

Felipe Martins Pereira Ribeiro

**MODELAGEM MATEMÁTICA DA TRANSFERÊNCIA DE MASSA POR
CONVECÇÃO E DIFUSÃO ENTRE UMA ESFERA E UM FLUIDO**

São Paulo
2012

Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da Escola Politécnica da USP
--

Felipe Martins Pereira Ribeiro

MODELAGEM MATEMÁTICA DA TRANSFERÊNCIA DE MASSA POR CONVECÇÃO E DIFUSÃO ENTRE UMA ESFERA E UM FLUIDO

Trabalho de Formatura apresentado à
Escola Politécnica da Universidade de
São Paulo

Departamento de Engenharia Metalúrgica
e de Materiais

Orientador: Prof. Dr. Marcelo de Aquino
Martorano

São Paulo
2012

Agradecimentos

Agradeço inicialmente ao professor Martorano e sua aparente infinita paciência, sempre disposto a me receber em sua sala para ajudar com o trabalho e discutir o caminho a seguir. A atenção despendida por ele com os alunos não se limita àqueles a quem está orientando, devo dizer que em todos esses anos na Poli vi poucos professores cuja dedicação para com os alunos fosse igual à dele.

Devo agradecer aos meus pais por me bancarem por esses longos seis anos, permitindo que eu somente me dedicasse aos estudos não tendo maiores preocupações, acreditando nesse investimento que estavam fazendo.

Em geral agradeço à todos que estiveram ao meu lado nesses seis anos aguentando muitas vezes meu mau humor motivado por alguma prova ou trabalho (em especial por esse trabalho de formatura), e peço desculpas pela chatice em tantos momentos.

Aos meus camaradas de Poli com quem convivi nos últimos anos que passaram ou ainda estão passando por todos esses bem conhecidos sufocos politécnicos, devo dizer que muitos me ajudaram mas em especial o companheiro Bruno Nagle foi sem dúvida o maior colaborador para que eu não estendesse minha vida politécnica por mais que seis anos.

Resumo

A modelagem matemática dos fenômenos de transporte ao redor de uma esfera já foi previamente analisado por inúmeros autores, cada um pesquisando fluidodinâmica ou transferência de calor e massa individualmente. Encontra-se na literatura os mais diversos artigos tratando desde situações genéricas até o modelagem de casos singulares de eventos particularmente interessantes à determinado pesquisador, há também trabalhos detalhando o processo de criação do modelo que dão ênfase na parte matemática do fenômenos bem como na criação de domínio e malha eficientes. O presente trabalho realiza simulações de fluidodinâmica e transferência de massa por meio do software comercial COMSOL v3.5 e as simulações de transferência de massa por difusão com contorno móvel no COMSOL v4.2. São compilados resultados da fluidodinâmica e transferência de calor e de massa de uma esfera, que são comparados à conhecidos resultados provenientes de correlações analíticas, outras simulações e modelos experimentais. Além disso, faz-se um estudo para garantir que os resultados fornecidos pelo modelo são independentes com relação ao domínio e a malha usada. A confirmação de resultados conhecidos além de compilá-los, dá base para a simulação da transferência de massa em uma esfera cujo contorno está se movendo. Verifica-se

então para que faixa de Peclet $(Pe = \frac{LV}{D})$, sendo L um comprimento característico, V a velocidade da movimentação do contorno e D o coeficiente de difusão) a correlação analítica para estado quasi-estacionário é válida.

Sumário

Agradecimentos.....	1
Resumo.....	2
Introdução.....	4
Objetivo.....	5
1-Revisão bibliográfica.....	6
1.1-Transporte de quantidade de movimento.....	6
1.2-Transporte de calor e massa.....	11
1.3-Sobre a adequação do domínio e da malha.....	15
2-Metodologia.....	17
2.1-O modelo matemático.....	18
2.1.1-Transporte de quantidade de movimento.....	18
2.1.2-O transporte de massa.....	21
2.1.3- Transporte de massa com movimentação do contorno.....	22
2.2-Adequação do domínio e da malha.....	24
2.2.1-Domínio.....	25
2.2.2-Malha.....	27
3-Obtenção de resultados numéricos.....	31
3.1-Resultados relativos ao transporte de quantidade de movimento.....	31
3.2-Resultados relativos ao transporte de energia e massa.....	36
3.3- A movimentação do contorno.....	39
Conclusões.....	44
Bibliografia.....	45

Introdução

Para o estudo dos fenômenos de transporte, cada vez mais, é usada como ferramenta a simulação computacional. Muitos trabalhos buscam meios para resolver as equações de transporte de formas analíticas, outros usam a simulação computacional e ainda há outros que se valem de experimentos em escala do problema. Cada trabalho identifica o comportamento dos fenômenos em separado, privilegiando um dos métodos mencionados.

A simulação computacional é em geral mais simples de ser executada do que medidas experimentais, isso permite que se verifique com certa facilidade resultados analíticos além de fornecer dados importantes de fenômenos difíceis de reproduzir em laboratório.

Entender a transferência de calor e massa em processos metalúrgicos contribui não só para aumentar a produtividade mas também para tornar as operações mais eficientes energeticamente e estáveis. Para que esse entendimento seja alcançado em um modelo é necessário que a descrição das transferências de calor e massa sejam adequadas, sendo assim, recriar a troca de calor e massa ao redor de uma esfera dá ferramentas e cria dados para que qualquer operação similar possa ser melhor compreendida e conseqüentemente melhorada.

Em particular, modelar a transferência de massa ao redor de uma esfera cujo contorno é móvel, permite transportar os resultados obtidos, com uma boa aproximação, para o caso onde há uma dendrita equiaxial crescendo em um processo de solidificação.

Objetivo

Este trabalho tem como objetivo simular a transferência de massa (ou calor) entre um meio fluido e uma esfera em movimento no interior deste fluido, considerando em alguns casos também o efeito do crescimento da esfera.

1-Revisão bibliográfica

1.1-Transporte de quantidade de movimento

A análise fluidodinâmica foi o ponto de partida para o modelagem da transferência de massa com movimentação de contorno de uma esfera. Há muitos trabalhos relatando diferentes abordagens do tema e com diferentes objetivos, de forma geral todos solucionam as equações do movimento sob diferentes enfoques.

O escoamento de um fluido ao redor de uma esfera pode ser dividido em três regimes; escoamento estável simétrico para valores de Reynolds (Re) até 200, escoamento estável assimétrico para Reynolds entre 210 e 270 e escoamento instável para Reynolds maiores que 270 [1]. As linhas de corrente revelam que para Reynolds entre 20 e 210 o fluxo tem a mesma estrutura, apresentando diferenças apenas no local onde ocorre a separação, na posição do vórtice e no comprimento da cauda [1].

No trabalho de Atefi et. Al [3] a geometria estudada é dada por coordenadas genéricas (ξ, η, ζ) , que no problema se sobrepõe às coordenadas esféricas (θ, Φ, r) , e há um fluxo na direção x com velocidade V_∞ conforme mostrado na figura 1.

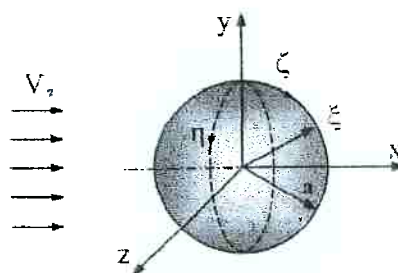


Figura 1: Sistema de coordenadas genéricas

O fluxo é governado pelas equações da continuidade e conservação da quantidade de movimento abaixo [3]:

$$\int_A \vec{V} \cdot \vec{n} dA = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \int_V \vec{V} dV + \int_A \vec{V} \vec{V} \cdot \vec{n} dA = - \int_A P \cdot \vec{n} dA + \frac{1}{Re} \int_A \nabla \vec{V} \cdot \vec{n} dA \quad (2)$$

onde $\tau = \lambda \cdot V$, sendo λ definido como coeficiente de escorregamento [3].

Essas equações foram adimensionalizadas usando o diâmetro da esfera D , a velocidade do fluido V_∞ e (D/V_∞) como o comprimento característico, velocidade e escala de tempo respectivamente [3]. A condição de contorno de entrada é simplesmente $v_x=1$ e $v_y=v_z=0$ [3]. A condição de saída impõe gradiente zero para todas as variáveis ao longo das linhas de corrente, para $\theta > 120^\circ$ [3].

O coeficiente de arrasto provocado por um corpo no fluido que o circunda pode ser dividido em duas partes, uma causada principalmente por uma diferença de pressão oriunda do formato do objeto; chamada resistência de forma, e outra causada pela resistência causada por cisalhamento viscoso na camada limite; chamada de atrito de superfície [7]. O coeficiente de arrasto é então definido como $C_D = C_{D,P} + C_{D,F}$, sendo $C_{D,P}$ a resistência de forma e $C_{D,F}$ o atrito na superfície. O coeficiente de arrasto em uma esfera é dado pela somatória das forças de atrito e pressão podendo ser escrito na forma

$$C_D = \frac{F_x}{\left(\frac{1}{2} \rho V_\infty^2 \pi \frac{D^2}{4}\right)} \quad (3)$$

onde F_x é a somatória das forças que compõem $C_{D,P}$ e $C_{D,F}$, ρ é a densidade do fluido, V_∞ a velocidade do fluido e D o diâmetro da esfera[1].

Para escoamento com Re muito baixo ao redor de uma esfera temos que [10]:

$$F_x = 6 \pi \mu \frac{D}{2} V_\infty \quad (4)$$

sendo μ a viscosidade do fluido.

Isso nos leva à relação

$$C_D = \frac{12\mu}{\frac{D}{2} V_\infty \rho} \quad (5) \text{ e então } C_D = \frac{24}{Re} \quad (6)$$

Comparações entre resultados experimentais e a correlação (6) podem ser feitas a partir da curva que relaciona coeficiente de arrasto com número de Reynolds (Figura 2).

