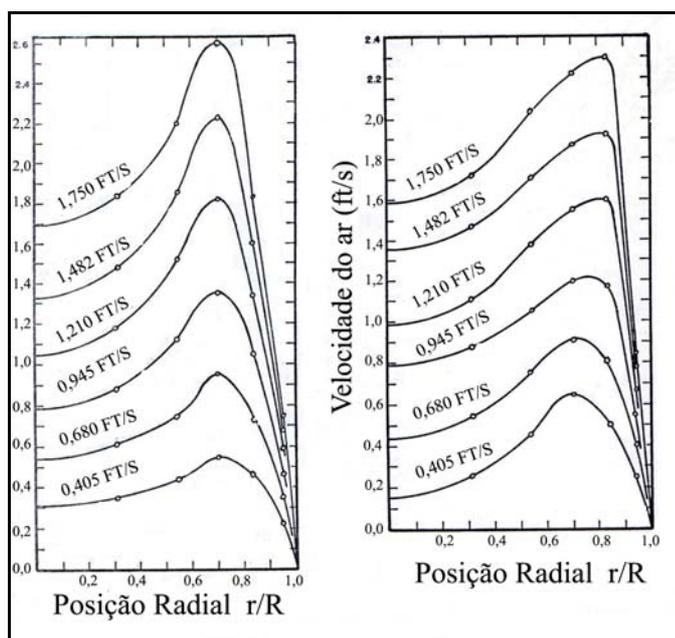


Figura 2.6. Resultados experimentais obtidos por MORALES *et al.* (1951).

Através deste estudo, MORALES *et al.* (1951) verificaram a presença de um ponto na proximidade da parede do tubo onde ocorre um máximo de velocidade. Com esta verificação, os autores demonstraram que a suposição de um perfil uniforme de velocidade no interior do leito não era a representação correta do escoamento.

SCHWARTZ e SMITH (1953) avaliaram experimentalmente o perfil de velocidade em leito fixo, utilizando-se de um aparato muito semelhante ao de MORALES *et al.* (1951), a uma distância de 50,8 mm da saída do leito, com um anemômetro de fio quente circular. Na figura 2.7 é possível visualizar o esquema geométrico dos anemômetros utilizado. Para tais medidas, o autor utilizou leitos com 50 a 100 mm de diâmetro com diferentes comprimentos, variando-se o recheio entre cilindros e esferas de diâmetros diferenciados, e também variando o número de Reynolds do escoamento.

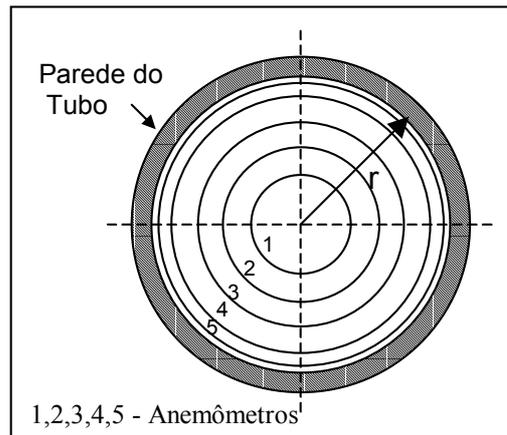


Figura 2.7. Esquema dos anemômetros posicionados na saída do leito utilizado por SCHWARTZ e SMITH (1953).

O estudo de SCHWARTZ e SMITH (1953) demonstrou a presença do pico de velocidade na proximidade da parede (pode ser visualizado na figura 2.8), constatando que o máximo de velocidade no interior do leito fixo (o pico de velocidade) encontra-se aproximadamente a um diâmetro de partícula, na direção radial, a partir da parede.

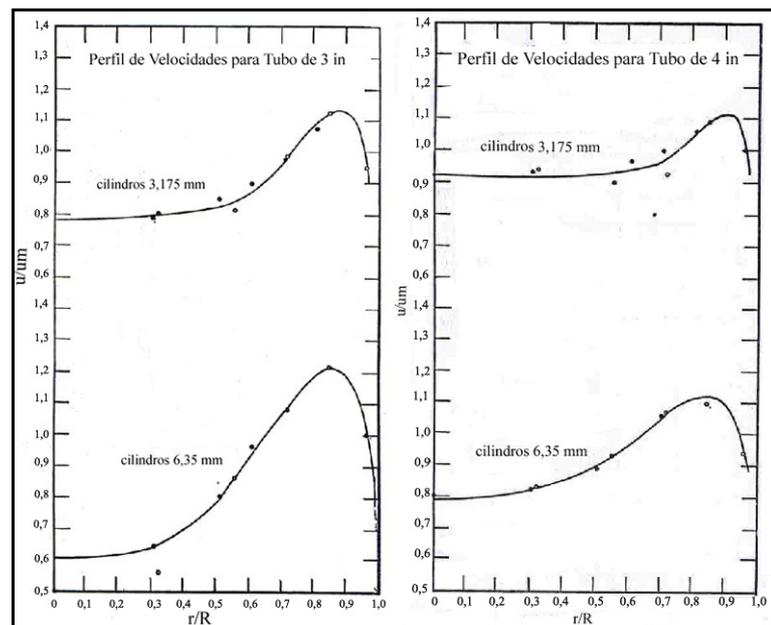


Figura 2.8. Resultados obtidos por SCHWARTZ e SMITH (1953).

No trabalho de SINGULANI (2001), foi determinado experimentalmente o perfil de velocidade radial do escoamento do ar em leito fixo por meio de medidas realizadas fora do leito, a diferentes distâncias da saída do mesmo, utilizando para tanto um anemômetro de fio quente. O trabalho foi realizado em um leito de dimensões de 8,2 cm de diâmetro e 29 cm de altura, empacotado com esferas de vidro de diferentes diâmetros. Os resultados obtidos experimentalmente por SINGULANI (2001) foram comparados com modelos citados na literatura, verificando-se a compatibilidade entre ambos. Alguns destes resultados são apresentados nas figuras 2.9, 2.10 e 2.11. É possível verificar a presença de um ponto de maior velocidade na proximidade da parede.

Através da comparação dos resultados obtidos para diferentes posições a partir da saída do leito onde os pontos foram tomados, SINGULANI (2001) verificou que uma maior distância de medida a partir da interface promove perfis de velocidade mais homogêneos.

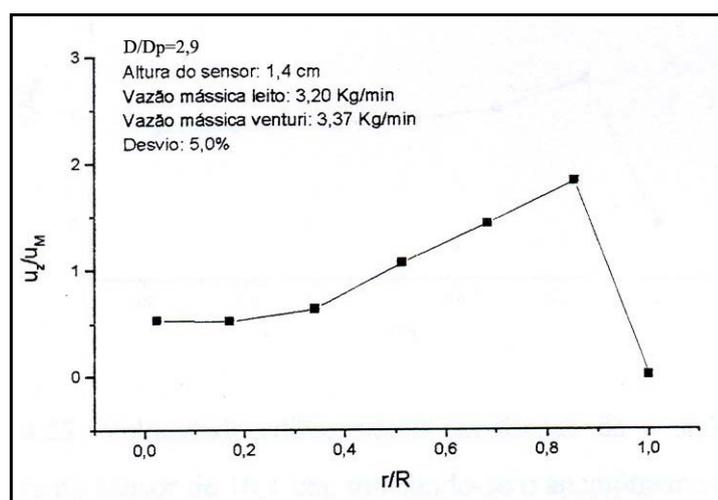


Figura 2.9. Velocidade adimensional em função da posição radial para $D/D_p=2,9$ e distância do sensor a 1,4cm da saída do leito fixo (SINGULANI, 2001).

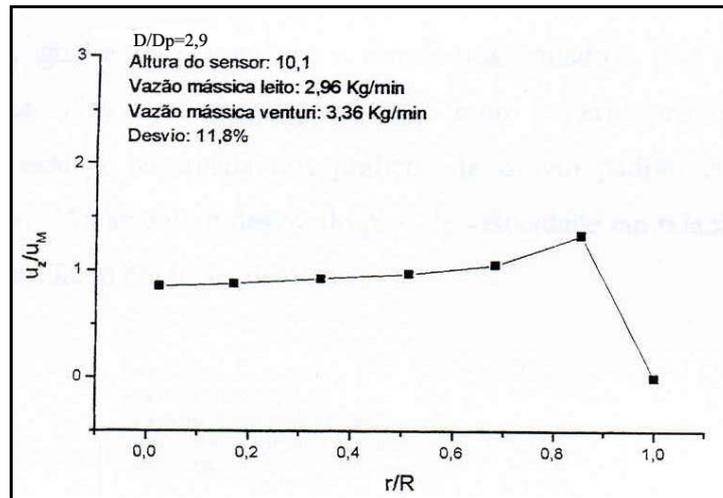


Figura 2.10. Velocidade adimensional em função da posição radial para $D/D_p=2,9$ e altura do sensor a 10,1cm da saída do leito fixo (SINGULANI, 2001).

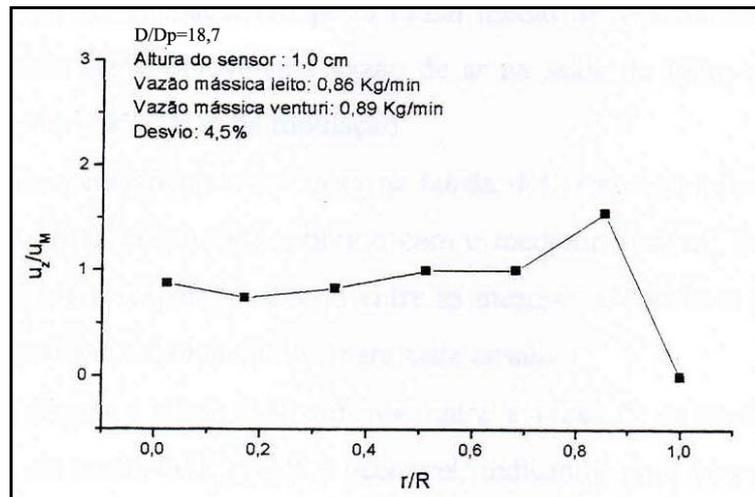


Figura 2.11. Velocidade adimensional em função da posição radial para $D/D_p=18,7$ e altura do sensor a 1cm da saída do leito fixo (SINGULANI, 2001).

O aparato experimental utilizado por SINGULANI (2001) foi desenvolvido no Centro de Secagem do DEQ-UFSCar, e é apresentado na figura 2.12.

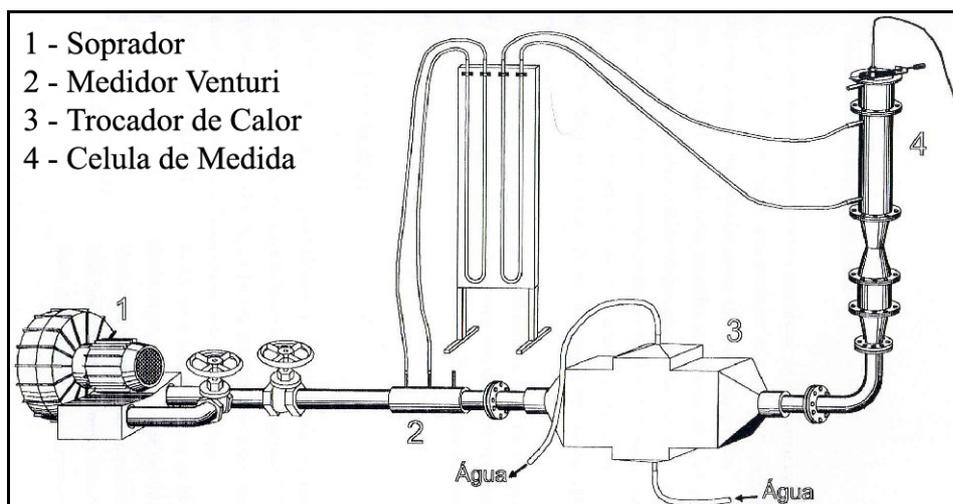


Figura 2.12. Esquema do equipamento utilizado em SINGULANI (2001).

O instrumento de medida utilizado foi um anemômetro de fio quente, da marca Dantec, formado por módulos individuais montados na base principal 56B10 e provido de um sensor tipo “miniature wire” de numeração 55P11, também da marca Dantec. Este sensor é constituído de platina e tungstênio, com 5 µm de diâmetro e 1,25 mm de comprimento. A figura 2.13 apresenta uma ilustração deste sensor.

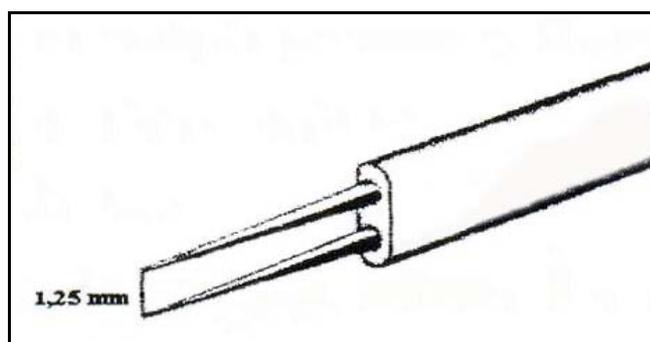


Figura 2.13. Extremidade do anemômetro de fio quente utilizado por SINGULANI (2001).

Algumas medidas realizadas por SINGULANI (2001) foram comparados com dados previstos pelo modelo proposto por ZIÓŁKWOSKA e ZIÓŁKWOSKI (1993). Estes resultados são apresentados nas figuras 2.14 e 2.15:

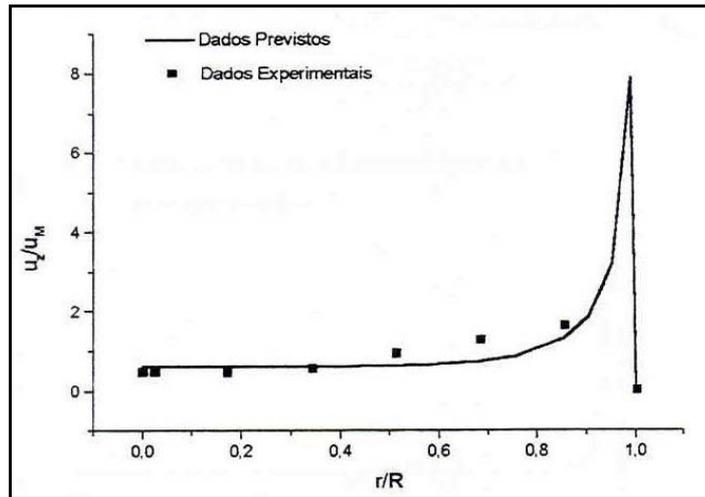


Figura 2.14. Comparação do modelo de ZIÓŁKWOSKA e ZIÓŁKWOSKI (1993) com resultados experimentais para o leito de $D/D_p=2,9$ (SINGULANI, 2001).

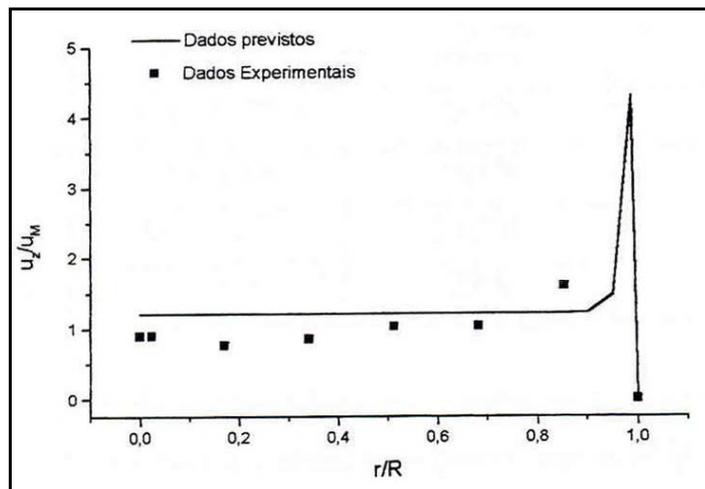


Figura 2.15. Comparação do modelo de ZIÓŁKWOSKA e ZIÓŁKWOSKI (1993) com resultados experimentais para o leito de $D/D_p=18,7$ (SINGULANI, 2001).

É possível verificar nos resultados apresentados por SINGULANI (2001), a presença de perfis de velocidade levemente oscilatórios e com um ponto de maior elevação na proximidade da parede. O modelo utilizado neste trabalho para a comparação demonstra um pico de maior elevação na proximidade da parede, pico este situado numa posição radial entre duas medidas realizadas, não sendo detectado experimentalmente. Este comportamento da velocidade é característico do leito fixo, marcado pela presença de oscilações na direção radial (relacionado à porosidade) e por apresentar um pico de velocidade na região próxima à parede, onde a porosidade aproxima-se de 1,0.

Apesar das formas de tratamento experimental utilizado nos trabalhos citados até agora se apresentarem muito semelhantes, baseando-se em medidas fora do leito, ela não é a única encontrada na literatura. Ainda no intuito de descrever o perfil de velocidade no interior do leito, MOISE e TUDOSE (1998) apresentam um tratamento diferenciado de obtenção de dados experimentais, obtendo-se uma equação empírica a partir destes dados para o perfil de velocidade no leito.

MOISE e TUDOSE (1998) determinaram uma equação para o escoamento do ar em leito fixo a partir de medidas experimentais da velocidade pontual no interior de leitos longos ($L/D \gg 1$) e com grandes diâmetros de partículas ($D_p > 5\text{mm}$), dividindo-se o leito em duas partes. A divisão do leito foi realizada utilizando-se telas de sustentação. Uma tela foi posicionada na parte superior do leito inferior, e a outra na parte inferior do leito superior, suportando-se os leitos e mantendo uma distância entre eles de 20mm. Dentro deste espaço de 20mm, na direção axial, foi posicionado um termoanemômetro, com o qual foram obtidos os pontos experimentais.

Analisando-se os resultados experimentais, reproduzidos na figura 2.16, MOISE e TUDOSE (1998) obtiveram medidas que não apresentaram uma boa correlação entre a velocidade e os valores das dimensões do leito e dos diâmetros das partículas. Sendo assim, os autores relacionaram as características dos perfis de velocidade obtidos a seus respectivos valores de Reynolds.

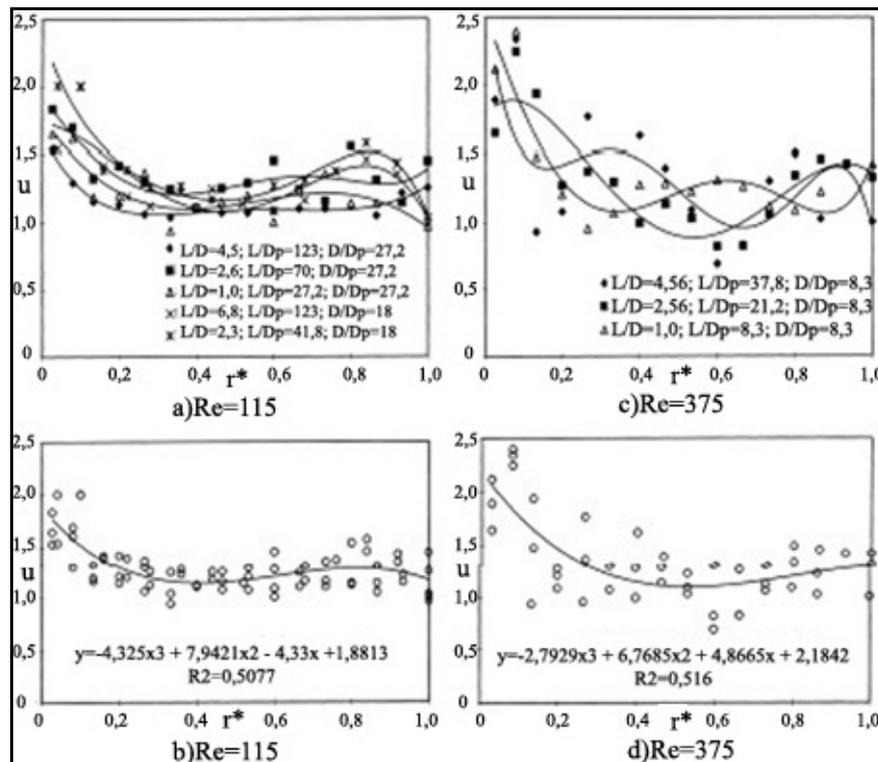


Figura 2.16. Resultados de MOISE e TUDOSE (1998) para um leito fixo seccionado.

Os autores sugeriram as equações (2.8) a (2.11) para a representação do perfil de velocidade em leitos de recheio:

$$u^* = \frac{a}{(r^*)^b} \quad (2.8)$$

onde:

$$u^* = \frac{u}{u_1} \quad (2.9)$$

sendo u_1 a velocidade medida no mesmo ponto para um tubo vazio, tal que:

$$u_1 = 2u_m \left[1 - (1 - r^*)^2 \right] \quad (2.10)$$

Para este equacionamento, o raio adimensional é calculado através da seguinte relação:

$$r^* = \frac{R - r}{R} \quad (2.11)$$

Os parâmetros “a” e “b” do modelo são calculados pelas equações 2.12 a 2.14 a seguir:

$$a = 0,363 + 2,6236 \cdot 10^{-5} \text{Re} + 3,184 \cdot 10^{-3} \frac{D}{D_p} \quad (2.12)$$

$$b = 1,03486 - 1,000335 \cdot 10^{-4} \frac{L}{D_p} - 5,352 \cdot 10^{-3} \frac{D}{D_p} \quad (2.13)$$

$$\text{Re} = \frac{u_m D}{\nu} \quad (2.14)$$

O equacionamento obtido pelos autores correlaciona as características geométricas do leito com o número de Reynolds. Seus resultados podem ser verificados na figura 2.17.

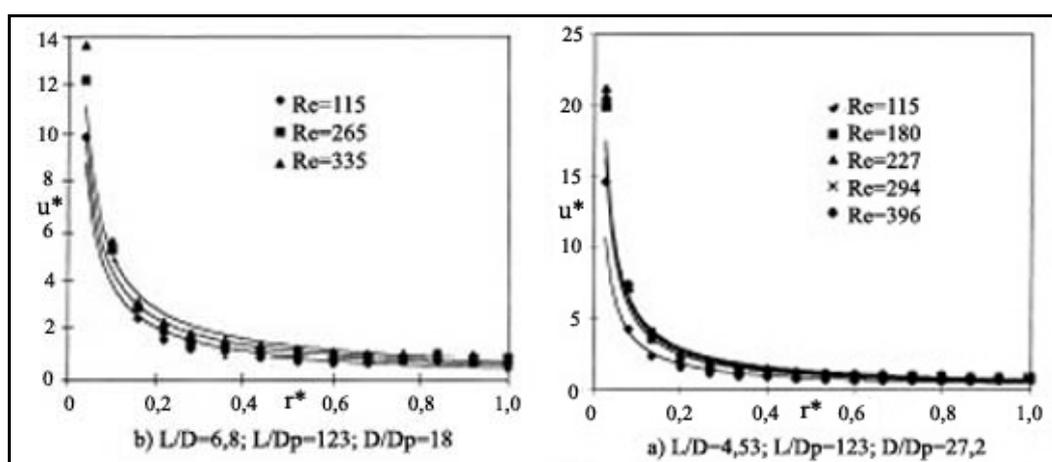


Figura 2.17. Distribuição radial da velocidade relativa obtida com o leito fixo seccionado (MOISE e TUDOSE, 1998).

Na seção seguinte são analisados trabalhos sobre escoamento em leito fixo com maior ênfase na modelagem e simulação do escoamento em tais sistemas.

2.2. MODELAGEM E SIMULAÇÃO APLICADA AO ESCOAMENTO EM LEITO FIXO

Na literatura, é possível verificar diversas formas de abordagem para o tratamento da modelagem e simulação do escoamento em leitos fixos. Observa-se uma grande quantidade de modelos empíricos, onde normalmente o foco principal é desenvolver uma correlação a partir de dados experimentais. Em outros casos, verificam-se modelos obtidos analiticamente, onde a característica marcante é a variação na forma de tratamento do sistema, procurando-se simplificá-lo e possibilitando através desta simplificação a solução analítica do problema. Em outras situações, faz-se o tratamento numérico, comumente aplicado quando se deseja tratar equacionamentos mais complexos, no intuito de obter uma representação mais abrangente do problema.

Para a descrição dos trabalhos com ênfase na modelagem e simulação do escoamento em leitos de recheio, optou-se por dividi-los com base no método de obtenção das equações e resultados (obtidos e solucionados analiticamente e solucionados numericamente). Uma atenção especial é dada às soluções numéricas, por tratar-se da linha de pesquisa deste trabalho, além da apresentação da equação de Darcy e Ergun, equações indispensáveis quando o escoamento em leito fixo está sendo avaliado.

2.2.1. A equação de Darcy e equação de Ergun

A equação de Darcy é amplamente utilizada na fluidodinâmica em meios porosos. Esta equação parte do princípio de que o campo de velocidades no escoamento é uniforme, ou seja, a velocidade em qualquer ponto do sistema é igual à velocidade média no mesmo.