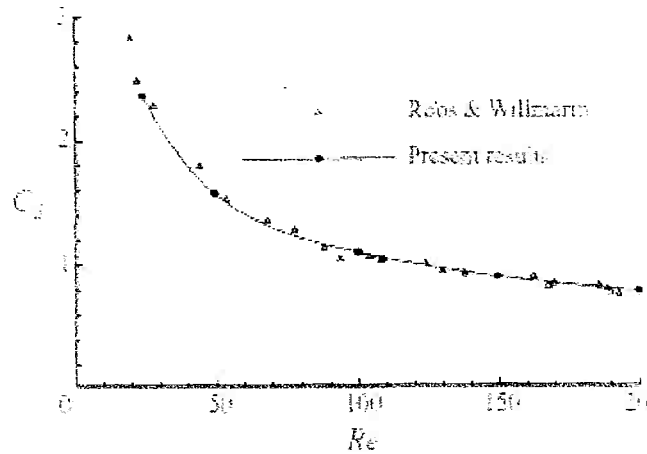


Figura 2: Coeficiente de arrasto em função do número de Reynolds

O modelagem matemática do artigo de Le Clair et. al. [2] é mostrado a seguir. Empregando todas as variáveis em sua forma adimensional temos a equação de Navier- Stokes, para estado estacionário para um fluido incompressível e simétrico, em termos da função corrente em coordenadas esféricas dada por [2]:

$$\frac{Re}{2} \left[\frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{E^2 \psi}{r^2 \sin^2 \theta} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{E^2 \psi}{r^2 \sin^2 \theta} \right) \right] \sin \theta = E^4 \psi \quad (7), \text{ onde}$$

$$E^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\sin \theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (8).$$

A equação (8) pode ser dividida em duas equações de segunda ordem assumindo que [2]:

$$E^2 \psi = \zeta r \sin \theta \quad (9)$$

de onde (9) se torna

$$\frac{Re}{2} \left[\frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\zeta}{r \sin \theta} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\zeta}{r \sin \theta} \right) \right] \sin \theta = E^2 (\zeta r \sin \theta) \quad (10)$$

Para um fluido escoando no regime de “creeping flow” (velocidades muito baixas) a equação do movimento pode ser reduzida para a forma $E^4 \psi = 0$ (11) que, ao ser imposta às mesmas condições de contorno para a equação não linear foi resolvida numericamente [2]. Alternativamente essa equação pode ser resolvida analiticamente se a função corrente for expressa como $\psi = [(A'/r) + B'r + C'r^2 + D'r^4] \sin^2 \theta$ (12), onde as constantes A', B', C' e D' são expostas em Hamielec et. al. satisfazendo as mesmas condições de contorno. De onde resulta que $C_D = -32B'/N_{Re}$ (13) [2]. O efeito da posição da fronteira do domínio no valor de C_D foi estimado a partir de uma comparação entre o C_D calculado da solução analítica de Stokes para um fluido confinado e o C_D dado pela solução de Stokes para um fluido não-confinado dado pela equação (6) [2]. Os resultados podem ser conferidos na figura 3, onde N_{Re} é o número de Reynolds, r_∞ a distância entre a esfera e o contorno externo. A primeira coluna com resultados de C_D foi obtida calculando-o por meio da equação (6), a segunda coluna por meio da equação (11) e a terceira por meio das equações (9) e (10). Na última coluna o C_D é obtido através de uma correção da equação (6) para um meio sem fronteiras.

N_{Re}	r_∞	C_D	C_D	C_D	C_D
		from analytical solution. Equ. (9)	from numerical solution. Equ. (6)	from numerical solution. Equ. (2) & (3)	corrected for unbounded fluid
0.01	90	2448.980	2446.510	2446.695	2400.185
	365	2411.890	2412.302	2413.199	2400.897
	1000	2404.328	2406.795	2408.669	2401.874
0.1	90	244.898	244.651	246.224	241.573
	365	241.189	241.230	244.467	243.177
	1000	240.433	240.680	244.501	243.821
1.0	150	24.292	24.273	27.394	27.121
	220	24.198	24.204	27.432	27.230
	1000	24.043	24.068	27.375	27.367

Figura 3: Comparação entre coeficientes de arrasto para diversos tamanhos de domínio

O trabalho de LeClair et al. [2] propõe calcular numericamente as equações de

Navier-Stokes para determinar o arrasto hidrodinâmico de uma esfera em queda livre em um fluido infinito [2]. As soluções numéricas foram comparados com os resultados teóricos de Stokes, Oseen, Goldstein, Proudman e Pearson, Jenson, Rimon, Cheng e Carrier, além de Maxworthy e Pruppacher e Steinberger. Para Reynolds menores a solução estava mais de acordo com a de Proudman e Pearson, para Reynolds intermediários a mais adequada foi a relação de Carrier e, para Reynolds altos, com os cálculos feitos por Haimelec et al. para Reynolds entre 40 e 100 e com os resultados numéricos de Rimon e Cheng [2]. Para toda a faixa de 0.01 e 400 adotada no trabalho a melhor concordância se deu com o trabalho experimental de Pruppacher, Pruppacher e Steinbachner e Beard e Pruppacher [2].

As condições de contorno para um modelagem como esse devem levar em conta a superfície de entrada, a de saída, as superfícies abertas e a esfera. A superfície de entrada de fluido consiste de um perfil de velocidade uniforme unidirecional enquanto a condição na superfície de saída deve ter pressão e tensão viscosa nulas, essa condição de saída permite que as perturbações deixem o domínio sem reflexão [15]. Sobre a superfície esférica é adotada condição de não escorregamento [15]. A resolução das equações foi feita por meio do método dos volumes finitos, para tanto, as equações de Navier-Stokes foram adimensionalizadas e simplificadas adotando a hipóteses de fluido incompressível [3].

É importante também destacar o trabalho de [3], no qual a fluidodinâmica é estudada adotando-se uma condição de contorno diferente da usual. As simulações numéricas são feitas para um fluido escoando em torno de uma esfera, porém, a condição de contorno na superfície desse sólido não é apenas a comumente usada de não escorregamento. Os testes são feitos em função do número de Reynolds e do número de Trostel, sendo este último definido como $\lambda \frac{a}{\mu}$, onde λ é o coeficiente de escorregamento, a o raio da esfera e μ a viscosidade do fluido. O número de Trostel pode variar de zero a infinito, sendo que na condição de escorregamento total seu valor é igual à zero e na condição de não-escorregamento seu valor tende a infinito [3]. Entre as varias condições analisadas estão inclusive aquelas em que não há escorregamento, cujos resultados podem fornecer valiosas fontes para comparação com os resultados calculados neste trabalho.

1.2-Transporte de calor e massa

É possível afirmar que a transferência de massa e calor por convecção são análogas uma vez que suas equações na forma adimensional assumem formas idênticas [7]. Cada uma das equações contém termos relacionados ao transporte convectivo e difusivo se relacionando com o campo de velocidades por meio do número de Reynolds. Dessa forma os parâmetros número de Prandtl (Pr) e número de Schmidt (Sc) assumem papéis análogos [7]. Tendo isso em vista pode-se estender a analogia das relações relativas à camada limite térmica para a camada limite de concentração, bem como os perfis de temperatura e concentração nessa região. Sob condições ideais os números de Nusselt (Nu) e Sherwood (Sh) podem ser considerados idênticos [13]. As relações de transferência de massa e calor são intercambiáveis para uma geometria particular, ou seja, se for realizada uma série de experimentos acerca da transferência de calor para determinar a forma da equação $Nu=f(x,Re,Pr)$ os resultados podem ser usados para entender a transferência de massa, simplesmente substituindo Nu por Sh e Pr por Sc [7].

Todos os dados experimentais considerados em [4] são descritos pelas equações:

$$\text{do movimento: } \rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \cdot \nabla v \right) = -\nabla P + \rho g + \mu (\nabla v + \nabla v^*) \quad (14)$$

$$\text{da continuidade } \nabla \cdot v = 0 \quad (15)$$

$$\text{da energia térmica } \rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (v \cdot \nabla T) \right) = k \nabla^2 T \quad (16)$$

em que k é a condutividade térmica, ρ a densidade e C_p o calor específico constantes e a viscosidade μ função da temperatura T [4]. Como a viscosidade está sendo escrita em função da temperatura podemos escrevê-la [4]:

$$\nabla \mu = \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right) (\nabla T) \quad (17)$$

O sobre-escrito asterisco indica que a função é avaliada na temperatura de

referência T^* , podemos expressar a equação (14) como[4]:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla P + \rho g + \mu^* \left[1 + \frac{1}{\mu^*} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)^* (T - T^*) \right] \nabla^2 \mathbf{v} + \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)^* (\nabla T) \cdot (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^*) \quad (18)$$

Escolhendo o comprimento característico L^* e a velocidade característica u^* , definimos os seguintes adimensionais [4]:

$$U = \frac{v}{u^*} \quad (19) \text{ velocidade adimensional,}$$

$$\nabla = L^* \nabla \quad (20) \text{ operador nabla adimensional,}$$

$$P = \frac{p - p^*}{\rho u^{*2}} + \frac{\phi}{u^{*2}} \quad (21) \text{ pressão adimensional onde } \phi \text{ é a função de energia potencial gravitacional,}$$

$$\Lambda = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial \mu}{\partial \Theta} \right) \quad (22) \text{ parâmetro de viscosidade adimensional,}$$

$$\theta = tu^*/L^* \quad (23) \text{ tempo adimensional e}$$

$$\Theta = (T - T^*)/(T_0 - T^*) \quad (24) \text{ temperatura adimensional}$$

Re-escrevemos as equações (14), (15) e (16) para obter as seguintes adimensionais:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial \theta} \right) + U \cdot \nabla U = -\nabla P + \frac{1}{Re} [1 + \Lambda \Theta] \nabla^2 U + \frac{1}{Re} [\Lambda (\nabla \Theta) \cdot (\nabla U + \nabla U^*)] \quad (25)$$

$$\nabla \cdot U = 0 \quad (26)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \theta} = U \cdot \nabla \Theta = \frac{1}{Re Pr} \nabla^2 \Theta \quad (27)$$

As simulações em [13] tem início com a transferência de calor de uma esfera para um meio infinito. Os resultados dessa simulação foram comparados com as correlações obtidas de forma experimental por Ranz-Marshall, Whitaker e Achenbach, respectivamente:

$$Nu = 2.0 + 0.66 Re^{0.5} Pr^{0.33} \text{ para } 10 < Re < 10^4, Pr > 0.7, Pe \gg 1 \quad (28)$$

$$Nu = 2.0 + (0.4 Re^{0.5} + 0.06 Re^{0.67}) Pr^{0.4} \text{ para } 3.5 < Re < 7.6 \times 10^4, 0.7 < Pr < 380 \quad (29)$$

$$Nu = 2.0 + \left(\frac{1}{4} Re + 3 \times 10^{-4} Re^{1.6}\right) \text{ para } 10^2 < Re < 2 \times 10^5 \quad (30)$$

O artigo ainda se vale de um modelo em escala do problema, no qual foi adotada uma esfera de 12.7mm de diâmetro com temperatura de 310K, definiu-se um domínio cilíndrico cuja condição de contorno, exceto pela entrada e saída do fluido, foi superfície aberta; para simular a condição de meio infinito. O fluido foi definido incompressível com temperatura 300K. As simulações de regime laminar foram feitas para $1.27 < Re < 127$ e de regime turbulento para $127 < Re < 1.27 \times 10^5$. Além disso, decidiu-se variar o número de Reynolds por meio da densidade do fluido e por manter o número de Prandtl igual a um [13].

O trabalho de [4] não tem a intenção de apresentar novas correlações para o referido fenômeno, mas sim de revisar as correlações antigas sob a ótica dos novos dados disponíveis e torna-la fácil de usar e aplicável a diferentes problemas. O interesse principal é expandir os conhecimentos acerca da troca de calor por convecção forçada em diferentes configurações possíveis.

No escoamento ao redor de uma esfera, configuração relevante para o trabalho, existe uma solução para estado estacionário na qual $Nu=2$ [4]. Sabendo-se que existe uma dependência do número de Nusselt em função de Reynolds e Prandtl, a determinação da correlação tem como ponto de partida a equação no seguinte formato [4]: $(Nu-2)=f(Re, Pr)$ pois sabe-se que quando $Re \rightarrow 0$, $f(Re) \rightarrow 0$.

O trabalho de Richardson afirma que a transferência de calor deve ser considerada como dois processos ocorrendo em paralelo. Na região da camada limite laminar a contribuição para o número de Nusselt deve ter os seguintes pesos: $Re^{1/2}$ e $Pr^{1/3}$, enquanto na região turbulenta os pesos devem ser $Re^{2/3}$ e $Pr^{1/3}$ o que leva a equação anterior a ser expressada da seguinte forma: $(Nu-2)=(aRe^{1/2}+bRe^{2/3})Pr^{1/3}$ [4].