Supondo-se um meio poroso isotrópico e homogêneo percolado por um fluido newtoniano tem-se:

$$\varepsilon \rho \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial V}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon^2} (\text{grad}V)V \right] = -\text{grad}[p - \alpha 1(\|V\|)] - m + \rho g \quad (2.15)$$

onde a força resistiva m é fornecida pela seguinte equação (MASSARANI, 2002):

$$m = \frac{\mu}{k} \left[1 + \frac{c\rho\sqrt{k}\|V\|}{\mu} \right] V \quad (2.16)$$

No caso de escoamento uniforme, chega-se à equação de Darcy:

$$0 = -\text{grad}p - m + \rho g \quad (2.17)$$

Para velocidade de escoamento lenta:

$$\frac{c\rho\sqrt{k}\|V\|}{\mu} \ll 1 \quad (2.18)$$

Substituindo 2.18 em 2.16:

$$m = \frac{\mu}{k} V \quad (2.19)$$

Para escoamento incompressível a equação de Darcy torna-se:

$$-\text{grad}P = m \quad (2.20)$$

onde:

$$P = p + \rho gh \quad (2.21)$$

Portanto, chega-se assim a uma forma simplificada da equação de Darcy:

$$\text{grad}P = \frac{\mu}{k} V \quad (2.22)$$

A equação de Ergun, amplamente utilizada para o escoamento em leito fixo, nada mais é que a equação de Darcy, onde o fator c e a permeabilidade k são relacionados por:

$$k = \frac{(\overline{Dp\Phi})^2 \varepsilon^3}{150(1 - \varepsilon)^2} \quad (2.23)$$

$$c = \frac{0,14}{\varepsilon^{3/2}} \quad (2.24)$$

Resultando na conhecida equação de Ergun:

$$-\frac{\Delta P}{L} = 150\mu \frac{(1 - \varepsilon)^2}{\varepsilon^3 (\overline{Dp\Phi})^2} V + 1,75\rho \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon^3 \overline{Dp\Phi}} V^2 \quad (2.25)$$

2.2.2. Modelos obtidos a partir do tratamento analítico do problema

Invariavelmente, todos os escoamentos podem ser descritos pelas equações de Navier-Stokes. Quando é desejado obter uma solução analítica para determinado caso, é possível partir das equações de Navier-Stokes e simplificá-las até tornar viável a sua solução analítica. Neste tópico apresentar-se-á alguns trabalhos que se baseiam na resposta analítica para o escoamento em leito fixo e sua forma de tratar o problema.

Uma das formas de tratamento para o escoamento em leito de recheio presente na literatura é a descrição do sistema como composto por duas regiões distintas. Para tanto, o leito é dividido em duas partes, utilizando-se comumente como critério de

divisão o perfil de porosidade do mesmo (figura 2.18). Baseando-se nas características mais marcantes de cada região, as suposições e considerações para ambas são apresentadas, e a modelagem é realizada tratando-se cada qual como distinta e obtendo-se ao final um perfil para o leito em sua totalidade.

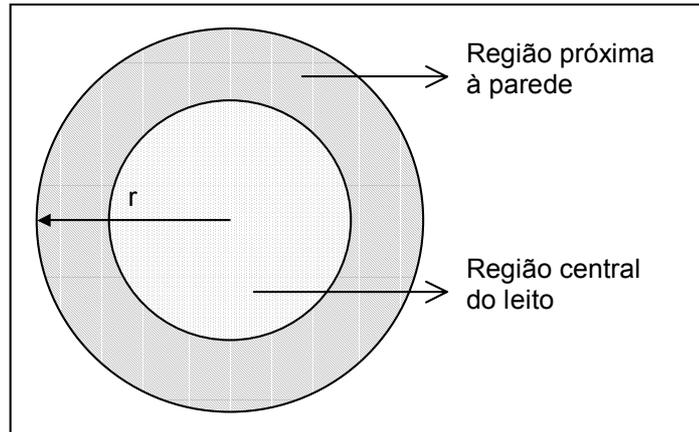


Figura 2.18. Esquema do leito fixo tratado como duas regiões distintas

Partindo-se desta forma de análise, ZIÓLKOWOSKA e ZIÓLKOWOSKI (1993) utilizaram a equação da continuidade e o balanço de quantidade de movimento para desenvolver um modelo de representação do escoamento no interior de leitos fixos.

Considerando-se o escoamento em regime estacionário, obtém-se para as equações da continuidade e da quantidade de movimento, na direção axial, as relações apresentadas nas equações 2.27 e 2.28. O raio adimensional é definido através da equação 2.26:

$$r^* = \frac{R - r}{D_p} \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial(\rho \epsilon v_r)}{\partial r^*} = 0 \quad (2.27)$$

$$\frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial r^*} \left[\rho v_r v_z + \varepsilon (\tau_{rz} + \tau_{rz}^i) \right] - \frac{\partial P}{\partial z} + \rho F = 0 \quad (2.28)$$

Na equação 2.28, $(\tau_{rz} + \tau_{rz}^i)$ é o termo referente a força de fricção interna e F a relação entre a resistência do escoamento com as partículas e a parede. A força F é equacionada a seguir:

$$F = \frac{f v_z^2 (1 - \varepsilon)}{D_p} \quad (2.29)$$

Para a solução deste modelo, o leito foi dividido em 2 partes. A região central, definida como a região onde $r^* < 0,5$, e a região próxima à parede.

Baseando-se no fato de que a porosidade na região central é praticamente constante, os autores consideraram que a velocidade nesta região também é constante, propondo a seguinte relação:

$$v_z = \sqrt{\frac{\Delta P D_p}{\rho L f (1 - \varepsilon)}} \quad (2.30)$$

Para a região próxima à parede, o perfil foi obtido por meio da integração do balanço de quantidade de movimento. Esta solução é apresentada pela equação 2.31.

$$v_z = \frac{1}{2} \left[-\frac{v_{ef}}{D_p \varepsilon} + \sqrt{\left(\frac{v_{ef}}{D_p \varepsilon} \right)^2 + \frac{4 \Delta P D_p A_e}{\rho L f \varepsilon^2}} \right] \quad (2.31)$$

onde

$$A_e = \frac{\varepsilon^2}{(1 - \varepsilon)} \quad (2.32)$$

A viscosidade cinemática efetiva pode ser determinada, segundo os autores, a partir da seguinte equação:

$$\frac{v_{ef}}{\nu} = \text{Re} \left(\frac{1 - \bar{\varepsilon}}{\varepsilon} A_e \frac{u_m}{u} - \frac{u}{u_m} \right) \quad (2.33)$$

Através da figura (2.19), é possível verificar a relação obtida entre o modelo proposto e os dados experimentais de ZIÓLKOWSKA e ZIÓLKWOSKI (1993).

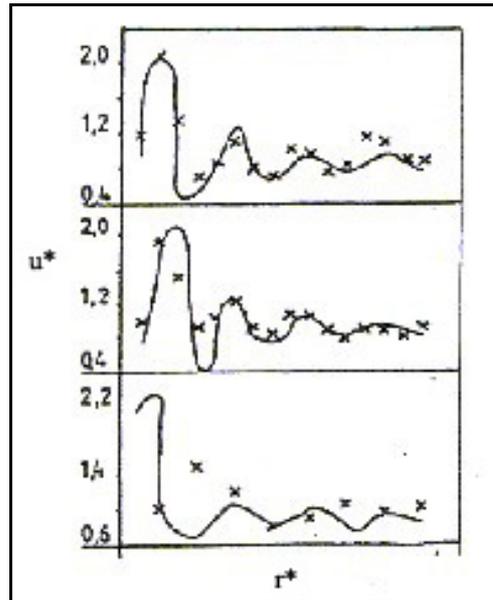


Figura 2.19. Comparação entre dados calculados por modelo e experimentais (ZIÓLKOWSKA e ZIÓLKWOSKI, 1993).

Partindo de uma análise similar à utilizada por ZIÓLKOWSKA e ZIÓLKWOSKI (1993), SUBAGYO *et al.* (1998) também apresentam um modelo para a determinação do perfil de velocidade em leito fixo considerando o interior do leito como sendo formado por duas regiões distintas. A região de maior porosidade (contínua) e a região de porosidade menor (descontínua). Com o modelo para o interior do leito determinado, os autores apresentam uma modelagem para representar o comportamento do escoamento em uma posição mais afastada da saída do leito fixo, onde é possível realizar medidas experimentais.

Na região descontínua, assumida pelos autores como a região de porosidade menor que 0,5, a modelagem é realizada partindo-se da consideração de que não há interação entre os poros por onde escoo o fluido. Ou seja, o escoamento através de um caminho não interfere no escoamento da vizinhança, similarmente a um conjunto de tubos distintos emaranhados, de raio r_e , por onde o fluido escoo. Já no sistema contínuo (porosidade maior que 0,5), assume-se que existe interação entre os poros, ou seja, o escoamento por um canal pode interferir no escoamento pelo canal vizinho.

Para a região descontínua, a modelagem utiliza a definição do raio hidráulico:

$$r_e = 2r_H \quad (2.34)$$

onde

$$r_H = \frac{\varepsilon D_P}{6(1-\varepsilon)} \quad (\text{BIRD } et al., 1960) \quad (2.35)$$

Para descrever o escoamento por tubos que não apresentem seção transversal regular, foi utilizado o conceito de comprimento equivalente, tal que:

$$L_e = \zeta \Delta z \quad (2.36)$$

Quando aplicada ao balanço de energia mecânica para escoamento em um tubo simples, considerando-se ζ constante, fornece:

$$\int_{P_z}^{P_z+\Delta z} \frac{\bar{V}}{g} dp + \frac{1}{2g} \Delta v_z^2 + \Delta z \left(1 + \frac{f \zeta v_z^2}{8gr_H} \right) = 0 \quad (2.37)$$

onde

$$v_z = \frac{u_z}{\varepsilon} \quad (2.38)$$

Tomando-se o limite quando $\Delta z \rightarrow 0$, a solução apresentada para a equação 2.37 é:

$$\omega_2 = \frac{u_{r_{0,5}} - \omega_1(r_{0,5} - R)}{r_{0,5}^2 - R^2} \quad (2.49)$$

A equação 2.46 representa a expressão que descreve o perfil de velocidade na região contínua do leito. A distribuição de porosidade pode ser obtida através da correlação de MULLER (1992), que é apresentada através das equações 2.50 a 2.55.

$$\varepsilon = \varepsilon_b + (1 - \varepsilon_b) J_0 \left(a \hat{r} \right) e^{-b \hat{r}} \quad \text{para } D / D_p \geq 2,02 \quad (2.50)$$

$$a = 7,45 - \frac{3,15}{D / D_p} \quad \text{para } 2,02 \leq D / D_p \leq 13,0 \quad (2.51)$$

$$a = 7,45 - \frac{11,25}{D / D_p} \quad \text{para } D / D_p \geq 13,0 \quad (2.52)$$

$$b = 0,315 - \frac{0,725}{D / D_p} \quad (2.53)$$

$$\hat{r} = \frac{r}{D_p} \quad \text{para } 0 \leq \frac{r}{D_p} \quad (2.54)$$

$$\varepsilon_b = 0,365 + \frac{0,220}{D / D_p} \quad (2.55)$$

Com o modelo para o interior do leito conhecido, é possível determinar o perfil radial de velocidade exatamente no local de saída do leito fixo. De posse deste perfil (na saída do leito), tomado como $u_0(r)$, e obtendo-se equações para o comportamento da velocidade fora do leito, em um tubo vazio, é possível obter o perfil de velocidade a uma determinada distância da saída do leito. Tomando-se esta posição como sendo o local onde foram realizadas as medidas experimentais, torna-se viável uma comparação entre os perfis previstos pelo modelo e o medido no interior do tubo, validando ou não a suposição para o interior do leito.

Para a região fora do leito foi considerado, para efeito de modelagem, fluido Newtoniano, tubo liso, regime estacionário e ausência das componentes radial e angular do vetor velocidade. O balanço de quantidade de movimento para o escoamento em um tubo resulta na equação 2.56:

$$\rho u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} = - \left(\frac{\partial p}{\partial z} + \rho g \right) + \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) \quad (2.56)$$

A dependência radial foi desprezada, necessitando-se das condições de contorno apresentadas a seguir para a solução do equacionamento:

$$z = 0, u_z = u_0 \quad (2.57)$$

$$z = \infty, u_z = u_\infty \quad (2.58)$$

Solucionando-se a equação do balanço, obtém-se a equação para o perfil de velocidade fora do leito, representada pela equação 2.59.

$$\Phi = e^{(-\beta g)} \quad (2.59)$$

onde

$$\Phi = \frac{u_z - u_\infty}{u_0 - u_\infty} \quad (2.60)$$

$$g = \frac{z}{R} \quad (2.61)$$

$$\beta = 2,14 \text{ Re}^{-0,5}, \text{ para } \text{Re} < 2100 \quad (2.62)$$

$$\beta = 0,05, \text{ para } \text{Re} > 2100 \quad (2.63)$$

Para a validação dos resultados do seu trabalho, os autores compararam seu modelo com dados experimentais e com os resultados modelados a partir de BEY e EINGENBERGER (1997). Os resultados são apresentados nas figuras 2.20 e 2.21.

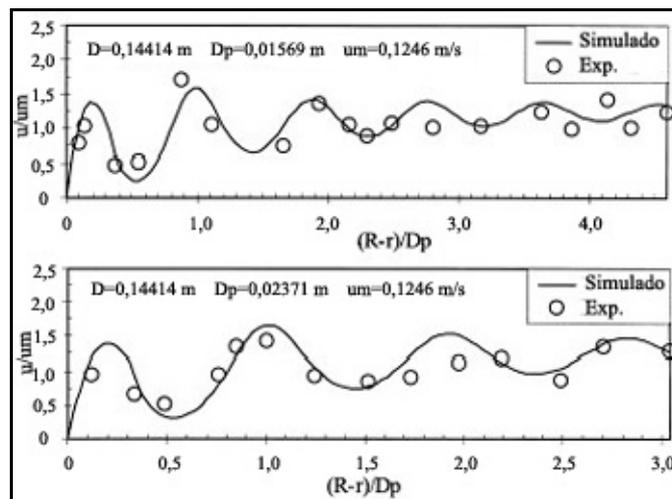


Figura 2.20. Resultados obtidos para medidas a 300mm da saída do leito e apresentados por SUBAGYO *et al.* (1998).

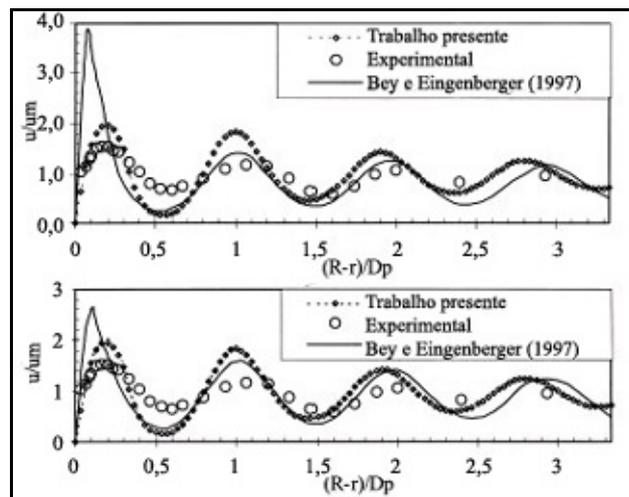


Figura 2.21. Comparação dos resultados obtidos pelo modelo proposto por SUBAGYO *et al.* (1998).

2.2.3. Métodos numéricos aplicados ao escoamento em leitos fixos

Neste item são apresentados trabalhos que utilizam métodos numéricos para a obtenção de perfis de velocidade em leito fixo.

Utilizando a técnica de medida fora do leito, BEY e EINGENBERGER (1997) realizaram um trabalho experimental de medida de perfis de velocidade semelhante ao trabalho de SINGULANI (2001) descrito anteriormente, diferindo deste último no sentido do escoamento, o qual é de cima para baixo. Os autores utilizaram os resultados experimentais para a comparação com seu modelo proposto.

O modelo bi-dimensional apresentado em BEY e EINGENBERGER (1997), contém a equação da continuidade (equação 2.64) e balanços de quantidade de movimento na direção radial e axial (equações 2.65 e 2.66). Estes balanços são compostos pela equação de Ergun e termos da equação de Navier-Stokes, como se segue:

$$0 = \frac{\partial(\varepsilon\rho v_z)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\varepsilon\rho v_r)}{\partial r} \quad (2.64)$$

$$0 = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r\varepsilon \left(\rho v_z v_z - \mu_{\text{eff}} \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) \right\} - \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \varepsilon \left(\rho v_z v_z - \mu_{\text{eff}} \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \right\} - \varepsilon \frac{\partial p}{\partial z} - \varepsilon F_z \quad (2.65)$$

$$0 = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r\varepsilon \left(\rho v_r v_r - \mu_{\text{eff}} \frac{\partial v_r}{\partial r} \right) \right\} - \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \varepsilon \left(\rho v_r v_z - \mu_{\text{eff}} \frac{\partial v_r}{\partial z} \right) \right\} - \varepsilon \frac{\partial p}{\partial r} + \varepsilon F_r - \varepsilon \mu_{\text{eff}} \frac{v_r}{r^2} \quad (2.66)$$

As condições de contorno utilizadas foram:

$$v_r|_{z=0} = 0 \quad (2.67)$$

$$\bar{v}_z = \frac{2}{R^2} \int_0^R v_z \varepsilon r dr \quad (2.68)$$

$$v_r|_{z=0} = 0 \quad (2.69)$$

$$p(r)|_{z=0} = p_0 \quad (2.70)$$

$$v_r|_{r=0} = 0 \quad (2.71)$$

$$\frac{\partial v_z}{\partial r}\bigg|_{r=0} = 0 \quad (2.72)$$

$$v_r|_{r=R} = 0 \quad (2.73)$$

$$v_z|_{r=R} = 0 \quad (2.74)$$

As forças F_z e F_r representam a queda de pressão no leito por unidade de comprimento, calculadas conforme as equações 2.75 e 2.76, a seguir:

$$F_z = 150\mu \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3 D_e^2} u_z - 1,75 \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3 D_e} u_z |u| \quad (2.75)$$

$$F_r = 150\mu \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3 D_e^2} u_r - 1,75 \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3 D_e} u_r |u| \quad (2.76)$$

sendo

$$v_z = \frac{u_z}{\varepsilon} \quad (2.77)$$

$$v_r = \frac{u_r}{\varepsilon} \quad (2.78)$$

$$v = \frac{u}{\varepsilon} \quad (2.79)$$

Assim obtém-se

$$F_z = 150\mu \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^2 D_e^2} v_z - 1,75 \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon D_e} v_z |v| \quad (2.80)$$

$$F_r = 150\mu \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^2 D_e^2} v_r - 1,75 \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon D_e} v_r |v| \quad (2.81)$$

onde

$$D_e = \frac{6V_p}{A_p} \quad (2.82)$$

Para a resolução das equações, os autores discretizaram as equações no domínio espacial tanto na direção radial, como na axial. As equações foram integradas sobre os volumes de controle, assumindo as propriedades do fluido constantes em cada um dos mesmos.

Os resultados apresentados na figura 2.22 comparam os perfis de velocidade obtidos pela modelagem para um leito de esferas, com os dados experimentais. Nesta figura são apresentados resultados modelados utilizando a viscosidade efetiva calculada através da equação 2.83 (linha pontilhada), a viscosidade do fluido (linha contínua) frente aos dados experimentais (pontos). É possível verificar que, a utilização da viscosidade efetiva proporcionou um resultado simulado com um pico de velocidades mais coerente com o experimental.

$$\frac{\mu_{eff}}{\mu} = 1 + \left(7,10^{-6} \frac{D_e}{D_p} + 2,10^{-5} \right) \left(\frac{\rho u_m D_p}{\mu} \right) \quad (2.83)$$

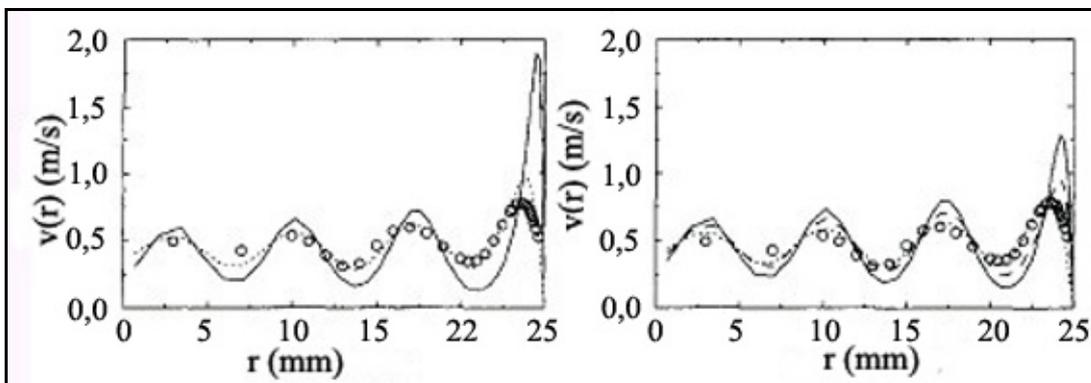


Figura 2.22. Resultados da comparação do modelo de BEY e EINGENBERGER (1993) com seus dados experimentais.

$$Z^* = 0, \quad \Omega(0, R^*) = -0,5\Omega(\Delta Z^*, R^*) - \frac{1,5}{R^*} \left[\frac{\partial^2 \Psi}{\partial R^{*2}}(0, R^*) - \frac{1}{R^*} \frac{\partial \Psi}{\partial R^*}(0, R^*) \right] +$$

$$- \frac{3C_1^2}{R^* \Delta Z^{*2}} [\Psi(\Delta Z^*, R^*) - \Psi(0, R^*)] \quad (2.98)$$

$$R^* = 0, \quad \frac{\partial \Omega}{\partial R^*} = 0 \quad (2.99)$$

$$R^* = 1, \quad \Omega(Z^*, 1) = -0,5\Omega(Z^*, 1 - \Delta R^*) + 3 \frac{\Psi(Z^*, 1) - \Psi(Z^*, 1 - \Delta R^*)}{\Delta R^{*2}(1 - \Delta R^*)} \quad (2.100)$$

A seguir são apresentados alguns resultados obtidos pelo modelo proposto por PAPAGEORGIU E FROMENT (1995).

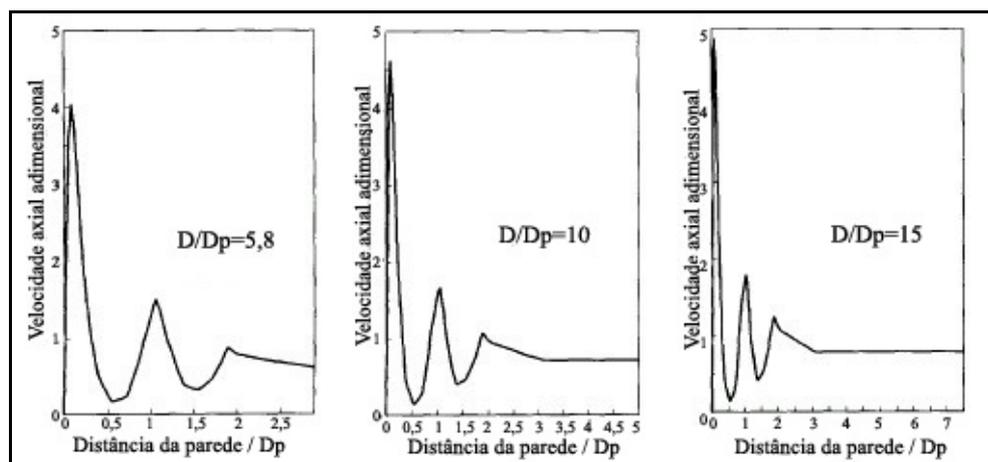


Figura 2.23. Velocidade em função da posição radial segundo o modelo de PAPAGEORGIU E FROMENT (1995).

Baseando-se na fluidodinâmica computacional (CFD – *Computational Fluid Dynamics*), FREUND et al. (2003) utilizaram métodos numéricos para simular o escoamento de um fluido monofásico a partir das propriedades do material e da geometria do sistema, sem a necessidade de utilização de dados empíricos. Os autores implementaram o método de Monte Carlo para representar o processo de

empacotamento do leito, baseando-se no algoritmo de SOPPE (1990) e com resolução em CFD. O método para a obtenção da simulação foi o método de Boltzmann. Este método é uma forma direta de simulação, onde apenas as propriedades físicas do material são consideradas, não havendo a necessidade de dados médios ou empíricos.

Estudos detalhados e a análise de inúmeros leitos simulados demonstram que a porosidade média em leitos empacotados aleatoriamente pode ser prevista satisfatoriamente através da simulação do método de Monte Carlo, para relações de D/d_p entre 1,1 e 20,3 (FREUND *et al.*, 2003).

Os resultados obtidos por meio da modelagem foram comparados aos resultados experimentais de KRISCHKE (2001). KRISCHKE (2001) relata uma análise experimental do escoamento em leito fixo utilizando a técnica de Anemometria Doppler a laser. Os resultados experimentais e os simulados podem ser verificados nas figuras 2.24 e 2.25.