Os trabalhos de Vliet e Leppert e Kramers permitiram acertar os expoentes e escolher as constantes a e b de modo a satisfazer dados experimentais, sendo que a forma final da equação é a que se segue [4]:

$$(Nu-2)=(0,4 Re^{1/2}+0,06 Re^{2/3}) Pr^{0,4} \quad (31)$$

Os efeitos da variação do numero de Reynolds e do numero de Prandtl na transferência de calor em uma esfera também foram verificados em [5]. A partir do método dos volumes finitos foram obtidos resultados que permitiram estabelecer correlações para condições de contorno de temperatura e fluxo de calor constantes na superfície de uma esfera sólida. Os cálculos foram feitos para Reynolds variando entre 5 e 200 e Prandtl entre 0,7 e 200, uma vez validados os resultados do campo de velocidades a equação da energia térmica foi resolvida para o campo de temperatura de modo a se obter os números de Nusselt global e local [5]. A semelhança entre os resultados relativos ao número de Nusselt local obtidos por meio de correlações e no artigo podem ser observadas na figura 4 onde a correlação 13 é a equação (31) e a correlação 14 é a equação (32) fornecida por Feng e Michaelides [4]:

$$Nu=(0.922+Pe^{1/3}+0.1Re^{1/3}Pe^{1/3}) \quad (32)$$

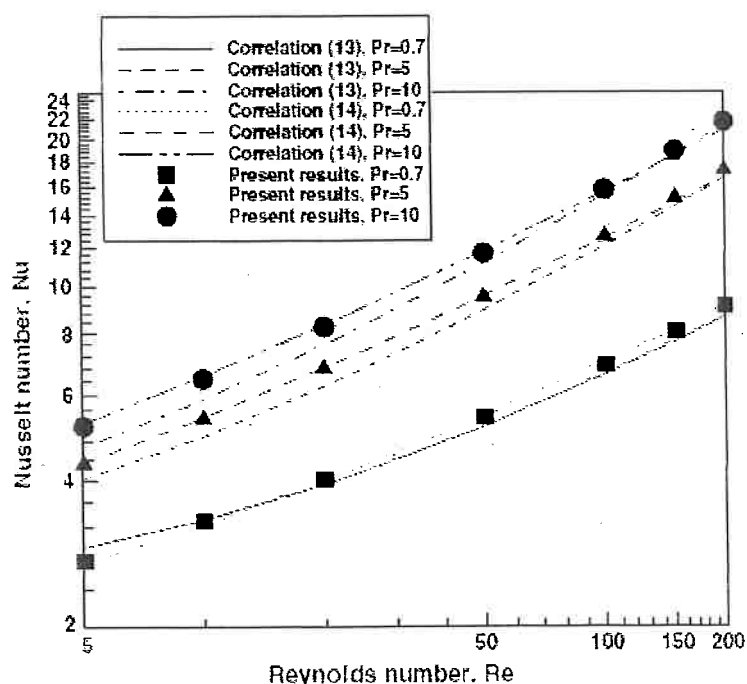


Figura 4: Relação entre número de Nusselt médio e número de Reynolds

1.3-Sobre a adequação do domínio e da malha

Para a realização dos cálculos numéricos é importante que haja um bom compromisso entre precisão e capacidade computacional, sendo esse último quesito traduzido em tempo de processamento. Testes preliminares são feitos para que se determine o tamanho do domínio e a densidade de elementos na vizinhança da esfera.

Para validar os resultados numéricos, sua dependência em relação a malha deve ser examinada de modo a minimizar a incerteza [17]. São feitas simulações onde as partículas tem 42, 72 ou 114 nós na superfície caracterizando as malhas grosseira, média e fina respectivamente e obteve-se um coeficiente de transferência de massa com a malha média aproximadamente 6,3% maior do que com a malha grosseira e 1,2% menor do que com a malha fina [17]. Decidiu-se que os resultados da simulação com malha média e fina estão coerentes, assim, optou-se por utilizar a malha com 72 nós na superfície da esfera para reduzir o tempo de uso do computador [17].

Para Reynolds pequenos uma malha mais fina é necessária perto da superfície

da esfera, enquanto uma malha mais grosseira pode ser usada longe da superfície [13]. Uma malha desse tipo é feita colocando cinco camadas sobre a superfície da esfera com espessura crescente, camada a camada, ao longo da direção radial [13]. A literatura sugere que para Reynolds igual a 200 a região afetada pela turbulência pode chegar a 1.5 unidades não-dimensionais na parte de trás da esfera, portanto, uma malha mais fina é aplicada em uma região cuja distância é de até 2.5 a partir do centro da esfera; além dessa região a malha se torna mais grosseira [5]. Fixado um tamanho de domínio foram feitas análises para dois regimes; $Re < 20$ e $20 < Re < 200$. Na faixa de $20 < Re < 200$ empregou-se $Re = 100$ e analisou-se o efeito da variação da malha no coeficiente de arrasto. A maior mudança quando mudando de uma malha 103×200 para uma 103×307 foi 0.48% [5]. Para a faixa de $Re < 20$ a simulação foi feita com $Re = 5$, a variação no resultado ao se alterar a malha de 63×240 para 103×298 foi de 0.29% o que permitiria que a malha mais grosseira (63×240) fosse utilizada [5]. Decidiu-se colocar pelo menos dez nós da malha no ponto de estagnação frontal da esfera. A espessura aproximada da camada limite no ponto de estagnação é $\delta = 1.13 / Re^{1/2}$ (33) onde δ é a espessura da camada limite adimensionalizada pelo diâmetro da esfera [1]. Sendo assim, a taxa de crescimento dos elementos da malha a partir da superfície da esfera é igual a 1,06 [1]. A malha deve ter resolução que permita resolver não só a camada limite laminar mas também a camada limite térmica, cuja espessura é da ordem de $\delta_t \approx Pr^{-1/3} \delta$ (34) [5].

Testes passados, com diferentes tamanhos de domínio mostraram que há pouca mudança nas soluções relativas ao fluxo, quando Reynolds é menor que 100, ao se estender o domínio além de uma distância maior que 15 vezes o diâmetro da esfera; no ponto de estagnação traseiro a pressão apresentou diferença de apenas 1.2% em relação a um domínio de tamanho 20 diâmetros [1]. Está claro que mudar a fronteira externa de uma posição igual a dez raios para uma posição de 20 ou 30 raios não introduz nenhuma mudança perceptível no coeficiente de arrasto. Para $Re < 1$ o efeito da superfície da esfera para uma dada distância até a fronteira do domínio cresce fortemente com a diminuição de Re [2]. O artigo de Le Clair et. al. [2] faz a comparação explícita entre alguns tamanhos de domínio e calcula o erro em relação à uma solução analítica proposta. Os erros resultantes da posição da

fronteira externa do domínio foram estimados a partir de comparações entre soluções numéricas e analíticas da equação de Navier-Stokes [2].

Uma outra análise afirma que a mudança no domínio de 20 para 90 representou, para $Re=20$, mudanças no $C_{D,P}$, $C_{D,F}$ e C_D de 0.88%, 0.39% e 0.57% e para $Re=200$ mudanças de 0.026%, 0.28% e 0.15%, o que representa menos de 1% em ambos os valores extremos [5]. As diversas tentativas com domínios e malhas de diferentes tamanhos geraram as tabelas abaixo (Figura 5).

Table 1
Domain independence study

Domain size	$C_{D,P}$	$C_{D,F}$	C_D
$Re = 5$			
100	4.7358	1.2355	6.9713
150	4.7671	1.2597	7.0267
$Re = 20$			
20	1.7290	0.9775	1.7065
40	1.7223	0.9693	1.6915
$Re = 200$			
20	0.3696	0.3847	0.7455
40	0.3596	0.3846	0.7447

Table 2
Grid independence study

Grid size	$C_{D,P}$	$C_{D,F}$	C_D
$Re = 100$			
63×112	0.5263	0.4938	1.0201
63×135	0.5638	0.4807	1.0445
103×146	0.5708	0.4915	1.0516
103×200	0.5787	0.4846	1.0633
103×307	0.5796	0.4821	1.0618
$Re = 5$			
63×240	4.7567	1.2551	7.0098
103×298	4.7671	1.2597	7.0267

Figura 5: Estudo da independência dos resultados em relação ao domínio e à malha.

2-Metodologia

Para o presente trabalho foram usadas as equações de Navier-Stokes e da continuidade para descrever a fluidodinâmica, cuja adimensionalização forneceu o número de Reynolds para ser comparado com coeficiente de arrasto. Além disso, foi usada equação da conservação das espécies químicas adimensionalizada, para que se obtivesse os números de Reynolds e Schmidt que foram utilizados para avaliar a transferência de massa na forma do adimensional Nusselt. Ainda, adimensionalizou-se a equação da conservação das espécies químicas de modo a obter um número de Peclet que relacionasse a velocidade de crescimento da esfera. Foi ainda necessário para o modelagem matemática decidir qual seria o domínio e a malha utilizados para garantir que os resultados seriam independentes desses dois parâmetros. Uma vez decidido o tamanho do domínio e a configuração da malha

realizaram-se simulações para comparar dados relativos à fluidodinâmica, à transferência de massa e à transferência de massa com movimentação do contorno com dados já existentes na literatura.

A modelagem do fenômeno teve início com o caso mais simples; a resolução da equação de Navier-Stokes e da continuidade para fluido escoando ao redor de uma esfera. Em seguida adicionaram-se ao modelo as equações de transferência de massa, etapa onde já podia ser determinado o perfil de concentração do meio em uma ampla faixa de números de Sherwood, e de onde se partiria para a fase final do modelo na qual se adicionaria a isto o crescimento da esfera. Antes disso foi preciso realizar testes para que se estabelecessem parâmetros relativos ao refino da malha e tamanho do domínio, de modo que a simulação fosse capaz de reproduzir os fenômenos com exatidão.

A reprodução de resultados conhecidos relativos à fluidodinâmica e à transferência de massa tem o intuito de validar o modelagem; assegurando que as etapas iniciais estejam corretas pode-se garantir que a execução de uma etapa mais avançada fornecerá resultados confiáveis.

2.1-O modelo matemático

2.1.1-Transporte de quantidade de movimento

Uma partícula decantando está sob influência de basicamente três forças; força peso, empuxo e forças de atrito causadas pelo arrasto do fluido a sua volta. A fluidodinâmica é regida pelas equações de Navier-Stokes e da continuidade, de onde podem ser obtidos os campos de velocidades e pressão. A seguir é mostrada a referida equação na forma conveniente e posteriormente sua adimensionalização que a torna mais conveniente para trabalhar.

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla \vec{V} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \frac{\mu \cdot \nabla^2 \vec{V}}{\rho} \quad (35)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{V} \cdot \rho) = 0 \quad (36)$$

onde $\vec{V}$ é o campo de velocidades, t o tempo, ρ a densidade do fluido, μ a viscosidade do fluido e P a pressão.

Assumindo que a partícula é uma esfera, a equação acima foi escrita de modo a tornar mais conveniente a análise do problema, para isso utilizaram-se coordenadas esféricas conforme se vê na figura 6, além disso considerou-se o problema estacionário já que a faixa de Reynolds em que se pretende trabalhar não entra em regime turbulento. Também se considera simetria em relação à coordenada Φ e velocidade nula nessa direção. Abaixo segue a equação em cada uma das coordenadas do sistema esférico:

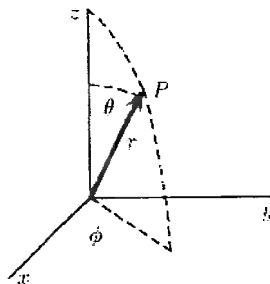


Figura 6: Esquema de coordenadas esféricas utilizado no modelagem

Em relação à r :

$$v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} - \frac{v_\theta^2}{r} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial r} + \frac{\mu}{\rho} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r^2 v_r) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial v_r}{\partial \theta}) \right] \quad (37)$$

Em relação à θ :

$$0 = -\frac{1}{\rho} \frac{1}{r} \frac{\partial P}{\partial \theta} + \frac{\mu}{\rho} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial v_\theta}{\partial r}) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (v_\theta \sin \theta) \right) + \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right] \quad (38)$$

As seguintes condições de contorno foram utilizadas:

C.C.: $v_r + v_\theta = 0$ para $r=R$

$$v_r^2 + v_\theta^2 = v_\infty^2 \text{ para } r \gg R$$

A solução analítica do campo de velocidades é dada por:

$$v_r = v_\infty \left[1 - \frac{3}{2} \left(\frac{R}{r} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{R}{r} \right)^3 \right] \cos \theta \quad (39)$$

$$v_\theta = v_\infty \left[-1 + \frac{3}{4} \left(\frac{R}{r} \right) + \frac{1}{4} \left(\frac{R}{r} \right)^3 \right] \sin \theta \quad (40)$$

$$v_\phi = 0 \quad (41)$$

Essa equação servirá para gerar o perfil de velocidade que será comparado aos resultados obtidos por meio da simulação. Dado o modelo matemático foi feita a adimensionalização das equações bem como das condições de contorno, de modo a reduzir o número de parâmetros utilizados permitindo que os resultados numéricos obtidos pudessem ser estendidos a problemas similares.

As variáveis adimensionais usadas nas equações são:

$$r^* = \frac{r}{R} \quad (42), \quad P^* = \frac{P}{\rho V_\infty^2} \quad (43), \quad v_r^* = \frac{v_r}{V_\infty} \quad (44) \text{ e } v_\theta^* = \frac{v_\theta}{V_\infty} \quad (45)$$

substituindo-as nas equações ficamos com:

$$v_r^* \frac{\partial v_r^*}{\partial r^*} + \frac{v_\theta^*}{r^*} \frac{\partial v_r^*}{\partial \theta} - \frac{v_\theta^{*2}}{r^*} = -\frac{1}{Re} \frac{\partial P^*}{\partial \theta^*} + \frac{1}{Re} \left[\frac{2v_r^*}{r^{*2}} + \frac{3}{r^*} \frac{\partial v_r^*}{\partial r^*} + \frac{\partial^2 v_r^*}{\partial r^{*2}} + \frac{1}{r^{*2}} \left(\cot \theta \frac{\partial v_r^*}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_r^*}{\partial \theta^2} \right) \right] \quad (46)$$

$$v_r^* \frac{\partial v_\theta^*}{\partial r^*} + \frac{v_\theta^*}{r^*} \frac{\partial v_\theta^*}{\partial \theta} - \frac{v_r^* v_\theta^*}{r^*} = -\frac{1}{Re} \frac{1}{r^*} \frac{\partial P^*}{\partial \theta^*} + \frac{1}{Re} \left[\frac{2}{r^*} \frac{\partial v_\theta^*}{\partial r^*} + \frac{\partial^2 v_\theta^*}{\partial r^{*2}} + \frac{1}{r^{*2}} \left(\frac{\partial^2 v_\theta^*}{\partial \theta^2} + \cos \theta \frac{\partial v_\theta^*}{\partial \theta} - \sin \theta v_\theta^* \right) \frac{2}{r^{*2}} \frac{\partial v_r^*}{\partial \theta} \right] \quad (47)$$

E as condições de contorno adimensionalizadas são:

$$\text{C.C.: } v_x^* = v_y^* = v_z^* = 0 \text{ para } r^* = 1 \text{ e}$$

$$v_z^* = 1, v_x^* = v_y^* = 0 \text{ para } r^* \gg 1$$

Com a equação adimensionalizada têm-se a vantagem de não ser necessário que haja coerência em cada parâmetro utilizado, devendo apenas se certificar de

que a relação entre os diversos parâmetros, traduzidas pelos números adimensionais, produza um valor de interesse para a simulação. Sendo assim, a fluidodinâmica é estudada considerando-se que o diâmetro da esfera, a velocidade de escoamento do fluido e a viscosidade do fluido são iguais a 1, o número adimensional de Reynolds é variado alterando-se a densidade do fluido somente.

2.1.2-O transporte de massa

O transporte de massa pode ser dividido em duas partes; o transporte por difusão, resultado do movimento intrínseco de cada molécula, e o transporte por convecção, decorrente do movimento do meio.

A transferência de massa por difusão pode ser entendida como resultado do movimento aleatório das moléculas onde, devido à igual probabilidade de seguir qualquer uma das direções, percebe-se um movimento aparente de moléculas migrando de uma região com maior concentração para uma região com menor concentração. O fluxo de moléculas é mensurado a partir do coeficiente de difusividade (em uma mistura binária A-B é simbolizado por D_{AB}).[7]

O transporte convectivo promove o movimento de moléculas induzido pelo movimento do fluido. Além do movimento aleatório que gera difusão há um movimento coordenado global que segue uma direção única. Sempre que um fluido de espécies com concentração c_0 passar por uma superfície com concentração mantida uniforme c_s , haverá transferência de massa por convecção se $c_0 \neq c_s$.

A troca de massa com o meio é regida pela equação da conservação das espécies químicas, nela fica claro a influência do transporte convectivo do lado esquerdo da equação, e do transporte difusivo do lado direito da equação. Assumindo estado estacionário a equação escrita em termos da concentração molar em coordenadas esféricas é a que se segue.

$$v_r \frac{\partial c}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial c}{\partial \theta} = D_{AB} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial c}{\partial \theta} \right) \right] \quad (48)$$

cujas condições de contorno são:

$$\text{C.C.: } C(x, t) = C_o \text{ para } r \rightarrow \infty$$

$$C(x, t) = C_s \text{ para } r = R$$

onde R é o raio da esfera.

Novamente foi feita a adimensionalização da equação para reduzir o número de parâmetros permitindo que com menos simulações fossem cobertos inúmeros casos, bastando para isso variar o número de Peclet proveniente dessa adimensionalização. O número de Peclet é também definido como $Pe = Re \cdot Sc$, sendo Sc o número adimensional de Schmidt dado por:

$$Sc = \{\text{fórmula}\}$$

As variáveis adimensionais utilizadas foram:

$$r^* = \frac{r}{R} \quad (49), \quad v_r^* = \frac{v_r}{V_\infty} \quad (50), \quad v_\theta^* = \frac{v_\theta}{V_\infty} \quad (51) \text{ e } c^* = \frac{c - c_o}{c_s - c_o} \quad (52)$$

$$v_r^* \frac{\partial c^*}{\partial r^*} + \frac{v_\theta^*}{r^*} \frac{\partial c^*}{\partial \theta} = \frac{1}{Pe} \left[\frac{1}{r^{*2}} \frac{\partial}{\partial r^*} \left(r^{*2} \frac{\partial c^*}{\partial r^*} \right) + \frac{1}{r^{*2} \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\sin \theta}{\theta} \frac{\partial c^*}{\partial \theta} \right) \right] \quad (53)$$

No caso da transferência de massa exclusivamente por difusão

$$0 = \frac{D_{AB}(C_s - C_o)}{R^2 C_o} \left[\frac{1}{r^{*2}} \frac{\partial}{\partial r^*} \left(r^{*2} \frac{\partial c^*}{\partial r^*} \right) + \frac{1}{r^{*2} \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\sin \theta}{\theta} \frac{\partial c^*}{\partial \theta} \right) \right] \quad (54)$$

As condições de contorno na forma adimensional são:

$$\text{C.C.: } c^* = 1 \text{ para } r^* = 1$$

$$c^* = 0 \text{ para } r^* \gg 1$$

Para simular a transferência de massa em diferentes condições foi preciso variar o adimensional número de Peclet; para tanto variou-se o número de Schmidt a cada valor de Reynolds simulado. Novamente, a opção por um número adimensional fez com que se adotasse o valor 1 para a velocidade de escoamento do fluido V_∞ , viscosidade do fluido μ e diâmetro da esfera D, fazendo com que o número de

Reynolds fosse determinado pela densidade ρ imposta ao fluido. Já o número de Schmidt foi determinado pelo coeficiente de difusão D_{AB} imposto, uma vez que os parâmetros (...) já estavam fixados. Tendo em vista que todo o problema estava em função de adimensionais, escolheu-se como concentração na superfície da esfera $c=1$ e longe da superfície da esfera $c=0$.

2.1.3- Transporte de massa com movimentação do contorno

Ao levar em conta a integração entre o transporte de massa, fluidodinâmica e movimentação do contorno foi necessário reavaliar a adimensionalização para as equações de transporte.

Inicialmente tem-se a equação da conservação de espécies químicas

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla} C = D_L \nabla^2 C \quad \text{para} \quad \begin{matrix} R < r < \infty \\ 0 < t < R_g/V_g \end{matrix} \quad (55)$$

Isso porque nesse caso o raio do grão R_g cresce com velocidade V_g , logo: $R_g = V_g \cdot t$.