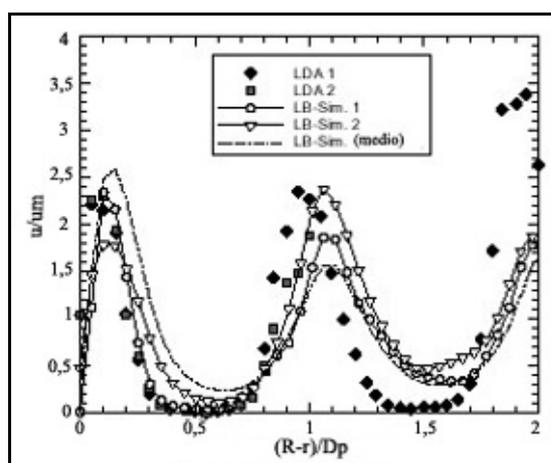


Figura 2.24. Perfil simulado de velocidade radial comparado com os dados de KRISCHKE (2001) para $D/D_p = 4$ e $Re_p = 50$ (FREUND *et al.*, 2003).

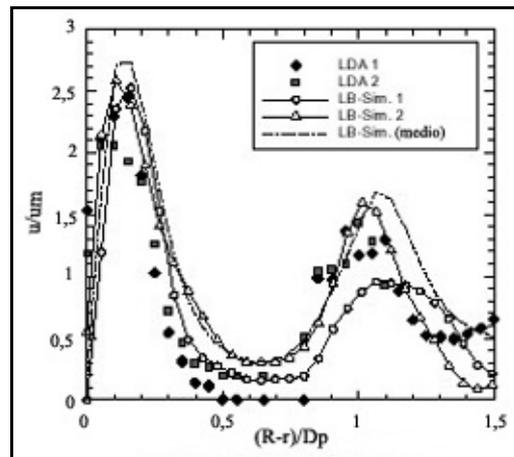


Figura 2.25. Perfil simulado de velocidade radial comparado com os dados de KRISCHKE (2001) para $D/Dp = 6,15$ e $Re_p = 50$ (FREUND *et al.*, 2003).

Na mesma linha de FREUND *et al.* (2003), ZEISER *et al.* (2001) utilizaram-se de um programa denominado “BEST”, desenvolvido no “Institute of Fluid Dynamics” da Universidade de Erlangen-Nuremberg para obter perfis de velocidade em leito fixo. O programa utilizado tem base no método de Boltzmann (LBA – *Lattice Boltzmann Automata*), com a estrutura da malha obtida também através do método de Monte Carlo. Destaca-se que o método utilizado pelo programa é o mesmo de FREUND *et al.* (2003).

O método LBA é eficiente na descrição do escoamento em geometria complexa, como por exemplo, os espaços vazios do leito fixo (ZEISER *et al.*, 2001). Este método é uma aproximação alternativa ao método dos volumes finitos, elementos finitos e diferenças finitas. Para realizar simulações LBA em leito fixo, é essencial discretizar os domínios no espaço com uma malha computacional adequada. Para gerar sinteticamente esta malha, os autores utilizaram o método de Monte Carlo aplicado ao empacotamento aleatório no tubo. As estruturas geradas pelo método de Monte Carlo têm apresentado boa aproximação em relação a medidas experimentais (ZEISER *et al.*, 2001).

O perfil de porosidade gerado pelo modelo e comparado aos resultados experimentais obtidos por BEY e EINGENBERGER (1997) é apresentado na figura 2.26. A distribuição de velocidade radial é apresentada na figura 2.27, com adimensionalização da velocidade realizada em relação à velocidade em um mesmo ponto para um tubo vazio. Verifica-se que os resultados obtidos pela simulação são uma boa aproximação para medidas experimentais (ZEISER *et al.*, 2001). O comportamento do perfil apresenta as oscilações características de perfis de porosidade para leitos empacotados.

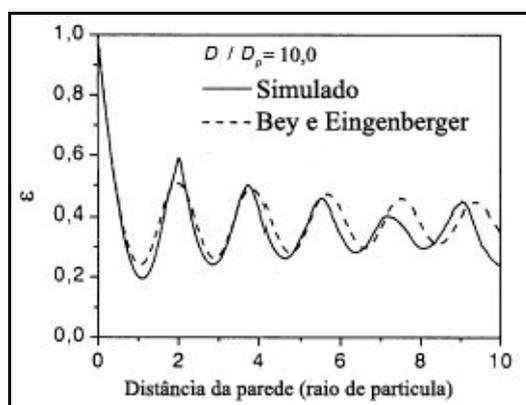


Figura 2.26. Distribuição de porosidade para um leito preenchido com esferas de razão $D/D_p = 10,0$, segundo o método de Boltzmann (ZEISER *et al.*, 2001).

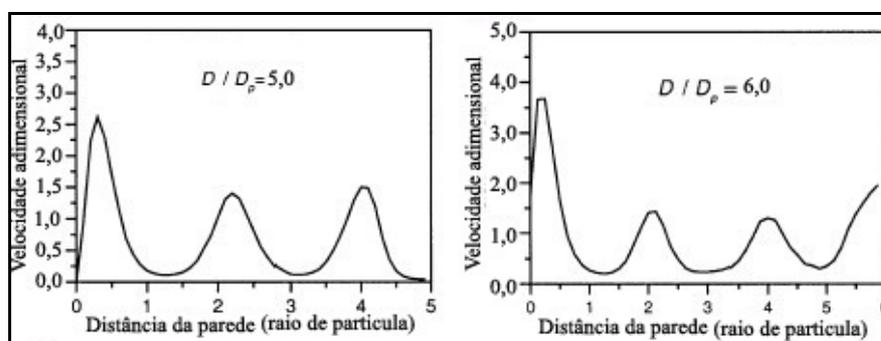


Figura 2.27. Distribuição radial de velocidade para dois diferentes leitos. (ZEISER *et al.*, 2001).

Em contrapartida aos autores anteriormente citados que direta ou indiretamente utilizaram o método de Monte Carlo, SCHINITZLEIN (2001) desenvolveu um algoritmo próprio, implementando-o para obter a distribuição de partículas do leito. Com base nesta distribuição, o autor obteve perfis de porosidade bi-dimensional e velocidade para um escoamento em leito fixo. Os resultados da simulação foram comparados a modelos e a dados experimentais já conhecidos.

O perfil de porosidade obtido com a implementação deste algoritmo é apresentado na figura 2.28, em comparação com outros dois algoritmos de descrição da distribuição de partículas. Os algoritmos citados para contraste são os algoritmos denominados “Random Settlement of Spheres” (REYES e IGLESIAS, 1991) e “Placement of Single Spheres” (SPEDDING e SPENCER, 1995).

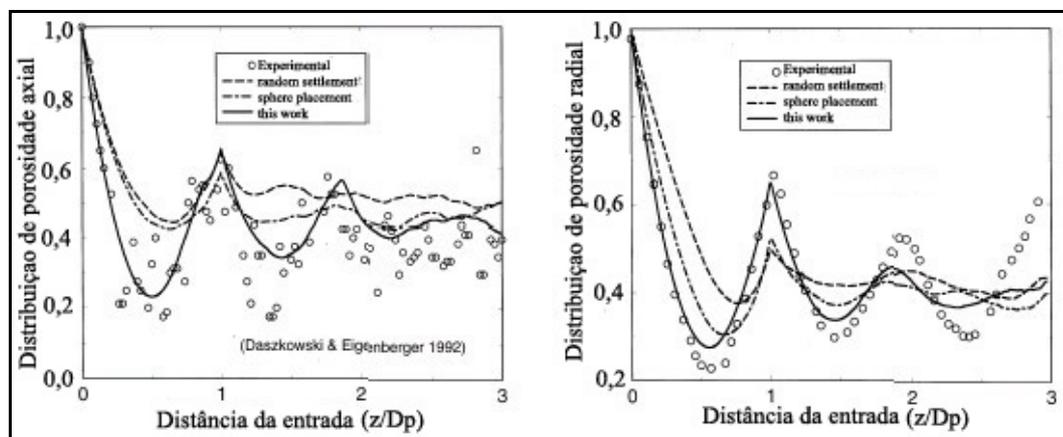


Figura 2.28. Perfis de porosidade obtidos a partir do algoritmo desenvolvido por SCHINITZLEIN (2001).

Observando-se os resultados para a porosidade, o autor verificou que o método utilizado pelo mesmo apresenta melhores resultados em comparação aos demais. A

seguir é apresentada a forma de obtenção das equações utilizadas na geração da distribuição da porosidade.

A partir da utilização de um sistema de tamanho e posição de partículas conhecido para obter a porosidade local em termos da posição, para um volume de controle ΔV_c :

$$\bar{\varepsilon}_v(z,r) = \frac{1}{\Delta V_c} \int_{V_c} \varepsilon(z,r,\theta) dV_c \quad (2.101)$$

A distribuição de velocidade bi-dimensional foi obtida através da resolução das equações de balanço de quantidade de movimento (equações 2.103 e 2.104) com a equação da continuidade (equação 2.102). A variação de energia é relacionada com uma força externa $H(\varepsilon)$, nas equações de balanço:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho v_z \bar{\varepsilon}_v(z,r)) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho v_r \bar{\varepsilon}_v(z,r)) = 0 \quad (2.102)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} (\rho v_z v_z \bar{\varepsilon}_v(z,r)) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho v_r r v_z \bar{\varepsilon}_v(z,r)) &= \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \bar{\varepsilon}_v(z,r) \mu \frac{\partial v_z}{\partial z} \right\} + \\ + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ \bar{\varepsilon}_v(z,r) \mu r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right\} &- \frac{\partial p}{\partial z} + H(\bar{\varepsilon}_v(z,r)) v_z \end{aligned} \quad (2.103)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} (\rho v_z v_r \bar{\varepsilon}_v(z,r)) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho v_r r v_r \bar{\varepsilon}_v(z,r)) &= \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \bar{\varepsilon}_v(z,r) \mu \frac{\partial v_r}{\partial z} \right\} + \\ + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ \bar{\varepsilon}_v(z,r) \mu r \frac{\partial v_r}{\partial r} \right\} &- \frac{\partial p}{\partial r} + H(\bar{\varepsilon}_v(z,r)) v_r \end{aligned} \quad (2.104)$$

onde

$$H(\bar{\varepsilon}_v(z,r)) = 150 \frac{(1 - \bar{\varepsilon}_v(z,r))^2}{\bar{\varepsilon}_v(z,r)^3 D_p^2} \mu + 1,75 \frac{(1 - \bar{\varepsilon}_v(z,r))}{\bar{\varepsilon}_v(z,r)^3 D_p^2} \rho \sqrt{v_z^2 + v_r^2} \quad (2.105)$$

As condições de contorno aplicadas para a solução das equações são: condição de simetria na direção axial do leito, a componente axial da velocidade na parede é nula,

perfil turbulento na entrada do leito e na saída uma condição de escoamento desenvolvido é assumida.

Para resolver as equações diferenciais parciais foi utilizada a técnica de volumes finitos. A distribuição de porosidade e os vetores de velocidade obtidos a partir da resolução do modelo são apresentados na figura 2.29.

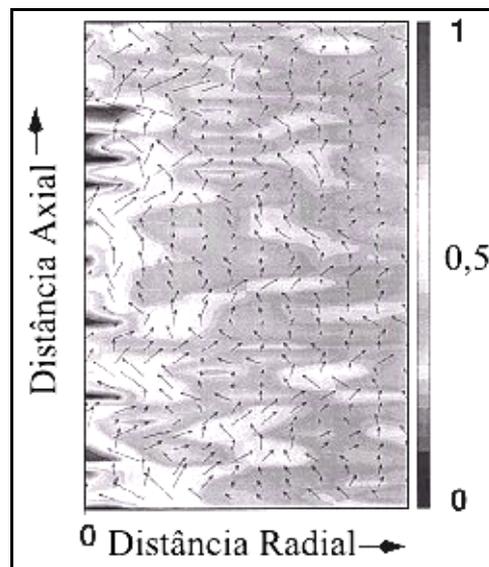


Figura 2.29. Perfil de porosidade e vetores de velocidade para a região próxima ao eixo do leito (SCHINITZLEIN, 2001).

Na figura 2.29, as regiões mais claras representam a região de menor porosidade, enquanto as mais escuras, próxima à parede, maior porosidade. As setas indicam a magnitude e a direção do vetor velocidade intersticial.

Apenas no intuito de comparar, sem propor um novo modelo, MUELLER (1997) analisou a coerência entre quatro modelos distintos para a obtenção de um perfil de porosidade em um leito fixo. Estes modelos estudados no trabalho são modelos

seqüenciais, e determinam as coordenadas em que as partículas do leito devem estar posicionadas, obtendo-se a estrutura do leito.

O autor analisou em seu trabalho os modelos denominados de: *Modelo de Camada*, *Modelo Alternado*, *Modelo de Bennett* e *Modelo Percentual*. Estes modelos foram testados em leitos com $D/D_p > 3$. Os resultados obtidos pelo autor podem ser visualizados na figura 2.30.

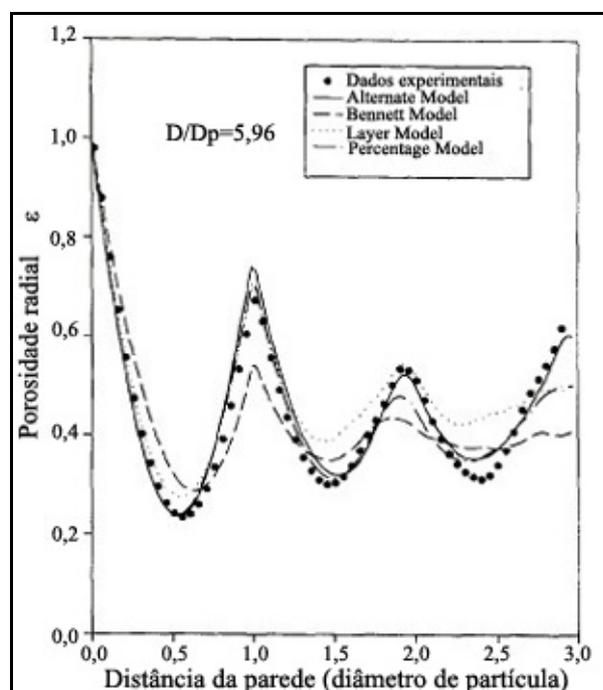


Figura 2.30. Resultados da comparação de modelos para a distribuição de porosidade em um leito fixo (MUELLER, 1997).

O trabalho de KLERK (2003) apresenta um estudo sobre modelos mais recentes que representem o perfil de porosidade em sistemas de leito fixo, propondo um “modelo modificado” com base naqueles investigados. Ao longo de seu trabalho, são citados e brevemente analisados diversos equacionamentos, tanto para porosidade como para o perfil de velocidade. Algumas técnicas experimentais consideradas mais relevantes pelo

autor, utilizadas anteriormente ao seu trabalho, também são discutidas. Os resultados experimentais utilizados neste trabalho podem ser visualizadas na figura 2.31.

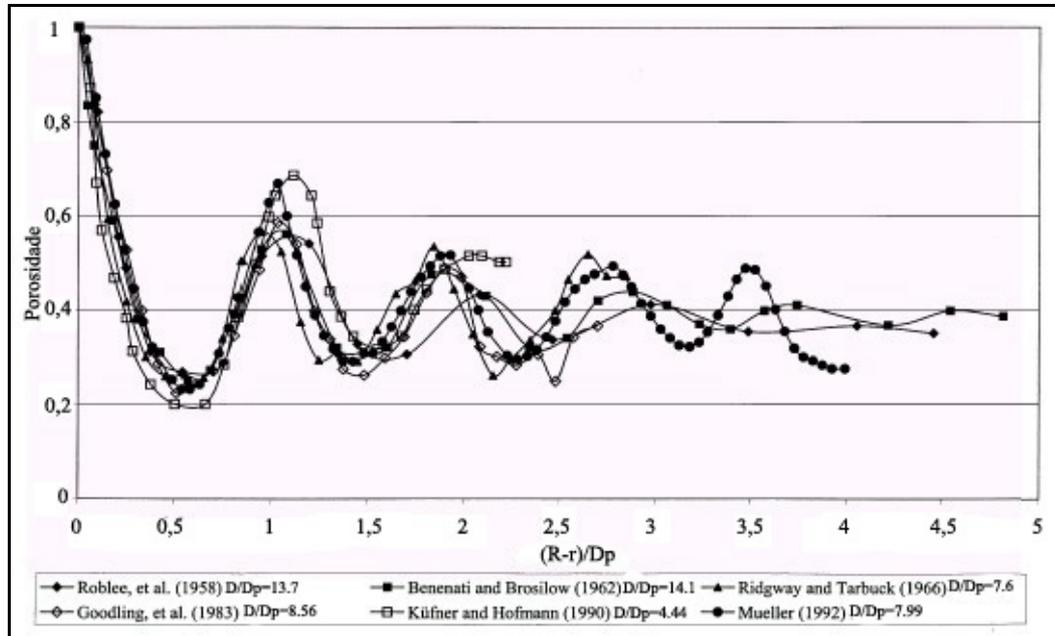


Figura 2.31. Perfis de porosidade obtidos em diversos trabalhos selecionados por KLERK (2003).

Para obter o modelo de porosidade em leito fixo, o autor dividiu o leito em duas regiões, propondo uma equação parabólica para descrever o comportamento na região central do leito e uma função de decaimento exponencial para a região da parede. Utilizando-se dos resultados experimentais da literatura, e realizando uma regressão, determinou as constantes do modelo. Através deste procedimento, o autor propôs as seguintes equações para a porosidade:

$$\varepsilon(r) = 2,14r^{*2} - 2,53r^{*} + 1; \quad r^{*} \leq 0,637 \quad (2.106)$$

$$\varepsilon(r) = \varepsilon_b + 0,29 \exp(-0,6r^{*}) \cdot [\cos(2,3\pi(r^{*} - 0,16))] + 0,15 \exp(-0,9r^{*}); \quad r^{*} > 0,637 \quad (2.107)$$

onde

$$r^* = \frac{(R - r)}{D} \quad (2.108)$$

O modelo apresentado pelo autor possui a vantagem de ser um modelo muito simples, embora de aplicação limitada, já que foi obtido baseando-se em trabalhos encontrados na literatura que possuem, por sua vez, condições e faixas de aplicabilidade nas quais suas respostas são representativas.

Apesar de algumas limitações, o modelo de KLERK (2003) demonstra ser um modelo de boa representação na faixa em que é válido, como é possível verificar através da tabela 2.1. Nesta tabela, s representa o desvio padrão entre modelos e x o valor médio. É possível observar que o modelo proposto pelo autor (na tabela representada pela “eq. 3”) apresenta valores médios e desvio padrão coerentes com os demais modelos.

Tabela 2.1. Comparação entre diversos modelos para o perfil de porosidade selecionados por KLERK (2003).

Fonte dos dados experimentais	D/d	Erro estimado (%)									
		Martin (1978)		Cohen et al. (1981)		Küfner et al. (1990)		Mueller (1992)		Eq. 3	
		x	s	x	s	x	s	x	s	x	s
Roblee et al. (1958)	13,7	13	10	20	17	21	28	14	9	12	10
	13,7	13	11	22	18	21	31	11	10	11	9
Benenati and Brosilow (1962)	2,61	19	15	25	17	32	33	19	13	11	10
	5,6	12	6	19	10	20	27	8	7	6	5
	14,1	10	8	17	12	15	22	11	9	6	5
	20,3	4	5	10	7	21	23	14	12	12	12
Ridgway and Tarbuck (1966)	7,6	11	8	15	10	28	26	15	12	13	10
	12,7	8	6	8	7	21	21	14	10	14	12
	15,2	10	6	9	8	19	22	20	16	14	12
Goodling et al. (1983)	7,35	14	8	20	11	26	26	11	8	9	7
	8,56	16	12	24	17	24	30	14	9	11	9
	10,7	14	11	21	15	22	23	11	10	10	9
Küfner and Hofmann (1990)	4,44	23	17	28	19	26	23	21	22	21	12
Mueller (1992)	2,02	20	11	31	16	45	36	10	6	20	9
	3,96	20	13	27	15	29	31	13	10	8	11
	5,96	17	11	24	14	26	29	9	8	8	9
	7,99	13	8	19	10	21	22	11	10	9	7
Media		14	10	20	13	25	27	13	11	11	9

As características do escoamento em leito fixo, conforme apresentado, já foram exaustivamente discutidas na literatura. Mesmo assim ainda continuam sendo

investigadas, devido à falta de consenso sobre elas. A medida do perfil de velocidades fora do leito é a forma mais utilizada de estimá-las dentro do leito.

CAPÍTULO 3

A DINÂMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL E O MÉTODO SOLA

Neste capítulo é apresentada uma abordagem simplificada da *Dinâmica de Fluidos Computacional* e do *Método Sola*, no intuito de esclarecer a forma de tratamento do problema e as vantagens do tratamento numérico escolhido.

3.1. DINÂMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (DFC)

O estudo do movimento de fluidos vem sendo realizado a muitos séculos, partindo-se de tratamentos experimentais muito anteriormente a tratamentos matemáticos. O tratamento matemático do comportamento dos fluidos só ganhou força a partir do século XIX, com as equações de Navier-Stokes. Soluções analíticas das equações de Navier-Stokes só foram determinadas para alguns poucos casos, devido a estas equações apresentarem a forma de equações diferenciais parciais (EDPs) não lineares e a teoria desta classe matemática de equações ainda não apresentar desenvolvimento suficiente para possibilitar a obtenção de soluções analíticas que, representem regiões arbitrárias e condições de contorno gerais (FORTUNA, 2000).

Devido ao fato de os tratamentos analíticos não apresentarem aplicação satisfatória em alguns casos, e com o advento do computador digital a partir da década de 50, surgiu a alternativa de obter soluções numéricas para as equações de Navier-Stokes utilizando-se de técnicas computacionais. Problemas reais de engenharia normalmente requerem o tratamento computacional, pois, muitas vezes, essa é a forma mais prática, ou a única, de se obter informações sobre o escoamento (FORTUNA,

2000). A *Dinâmica de Fluidos Computacional* (DFC) é a análise de sistemas que envolvem escoamento de fluidos, transferência de calor e fenômenos associados, como reações químicas, através de simulação computacional. A técnica é muito eficiente e abrange uma grande área de aplicações industriais e não-industriais (VERSTEEG E MALASAKERA, 1995).

Com relação à forma de abordagem de um problema físico e as características pertinentes a ela, a tabela 3.1 e a figura 3.1 apresentam informações gerais indicando o tratamento possível para algum determinado problema, particularmente destacando os métodos numéricos neste conjunto.

Tabela 3.1. Comparação entre as três formas de tratamento na solução de um problema (FORTUNA, 2000).

<i>Técnica</i>	<i>Vantagens</i>	<i>Desvantagens</i>
<i>Experimental</i>	<ul style="list-style-type: none"> • Mais realista 	<ul style="list-style-type: none"> • Equipamento exigido • Problemas de escala • Dificuldades de medição • Custo operacional
<i>Analítica</i>	<ul style="list-style-type: none"> • Mais geral • Fórmula fechada 	<ul style="list-style-type: none"> • Restrita a geometrias e processos físicos simples • Geralmente restrita a problemas lineares
<i>Numérica</i>	<ul style="list-style-type: none"> • Não há restrição à linearidade • Geometrias e processos complexos • Evolução temporal do processo 	<ul style="list-style-type: none"> • Erros de truncamento • Prescrição das condições de contorno apropriadas • Custos computacionais

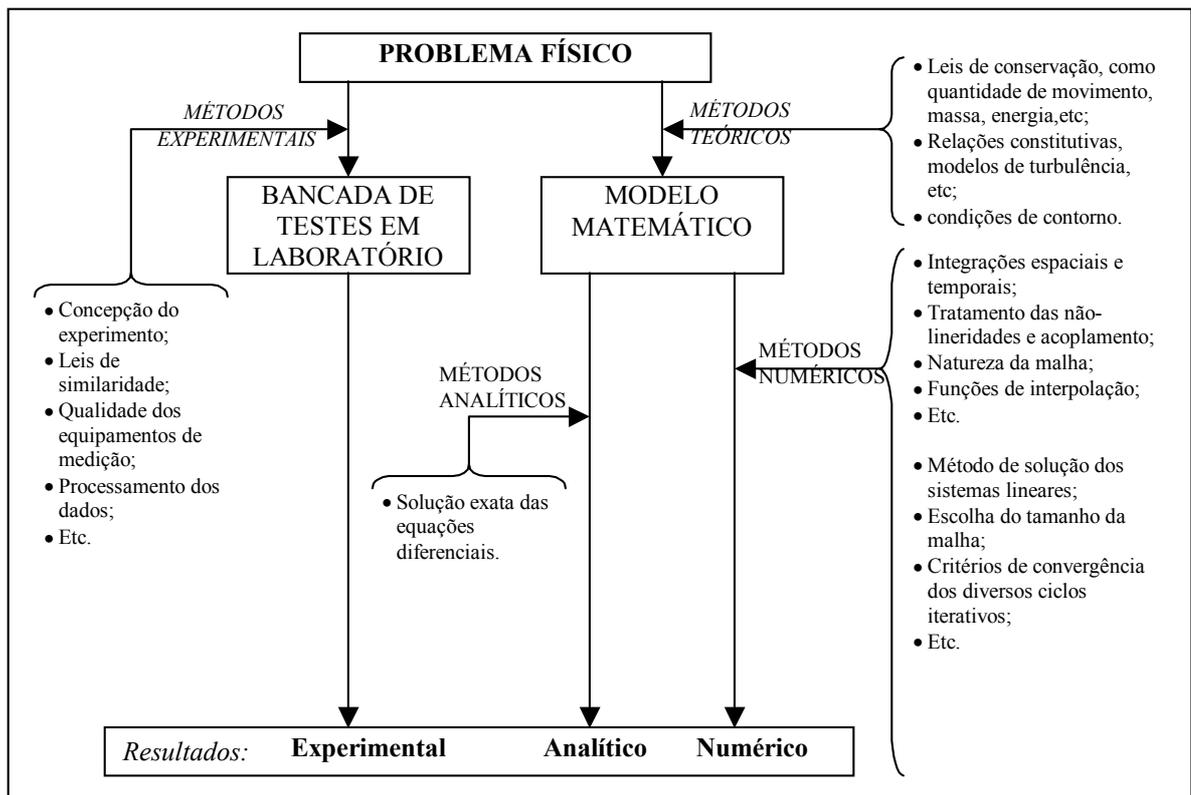


Figura 3.1. Quadro apresentando os métodos utilizados para a solução de um problema (MALISKA, 1995).