As condições iniciais e de contorno são as seguintes:

$$\text{C.I.: } C(x, t) = C_0 \text{ para } r > 0, t = 0$$

$$\text{C.C.: } C(x, t) = C_s \text{ para } r = R, t > 0$$

$$C(x, t) = C_0 \text{ para } r \rightarrow \infty, t > 0$$

A equação do movimento é dada por:

$$\rho \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \rho \vec{V} \cdot \vec{\nabla} \vec{V} = -\vec{\nabla} P + \mu \nabla^2 \vec{V} \quad \text{para} \quad \begin{matrix} R < r < \infty \\ 0 < t < R_g/V_g \end{matrix} \quad (56)$$

cujas condições iniciais e de contorno são

$$\text{C.I.: } \begin{matrix} \vec{V}(x, t) = 0 \\ P(x, t) = 0 \end{matrix} \text{ para } r > 0, t = 0$$

$$\begin{aligned}\vec{V}(x, t) &= 0 \text{ para } r = R, t > 0 \\ \text{C.C.: } \vec{V}(x, t) &= V_{\infty} \text{ para } r \rightarrow \infty, t > 0 \\ P(x, t) &= 0 \text{ para } R < r < \infty, t > 0\end{aligned}$$

Dessas equações se identifica as seguintes variáveis adimensionais a serem substituídas na equação da conservação de espécies.

$$C^* = \frac{C - C_0}{C_s - C_0} \quad (57), \quad \vec{V}^* = \frac{\vec{V}}{V_{\infty}} \quad (58), \quad t^* = \frac{t D_l}{D_g^2} \quad (59), \quad r^* = \frac{r}{D_g} \quad (60) \text{ e } P^* = \frac{P D_g}{\mu V_{\infty}} \quad (61)$$

$$\frac{\partial C^*}{\partial t^*} + \left[\frac{V_{\infty} D_g}{D_L} \right] \vec{V}^* \cdot \vec{\nabla}^* C^* = \nabla^{*2} C^* \quad (62)$$

$$Pe_v = \frac{U_{\infty} D_g}{D_L} = \left[\frac{V_{\infty} D_g}{\nu} \right] \left[\frac{\nu}{D_L} \right] = Re Sc \quad (63) \text{ e finalmente}$$

$$\frac{\partial C^*}{\partial t^*} + \vec{V}^* \cdot \vec{\nabla}^* C^* = \left(\frac{1}{Re Sc} \right) \nabla^{*2} C^* \quad \text{para} \quad \begin{aligned} R^* &= \frac{R}{D_g} < r^* < \infty \\ 0 < t^* &< \frac{D_L}{2 D_g V_g} = \frac{1}{2 Pe_v} \end{aligned} \quad (64)$$

desse modo as condições inicial e de contorno são

$$\text{C.I.: } C^* = 0 \text{ para } r^* > 0, t^* = 0$$

$$\text{C.C.: } \begin{aligned} C^* &= 1 \text{ para } r^* = R^*, t^* > 0 \\ C^* &= 0 \text{ para } r^* \rightarrow \infty, t^* > 0 \end{aligned} \quad \text{onde } R^* = Pe_v t^*$$

Na equação do movimento as seguintes variáveis adimensionais são substituídas:

$$P^* = \frac{P D_g}{\mu V_{\infty}} \quad (65), \quad \vec{V}^* = \frac{\vec{V}}{V_{\infty}} \quad (66)$$

$$\left[\frac{D_L}{V_{\infty} D_g} \right] \frac{\partial \vec{V}^*}{\partial t^*} + \vec{V}^* \cdot \vec{\nabla}^* \vec{V}^* = \left[\frac{\nu}{V_{\infty} D_g} \right] \vec{\nabla}^* P^* + \left[\frac{\nu}{V_{\infty} D_g} \right] \nabla^{*2} \vec{V}^* \quad (67)$$

$$\frac{1}{Sc} \frac{\partial \vec{V}^*}{\partial t^*} + Re \vec{V}^* \cdot \nabla^* \vec{V}^* = \nabla^* P^* + \nabla^{*2} \vec{V}^* \quad \text{para } \begin{matrix} R^* < r^* < \infty \\ 0 < t^* < \frac{1}{2Pe_v} \end{matrix} \quad (68)$$

nesse caso as condições inicial e de contorno são

$$\text{C.I.: } \begin{matrix} \vec{V}^* = 0 \text{ para } r^* > 0, t^* = 0 \\ P^* = 0 \text{ para } r^* > 0, t^* = 0 \end{matrix}$$

$$\text{C.C.: } \begin{matrix} \vec{V}^* = 0 \text{ para } r^* = R^*, t^* > 0 \\ \vec{V}^* = 1 \text{ para } r^* \rightarrow \infty, t^* = 0 \\ P^* = 0 \text{ para } 1 < r^* < \infty, t^* > 0 \end{matrix}$$

No presente trabalho, a esfera inicia o crescimento de tamanho nulo até atingir R_g . Neste momento são coletados os dados de fluxo de massa.

Cada simulação transiente é utilizada para se obter um único valor de coeficiente de transferência k , ou Sh , calculado a partir de uma entrada Re , Sc e Pe_v inserida nas equações adimensionais.

2.2-Adequação do domínio e da malha

O software utilizado, realiza os cálculos numéricos por meio de elementos finitos; isso é feito criando-se uma malha no domínio por meio da qual as equações diferenciais são solucionadas. Foi escolhida uma malha tetraédrica para preencher o domínio. Para garantir a aderência dos resultados simulados foi preciso determinar o tamanho do domínio em relação à esfera e o número de elementos da malha que seria usada para o cálculo dos elementos finitos. Inicialmente buscou-se um domínio no qual se estabelecesse longe de seus limites uma condição em que o arrasto provocado pela esfera tivesse os efeitos de sua propagação tendendo à zero. Foram feitas simulações para dois tamanhos de domínio nas situações mais extremas de creeping flow que seriam estudadas, cujo Re era igual a 0,01 e 0,1. A escolha da malha seguiu o mesmo procedimento, entretanto, a situação mais extrema para a seleção a malha é aquela em que os efeitos do escoamento devam ser reproduzidos dentro das camadas limite laminar e térmica.

A técnica adotada foi a mesma abordada nos artigos da revisão bibliográfica. O

tamanho do domínio é escolhido partindo-se de um domínio escolhido arbitrariamente. Calcula-se então algum parâmetro relevante do problema e em seguida aumenta-se o tamanho do domínio para calcular novamente o mesmo parâmetro. Isso é feito até que o valor do parâmetro não se altere significativamente em relação ao valor calculado anteriormente. A escolha da malha é feita da mesma forma: escolhe-se arbitrariamente um refino inicial e calcula-se um determinado parâmetro, refina-se então a malha e é calculado novamente o mesmo parâmetro. Quando o valor calculado do parâmetro não muda significativamente após mudar o domínio ou a malha diz-se que há independência entre os resultados e o tamanho do domínio e refino da malha

2.2.1-Domínio

Com Reynolds fixado em 0,01 e 0,1 foram feitas simulações para domínios 100 e 1000 vezes maiores que o diâmetro da esfera pois se desejava a dimensão mínima para a qual a condição de contorno $v_r^2 + v_\theta^2 = v_\infty^2$ estivesse satisfeita. Por meio da análise dos perfis de velocidade, foi possível afirmar que o efeito do arrasto se propagava até uma distância do centro da esfera igual a 200 vezes seu diâmetro, a partir desse ponto a velocidade do fluido tendia a V_∞ . Embora domínios não maiores que 15 vezes o diâmetro da esfera sejam suficientes para Reynolds maiores, esse tamanho não foi suficiente para a condição de creeping flow, no entanto, longe dessa condição aceitou-se os domínios usados em Le Clair et. al.[2].

Como a intenção era avaliar a distância da fronteira do domínio, a simulação para obter o perfil de velocidade foi feita duas vezes; em cada uma variou-se apenas o número de elementos na superfície, a fim de detectar, caso houvessem desvios do resultado analítico, que eles se davam exclusivamente devido a um domínio insuficientemente grande. O domínio usado tem a forma de um cubo com lados igual a 100 e 1000 vezes o diâmetro da esfera, onde se lê D=100 o domínio é igual a cem vezes o diâmetro e onde se lê D=1000 o domínio é igual a mil vezes.

A velocidade do fluido em função da distância da superfície da esfera para ambos os domínios e números de Reynolds está registrada nos gráficos abaixo (Figura 7), onde M é a quantidade de faces triangulares dos elementos tetraédricos

na superfície da esfera, logo, $M=876$ significa que existem 876 distribuídos ao longo da superfície esférica e $M=1296$ significa que na referida simulação existem 1296 elementos distribuídos na superfície da esfera. Ainda, 'Res. Analítico' se refere à velocidade prevista por meio da correlação analítica conhecida (39).

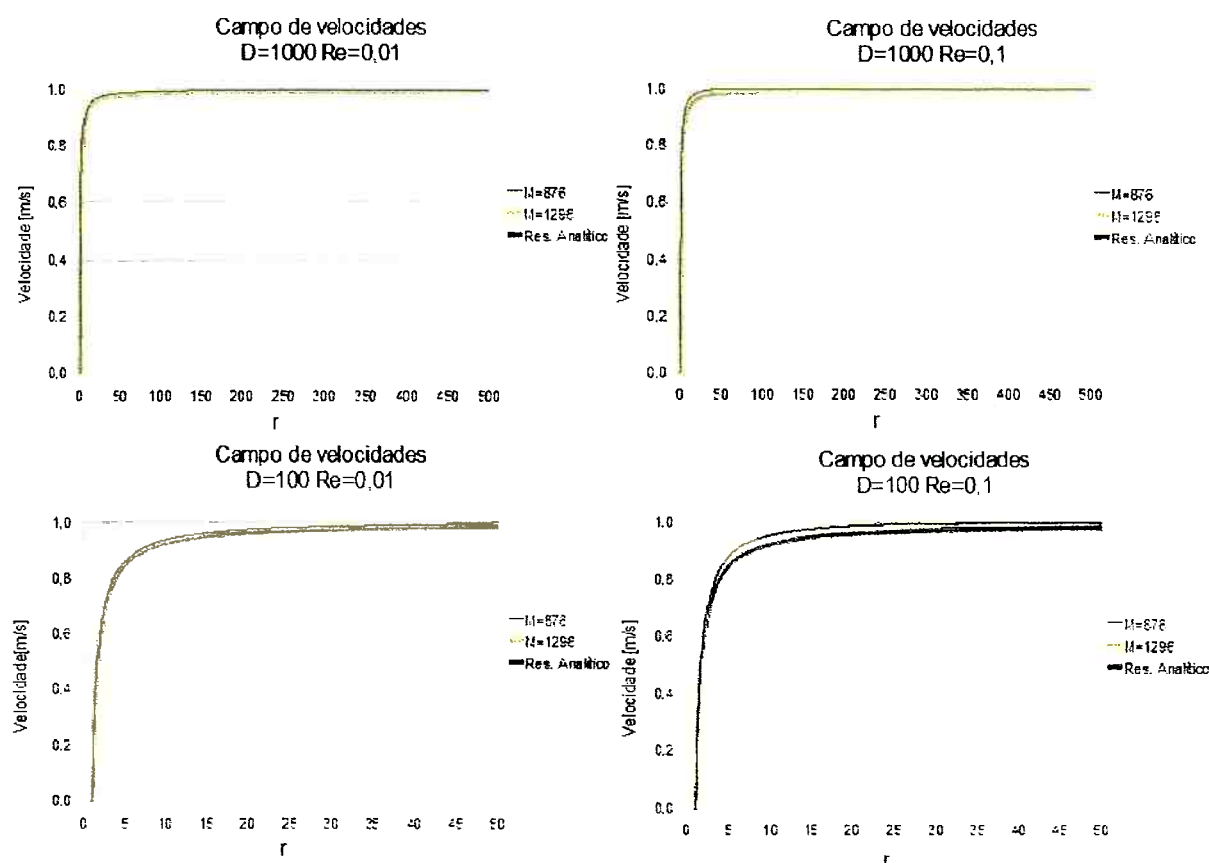


Figura 7: Perfis de velocidade para diferentes domínios e malhas

A simulação realizada para domínio igual a 100 vezes o diâmetro da esfera indica que à distância de 50 raios o efeito das forças viscosas ainda é percebido; a velocidade só fica próxima de V_∞ a uma distância maior que 200 raios, o que só pode ser afirmado ao se observar o perfil obtido quando o domínio é igual a 1000 vezes o diâmetro da esfera. Contudo, a simulação para o domínio menor permitiu que o gráfico se focasse na região mais próxima da esfera, e serviu para visualizar melhor a diferença entre os resultados calculados numericamente para dois tamanhos de malha e o resultado calculado a partir da correlação conhecida. Ainda é possível perceber que nessa escala o refino da malha teve pouca influência no

resultado.