A dinâmica de fluidos computacional consiste basicamente do estudo de análises numéricas em sistemas de fluidos implementadas em rotinas computacionais. Existem no mercado mundial diversos programas baseados em DFC (*Dinâmica de Fluidos Computacional*), que simulam perfis de escoamento para os mais diversos sistemas.

Em muitos casos, a DFC permite substituir as técnicas experimentais no estudo de um fenômeno de escoamento de fluidos. Utilizando-se simulações computacionais, torna-se possível acelerar o desenvolvimento de um projeto, devido à facilidade e rapidez com que consegue-se alterar parâmetros e características do sistema, obtendo-se respostas rápidas.

3.2. MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

O Método dos Volumes Finitos foi inicialmente introduzido no campo da fluidodinâmica para a resolução numérica de equações bidimensionais dependentes do tempo, sendo logo depois aplicado à solução de escoamentos tridimensionais. A denominação do método é devido ao fato de que as formulações integrais das leis de conservação são discretizadas diretamente no espaço físico.

A solução é obtida, pelo método dos volumes finitos, a partir da integração da equação que representa o sistema em um “volume” do espaço no qual ela é válida. A partir desta integração para todos os “volumes” da malha, obtém-se um conjunto de equações lineares ou não, que resolvidas, apresentarão a solução do sistema.

Este método possui a vantagem de possibilitar uma malha arbitrária, onde muitas opções são abertas para a definição do volume de controle representativo às leis de conservação aplicadas. A possibilidade de modificação da superfície e localização dos volumes de controle de uma determinada malha, bem como a precisão na avaliação dos fluxos através dos volumes, fornece grande flexibilidade ao método.

Existem duas maneiras de se obter as equações aproximadas pelo método dos volumes finitos. A primeira é a realização de balanços da propriedade em questão nos volumes elementares, ou volumes finitos, e a segunda é, partindo-se da equação diferencial na forma conservativa, integrá-la sobre o volume elementar, no espaço e no tempo (MALISKA, 1995). Os processos são equivalentes, como pode ser verificado no exemplo que é apresentado a seguir.

Realizando-se um balanço de massa no elemento representado pela figura 3.2, para regime permanente:

$$\rho u_x \Delta y|_e - \rho u_x \Delta y|_w + \rho u_y \Delta x|_n - \rho u_y \Delta x|_s = 0 \quad (3.1)$$

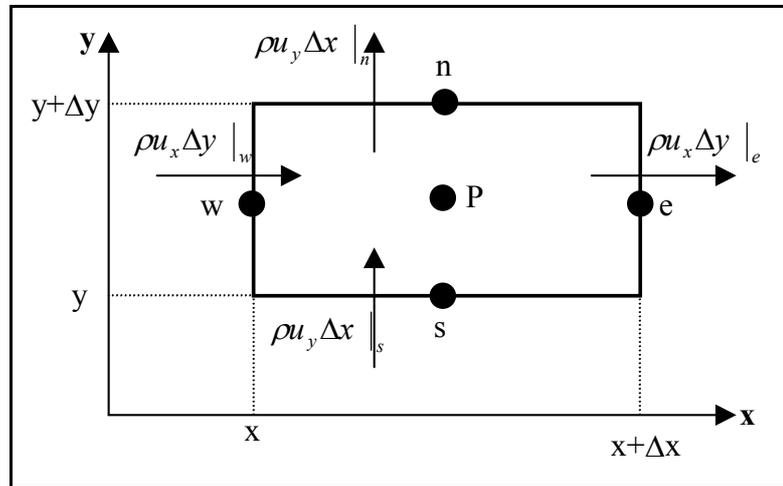


Figura 3.2. Balanço de massa no volume finito representativo de um problema (MALISKA, 1995).

Os sub-índices e (*east*), w (*west*), s (*south*), n (*north*) representam os pontos cardeais utilizados para a identificação das faces do volume de controle. Dividindo-se a equação anterior por $\Delta x \Delta y$ obtém-se:

$$\frac{\rho u_x|_e - \rho u_x|_w}{\Delta x} + \frac{\rho u_y|_n - \rho u_y|_s}{\Delta y} = 0 \quad (3.2)$$

Aplicando-se o limite à equação 3.2, encontra-se a forma diferencial conservativa da equação de conservação da massa.

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho u_y) = 0 \quad (3.3)$$

Realizando-se a integração da equação 3.3 no volume elementar representado pela figura 3.2, tem-se:

$$\int_w^e \int_s^n \left[\frac{\partial}{\partial x} (\rho u_x) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho u_y) \right] dx dy = 0 \quad (3.4)$$

$$\int_s^n [\rho u_x|_e - \rho u_x|_w] dy + \int_w^e [\rho u_y|_n - \rho u_y|_s] dx = 0 \quad (3.5)$$

Considerando que o fluxo de massa avaliado no meio da face do volume de controle representa a média da variação da face, pode-se escrever

$$\rho u_x \Delta y|_e - \rho u_x \Delta y|_w + \rho u_y \Delta x|_n - \rho u_y \Delta x|_s = 0 \quad (3.6)$$

Que é exatamente a equação 3.1 anterior (MALISKA, 1995).

A aproximação em volumes finitos é particularmente útil quando a malha não é uniforme, principalmente em duas e três dimensões. As EDPs são integradas diretamente sobre a malha, o que facilita a obtenção das equações de diferenças finitas e sua posterior solução numérica (FORTUNA, 2000). Para finalizar, é possível observar, que em determinados casos, o método dos volumes finitos nada mais é do que uma técnica diferenciada de obtenção das equações de diferenças finitas.

3.3. O MÉTODO MAC E O MÉTODO SOLA

Escoamentos incompressíveis modelados através das equações de Navier-Stokes necessitam da solução de uma equação de Poisson para a pressão a cada incremento no tempo. Em geral, as principais dificuldades na solução deste tipo de sistema são:

- A restrição global $\nabla \cdot u = 0$ (equação da continuidade) deve ser satisfeita a cada passo de tempo, gerando a necessidade da solução de um conjunto de equações acopladas para a determinação do campo de velocidades em $n+1$;

- Não há condições de fronteira físicas para a pressão; deve-se utilizar condições de fronteira apropriadas à solução numérica da equação de Poisson para a pressão.

A equação de Poisson para a pressão apresenta peculiaridades na sua discretização, conforme é apresentado em FORTUNA (2000), exigindo alguns cuidados especiais para evitar a geração de um campo de pressões oscilatório. Este campo oscilatório, apesar de fisicamente incorreto, pode ser “visto” pelas equações discretizadas como um campo uniforme, gerando soluções fisicamente incoerentes.

O método MAC (*Marker and Cell*) foi inicialmente proposto para a solução de problemas de escoamento em superfícies livres, e tornou-se um dos esquemas explícitos mais populares para a solução das equações de Navier-Stokes. Este método pode ser utilizado para escoamentos transientes bem como para estacionários, e é comumente implementado em uma malha deslocada. No MAC, a discretização dos termos que envolvem velocidade é realizada no instante n enquanto que o termo envolvendo pressão é discretizado em $n+1$, de forma que após o cálculo das velocidades em $n+1$, todas as variáveis do escoamento são avançadas no tempo.

O método Sola é conceitualmente semelhante ao método MAC, diferindo basicamente na forma de resolução da equação de Poisson, onde no método Sola a solução desta equação é obtida a partir de um procedimento iterativo, gerando uma correção para a pressão δp . Este processo iterativo permite:

- aumentar a pressão na célula em caso de fluxo mássico para dentro da mesma ou;
- diminuir a pressão na célula em caso de fluxo mássico para fora da mesma.

Para obter o sentido do fluxo de massa, o cálculo da Dilatação (D) é realizado, que em coordenadas cartesianas torna-se:

$$D_{i,j} = (\nabla \cdot \mathbf{u}) = \left. \frac{\partial u_x}{\partial x} \right|_{i,j} + \left. \frac{\partial u_y}{\partial y} \right|_{i,j} \quad (3.7)$$

Um esquema do elemento de volume pode ser visualizado na figura 3.3.

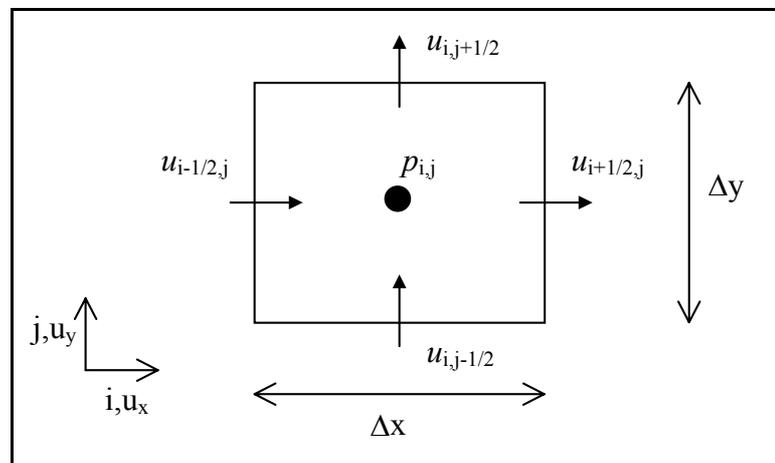


Figura 3.3. Esquema de um elemento de volume típico, bi-dimensional, em coordenadas retangulares.

Quando $\nabla \cdot \mathbf{u} > 0$, o fluxo de massa é para fora do elemento de fluido. Portanto, a pressão no interior da célula deve ser diminuída. Caso $\nabla \cdot \mathbf{u} < 0$, o fluxo é para dentro do elemento, necessitando-se aumentar a pressão no mesmo. Como o ajuste da pressão em um dos elementos de fluido influencia os elementos vizinhos, já que a diferença de pressão entre eles é a força motriz do escoamento, o procedimento torna-se necessariamente iterativo, até que a dilatação de cada uma das células esteja abaixo de um limite pré-determinado.

Para as versões discretas do equacionamento no método Sola, tem-se:

$$u_{x,i+1/2,j}^{n+1} = Fsola_{i+1/2,j}^n - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{P_{i+1,j}^n - P_{i,j}^n}{\Delta x} \quad (3.8)$$

$$u_{y,i,j+1/2}^{n+1} =Gsola_{i,j+1/2}^n - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{P_{i,j+1}^n - P_{i,j}^n}{\Delta y} \quad (3.9)$$

onde

$$Fsola_{i+1/2,j}^n = u_{x,i+1/2,j}^n + \Delta t \left[-CONV_{i+1/2,j}^n + VISC_{i+1/2,j}^n \right] \quad (3.10)$$

$$Gsola_{i,j+1/2}^n = u_{y,i,j+1/2}^n + \Delta t \left[-CONV_{i,j+1/2}^n + VISC_{i,j+1/2}^n \right] \quad (3.11)$$

Os termos indicados por CONV e VISC representam os termos convectivos e viscosos, respectivamente, das equações de Navier-Stokes. A discretização destes termos é dependente do esquema numérico escolhido.

Aplicando-se o equacionamento anterior a uma célula, nas quatro faces, e relacionando-se a variação na pressão desta célula (δp) com uma variação na velocidade (δu) obtém-se:

$$\partial u_{x,i+1/2,j}^{(k)} = \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\delta p_{i,j}}{\Delta x} \quad (3.12)$$

$$\partial u_{x,i-1/2,j}^{(k)} = -\frac{\Delta t}{\rho} \frac{\delta p_{i,j}}{\Delta x} \quad (3.13)$$

$$\partial u_{x,i,j+1/2}^{(k)} = \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\delta p_{i,j}}{\Delta y} \quad (3.14)$$

$$\partial u_{x,i,j-1/2}^{(k)} = -\frac{\Delta t}{\rho} \frac{\delta p_{i,j}}{\Delta y} \quad (3.15)$$

onde k representa o nível da iteração dentro do processo iterativo para a pressão, processo este realizado para que seja satisfeita a equação da continuidade.

Impondo que as velocidades corrigidas em $n+1$ tornem a dilatação $D_{i,j}^{n+1,(k+1)}$ igual a zero, obtém-se:

$$\delta p_{i,j}^{(k)} = \frac{-\eta D_{i,j}^{n+1,(k)}}{2 \frac{\Delta t}{\rho} \left(\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} \right)} \quad (3.16)$$

onde η é um fator de relaxação, com $1 < \eta < 2$.

A atualização da velocidade nas faces deve respeitar a direção escolhida para percorrer o domínio em questão. Cada uma das velocidades, exceto nas fronteiras, é corrigida duas vezes. Portanto, define-se um nível de iteração para onde será conduzida a primeira parte desta iteração, $(k+1/2)$. Somente após a segunda parte da iteração, a variável é passada para o nível $(k+1)$. As correções seguem o equacionamento a seguir:

$$u_{x,i+1/2,j}^{n+1,(k+1/2)} = u_{x,i+1/2,j}^{n+1,(k)} + \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\delta p_{i,j}^{(k)}}{\Delta x} \quad (3.17)$$

$$u_{x,i-1/2,j}^{n+1,(k+1)} = u_{x,i-1/2,j}^{n+1,(k+1/2)} - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\delta p_{i,j}^{(k)}}{\Delta x} \quad (3.18)$$

$$u_{x,i,j+1/2}^{n+1,(k+1/2)} = u_{x,i,j+1/2}^{n+1,(k)} + \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\delta p_{i,j}^{(k)}}{\Delta y} \quad (3.19)$$

$$u_{x,i,j-1/2}^{n+1,(k+1)} = u_{x,i,j-1/2}^{n+1,(k+1/2)} - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\delta p_{i,j}^{(k)}}{\Delta y} \quad (3.20)$$

Condições de estabilidade para métodos que tratam EDP's não lineares são difíceis de serem obtidas analiticamente. Por isso, as equações são linearizadas e critérios de estabilidade aplicáveis a estas equações são determinados. Estes critérios representam apenas condições necessárias para a estabilidade das equações não lineares originais, mas não, obrigatoriamente, suficientes (FORTUNA, 2000):

1. O fluido não pode percorrer uma distância maior que um comprimento de célula a cada intervalo de tempo. O valor de Δt deve ser tal que

$$\Delta t_1 < \min \left(\frac{\Delta x}{|u_x|_{\max}}, \frac{\Delta y}{|u_y|_{\max}} \right) \quad (3.21)$$

2. O termo difusivo das equações de movimento exige que

$$\Delta t_2 < \frac{1}{2\nu} \left(\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} \right)^{-1} \quad (3.22)$$

O valor de Δt deve satisfazer, simultaneamente, as duas condições anteriores:

$$\Delta t = \kappa \min(\Delta t_1, \Delta t_2) \quad (3.23)$$

onde κ é um fator de segurança, normalmente escolhido entre 0,2 e 0,6.

O procedimento iterativo do método Sola pode ser resumido nos passos a seguir (FORTUNA, 2000):

1. No instante $t=t_0$, iniciam-se as pressões com o valor zero e constrói-se um campo de velocidades que satisfaça as condições:

$$\nabla u = 0 \text{ e } \int_S u \cdot \hat{n} dS = 0 \quad (3.24)$$

2. A partir dos campos de velocidade e pressão no instante n , calcula-se os valores do campo de velocidades no instante $n+1$, nas faces, para todos os pontos da malha.
3. Para cada uma das células da malha, (i, j) :
 - a) Calcula-se a correção da pressão utilizando-se a equação 3.16;
 - b) Determina-se $p_{i,j}^{n+1,(k+1)}$ a partir da equação

$$p_{i,j}^{n+1,(k+1)} = p_{i,j}^{n+1,(k)} + \delta p^{n+1,(k)} \quad (3.25)$$

c) Corrigem-se as velocidades nas faces por meio das equações 3.17 a 3.20;

4. Repete-se o passo (3) até que o critério de convergência seja satisfeito:

$$\max |D_{i,j}^{(k)}| \leq \text{erro} \quad (3.26)$$

CAPÍTULO 4

METODOLOGIA

Neste capítulo são abordados o procedimento utilizado para a modelagem do sistema e a forma usada no tratamento do problema numérico e sua solução. São também apresentadas as principais características da rotina numérica desenvolvida e algumas peculiaridades em relação à sua implementação.

Conforme já apresentado anteriormente, o procedimento comumente utilizado para a análise experimental do perfil de velocidades no interior do leito fixo é medi-lo fora do leito, na região de saída do mesmo. Considera-se para tanto, que o comportamento do escoamento verificado na interface não sofre modificações significativas até o ponto onde a medida experimental é realizada. Um esquema do sistema pode ser visualizado na figura 4.1. Entretanto, esta forma de medida é questionável, pois existe a influência do tubo vazio sobre o escoamento, a partir da posição de interface leito-tubo vazio até a posição de medida, causando alterações nas características fluidodinâmicas do mesmo nesta região, quando comparado ao perfil de escoamento na posição da interface.

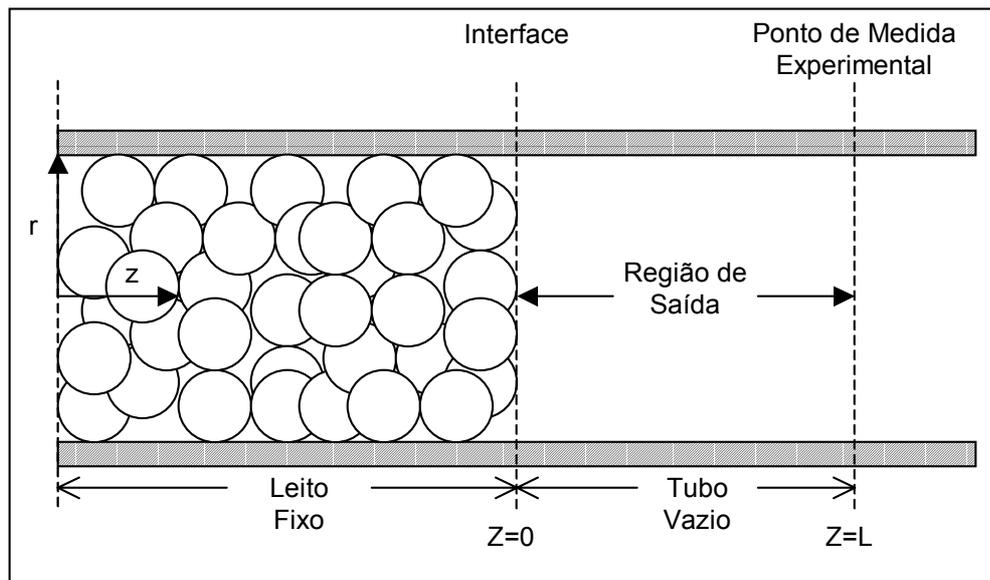


Figura 4.1. Esquema do leito fixo, com destaque para a região onde são realizadas as medidas experimentais.

Frente a esta situação, verifica-se a necessidade da avaliação da influência da região de saída no comportamento do escoamento, para inferir sobre o perfil de velocidades com uma maior clareza no interior do leito fixo. Para isto, foi desenvolvida uma rotina de Fluidodinâmica Computacional na implementação de um simulador para escoamento bidimensional, possibilitando o mapeamento fluidodinâmico no tubo vazio, a partir da saída do leito. Este mapeamento viabiliza a comparação entre dados experimentais e simulados na posição de realização da medida experimental.

Para simular o interior do leito fixo, foi utilizado um modelo de escoamento unidirecional em regime permanente. Aplicando este modelo à posição de interface, encontra-se o perfil de velocidades na mesma, que é utilizado como condição de contorno na entrada do tubo, para o simulador DFC. Aplicando-se este contorno no simulador, informações fluidodinâmicas são geradas a partir da interface (contorno) até a posição axial desejada. Tomando-se esta posição como o local da medida

experimental, torna-se possível avaliar a resposta simulada neste. A figura 4.2 apresenta um esquema deste procedimento de simulação.

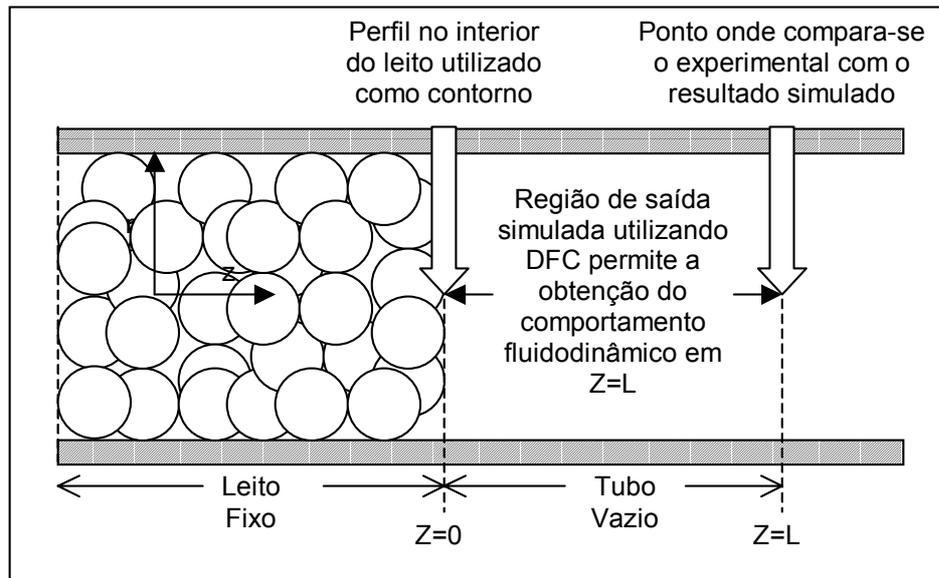


Figura 4.2. Esquema das duas regiões do escoamento, com a indicação da região onde se aplica DFC.

O procedimento descrito fornece uma maior confiabilidade na comparação entre dados experimentais e simulados, pois avalia ambos no mesmo local. O equacionamento utilizado em cada região do escoamento, bem como os aspectos pertinentes a cada uma delas, são apresentados nos itens a seguir.

4.1. INTERIOR DO LEITO FIXO

O escoamento no interior do leito fixo é caracterizado pela presença de uma geometria de empacotamento aleatória, alta turbulência e um perfil de velocidades apresentando flutuações. Para obter um modelo representativo deste sistema, algumas

simplificações são comumente empregadas, destacando-se a simetria angular do escoamento no leito e a distribuição contínua da porosidade no mesmo. O comportamento do perfil de velocidades pode ser descrito pelas equações de Navier-Stokes, modificadas para o meio poroso em questão.

Para o escoamento unidirecional em regime permanente no interior de leitos fixos, BEY e EINGENBERGER (1997) apresentam o seguinte equacionamento, baseado nas equações de Navier-Stokes, para descrever o comportamento do fluido no leito fixo, conforme apresentado no capítulo 2:

$$\frac{dP}{dZ} = -150\mu_{eff} \frac{[1 - \varepsilon(r)]^2}{\varepsilon(r)^2 De^2} v_z(r) - 1,75\rho \frac{[1 - \varepsilon(r)]}{\varepsilon(r)De} v_z(r)^2 + \frac{\mu_{eff}}{\varepsilon(r)r} \frac{d}{dr} \left[\varepsilon(r)r \frac{dv_z(r)}{dr} \right] \quad (4.1)$$

As condições de contorno utilizadas foram:

$$r = 0; \frac{dv_z(0)}{dr} = 0 \quad (4.2)$$

$$r = R; v_z(R) = 0 \quad (4.3)$$

A velocidade superficial é calculada através da seguinte relação:

$$u_z(r) = v_z(r)\varepsilon(r) \quad (4.4)$$

O diâmetro equivalente é obtido por:

$$De = 6 \cdot \frac{Vp}{Ap} \quad (4.5)$$

BEY e EINGENBERGER (1997) também apresentam uma correlação para o cálculo da viscosidade efetiva, utilizada na simulação no interior do leito fixo:

$$\frac{\mu_{eff}}{\mu} = 1 + \left(7,10^{-6} \frac{D}{D_p} + 2,10^{-5} \right) \left(\frac{\rho u_m D_p}{\mu} \right) \quad (4.6)$$

Para a resolução desse sistema de equações, utilizou-se discretização em diferenças finitas, com solução pelo Método de Newton (PRESS *et al.*, 1996). Para esta

discretização, a malha utilizada é apresentada na figura 4.3. Nesta figura, os pontos i representam a posição onde a velocidade é avaliada no elemento de volume.