Optou-se por utilizar domínios com dimensão igual a 15 vezes o diâmetro da esfera para a faixa de Reynolds entre 50 e 200, domínios de 90 vezes o diâmetro da esfera para faixa de Reynolds entre 5 e 50 e domínios de 600 vezes o diâmetro da esfera para Reynolds menores que 5.

2.2.2-Malha

Um ponto mais crítico da simulação foi determinar a configuração da malha. A princípio foi utilizado como parâmetro o coeficiente de arrasto, a exemplo do que foi feito em Dohle et. al. e Dixon et. al.[5, 11]. Contudo, ao se observar outros parâmetros como pressão e vorticidade locais, percebeu-se que para que esses resultados também fossem compatíveis com a literatura, seria necessária que a malha fosse mais refinada. Isso gerou um estudo completo da influencia do refino da malha nos resultados até que a aderência dos resultados fosse satisfatória. Esse estudo se fez necessário pois posteriormente os efeitos a serem analisados relativos, principalmente, à difusão na camada limite ocorrem em uma escala muito pequena.

O estudo relativo à malha teve como ponto de partida a taxa de crescimento dos elementos. A partir de um valor inicial definido pela área da superfície esférica dividida pela quantidade de elementos na superfície, definiu-se que os elementos subsequentes teriam volume igual a 1,06 do elemento anterior, criando-se um domínio com elementos de volume crescente a partir da superfície da esfera da mesma forma que foi feito em [1]. Sendo assim, para que se pudesse comparar as diferentes malhas em diferentes tamanhos de domínio, a variável a ser controlada foi o número de elementos na superfície da esfera. Variar somente a quantidade de elementos na superfície mantendo a taxa de crescimento deles constante garante que, independente do tamanho do domínio, a uma mesma distância da esfera haverá a mesma quantidade de elementos.

A situação escolhida para a análise foi aquela em que $Re=200$, pois gera uma camada limite laminar de espessura muito pequena. O domínio adotado nesse caso

foi de 15 vezes o diâmetro da esfera. Simulou-se o escoamento com malhas contendo: 876, 992, 1310, 1586 e 1982 elementos na superfície da esfera e 903139, 986380, 1231993, 1390846 e 1635266 elementos no domínio respectivamente. Na figura 8 pode se ver a configuração da malha numa vizinhança da esfera. Depois de avaliado o erro médio entre os valores de pressão e vorticidade locais optou-se pela malha com 1586 elementos, onde a diferença para o artigo de Le Clair et. al. era de menos de 1% no ponto de estagnação frontal. As medidas de pressão e vorticidade locais foram tomadas ao longo de uma circunferência contida num plano paralelo a velocidade de escoamento do fluido variando-se a posição a cada medida 12° , considerando-se 0° o ponto de estagnação da frente da esfera e 180° o ponto de estagnação da parte de trás da esfera (figura 9). A distribuição de pressão P^* (figura 10) e vorticidade ζ^* (figura 11) ao redor da esfera pode ser vista nos gráficos abaixo.

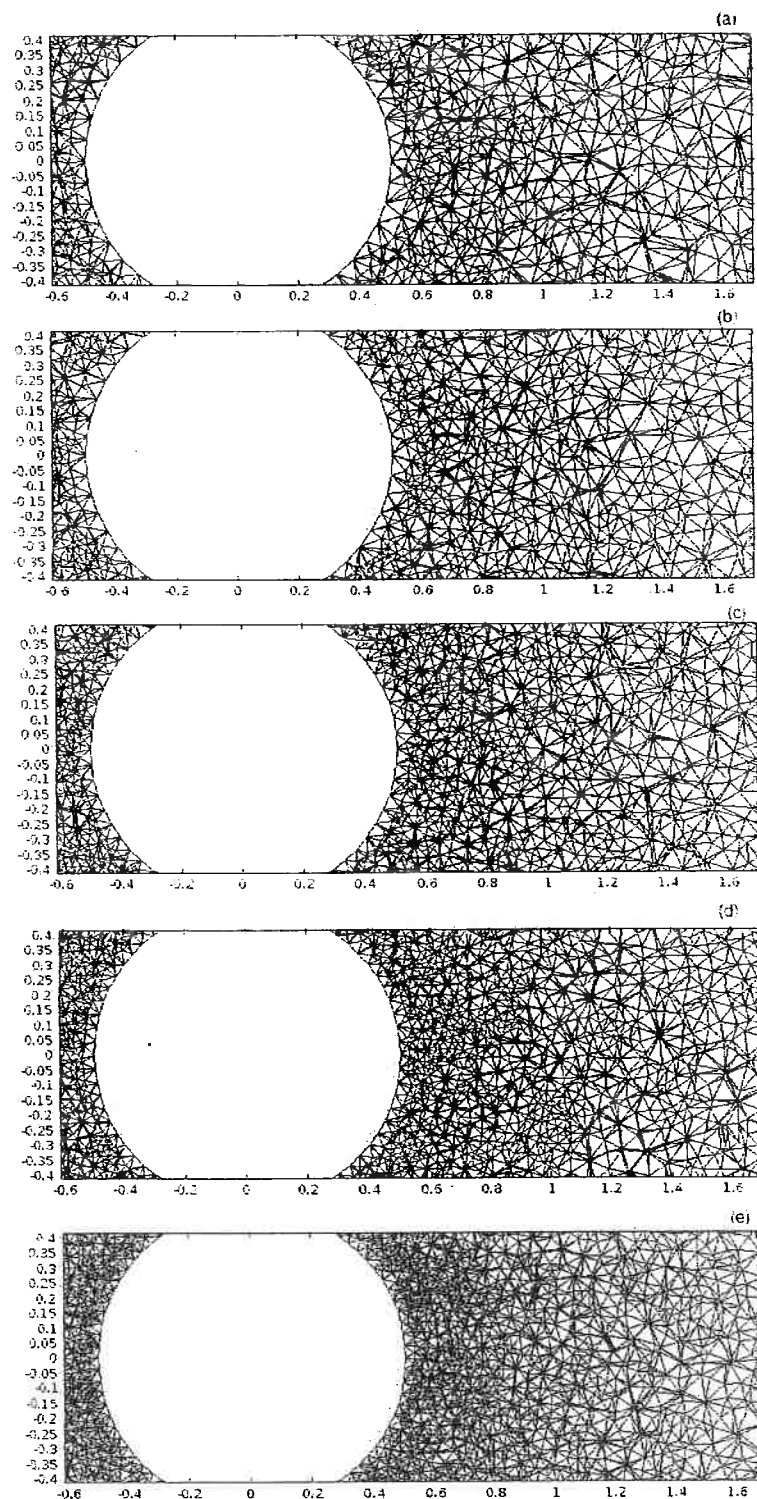


Figura 8: Vizinhança da esfera com malhas contendo em sua superfície: (a)876 elementos (b)992 elementos (c)1310 elementos(d)1586 elementos (e)1982 elementos

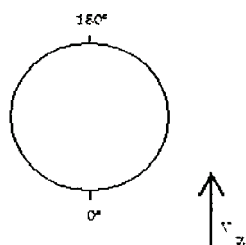


figura 9: Representação dos pontos de estagnação frontal e traseiro

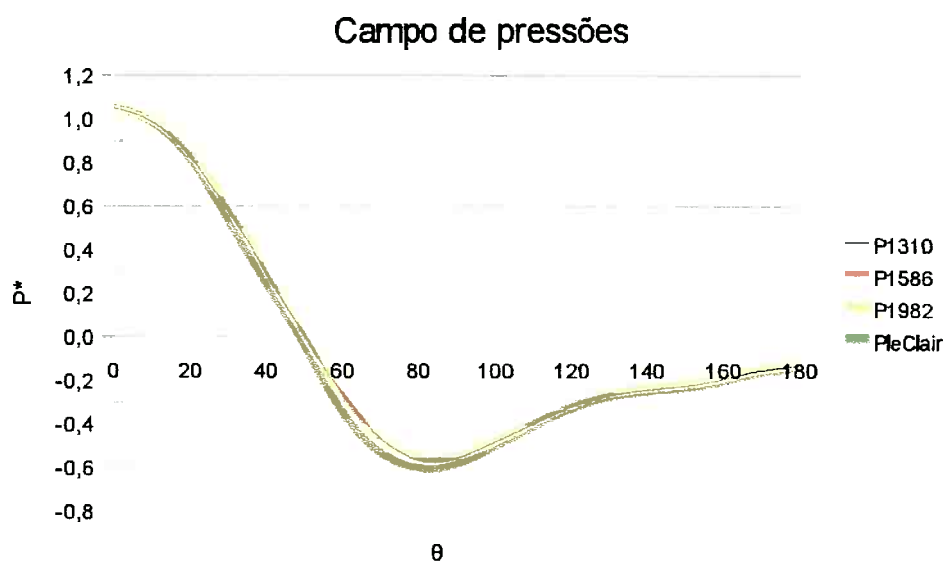


figura 10: Pressão adimensional em função do ângulo

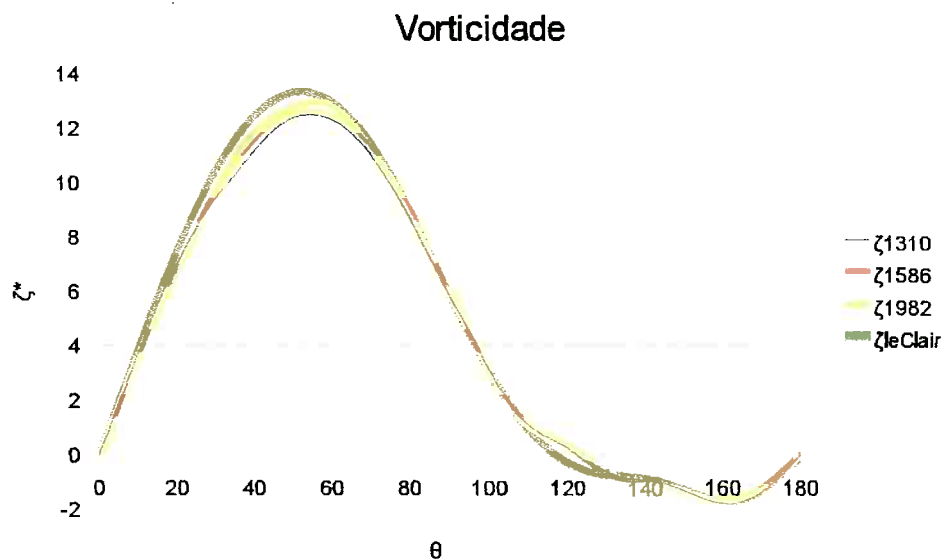


figura 11: Vorticidade adimensional em função do ângulo

Em ambas as imagens tem-se a comparação entre os resultados obtidos por meio do COMSOL para as três configurações de malha que mais se aproximaram do resultado apresentado no artigo; na figura 10 temos P1310 representando o campo de pressões simulado com uma malha composta por 1310 elementos na superfície da esfera, em P1586 temos 1586 elementos na superfície da esfera e em P1982 temos 1982 elementos, o resultado obtido por le Clair et. al. [2] está representado pela curva indicada por PleClair. Na figura 11 a mesma coisa se aplica, sendo que as indicações ζ_{1310} , ζ_{1586} , ζ_{1982} e $\zeta_{leClair}$ se referem as malhas que contém 1310, 1586 e 1982 elementos na superfície da esfera e o resultado obtido por Le Clair et.al. [2] respectivamente.

Ao incluir o transporte de massa e energia no modelo, realizou-se novo estudo da malha para verificar qual era o refino necessário para essa nova situação. Além disso, haveria confirmação no que diz respeito a malha usada para o problema onde havia apenas fluidodinâmica. Do mesmo modo foi-se refinando a malha até que um valor para a quantidade de elementos na superfície da esfera fosse satisfatória. No estudo anterior fez-se o teste com 1310 e 1586 elementos, dessa vez optou-se por utilizar números mais próximos de 1586, o que permitiu avaliar a malha para valores um pouco menores que 1586 e decidir que 1514 elementos na superfície da esfera já eram suficientes para um resultado satisfatório.

3-Obtenção de resultados numéricos

A simulação do problema por meio de um software fornece valores que são comparados com resultados encontrados na literatura, isso possibilita avaliar a qualidade dos resultados para posteriormente realizar simulações mais complexas cujos resultados trarão informações não disponíveis na literatura, desse modo é importante estar seguro que o modelo está bem fundamentado.

3.1-Resultados relativos ao transporte de quantidade de movimento

As análises preliminares que serviram para a adequação do domínio e da malha já fornecem os primeiros resultados das simulações da fluidodinâmica, outros resultados foram obtidos por meio de simulações onde há 1586 elementos na superfície e estes tem um fator de crescimento de 1,06 até os limites do domínio, gerando cascas esféricas envolta da esfera com quantidade igual de elementos em seu interior para distâncias iguais da superfície do sólido. A apresentação dos resultados será feita sem mencionar mais o tamanho do domínio utilizado tampouco o grau de refino da malha.

O primeiro parâmetro comparado foi o coeficiente de arrasto. Calculou-se esse coeficiente para $0,1 \leq Re \leq 200$, obtendo-se uma curva similar à encontrada em [1] (figura 12).

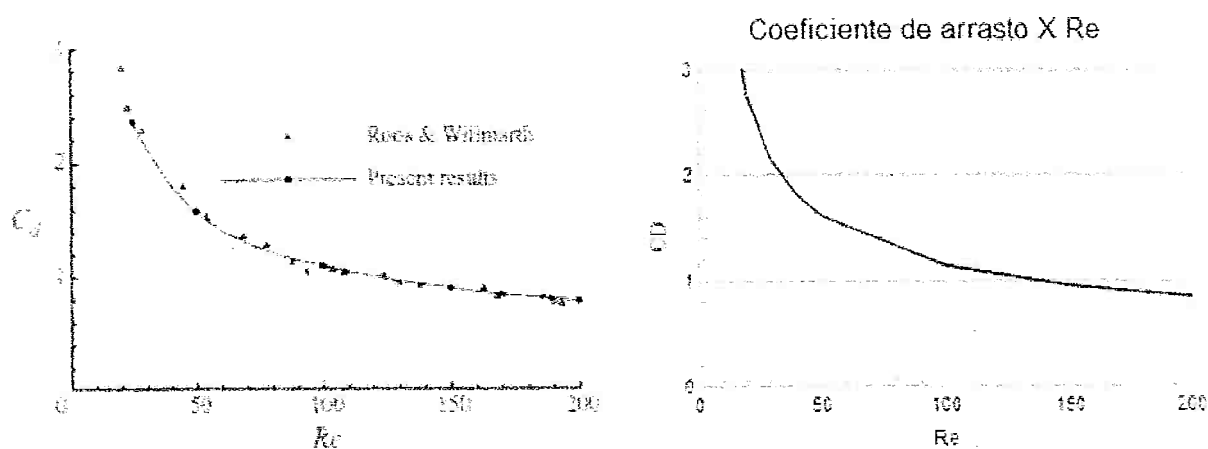


figura 12: C_D em função de Re . A esquerda resultado da literatura, a direita resultado obtido no presente trabalho

Foram ainda compilados diferentes gráficos para exibir o campo de pressões local (figura 13) e a vorticidade local (figura 14) na superfície da esfera. Com o intuito de garantir que a simulação está correta e forneceu resultados com suficiente exatidão, comparou-se novamente esses dois parâmetros com resultados da literatura, dessa vez porém com o artigo [3], mais recente que o [2] anteriormente usado para a configuração da malha e útil naquele caso por apresentar os resultados em tabelas, permitindo uma comparação mais direta.

Como já mencionado, em [3] as simulações foram feitas para diferentes números de Trostel; que indicam o grau de escorregamento existente na superfície da esfera. Segundo a definição, quando temos a condição de escorregamento total ao redor da esfera $Tr \rightarrow 0$, e quando temos a condição de não escorregamento $Tr \rightarrow \infty$. Sendo assim, mesmo com objetivo essencialmente diferente, ainda é possível utilizar parte dos resultados de seu artigo para comparar os resultados obtidos no presente trabalho; considerando, para tanto, apenas as curvas em que $Tr=10^5$, valor para o qual a condição de não escorregamento é satisfeita, conferindo à superfície da esfera a mesma condição de contorno utilizada no presente trabalho.

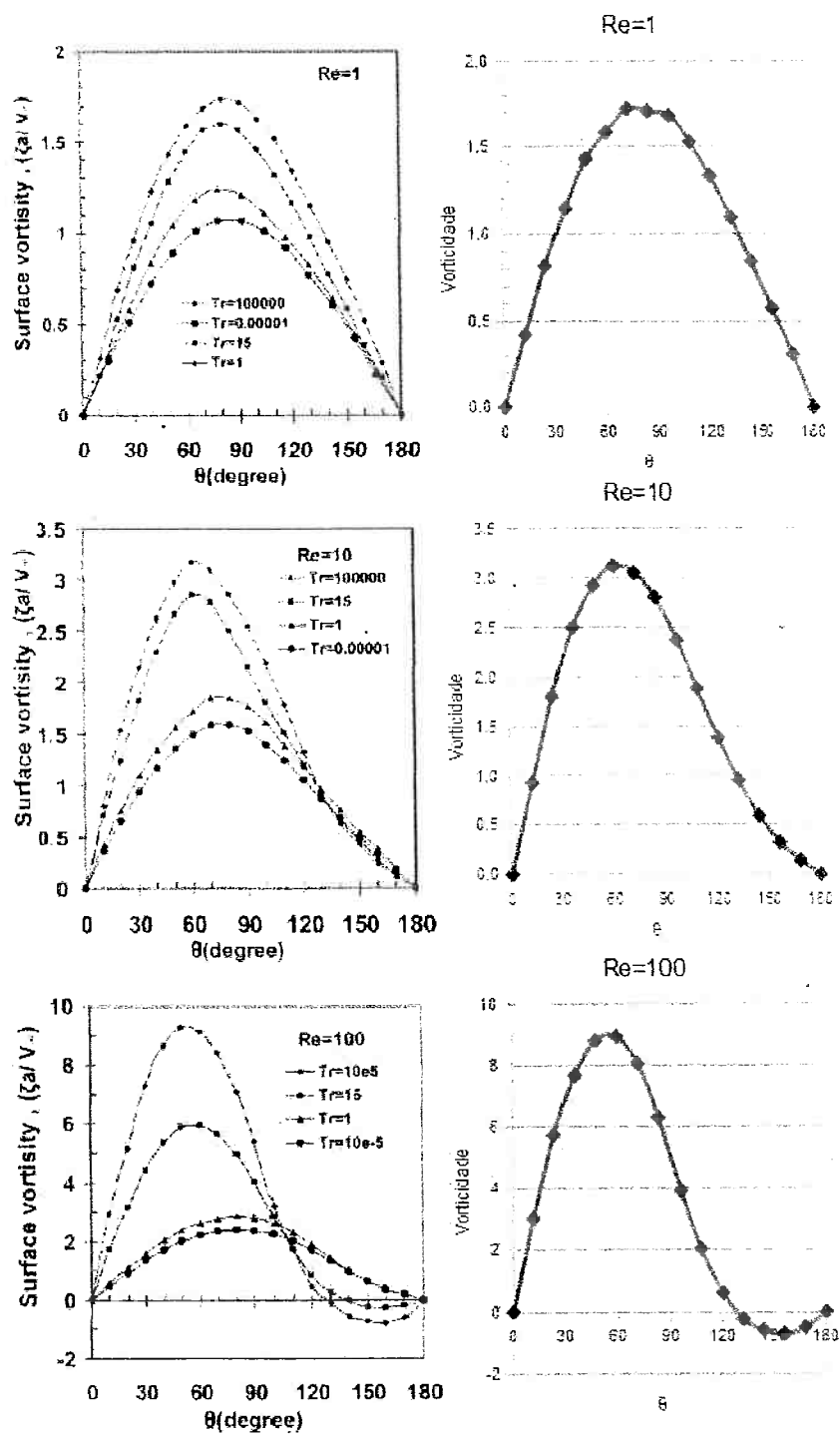


figura 13: Vorticidade superficial encontrada em [3] e a obtida no presente trabalho