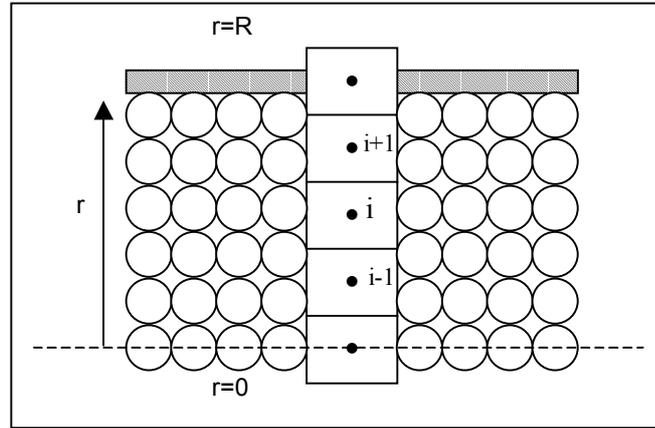


Figura 4.3. Malha de discretização aplicada para a simulação no interior do leito.

Discretizando-se em diferenças finitas as equações de modelo (equações 4.1 a 4.3), obtém-se:

$$\frac{\Delta P}{L} = h_i + \frac{\mu_{eff}}{\varepsilon_i r_i} \frac{1}{\Delta r^2} [r_{n,i} \varepsilon_{n,i} (v_{i+1} - v_i) - r_{s,i} \varepsilon_{s,i} (v_i - v_{i-1})] \quad (4.7)$$

onde

$$h_i = -150 \mu_{eff} \frac{[1 - \varepsilon_i]^2}{\varepsilon_i^2 De^2} v_{z,i} - 1,75 \rho \frac{[1 - \varepsilon_i]}{\varepsilon_i De} v_{z,i}^2 \quad (4.8)$$

$$\varepsilon_{n,i} = \frac{(\varepsilon_{i+1} + \varepsilon_i)}{2} \quad (4.9)$$

$$\varepsilon_{s,i} = \frac{(\varepsilon_{i-1} + \varepsilon_i)}{2} \quad (4.10)$$

$$r_{n,i} = \frac{(r_{i+1} + r_i)}{2} \quad (4.11)$$

$$r_{s,i} = \frac{(r_{i-1} + r_i)}{2} \quad (4.12)$$

Rearranjando convenientemente, obtém-se:

$$0 = \frac{\varepsilon_i r_i \Delta r^2}{\mu_{eff}} h_i + [r_{n,i} \varepsilon_{n,i} (v_{i+1} - v_i) - r_{s,i} \varepsilon_{s,i} (v_i - v_{i-1})] - \frac{\Delta P}{L} \frac{\varepsilon_i r_i \Delta r^2}{\mu_{eff}} \quad (4.13)$$

As condições de contorno discretizadas ficam iguais a:

$$r = 0; v_{z,i-1} = v_{z,i} \quad (4.14)$$

$$r = R; v_{z,i} = 0 \quad (4.15)$$

Solucionando-se o sistema de equações representado pelas equações 4.13 a 4.15, obtém-se o comportamento da velocidade axial na direção radial para o interior do leito fixo. Para a porosidade presente no equacionamento desse problema, foram utilizados diferentes modelos, conforme será apresentado com maior detalhamento no capítulo 5.

Utilizando o resultado do modelo para o interior do leito como condição de contorno em $Z=0$, torna-se possível avaliar o comportamento fluidodinâmico na região do tubo vazio, através da solução das equações regentes do escoamento nesta região. A seguir, apresenta-se o equacionamento utilizado no desenvolvimento do simulador para a região do tubo vazio e a forma de implementação do mesmo.

4.2. REGIÃO DE SAÍDA DO LEITO FIXO

Para a modelagem da região de saída do leito fixo, algumas considerações foram efetuadas com respeito ao escoamento do ar nesta região. Estas considerações são apresentadas a seguir:

- fluido newtoniano;

- sistema isotérmico;
- viscosidade e densidade do fluido constante;
- escoamento em regime laminar;
- simetria angular;
- efeitos da gravidade desprezíveis;

Nas condições descritas anteriormente, as equações de Navier-Stokes para o escoamento em coordenadas cilíndricas tomam a seguinte forma:

Equações do Movimento:

$$z \Rightarrow \rho_f \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) - \mu \left[\frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) \right] + \frac{\partial p}{\partial z} = 0 \quad (4.16)$$

$$r \Rightarrow \rho_f \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) - \mu \left[\frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_r) \right) \right] + \frac{\partial p}{\partial r} = 0 \quad (4.17)$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r u_r) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho u_z) = 0 \quad (4.18)$$

Condições de contorno:

$$r = 0 \Rightarrow \frac{\partial u_z}{\partial r} = 0; u_r = 0 \quad (4.19)$$

$$r = R \Rightarrow u_z = 0; u_r = 0 \quad (4.20)$$

$$z = 0 \Rightarrow u_z = f(r); u_r = 0 \quad (4.21)$$

$$z = 0 \Rightarrow \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0; \frac{\partial u_r}{\partial z} = 0 \quad (4.22)$$

Devido à complexidade do sistema de equações de Navier-Stokes, tornou-se necessário utilizar um método numérico para solucioná-lo. Após a implementação de algumas rotinas comumente utilizadas para a solução de sistemas de equações

diferencias não-lineares, como o Método de Newton, verificou-se que as mesmas não seriam adequadas à solução do problema numérico aqui colocado. Devido a problemas de convergência encontrados, em conjunto com a dificuldade de tratamento das variáveis aliadas à velocidade lenta de resposta, foi implementada uma rotina de Fluidodinâmica Computacional, desenvolvida especialmente para a simulação de escoamentos com um campo de pressões desconhecido e preparada para contornar os problemas observados em métodos menos robustos. O método escolhido para o desenvolvimento do simulador foi o Método Sola (FORTUNA, 2000), descrito no Capítulo 3.

Optou-se por este método dentre outros, como por exemplo o SIMPLE (PATANKAR, 1980), devido à facilidade apresentada na avaliação do campo de pressão e por não exigir maiores tratamentos nos sistemas de equações gerados. Estas vantagens tornaram o método Sola menos complexo quando avaliado o critério de implementação, e portanto mais atrativo para a implementação da rotina computacional.

A malha utilizada para a discretização das equações é apresentada na figura 4.4.

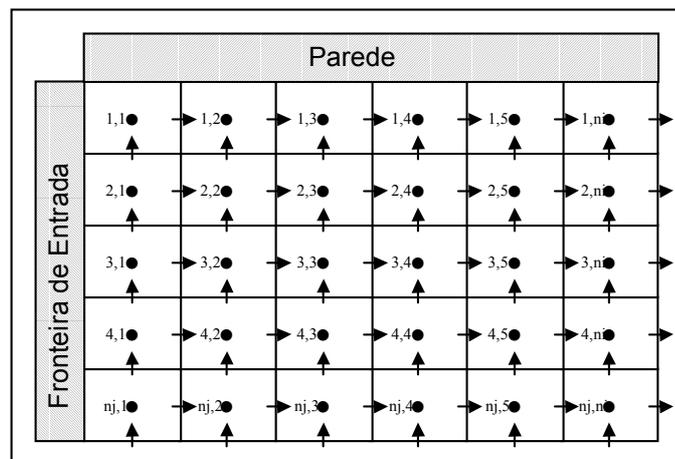


Figura 4.4. Estrutura da malha deslocada para a simulação do escoamento na região de saída.

Discretizando-se as equações do movimento obtém-se:

$$z \rightarrow u_{z,i+1/2,j}^{n+1} = u_{z,i+1/2,j}^n + \Delta t \left[-CONVZ_{i+1/2,j}^n + VIS CZ_{i+1/2,j}^n \right] - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{(P_{i+1,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1})}{\Delta z} \quad (4.23)$$

$$r \rightarrow u_{r,i,j+1/2}^{n+1} = u_{r,i,j+1/2}^n + \Delta t \left[-CONVR_{i,j+1/2}^n + VIS CR_{i,j+1/2}^n \right] - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{(P_{i,j+1}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1})}{\Delta r} \quad (4.24)$$

Os termos viscosos são discretizados utilizando diferenças centrais, formando as equações:

$$VIS CZ_{i+1/2,j}^n = \left(\frac{u_{z,i-1/2,j}^n - 2u_{z,i+1/2,j}^n + u_{z,i+3/2,j}^n}{\Delta z^2} \right) + \left(\frac{u_{z,i+1/2,j+1}^n - 2u_{z,i+1/2,j}^n + u_{z,i+1/2,j-1}^n}{\Delta r^2} \right) + \frac{1}{r_{i+1/2,j}} \left(\frac{u_{z,i+1/2,j+1}^n - u_{z,i+1/2,j-1}^n}{\Delta r} \right) \quad (4.25)$$

$$VIS CR_{i,j+1/2}^n = \left(\frac{u_{r,i-1,j+1/2}^n - 2u_{r,i,j+1/2}^n + u_{r,i+1,j+1/2}^n}{\Delta z^2} \right) + \left(\frac{u_{r,i,j-1/2}^n - 2u_{r,i,j+1/2}^n + u_{r,i,j+3/2}^n}{\Delta r^2} \right) + \frac{1}{r_{i,j+1/2}} \left(\frac{u_{r,i,j+3/2}^n - u_{r,i,j-1/2}^n}{\Delta r} \right) + \frac{u_{r,i,j+1/2}^n}{(r_{i,j+1/2})^2} \quad (4.26)$$

Em escoamentos nos quais a convecção tem um papel importante, a discretização adequada dos termos convectivos é de fundamental importância para evitar problemas numéricos, melhorando a qualidade da resposta. Um dos desafios da DFC é encontrar aproximações para o termo convectivo que não introduzam distorções na solução numérica (FORTUNA, 2000), na forma de difusão e/ou dispersão artificiais.

Para a discretização dos termos convectivos utiliza-se a formulação:

$$CONVZ_{i+1/2,j}^n = \frac{(\bar{u}_z u_z)_{i+1,j}^n - (\bar{u}_z u_z)_{i,j}^n}{\Delta z} + \frac{1}{r_{i,j}} \left(\frac{r_{i,j+1/2} (u_z u_r)_{i+1/2,j+1/2}^n - r_{i,j-1/2} (u_z u_r)_{i+1/2,j-1/2}^n}{\Delta r} \right) \quad (4.27)$$

$$\begin{aligned}
CONVR_{i,j+1/2}^n &= \frac{(u_z u_r)_{i,j+1}^n - (u_z u_r)_{i,j}^n}{\Delta z} + \\
&\frac{1}{r_{i,j+1/2}} \left(\frac{(r \bar{u}_r u_r)_{i,j+1}^n - (r \bar{u}_r u_r)_{i,j}^n}{\Delta r} \right)
\end{aligned} \tag{4.28}$$

Em escoamentos com valores baixos de Reynolds, a aproximação dos termos convectivos por diferenças centrais é adequada. Neste esquema, as equações discretizadas tornam-se iguais a:

$$\begin{aligned}
CONVZ_{i+1/2,j}^n &= \frac{1}{\Delta z} \left[\left(\frac{u_{z,i+3/2,j}^n + u_{z,i+1/2,j}^n}{2} \right)^2 - \left(\frac{u_{z,i+1/2,j}^n + u_{z,i-1/2,j}^n}{2} \right)^2 \right] + \\
&+ \frac{r_{i,j+1/2}}{r_{i+1/2,j}} \left(\frac{u_{z,i+1/2,j+1}^n + u_{z,i+1/2,j}^n}{2} \right) \left(\frac{u_{r,i+1,j+1/2}^n + u_{r,i,j+1/2}^n}{2} \right) + \\
&+ \frac{r_{i,j-1/2}}{r_{i+1/2,j}} \left(\frac{u_{z,i+1/2,j-1}^n + u_{z,i+1/2,j}^n}{2} \right) \left(\frac{u_{r,i,j-1/2}^n + u_{r,i+1,j-1/2}^n}{2} \right)
\end{aligned} \tag{4.29}$$

$$\begin{aligned}
CONVR_{i,j+1/2}^n &= \frac{1}{\Delta z} \left[\left(\frac{u_{z,i+1/2,j+1}^n + u_{z,i-1/2,j+1}^n}{2} \right) \left(\frac{u_{r,i,j+3/2}^n + u_{r,i,j+1/2}^n}{2} \right) - \right. \\
&\left. + \left(\frac{u_{z,i+1/2,j}^n + u_{z,i-1/2,j}^n}{2} \right) \left(\frac{u_{r,i,j+1/2}^n + u_{r,i,j-1/2}^n}{2} \right) \right] + \\
&+ \frac{1}{r_{i,j+1/2}} \left[\frac{r_{i,j+1}}{\Delta r} \left(\frac{u_{r,i,j+3/2}^n + u_{r,i,j+1/2}^n}{2} \right)^2 - \frac{r_{i,j}}{\Delta r} \left(\frac{u_{r,i,j+1/2}^n + u_{r,i,j-1/2}^n}{2} \right)^2 \right]
\end{aligned} \tag{4.30}$$

Utilizando a discretização *upwind* (à frente), os termos convectivos tomam a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
CONVZ_{i+1/2,j}^n &= \frac{u_{z,i+1/2,j}^n}{\Delta z} \left(\frac{u_{z,i+3/2,j}^n + u_{z,i+1/2,j}^n}{2} \right) - \frac{u_{z,i-1/2,j}^n}{\Delta z} \left(\frac{u_{z,i+1/2,j}^n + u_{z,i-1/2,j}^n}{2} \right) + \\
&+ \frac{r_{i,j+1/2}}{r_{i+1/2,j}} u_{z,i+1/2,j}^n \left(\frac{u_{r,i+1,j+1/2}^n + u_{r,i,j+1/2}^n}{2} \right) + \frac{r_{i,j-1/2}}{r_{i+1/2,j}} u_{z,i+1/2,j}^n - 1 \left(\frac{u_{r,i,j-1/2}^n + u_{r,i+1,j-1/2}^n}{2} \right)
\end{aligned} \tag{4.31}$$

$$\begin{aligned}
 CONVR_{i,j+1/2}^n &= \frac{1}{\Delta z} \left[\left(\frac{u_{z,i+1/2,j+1}^n + u_{z,i-1/2,j+1}^n}{2} \right) u_{r,i,j+1/2}^n - \left(\frac{u_{z,i-1/2,j}^n + u_{z,i-1/2,j+1}^n}{2} \right) u_{r,i-}^n \right. \\
 &+ \left. \frac{1}{r_{i,j+1/2}} \left[\frac{r_{i,j+1}}{\Delta r} \left(\frac{u_{r,i,j+3/2}^n + u_{r,i,j+1/2}^n}{2} \right) u_{r,i,j+1/2}^n - \frac{r_{i,j}}{\Delta r} \left(\frac{u_{r,i,j+1/2}^n + u_{r,i,j-1/2}^n}{2} \right) u_{r,i,j}^n \right] \right] \quad (4.32)
 \end{aligned}$$

A discretização por diferenças centrais pode originar soluções oscilatórias na presença de gradientes de velocidade quando o número de Peclet é maior que 2.

$$Pe_i = \frac{u_i (\Delta x)}{\nu} > 2 \quad (4.33)$$

Entretanto, essa discretização fornece bons resultados quando $Pe_i < 2$, sendo bastante utilizada na literatura de DFC. A discretização *upwind* introduz, em geral, uma forte difusão numérica na solução, isto é, erros de truncamento associados a aproximação dos termos convectivos por esquemas dissipativos. Apesar disto, por não produzir soluções oscilatórias, este esquema é utilizado como um dos componentes do esquema híbrido.

O esquema híbrido combina a precisão da discretização por diferenças centrais nas regiões do escoamento em que $Pe_i < 2$, com a discretização *upwind* em zonas nas quais $Pe_i \geq 2$. Nessa região em particular, o esquema híbrido permite a obtenção de soluções não oscilatórias, porém, afetadas pela difusão numérica (FORTUNA, 2000). O esquema híbrido pode ser definido como:

$$u_i = \begin{cases} u_i^{UP}, & se \quad Pe_i \geq 2 \\ u_i^{DC}, & se \quad Pe_i < 2 \end{cases} \quad (4.34)$$

Para evitar que a convergência do método seja afetada pela alteração brusca no valor de u_i para o limite ($Pe_i=2$), utiliza-se uma mudança de forma gradual para o cálculo do mesmo, conforme apresentado abaixo:

$$u_i = (1 - FP_i) u_i^{DC} + (FP_i) u_i^{UP} \quad (4.35)$$

onde

$$FP_i = FP(Pe_i) = \begin{cases} 0, & \text{se } Pe_i < 1,9 \\ \frac{Pe_i - 1,9}{0,1}, & \text{se } 1,9 \leq Pe_i < 2,0 \\ 1, & \text{se } Pe_i \geq 2,0 \end{cases} \quad (4.36)$$

Implementado o simulador, a resposta do mesmo foi comparada a dados experimentais obtidos da literatura. A coerência entre ambos garante a validade do modelo proposto e do método numérico adotado para o interior do leito. Para validar a resposta do simulador utilizou-se como critério a velocidade média ao longo da direção axial na região de saída (tubo vazio). O princípio de conservação da massa deve ser satisfeito independentemente do comportamento fluidodinâmico radial ao longo da direção axial.

Para avaliar a velocidade média radial utilizou-se o seguinte equacionamento:

$$u_m = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^R r u_z(r) dr d\theta}{\int_0^{2\pi} \int_0^R r dr d\theta} \quad (4.37)$$

onde u_m é a velocidade superficial média no leito fixo.

4.3. IMPLEMENTAÇÃO DA ROTINA COMPUTACIONAL

Duas rotinas distintas escritas em FORTRAN foram desenvolvidas para a simulação do escoamento nas duas regiões. A rotina utilizada no interior do leito foi construída de forma a gerar o comportamento fluidodinâmico para o leito fixo, em regime permanente, a partir de condições de operação e características pré-definidas para essa região. Os dados necessários à simulação são:

- diâmetro do leito;
- diâmetro da partícula de empacotamento;
- comprimento do leito;
- propriedades do fluido (viscosidade, densidade);
- queda de pressão no leito;
- número de pontos da malha;
- função de porosidade;

Como algumas referências da literatura não apresentavam a queda de pressão no leito, tornou-se necessário estimar este valor em alguns casos. Esta estimativa da queda de pressão foi realizada de tal forma que este valor aproximado gerasse uma velocidade média superficial no leito equivalente ao experimental, apresentado pelo(s) respectivo(s) autor (es). Com esse procedimento foi possível igualar as condições de operação do simulador às condições operacionais utilizadas nos trabalhos que não apresentaram dados de queda de pressão no leito.

Após a resolução do sistema de equações pertinentes, um arquivo de dados é gerado. Este arquivo contém os valores da velocidade em função da posição radial, para o número de pontos especificado na malha.

A implementação do simulador Sola foi realizada de forma a utilizar o arquivo de dados gerado pela simulação no interior do leito, como sendo o arquivo contendo os dados da condição de contorno para a entrada do tubo. Portanto, para a utilização do simulador Sola, tornou-se necessário fornecer à rotina:

- diâmetro do tubo (idêntico ao leito fixo);
- distância da saída do leito até a posição de medida experimental;
- propriedades do fluido (densidade, viscosidade);
- número de pontos da malha (neste caso, n_i pontos na direção axial e n_j na direção radial);
- número de iterações na pressão (quando utilizada a formulação pseudo-transiente);
- arquivo contendo os dados da condição de contorno na entrada do tubo vazio;

Finalizada a simulação nesta região, a rotina gera três arquivos de saída: um arquivo contendo o comportamento da velocidade axial, um segundo arquivo apresentado o perfil de velocidades na direção radial e por último a resposta do gradiente de pressões. De posse destes arquivos, os gráficos podem ser montados em um programa estatístico adequado para esta finalidade.

Optou-se por manter duas rotinas distintas para simular o sistema em cada uma das regiões devido ao fato de que, em condições mais extremas (malha com um número elevado de pontos ou alto número de Reynolds no escoamento), a resposta do simulador Sola apresenta uma maior lentidão. Separando-se as rotinas, é possível avaliar primeiramente a resposta do interior do leito (mesmo em condições extremas o resultado é muito rápido) em regime permanente e verificar possíveis erros cometidos, evitando o desperdício do tempo com o simulador Sola, ao introduzir um contorno incorreto. Esta separação facilita também a solução de casos onde a queda de pressão não é conhecida, possibilitando maior rapidez nas estimativas e conseqüentemente maior rapidez na solução do problema numérico.

CAPÍTULO 5

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo são apresentados os resultados simulados obtidos para o escoamento do ar em leito fixo utilizando-se os modelos e os procedimentos de simulação descritos no Capítulo 4. Os dados experimentais utilizados para validar as simulações foram obtidos a partir da literatura, sendo apresentados com maior detalhamento neste capítulo. São também apresentados e discutidos os modelos de porosidade utilizados nas simulações, bem como resultados para diferentes condições operacionais, destacando-se os aspectos mais relevantes observados nestes resultados alcançados ao longo do trabalho. Com base nos resultados, neste capítulo é apresentada uma forma diferenciada, com base na velocidade central do escoamento, para quantificar o erro experimental ao inferir-se o escoamento no interior do leito a partir de medidas realizadas fora do mesmo.

5.1. BASE EXPERIMENTAL

Para este trabalho foram utilizados como base experimental na validação das simulações as medidas de velocidade presentes nos trabalhos de MORALES *et al* (1951) e SCHWARTZ e SMITH (1953), trabalhos citados em uma grande quantidade de estudos sobre escoamento em leito fixo presentes na literatura. Estes estudos utilizam um aparato experimental semelhante, possibilitando uma abrangência maior de condições de operação com um menor erro gerado pela diferença nos experimentos.

As condições operacionais adotadas nos trabalhos de MORALES *et al* (1951) e SCHWARTZ e SMITH (1953) são apresentadas nas tabelas 5.1 e 5.2.

Tabela 5.1. Condições operacionais utilizadas por MORALES *et al.* (1951).

Diâmetro do leito (m)	0,0525
Diâmetro das partículas de empacotamento (m)	0,0031; 0,0063; 0,0095
Velocidade superficial do ar (m/s)	0 a 0,535
Temperatura do ar (°C)	23,90
Comprimento do leito (m)	0,4572
Distância de medida experimental (m)	0,0095
Forma das partículas de empacotamento (m)	Cilíndrica

Tabela 5.2. Condições operacionais usadas em SCHWARTZ e SMITH (1953).

Diâmetro do leito (m)	0,0525; 0,078; 0,1022
Diâmetro das partículas de empacotamento (m)	0,0039; 0,0063; 0,0095
Velocidade superficial do ar (m/s)	0 a 1,10
Temperatura do ar (°C)	22,77 a 28,33
Comprimento do leito (m)	0,5842
Distância de medida experimental (m)	0,0508
Forma das partículas de empacotamento (m)	Cilíndrica e esférica

Nas figuras 5.1 e 5.2 são observados os resultados experimentais obtidos pelos autores, os quais serão utilizados para a comparação com os resultados simulados gerados nesta dissertação. O leito utilizado para a obtenção dos resultados nestes dois trabalhos possui um empacotamento aleatório de suas partículas, utilizando para a medida experimental um anemômetro de fio quente circular, que fornece uma medida radial média em relação à coordenada angular do leito (figura 2.7).

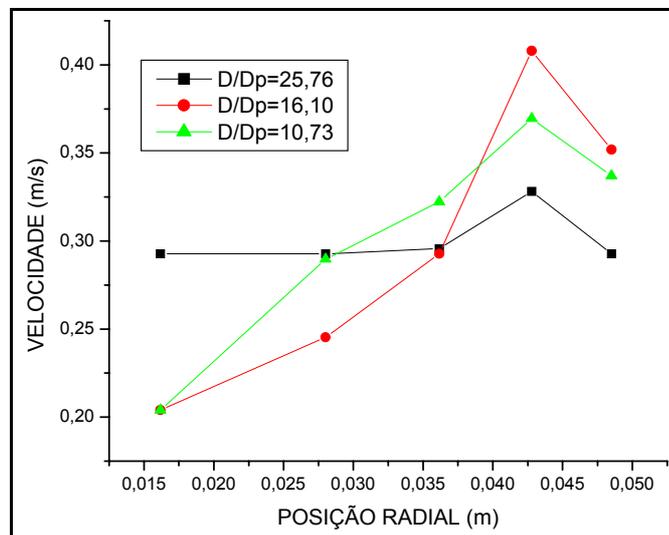


Figura 5.1. Resultados experimentais de SCHWARTZ e SMITH (1953) em função do adimensional D/D_p ($D=0,1022$ m, $u_m=0,308$ m/s, $L=0,58$ m).

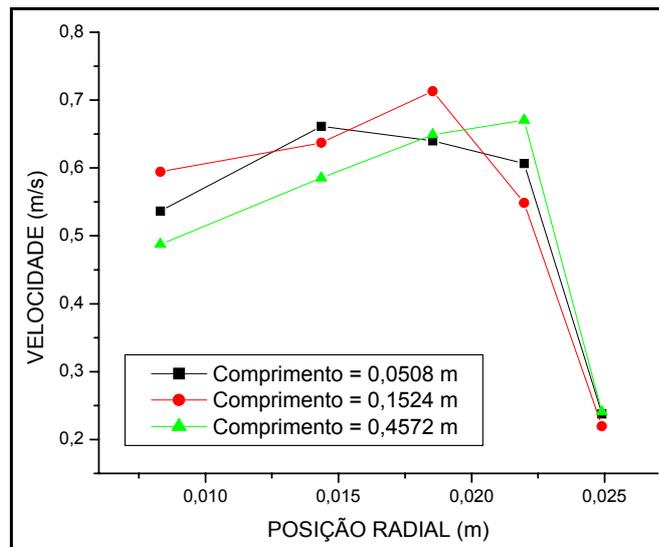


Figura 5.2. Resultados experimentais de MORALES, *et al* (1951) em função do comprimento do leito ($D=0,0508$ m, $u_m=0,5334$ m/s, $D/D_p=15,97$).

Verifica-se nos resultados indicados nas figuras 5.1 e 5.2, a presença de picos de velocidade na região de maior proximidade da parede, tendendo a assumir menores valores de velocidade na região central do leito. Este comportamento do escoamento é característico em leito fixo, sendo explanado com maiores detalhes no item seguinte.

5.2. SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO DO AR NO INTERIOR DO LEITO

5.2.1. Propriedades do fluido

O escoamento do ar no interior do leito fixo foi simulado utilizando-se o equacionamento de BEY e EINGENBERGER (1997), segundo descrito no Capítulo 3. Os valores da densidade e viscosidade do fluido foram obtidos a partir das equações de estado (considerando o ar como gás ideal) e de PERRY e CHILTON (1973),

respectivamente, para as condições de operação descritas nos trabalhos experimentais.

Na tabela 5.3, a seguir, são apresentados os valores dessas propriedades físicas.

Tabela 5.3. Viscosidade e densidade para as diferentes temperaturas consideradas.

	MORALES <i>et al.</i> (1951)	SCHWARTZ e SMITH (1953)
Temperatura (°C)	23,9	25,5
Densidade do ar (kg/m ³)	1,190	1,186
Viscosidade do ar (cp)	0,0184	0,0185

O trabalho de SCHWARTZ e SMITH (1953) não apresenta especificadamente a temperatura de operação de cada um dos experimentos, mas apenas uma faixa de temperaturas utilizada no experimento. Optou-se por utilizar um valor médio de temperatura dentro desta faixa para calcular o valor da viscosidade e densidade do ar.

5.2.2 Equações de porosidade

O interesse ao simular o escoamento no interior do leito fixo foi obter um perfil de velocidades unidirecional em regime permanente. Portanto, para avaliar o perfil de porosidade no mesmo considerou-se apenas a sua variação radial no leito. Para esta representação da porosidade foram avaliados os modelos de MULLER (1992) e HAIDEGER (1989). A seguir são apresentados resultados simulados para a porosidade radial através do modelo de MULLER (1992) (figuras 5.3 e 5.4).

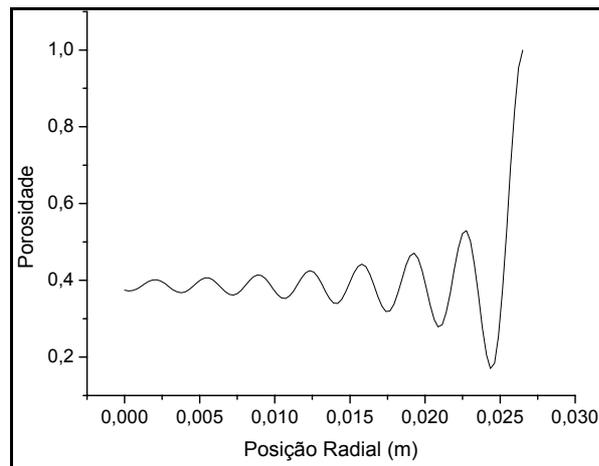


Figura 5.3. Perfil de porosidade radial obtido a partir do modelo de MULLER (1992), com $D/D_p=13,35$.

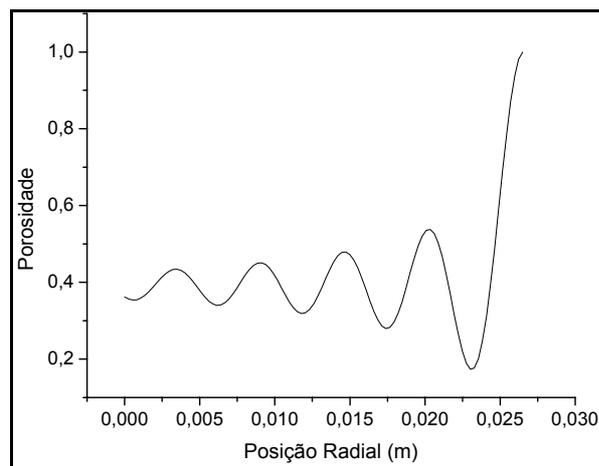


Figura 5.4. Perfil de porosidade radial obtido a partir do modelo de MULLER (1992), com $D/D_p=8,34$.

A diferença na frequência das oscilações quando comparadas as respostas anteriores (figuras 5.3 e 5.4) é justificada pela diminuição da relação D/D_p . Esta característica é explanada com maiores detalhes na seção 5.2.3.

Ao partir do equacionamento de HAIDEGGER *et al* (1989), nas mesmas condições avaliadas para o modelo de MULLER (1992) apresentado anteriormente,

verificou-se um comportamento constante para a região central do leito, observando junto à parede, o valor máximo de porosidade. Nas figuras 5.5 e 5.6 é possível visualizar dois resultados da aplicação do modelo de HAIDEEGER *et al.* (1989).

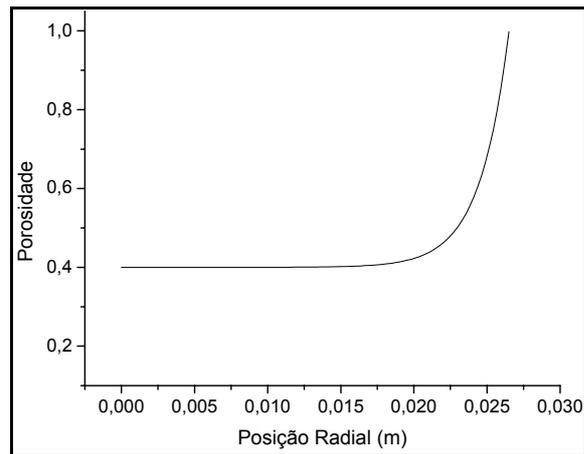


Figura 5.5. Perfil de porosidade radial gerado com o modelo de HAIDEEGER *et al.* (1989) e $D/D_p=13,35$.

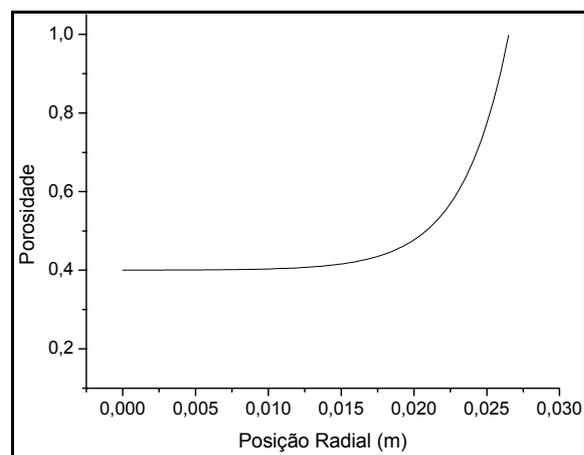


Figura 5.6. Perfil de porosidade radial gerado com o modelo de HAIDEEGER *et al.* (1989) e $D/D_p=8,34$.

Analisando as figuras 5.3 a 5.6, verifica-se que a diferença entre as respostas dos modelos de porosidade testados está na presença do comportamento oscilatório da mesma. Entretanto, observa-se que o valor médio da porosidade para a região central, bem como o máximo de porosidade, apresentam comportamentos semelhantes em ambos os modelos. Baseando-se no comportamento verificado experimentalmente por ZOTIN (1985), optou-se por utilizar o equacionamento de MULLER (1992) nas simulações no interior do leito, devido ao mesmo apresentar um comportamento mais aproximado das características verificadas por ZOTIN (1985).

5.2.3. O interior do leito

As simulações do escoamento do ar no interior do leito foram realizadas segundo o equacionamento e o procedimento apresentado nos Capítulos 3 e 4. Uma malha de 100 pontos foi utilizada, pois proporciona uma boa relação entre refinamento da malha e tempo computacional. As respostas geradas pela rotina implementada, utilizando-se o Método de Newton, foram rápidas mesmo com essas condições extremas de simulação.

A seguir são apresentados resultados simulados para o escoamento no interior do leito, utilizando-se uma malha de 100 volumes (figuras 5.7 e 5.10). São apresentadas respostas considerando a viscosidade do fluido e a viscosidade efetiva proposta por BEY e EINGENBERGER (1997), calculada segundo a equação 4.6. A função de porosidade utilizada correspondeu ao modelo de MULLER (1992), descrito pelas equações 2.7 a 2.12.

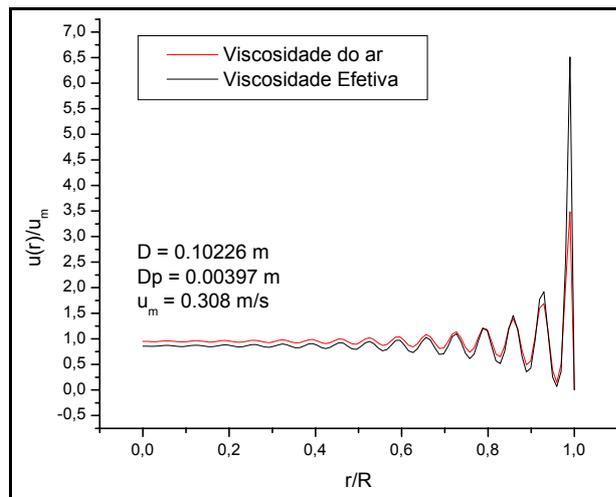


Figura 5.7. Comparação entre os perfis de velocidade simulados para o interior do leito utilizando a viscosidade efetiva de BEY e EINGENBERGER (1997) e a viscosidade do ar ($D=0,1022$ m, $D/D_p = 25,76$).

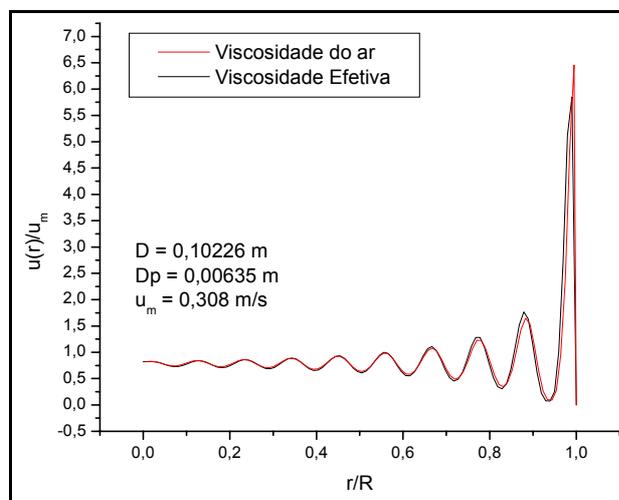


Figura 5.8. Comparação entre os perfis de velocidade simulados para o interior do leito utilizando a viscosidade efetiva de BEY e EINGENBERGER (1997) e a viscosidade do ar ($D=0,1022$ m, $D/D_p=16,10$).

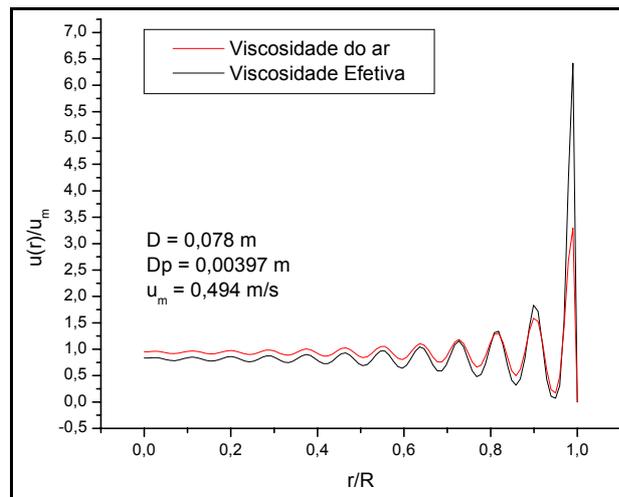


Figura 5.9. Comparação entre os perfis de velocidade simulados para o interior do leito utilizando a viscosidade efetiva de BEY e EINGENBERGER (1997) e a viscosidade do ar ($D=0,078$ m, $D/D_p = 19,65$).

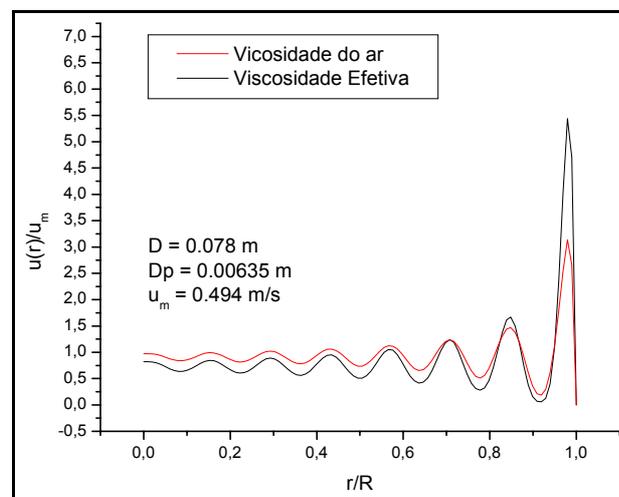


Figura 5.10. Comparação entre os perfis de velocidade simulados para o interior do leito utilizando a viscosidade efetiva de BEY e EINGENBERGER (1997) e a viscosidade do ar ($D=0,078$ m, $D/D_p = 12,28$).

Nas figuras 5.8 a 5.11 verifica-se a presença de picos de velocidade na região próxima à parede do tubo e um comportamento oscilatório do escoamento na direção

radial. Para diâmetros de leito e velocidades superficiais equivalentes, é possível verificar através destes resultados a dependência da frequência de oscilações e da amplitude do pico de velocidade na região junto à parede com o diâmetro da partícula. Diminuindo-se a relação D/D_p verificam-se decréscimos na frequência das oscilações ao longo do raio e na amplitude do pico de velocidade próximo à parede, para uma mesma velocidade média superficial. A diminuição do pico de velocidade com a diminuição do adimensional D/D_p em leitos preenchidos com esferas também foi verificado por BEY e EINGENBERGER (1997). O pico de velocidade apresenta um valor mais elevado para maiores relações de D/D_p devido ao fato de que, quanto menor o diâmetro de partícula, menor a porosidade no centro do leito. Essa baixa porosidade no centro do leito dificulta o escoamento nessa região, forçando o fluido a escoar pela região de maior porosidade (região da parede), elevando a velocidade de escoamento na mesma.

O aumento na frequência das oscilações é ocasionado pela presença de um maior número de partículas quando se diminui o diâmetro da partícula de preenchimento, em relação a um leito de mesmo diâmetro, agora preenchido com partículas maiores. O maior número de partículas proporciona maior quantidade de “espaços vazios” entre partículas, gerando, conseqüentemente, um maior número de oscilações na velocidade. A figura 5.11 ilustra o aumento na quantidade de espaços vazios entre as partículas com a diminuição do diâmetro da partícula em relação ao diâmetro do leito.

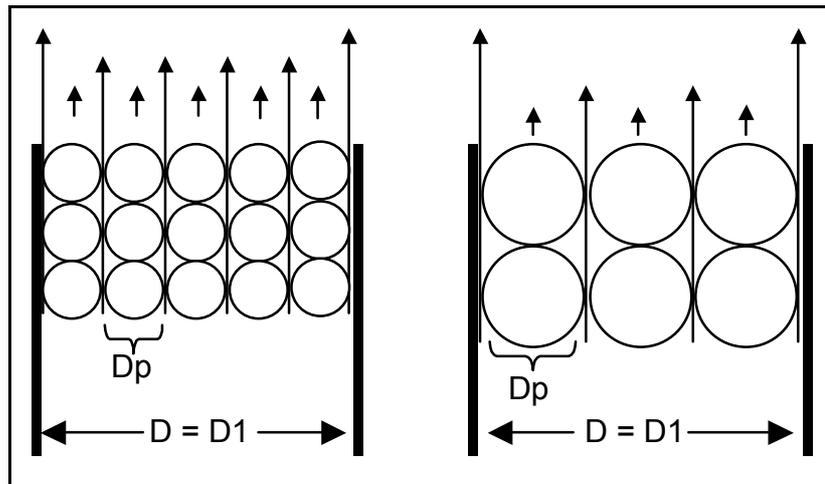


Figura 5.11. Ilustração de como as oscilações na velocidade de escoamento aumentam com a diminuição do diâmetro da partícula para leitos de mesmo diâmetro.

Os resultados obtidos através de simulações no interior do leito fixo são tomados como representativos para a interface entre o leito fixo e o tubo vazio. Como estes resultados serão utilizados como condição de contorno para a simulação no tubo vazio, optou-se por não considerar a viscosidade efetiva apresentada por BEY e EINGENBERGER (1997) no interior do leito. Conforme se verifica nas figuras 5.7 a 5.10, o comportamento do escoamento não difere significativamente, ao ponto de justificar a utilização de duas viscosidades diferentes (a viscosidade efetiva no interior do leito e a viscosidade do ar no tubo vazio), ou mesmo utilizar uma viscosidade correlacionada (efetiva) em ambas as partes do sistema, visto que para o escoamento em tubo vazio o valor da viscosidade do ar é conhecido para uma ampla faixa de temperaturas.

5.3. SIMULAÇÃO DA REGIÃO DE SAÍDA DO LEITO FIXO

5.3.1. Aspectos gerais

A simulação da região de saída foi realizada utilizando-se o simulador desenvolvido através do método Sola. Este simulador, descrito no Capítulo 3, fornece a resposta do perfil de velocidades radial ao longo da região de saída (tubo vazio). A título de demonstração, a figura 5.12 apresenta a resposta do programa avaliada em diferentes posições axiais para um baixo valor de Reynolds, resposta esta obtida até a posição onde praticamente a condição de escoamento desenvolvido em tubo vazio é atingida, caracterizado pelo perfil parabólico de velocidades, quando em regime laminar.

É possível visualizar na figura 5.12 a tendência que o escoamento possui em assumir um comportamento parabólico numa posição mais afastada da saída do leito. A partir desta posição de escoamento desenvolvido, o comportamento do mesmo mantém-se sem alterações ao longo da posição axial.

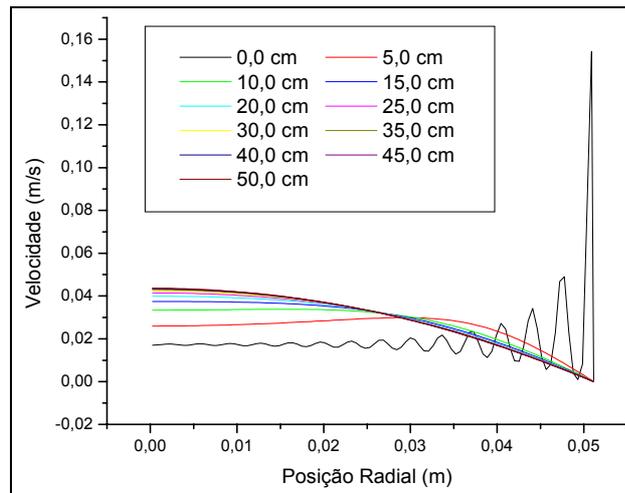


Figura 5.12. Ilustração do comportamento da velocidade em função da posição radial para diferentes posições axiais na região de saída do leito fixo ($Re=100$, $D=0,01022$ m, $D_p=0,00397$ m).

Para que o princípio da conservação da massa seja satisfeito, a velocidade média, ao longo da direção axial não deve sofrer variações, mantendo seu valor desde a posição de entrada no tubo ($Z=0$, contorno) até a posição de saída do mesmo. Avaliando-se a variação da velocidade média no escoamento ao longo da direção axial, para a situação simulada anteriormente (figura 5.12), verifica-se o comportamento representado pela figura 5.13.

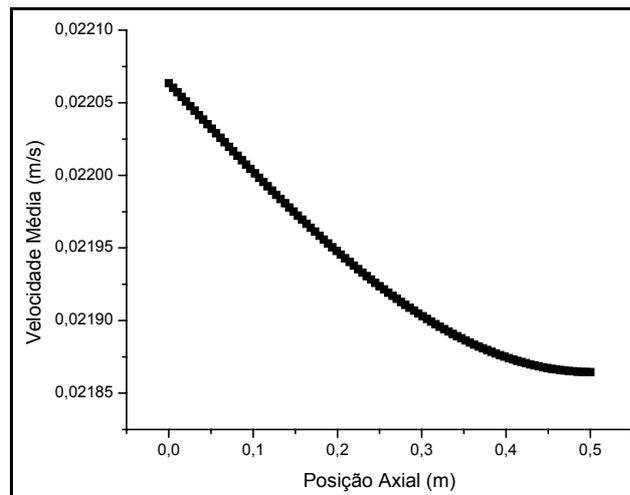


Figura 5.13. Variação na velocidade média observada na região de saída do leito fixo ($Re=100$, $D=0,01022$ m, $D_p=0,00397$ m).

Observa-se na figura 5.13, um pequeno decréscimo da velocidade média ao longo da direção axial. Esta diferença na velocidade média, que não ultrapassou valores maiores do que 1% em relação à entrada do tubo, deve-se principalmente ao comportamento oscilatório do contorno, visto que este comportamento na entrada não favorece a convergência do método numérico. Estas oscilações possivelmente provocam leves instabilidades na solução numérica do problema, instabilidades estas que não chegam a comprometer a qualidade da resposta, mas que levam a este erro no cálculo da velocidade média, já que a correção do campo de velocidades, no método Sola, é realizada com base na equação da continuidade.

Este erro observado na avaliação da velocidade média também é influenciado por erros de iteração, gerados em função da formulação pseudo-transiente. Esta formulação não permite satisfazer completamente a equação da continuidade em cada passo de tempo, devido ao estabelecimento de um número fixo de iterações na equação da continuidade, que é fornecido à rotina. Outro ponto importante é a tolerância fixada

no programa para garantir que foi atingido o regime permanente. Em todas as simulações realizadas obtiveram-se valores em torno de 10^{-8} m/s para os erros de iteração e 10^{-5} para o resíduo da continuidade. Estes valores podem ser reduzidos, porém a custo da velocidade de convergência do método. Apesar destes erros apresentarem valores muito mais baixos que o valor da variação máxima da velocidade média durante as simulações, o efeito dos mesmos a cada posição axial pode contribuir para esta variação final, visto que o equacionamento utilizado é muito sensível a alterações, devido à presença de termos com caráter altamente não linear.

Este erro de simulação descrito anteriormente está inserido em todas as simulações na região de saída do leito fixo presentes neste trabalho. Entretanto, baseando-se na velocidade média como critério de avaliação, o desvio verificado nas simulações não ultrapassa o valor de 1% em qualquer um dos casos, tornando-se mais próximo deste valor em simulações que apresentem valores do número de Reynolds mais elevados e menores relações de D/D_p , devido justamente ao aumento na amplitude e frequência das oscilações verificadas no contorno de entrada.

5.3.2. Obtenção do perfil de velocidades fora do leito fixo

Neste tópico é avaliada a resposta do simulador para diferentes condições operacionais, em contraste com dados experimentais obtidos da literatura. A partir destas simulações é possível verificar a confiabilidade do modelo proposto para inferir sobre o perfil de escoamento no interior do leito fixo.

Através dos resultados experimentais e condições verificadas nos trabalhos de SCHWARTZ e SMITH (1953) e MORALES *et al* (1951), foram gerados os perfis de

velocidade simulados apresentados nas figuras 5.14 a 5.19. Aproveitou-se para também compará-los com os perfis de velocidade obtidos com o modelo de SUBAGYO *et al.* (1998), lembrando que este modelo apresenta uma formulação voltada à obtenção de perfis de velocidade em posição externa ao leito fixo.

Nas figuras 5.14 a 5.19 verificam-se os resultados da simulação para diferentes condições de operação.

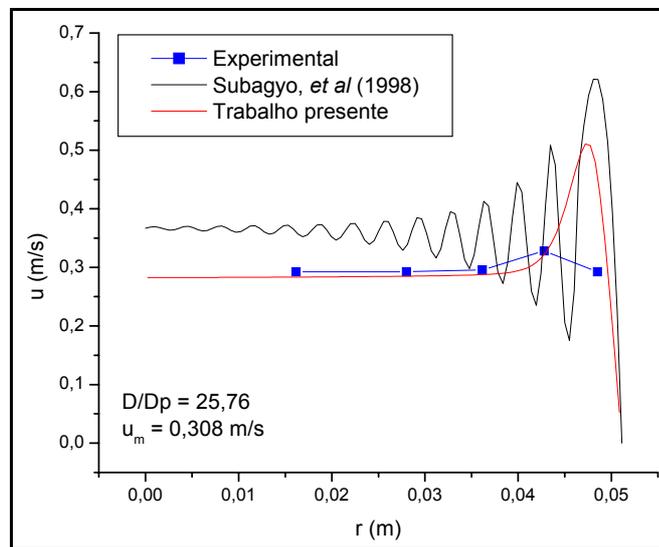


Figura 5.14. Resultados simulados a 0,0508 m da saída do leito fixo comparados com resultados experimentais de SCHWARTZ e SMITH (1953) e o modelo de SUBAGYO *et al* (1998) ($D=0,10226$ m; $D/D_p=25,76$; $Re=1409,82$).

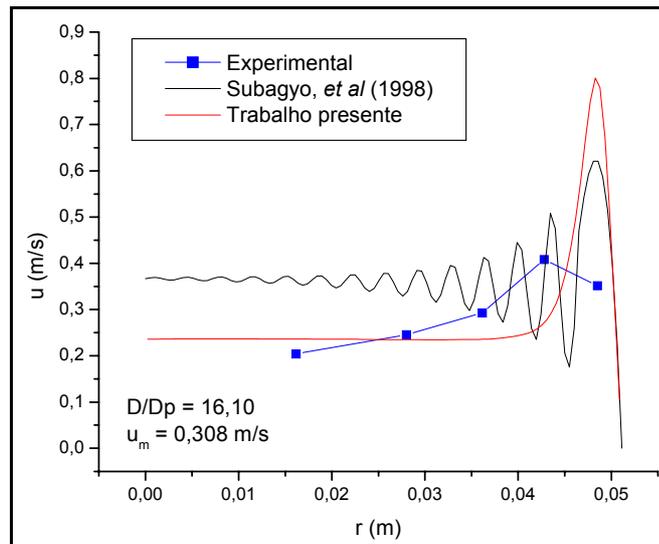


Figura 5.15. Resultados simulados a 0,0508 m da saída do leito comparados com resultados experimentais de SCHWARTZ e SMITH (1953) e o modelo de SUBAGYO *et al.* (1998) ($D=0,10226$ m; $D/D_p=16,10$; $Re=1409,82$).

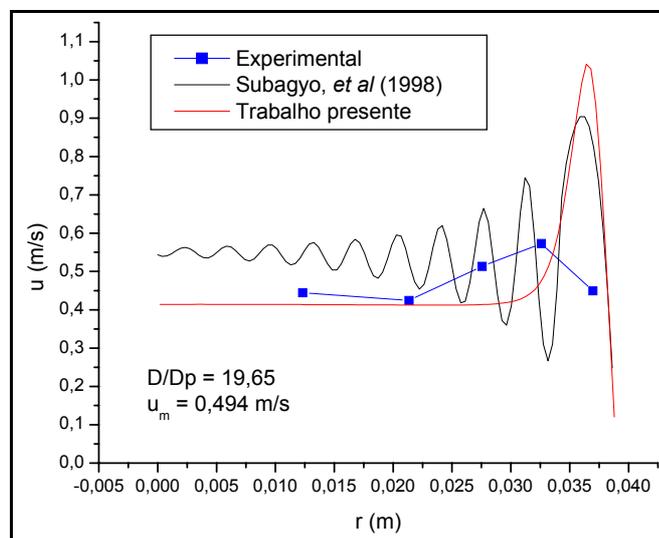


Figura 5.16. Resultados simulados a 0,0508 m da saída do leito comparados com resultados experimentais de SCHWARTZ e SMITH (1953) e o modelo de SUBAGYO *et al.* (1998) ($D=0,078$ m; $D/D_p=19,65$; $Re=1724,76$).

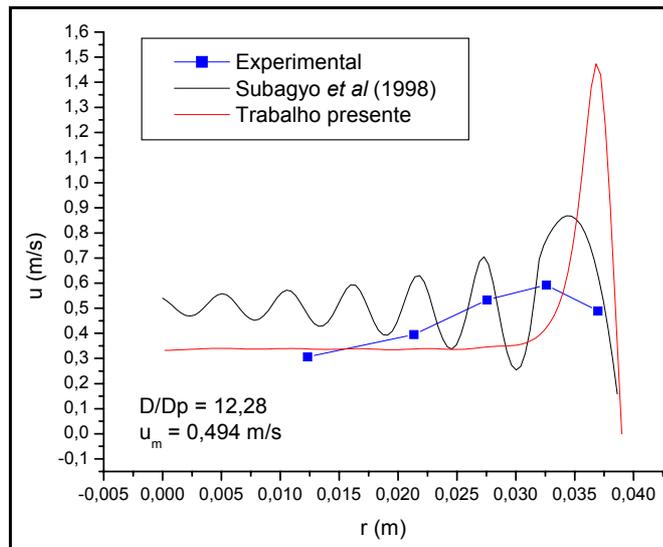


Figura 5.17. Resultados simulados a 0,0508 m da saída do leito comparados com resultados experimentais de SCHWARTZ e SMITH (1953) e o modelo de SUBAGYO *et al.* (1998) ($D=0,078$ m; $D/D_p=12,28$; $Re=1724,76$).

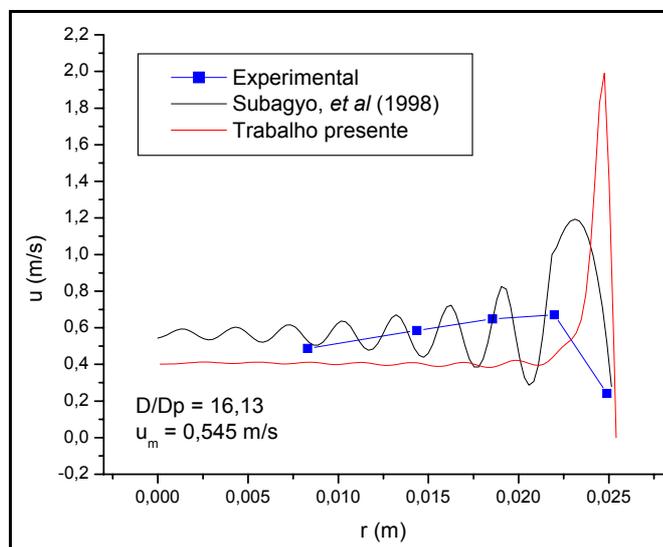


Figura 5.18. Resultados simulados a 0,0095 m da saída do leito comparados com resultados experimentais de MORALES *et al* (1951) e o modelo de SUBAGYO *et al.* (1998) ($D=0,0513$ m; $D/D_p=16,13$; $Re=1253,33$).

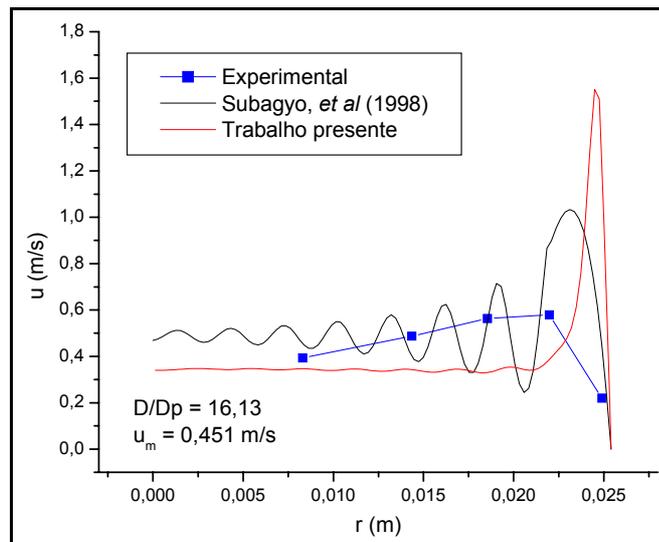


Figura 5.19. Resultados simulados a 0,0095 m da saída do leito comparados com resultados experimentais de MORALES *et al* (1951) e o modelo de SUBAGYO *et al.* (1998) ($D=0,0513$ m, $D/D_p=16,13$, $Re=1060,13$).

Na tabela 5.4, são apresentados os erros observados nos resultados simulados e o desvio em relação aos dados experimentais de cada simulação apresentada anteriormente. O erro de iteração corresponde à tolerância assumida para que o regime permanente fosse considerado alcançado. Este erro corresponde ao maior valor verificado para a diferença entre a velocidade no instante n e a velocidade no instante $n-1$. O erro de correção corresponde ao valor mínimo atingido no resíduo da equação da continuidade. Já o desvio médio representa uma média percentual do desvio entre os dados simulados e experimentais, excluindo-se o ponto mais próximo à parede (este ponto causa uma grande distorção no desvio, devido à oscilação na região da parede apresentar alta variação na amplitude em uma pequena distância a partir da mesma), calculado através da seguinte equação:

$$Desv = \frac{\sum_{i=1}^{i=np} \left| \frac{ui_{calc} - ui_{exp}}{ui_{exp}} \right|}{np} \times 100 \quad (5.2)$$

Tabela 5.4. Erros verificados nas simulações apresentadas.

Figura	D/Dp	D (m)	Dp (m)	Re	Erro		
					Iteração (m/s)	Correção	Desvio (%)
5.14	25,76	0,1022	$3,97 \cdot 10^{-3}$	$1,41 \cdot 10^3$	$7,0 \cdot 10^{-8}$	$5,8 \cdot 10^{-5}$	11,88
5.15	16,10	0,1022	$6,35 \cdot 10^{-3}$	$1,41 \cdot 10^3$	$1,0 \cdot 10^{-7}$	$3,47 \cdot 10^{-5}$	22,51
5.16	19,65	0,0780	$3,97 \cdot 10^{-3}$	$1,72 \cdot 10^3$	$1,0 \cdot 10^{-7}$	$5,7 \cdot 10^{-5}$	2,97
5.17	12,28	0,0780	$6,35 \cdot 10^{-3}$	$1,72 \cdot 10^3$	$8,0 \cdot 10^{-8}$	$2,9 \cdot 10^{-5}$	18,57
5.18	16,13	0,0513	$3,18 \cdot 10^{-3}$	$1,25 \cdot 10^3$	$9,0 \cdot 10^{-8}$	$4,43 \cdot 10^{-6}$	30,23
5.19	16,13	0,0513	$3,18 \cdot 10^{-3}$	$1,06 \cdot 10^3$	$9,0 \cdot 10^{-8}$	$7,15 \cdot 10^{-6}$	29,70

As respostas do simulador para altas relações de D/Dp apresentaram melhores resultados em comparação com dados experimentais (figura 5.14 com a 5.15 e figura 5.16 com a 5.17). Verificou-se que, em conjunto com altas relações de D/Dp, baixas velocidades médias de escoamento (Re menores) também melhoram a resposta do simulador (figura 5.18 com a 5.19). Este comportamento é atribuído ao efeito de saída provocado pelo leito fixo.

Comparando-se resultados para baixas relações de D/Dp constatou-se que a utilização de um modelo para velocidade intersticial do fluido quando comparado a um modelo de velocidade superficial, em mesmas condições de operação na simulação do

interior do leito e conseqüente geração do contorno, promove melhores respostas simuladas. Nas figuras 5.20 e 5.21 é possível verificar alguns resultados.

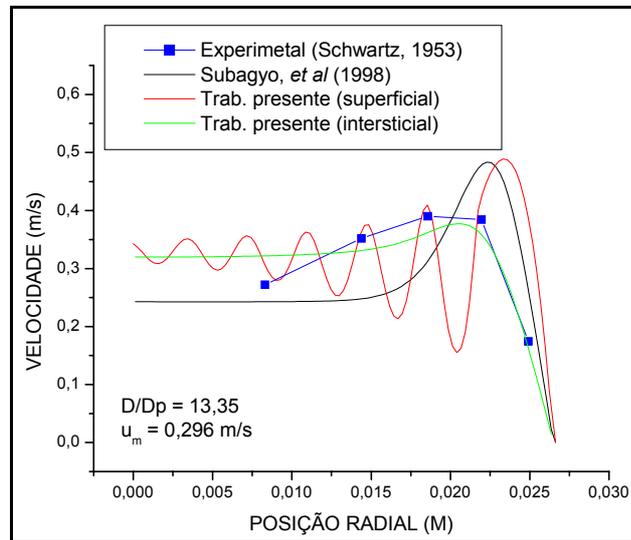


Figura 5.20. Comparação de resultados simulados obtidos utilizando a velocidade superficial e intersticial como condição de contorno em $z=0 \text{ cm}$ ($D/D_p=13,35$).

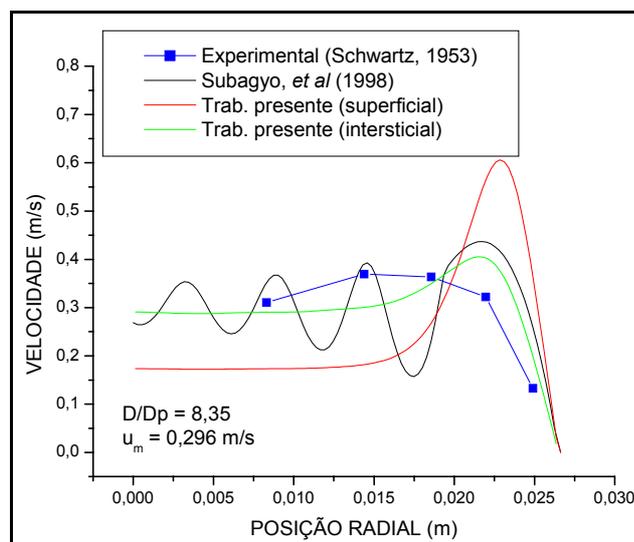


Figura 5.21. Comparação de resultados simulados obtidos utilizando a velocidade superficial e intersticial como condição de contorno em $z=0 \text{ cm}$ ($D/D_p=8,35$).

O comportamento da resposta apresentado anteriormente, nas figuras 5.20 e 5.21, pode ser atribuído ao efeito de saída sobre o escoamento provocado pelas partículas do leito fixo, localizadas junto a interface entre o próprio e o tubo vazio. Este efeito acaba por se estender a uma distância maior no tubo vazio, a partir da interface, quando D/D_p é menor e Re é maior. Isto torna necessária a presença de um determinado distanciamento do leito para que a velocidade de escoamento do fluido assuma as características da velocidade superficial (por exemplo, na posição $Z=Z_2$ da figura 5.22). Devido a este distúrbio, na saída verifica-se a tendência do comportamento da velocidade na região mais próxima da interface assumir as características da velocidade intersticial do fluido no interior leito. Um esquema deste efeito pode ser visualizado na figura 5.22.

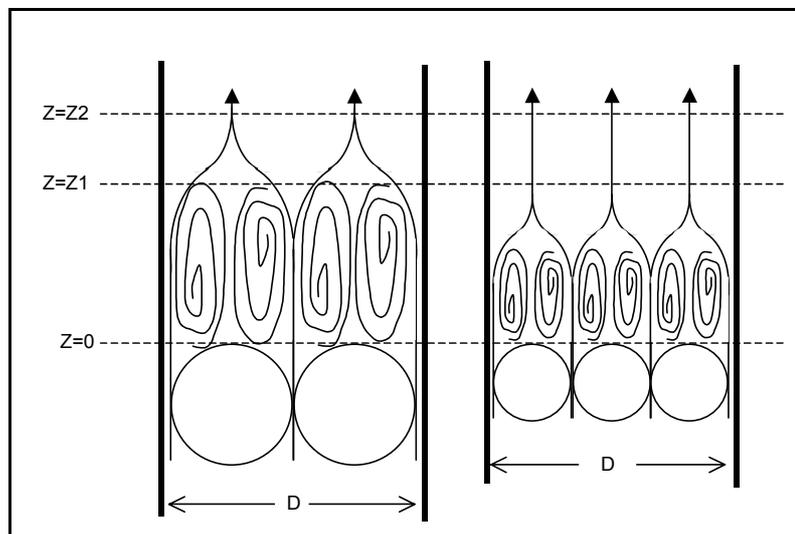


Figura 5.22. Esquema de como o efeito de saída, provocado pelo leito fixo, afeta a velocidade no tubo, para diferentes relações de D/D_p .

Portanto, o uso da velocidade superficial como condição de contorno nas simulações realizadas sob estas condições (baixas relações de D/D_p e altos Re) pode

sofrer a influência descrita anteriormente, originando resultados incoerentes, quando comparados a medidas experimentais. Nestes casos, o uso de modelos para simular a velocidade intersticial no contorno pode promover melhores respostas.

Nas figuras 5.23 a 5.28, são apresentados o desenvolvimento do perfil de velocidades no tubo, partindo da posição de entrada (contorno) até a posição de medida experimental, para as simulações mostradas nas figuras 5.14 a 5.19.

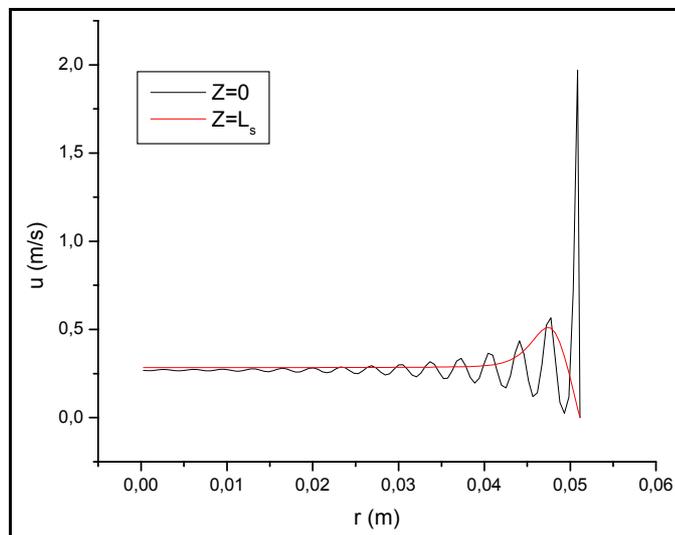


Figura 5.23. Desenvolvimento do perfil de velocidades ($L_s=0,0508$ m; $D=0,10226$ m, $D/D_p=25,76$; $Re=1409,82$) relativo à figura 5.14.

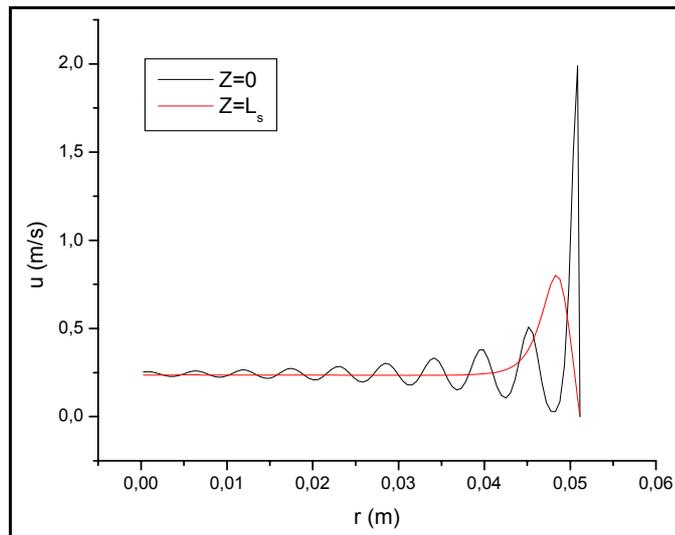


Figura 5.24. Desenvolvimento do perfil de velocidades ($L_s=0,0508$ m; $D=0,10226$ m; $D/D_p=16,10$; $Re=1409,82$) relativo à figura 5.15.

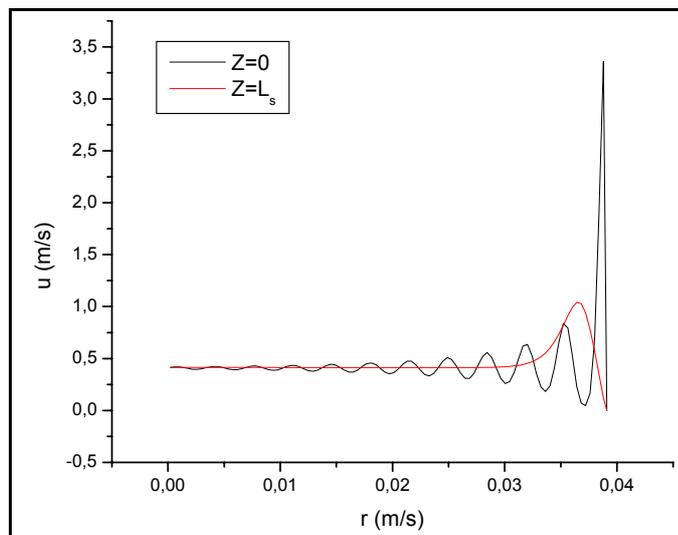


Figura 5.25. Desenvolvimento do perfil de velocidades ($L_s=0,0508$ m; $D=0,078$ m; $D/D_p=19,65$; $Re=1724,76$) relativo à figura 5.16 .

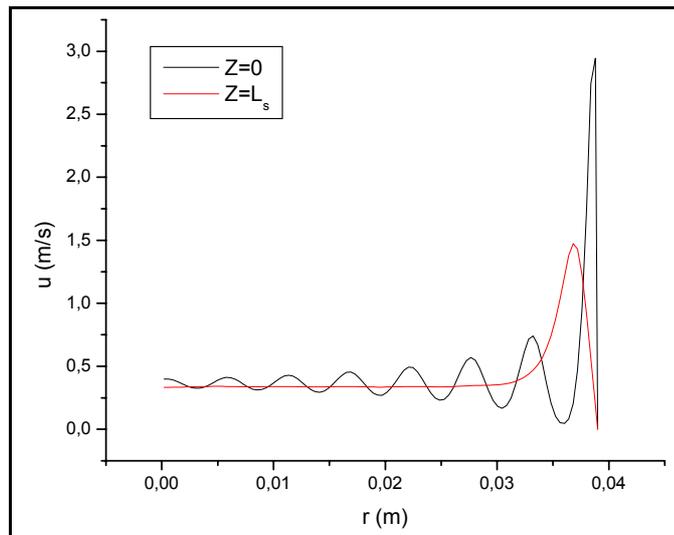


Figura 5.26. Desenvolvimento do perfil de velocidades ($L_s=0,0508$ m; $D=0,078$ m; $D/D_p=12,28$; $Re=1724,76$) relativo à figura 5.17.

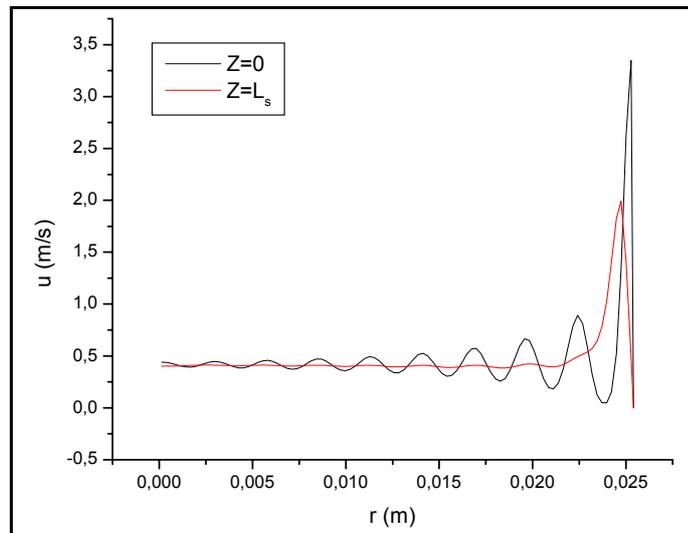


Figura 5.27. Desenvolvimento do perfil de velocidades ($L_s=0,0095$ m; $D=0,0513$ m; $D/D_p=16,13$; $Re=1253,33$) relativo à figura 5.18.

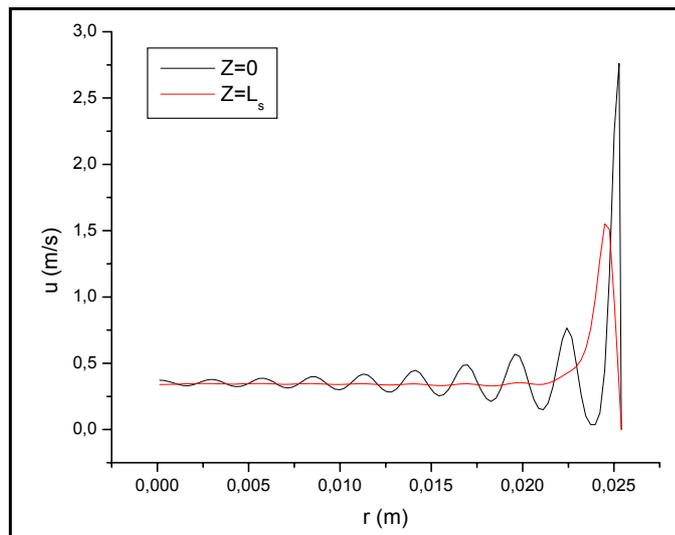


Figura 5.28. Desenvolvimento do perfil de velocidades ($L_s=0,0095$ m; $D=0,0513$ m, $D/D_p=16,13$, $Re=1060,13$) relativo à figura 5.19.

Nas figuras 5.23 a 5.28 observa-se que o perfil de velocidades não apresenta alterações significativas na velocidade média para a região central do escoamento, ao longo da região de saída avaliada nestes casos. Observa-se nos resultados apenas a tendência de amortecimento das oscilações na região central e redução da amplitude do pico de velocidades nas proximidades da parede.

Para analisar a característica de amortecimento da resposta comentado anteriormente, nas figuras 5.29 e 5.30 utiliza-se na simulação uma região de saída mais extensa, possibilitando visualizar com maior clareza esse comportamento. Nas posições mais próximas da interface ocorre apenas o amortecimento das oscilações, para que em posições mais afastadas a tendência de escoamento desenvolvido seja verificada.

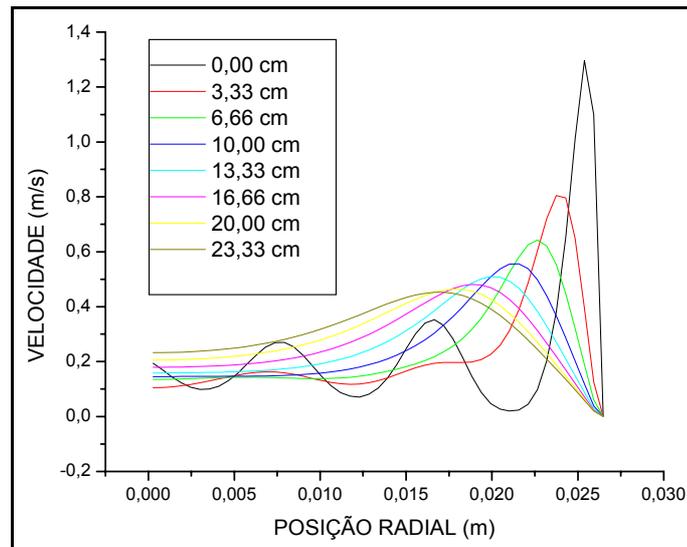


Figura 5.29. Comportamento radial do escoamento logo após a saída do leito.

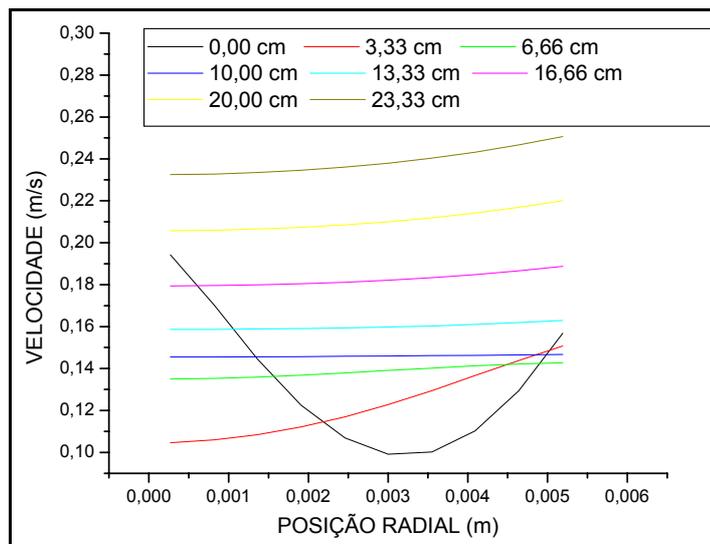


Figura 5.30. Comportamento do escoamento na região central após a saída do leito, indicando a redução das oscilações.

Avaliando-se as figuras 5.29 e 5.30, observa-se que o pico de velocidade próximo à parede do tubo é reduzido substancialmente com o aumento da distância axial em relação à interface. A velocidade média no centro do tubo, caracterizada por

comportamento oscilatório, também sofre distúrbios, tendendo ao amortecimento conforme aumenta-se a distância a partir da interface.

Através dos resultados simulados é possível afirmar que a análise fluidodinâmica de leitos fixos, utilizando-se medidas de velocidade realizadas fora do leito, tende a se tornar menos representativa para o interior, à medida que é aumentado o distanciamento da posição de tomada experimental em relação à saída do leito, para condições equivalentes de operação. Em contrapartida, o efeito de saída pode gerar resultados incoerentes quando a proximidade da medida em relação ao leito é aumentada. Impondo um maior afastamento, obtém-se uma medida menos representativa, porém mais fisicamente coerente com o comportamento do escoamento.

5.3.3. Critério para avaliação da representatividade da medida fora do leito

A partir das observações sobre a validade da medida experimental fora do leito fixo, procurou-se estabelecer um critério representativo e confiável para inferir o perfil de velocidades no interior do leito. Para tanto, adotou-se a avaliação da influência do tubo vazio sobre o escoamento na região de saída do leito. Considerou-se que na posição axial onde o escoamento está totalmente desenvolvido e a velocidade no centro do tubo é a velocidade máxima do escoamento, existe apenas a influência do tubo vazio sobre o perfil de velocidades. Não há, portanto, a possibilidade de tirar conclusões sobre o contorno na entrada do tubo; isto é, sobre o perfil de velocidades na interface. Em contrapartida, na posição exata de interface, considerou-se que apenas o leito fixo influencia o perfil de velocidades, sendo este representativo para o interior do leito. Na figura 5.31 é possível visualizar uma representação do esquema utilizado.

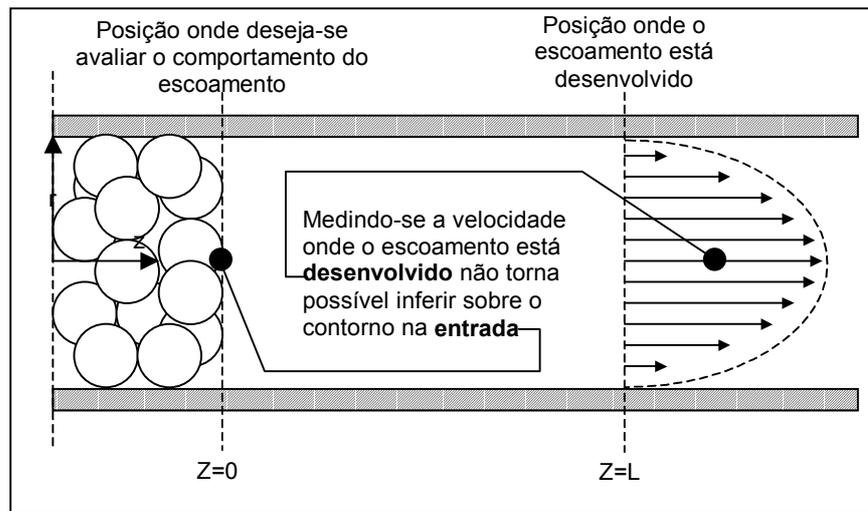


Figura 5.31 - Representação do perfil de velocidades quando desenvolvido.

Para avaliar o comportamento da velocidade central ao longo da direção axial, a partir da saída do leito fixo, simulou-se o escoamento em uma região de saída de 0,5 m, para diferentes números de Reynolds e adimensionais D/D_p . Para obter um valor mais homogêneo da velocidade central, utilizou-se uma média dos valores de velocidade nesta região. Esta média foi realizada partindo de $r=0$ até $r=0,1R$. Nas figuras 5.32 a 5.34 é possível visualizar o comportamento da velocidade central ao longo do tubo. A região de amortecimento da velocidade, onde não ocorrem grandes variações na velocidade média central (logo após a saída do leito), conforme descrito anteriormente, pode ser claramente observada nas figuras 5.32 a 5.34, nas proximidades da posição $Z=0,0$ m.

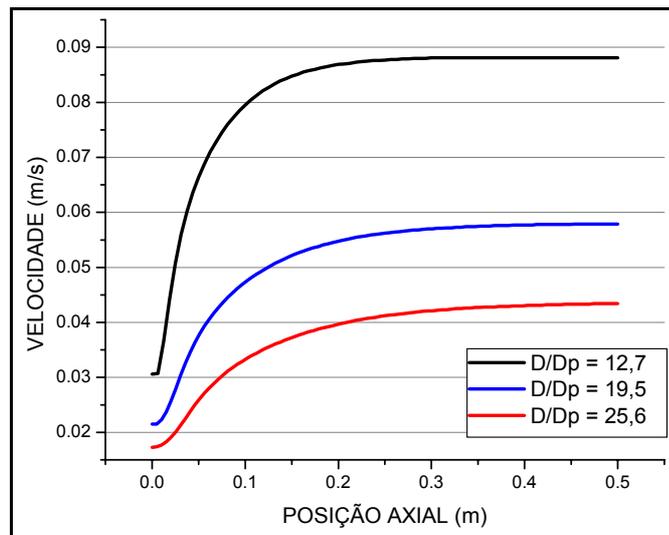


Figura 5.32. Comportamento da velocidade central ao longo do tubo para razões D/D_p diferentes ($Re=100$, $D_p=0,00397$ m).

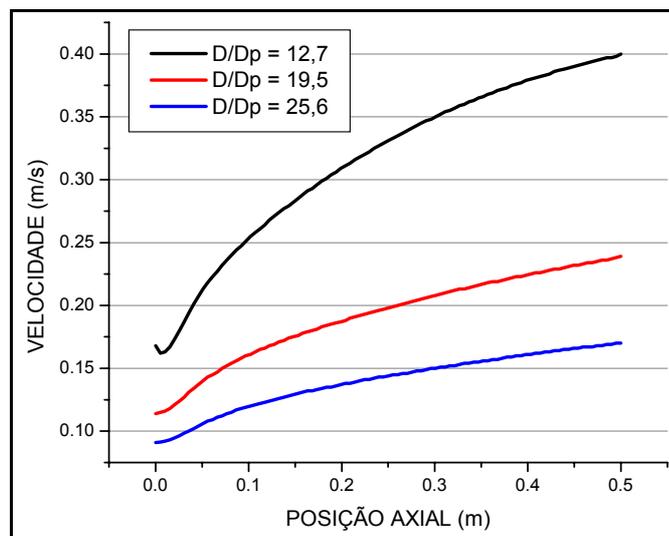


Figura 5.33. Comportamento da velocidade central ao longo do tubo para razões D/D_p diferentes ($Re=500$, $D_p=0,00397$ m).

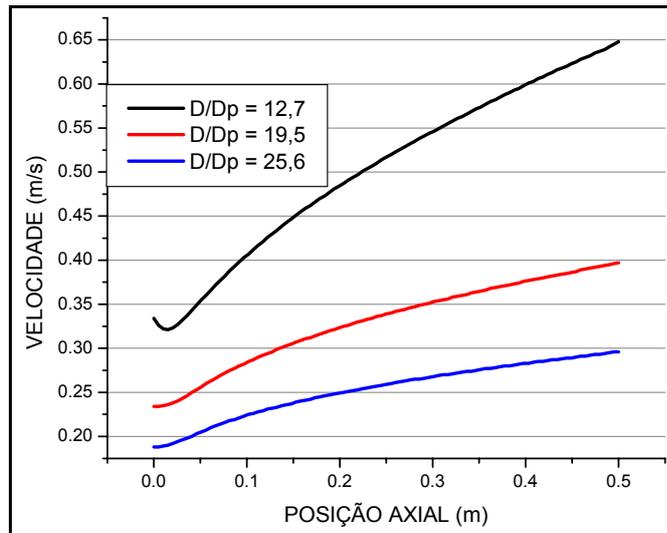


Figura 5.34. Comportamento da velocidade central ao longo do tubo para razões D/D_p diferentes ($Re=1000$, $D_p=0,00397$ m).

Tomando-se a velocidade na região central da interface como a situação onde o escoamento ainda não sofreu o efeito da parede do tubo vazio, indicando 0% de desvio sobre a velocidade avaliada, calculou-se o desvio quadrático para a velocidade central em relação ao seu valor na interface, ao longo da direção axial no tubo, segundo as equações 5.3 e 5.4. O percentual do desvio foi calculado tomando-se um desvio de 100% para a posição onde a velocidade média central apresentasse um valor próximo da velocidade máxima do escoamento (superior a 95%), calculada a partir da equação 5.3. Nesta situação não há a possibilidade de inferir alguma característica ao contorno na entrada (interface), apenas com esta informação (figura 5.31).

$$desv(\%) = \left| \frac{u_c - u_{c0}}{u_{\max} - u_{c0}} \right| \times 100 \quad (5.3)$$

$$u_{\max} = 2u_m \quad (5.4)$$

Com este procedimento mapeou-se a região axial compreendida entre 0,0 (posição de interface) e 0,5 m, obtendo-se um gráfico para o percentual de desvio da velocidade média central em função da distância axial a partir da interface, indicando assim o efeito do tubo vazio sobre a mesma. Estes gráficos podem ser visualizados nas figuras 5.35 a 5.37.

Dois pontos importantes a destacar:

- esse erro diz respeito à velocidade média central, como definida anteriormente, e não a todo o perfil de velocidades;
- esse erro independe dos prováveis erros de medida do instrumento utilizado; portanto, a inferência sobre o escoamento no leito fixo certamente será pior;

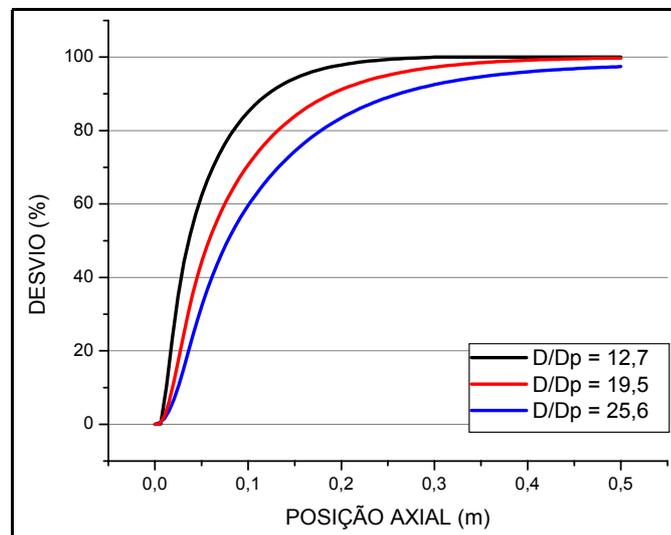


Figura 5.35. Desvio percentual da velocidade média central ao longo do tubo em relação à velocidade média central na interface ($Re=100$, $D_p=0,00397$ m).

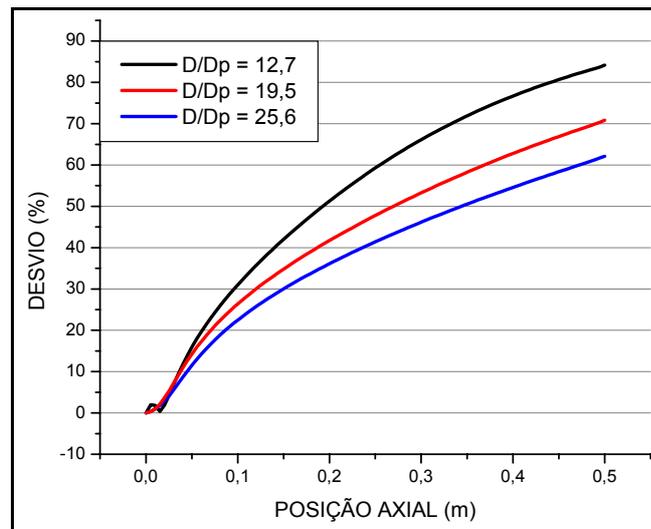


Figura 5.36. Desvio percentual da velocidade média central ao longo do tubo em relação à velocidade média central na interface ($Re=500$, $D_p=0,00397$ m).

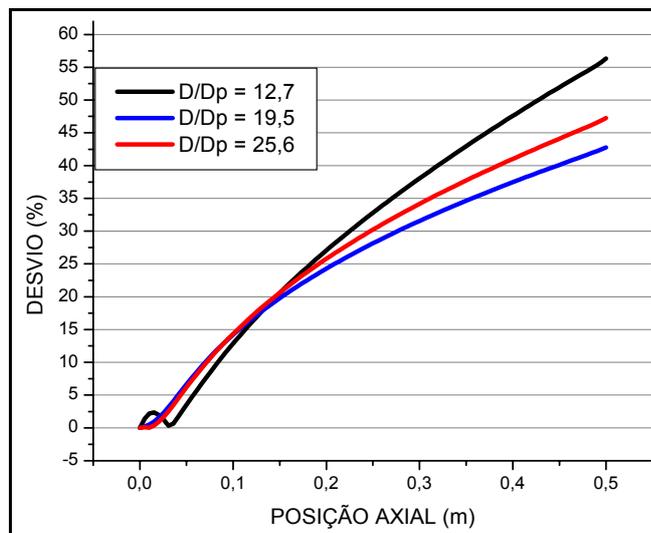


Figura 5.37. Desvio percentual da velocidade média central ao longo do tubo em relação à velocidade média central na interface ($Re=1000$, $D_p=0,00397$ m).

As figuras 5.35 a 5.37 demonstram o comportamento do desvio em relação à interface, segundo as condições explanadas anteriormente. Verifica-se que em dutos de

menor diâmetro, o efeito da parede sobre o escoamento é mais expressivo em relação a dutos de maior diâmetro, na região próxima à saída do leito.

Tomando a figura 5.35 como exemplo, alguém que realizasse uma medida do perfil de velocidades, com relação $D/D_p=25,6$, a 0,1 metros de distância do leito, estaria inferindo o perfil de velocidades no leito fixo com um erro de aproximadamente 40%, baseando-se no critério de velocidade central adotado. Entretanto, apesar dos gráficos indicarem uma melhor medida experimental quanto mais próxima for a posição desta em relação à saída do leito, vale ressaltar que o efeito de saída do leito pode prejudicar a mesma.

É possível que medidas realizadas próximas à saída do leito apresentem um maior erro quando comparado à medidas mais distantes. Este erro pode estar mais presente principalmente em condições operacionais conforme discutido no item 5.3.2.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÃO E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Este capítulo apresenta as principais conclusões obtidas com este trabalho, seguidas por algumas sugestões para o desenvolvimento de novos trabalhos nesta linha de pesquisa.

6.1. CONCLUSÃO

A partir dos resultados simulados observou-se que a frequência e amplitude das oscilações no perfil de velocidades para o interior do leito fixo é dependente do adimensional D/D_p e do número de Reynolds do sistema. Verificou-se a presença de perfis oscilatórios para o escoamento no interior do leito, conforme observado por SINGULANI (2001) para fora do leito.

Através da implementação da rotina Sola (FORTUNA, 2000) para a simulação do perfil de velocidades com campo de pressões desconhecido, foi possível avaliar o comportamento do escoamento em uma posição mais afastada da saída do leito fixo. Tomando-se esta posição como a posição de medida experimental, comparou-se a resposta simulada do escoamento com dados experimentais medidos neste ponto.

As simulações realizadas apresentaram respostas coerentes com os dados experimentais, verificando-se melhores comportamentos para altas relações de D/D_p e baixos números de Reynolds. Uma justificativa para este comportamento é o efeito de saída do leito fixo. Constatou-se que, utilizando a velocidade intersticial como condição de contorno, ao contrário da velocidade superficial, comumente utilizada, o resultado

simulado nestas condições apresentou melhores respostas, quando comparados à dados experimentais.

Com relação à medida experimental de velocidade realizada fora do leito fixo, procurou-se estabelecer um critério confiável e representativo para inferir o perfil de velocidades no interior do mesmo a partir destas medidas. Para isso, adotou-se como critério de avaliação a influência do tubo vazio sobre o escoamento na região de saída do leito fixo. Através da simulação da velocidade central ao longo da posição axial no tubo vazio, foi possível mapear essa influência avaliando a diferença dessa velocidade média central com relação a mesma calculada à saída do leito. Essa diferença foi tomada como representativa para a influência do tubo vazio no escoamento, ou seja, o desvio da medida no ponto em questão em relação à medida no interior do leito fixo.

6.2. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Para a realização de trabalhos futuros neste tema, baseando-se nas dificuldades observadas ao longo deste trabalho, destacam-se algumas sugestões:

- Realização de experimentos para observar o desenvolvimento do escoamento após a saída do leito, ao longo da direção axial, com a finalidade de avaliar as respostas simuladas;
- Testes com outros algoritmos de CFD, para testar a qualidade do algoritmo Sola;
- Utilização de pacotes para Fluidodinâmica Computacional na avaliação do problema;
- Incorporar a troca de calor para avaliar o comportamento da temperatura quando utilizado o perfil de velocidades no interior do leito.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. BEY, O., EINGENBERGER, G., Fluid Flow Through Catalyst Filled Tubes. *Chemical Engineering Science*, vol 52, 1365-1376, 1997.
2. BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N., Transport Fenomena. Wiley, New York, 1960.
3. BROWN, G. G., FOUST, A. S., SCHNEIDEWIND, R., KATZ, D. L., WOOD, W. P., WHITE, R. R., BROWN, G. M., BROWNELL, L. E., MARTIN, J. J., WILLIAMS, G. B., BANCHERO, J. T., e YORK, J. L., Unit Operations. Wiley, 1950.
4. FORTUNA, A. O., Técnicas Computacionais para Dinâmica de Fluidos. EDUSP, São Paulo, 2000.
5. FREUND, H., ZEISER, T., HUBER, F., KLEMM, E., BRENNER, G., DURST, F., EMIG, G., Numerical Simulations of Single Phase Reacting Flows in Randomly Packed Fixed-bed Reactors and Experimental Validation. *Chemical Engineering Science*, vol .58, pp. 903-910, 2003.
6. GOVINDARAO V. M. H., FROMENT, G. F., Voidage Profiles in Packed Beds of Spheres. *Chemical Engineering Science*, 41, 533, 1986.
7. HAIDEGER, E., VORTMEYER, D. E, WAGNER, P., Simultane Losuung von Energie – Stoff-und Impullgleichungen fur Wandgekühlte Chemische Fesbtreaktoren. *Chem. Ing. Tech.*, vol. 61, pp. 647-650, 1989.
8. KLERK, A., Voidage Variation in Packed Beds at Small Column to Particle Diameter Ratio. *AIChE Journal*, vol. 43, nº8, pp. 2022-2029, 2003.

9. KRISCHKE, A. M., Modellierung und Experimentelle Untersuchung von Transportprozessen in Durchströmten Schüttungen. *Fortschritt-Berichte VDI*, vol. 3, nº 713, 2001.
10. MALISKA, C. R., Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional. LTC, Rio de Janeiro, 1995.
11. MASSARANI, G., Fluidodinâmica em Sistemas Particulados. 2ª Edição, E-Papers, Rio de Janeiro, 2002.
12. MOISE, A., TUDOSE, R. Z., Air Isothermal Flow Through Packed Beds. *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol. 18, pp. 134-141, 1998.
13. MORALES, M., SPINN, C. W., SMITH, J. M., Velocities and Effective Thermal Conductivities in Packed Beds. *Engineering and Process Development*, vol. 43, nº1, pp. 225-232, 1951.
14. MUELLER, G. E., Radial Void Fraction Distributions in Randomly Packed Fixed Beds of Uniformly Sized Spheres in Cylindrical Containers. *Powder Technology*, vol. 72, pp. 269-275, 1992.
15. MUELLER, G. E., Numerical Simulation of Packed Beds with Monosized Spheres in Cylindrical Containers. *Powder Technology*, vol. 92, pp. 179-183, 1997.
16. PAPAGEORGIOU, J. N., FROMENT, J. F., Simulations Models Accounting for Radial Voidage Profiles in Fixed-Bed Reactors. *Chemical Engineering Science*, vol. 50, nº 19, pp. 3043-3056, 1995.
17. PATANKAR, S. V., Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, *Hemisphere Publishing Corporation*, Washington D. C., 1980.
18. PRESS, W. H., et al., Numerical Recipes in Fortran 90: The Art of Parallel Scientific Computing. 2º ed, Cambridge University, vol 2, 1996.

19. REYES, S. C., IGLESIAS, E., Monte Carlo Simulations of Structural Properties of Packed Beds. *Chemical Engineering Science*, vol. 46, n° 4, pp. 1089-1099, 1991.
20. SCHINITZLEIN, K., Modelling Radial Dispersion in Terms of the Local Structure of Packed Beds. *Chemical Engineering Science*, vol. 56, pp. 579-585, 2001.
21. SCHWARTZ, C. E., SMITH, J. M., Flow Distribution in Packed Beds. *Industrial and Engineering Chemistry*, vol. 45, n°6, pp. 1209-1218, 1953.
22. SINGULANI, R. C., Análise Teórico-Experimental do Escoamento do Ar em Leito Fixo. São Carlos, UFSCar, 2001. 97p. (Dissertação).
23. SOPPE, W., Computer Simulation of Random Packings of Hard Spheres. *Powder Technology*, vol. 62, pp. 189-196, 1990.
24. SPEDDING, P. L., SPENCER, R. M., Simulation of Packing Density and Liquid Flow in Packed Beds. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 19, pp. 43-73, 1995.
25. SUBAGYO, STANDISH, N., BROOKS, G. A., A New Model of Velocity Distribution of a Single-Phase Fluid Flowing in Packed Beds. *Chemical Engineering Science*, vol. 53, n° 7, pp. 1375-1385, 1998.
26. VERSTEEG, H. K., MALALASEKERA, W., An Introduction to Computational Fluid Dynamics – The Finite Volume Method. Pearson, England, 1995.
27. ZEISER, T., LAMMERS, P., KLEMM, E., LI, Y. W., BENS DORF, J., e BRENNER, G., CFD-Calculation of Flow, Dispersion and Reaction in a Catalyst Filled Tube by the Lattice Boltzmann Method. *Chemical Engineering Science*, vol. 56, pp. 1697-1704, 2001.

28. ZIÓLKWOSKA, I., ZIÓLKWOSKI, D., Modelling of Gas Interstitial Velocity Radial Distribution Over a Cross-Section of a Tube Packed with a Granular Catalytic Bed. *Chemical Engineering Science*, vol. 48, nº 18, pp. 3283-3292, 1993.
29. ZOTIN, F. M. Z., O Efeito de Parede em Colunas de Recheio. UFSCar, São Carlos, 85p. 1985. (Dissertação).