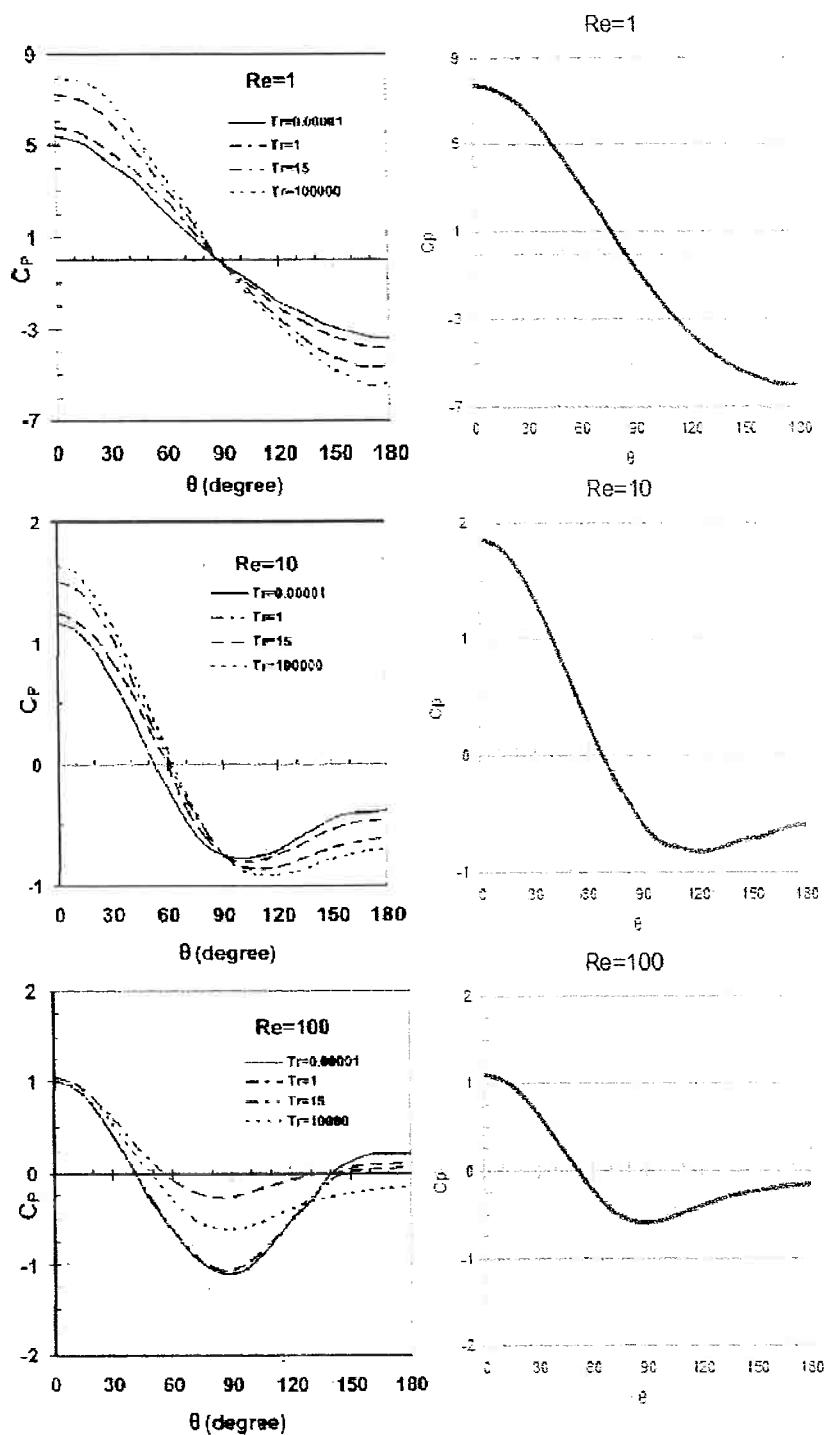


figura 14: Campo de pressões encontrado em [3] e o obtido no presente trabalho

Das simulações podem também ser extraídas linhas de corrente que fornecem

informações acerca da separação da camada limite, posição do vórtice e comprimento da cauda (figura 15). Há indiscutível semelhança entre elas, tanto no ângulo de separação da camada limite quanto no comprimento da cauda, corroborando a eficácia do modelo até então executado.

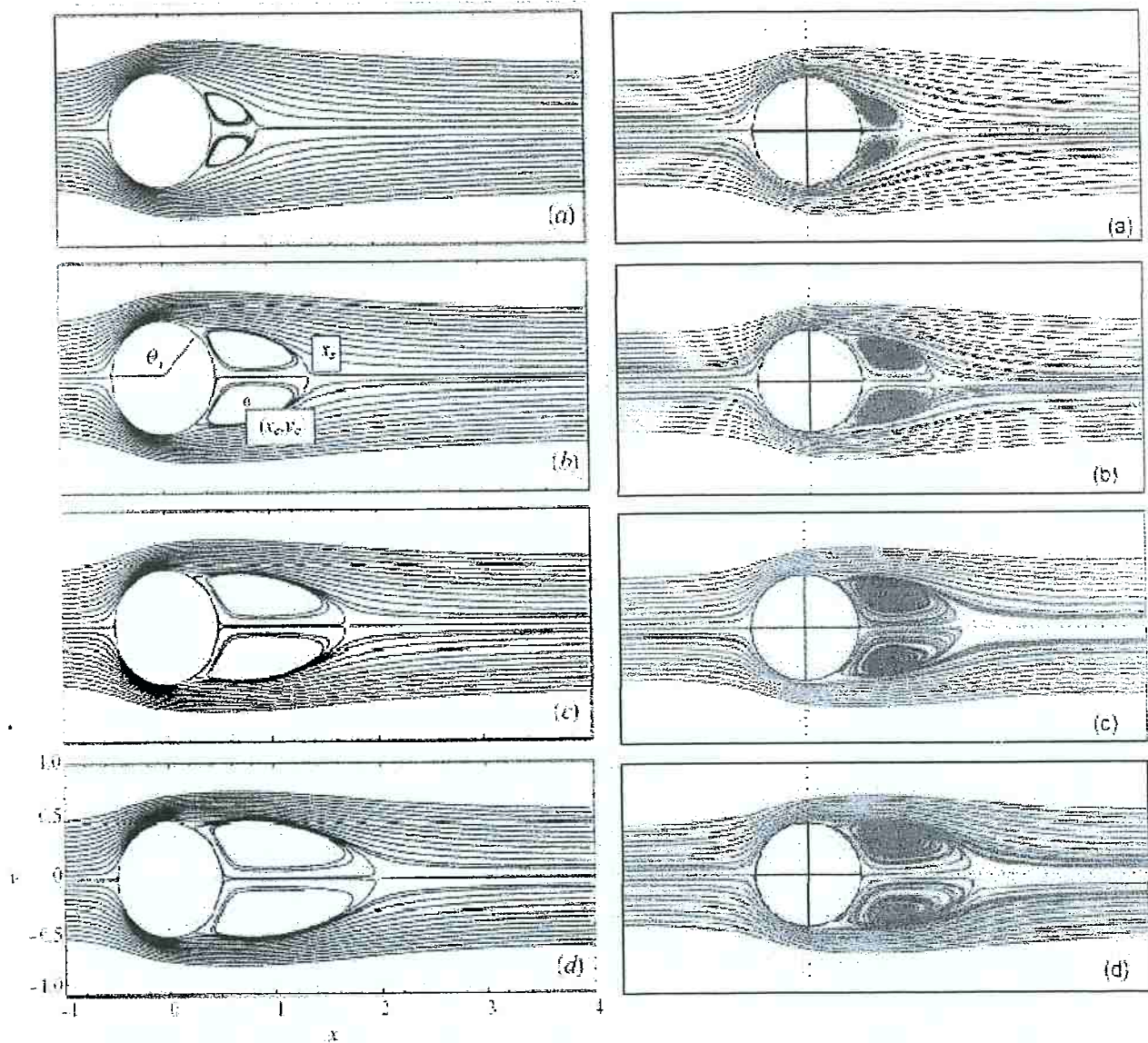


figura 15: Linhas de corrente de [1] a esquerda e as obtidas no presente trabalho a direita. Temos a) $Re=50$, b) $Re=100$, c) $Re=150$, d) $Re=200$

3.2-Resultados relativos ao transporte de energia e massa

A forma mais simples de iniciar a análise é comparando o perfil de concentração no caso de transferência de massa apenas por difusão. Esse primeiro passo elimina a interferência da movimentação do fluido tornando o modelo muito mais simples, além disso, o perfil de concentração dessa situação possui uma solução analítica. No gráfico abaixo estão o perfil de concentração obtido por meio da simulação e a solução analítica conforme a legenda. Para que se obtivesse um perfil de concentração (figura 16) no estado estacionário a simulação da difusão se processou por um tempo igual a 10^7 segundos. A solução analítica usada para perfil de concentração foi:

$$C = \frac{1}{2r} \quad (69)$$

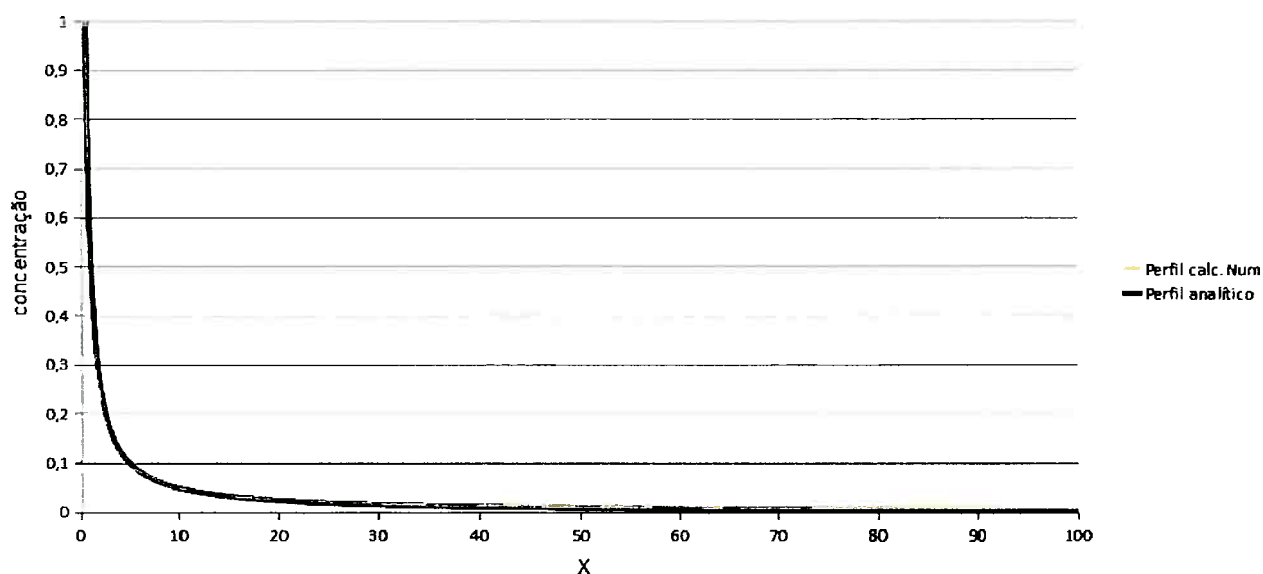


figura 16: Perfis de concentração analítico e obtido numericamente no presente trabalho

O software utilizado permite trabalhar separadamente com as equações relativas ao transporte de energia e de calor apesar das equações serem análogas. Isso se dá simplesmente para que haja uma interface mais amigável para o usuário, onde se

possa simular situações sem necessariamente se valer dos números adimensionais. Sendo assim, optou-se por realizar cada cálculo duas vezes; uma optando pelas entradas próprias à situação de transferência de calor e outra substituindo convenientemente as propriedades necessárias para que se obtivesse valores iguais nos adimensionais análogos da transferência de massa. Essa abordagem não é inédita e algo semelhante pode ser visto no trabalho de [13], além disso, foi uma forma de dar prosseguimento ao trabalho sem prejuízo aos resultados uma vez que é escasso o material presente na literatura tratando exclusivamente do transporte de massa ao redor de uma esfera, conforme as condições do problema estudado.

Realizar cálculos, a princípio redundantes, é uma forma de ter certeza que o software de fato emite os mesmos resultados quando submetido às mesmas entradas, diferindo apenas pelo modo como são inseridas, uma sob a abordagem da transferência de calor e outra sob a abordagem da transferência de massa, algo próprio do software.

As simulações se processaram variando-se tanto os valores de Schmidt quanto de Reynolds. Com o fluxo local calculou-se o número de Sherwood local por meio da relação [13]:

$$k = \frac{q}{\pi d^2 (C_i - C_0)} \quad (70) \text{ e}$$

$$Sh = \frac{k d}{D} \quad (71).$$

Os resultados foram então organizados de modo semelhante aos encontrados em [5], pelo qual se pôde observar que os fluxos ao redor da esfera obtidos são coerentes com os da literatura conforme pode ser visto na figura 17 abaixo. Isso permite que o próximo passo seja dado sem receio de que algo em desacordo interfira em seu resultado. Cada gráfico representa a situação com um valor de Reynolds diferente e, em cada um, as respectivas linhas os diferentes número de Schmidt para os quais a simulação foi feita; conforme já havia sido feito para calcular a pressão e vorticidade locais, extraiu-se os resultados do fluxo de massa em pontos da esfera ao longo de uma circunferência contida em um plano paralelo ao fluxo.

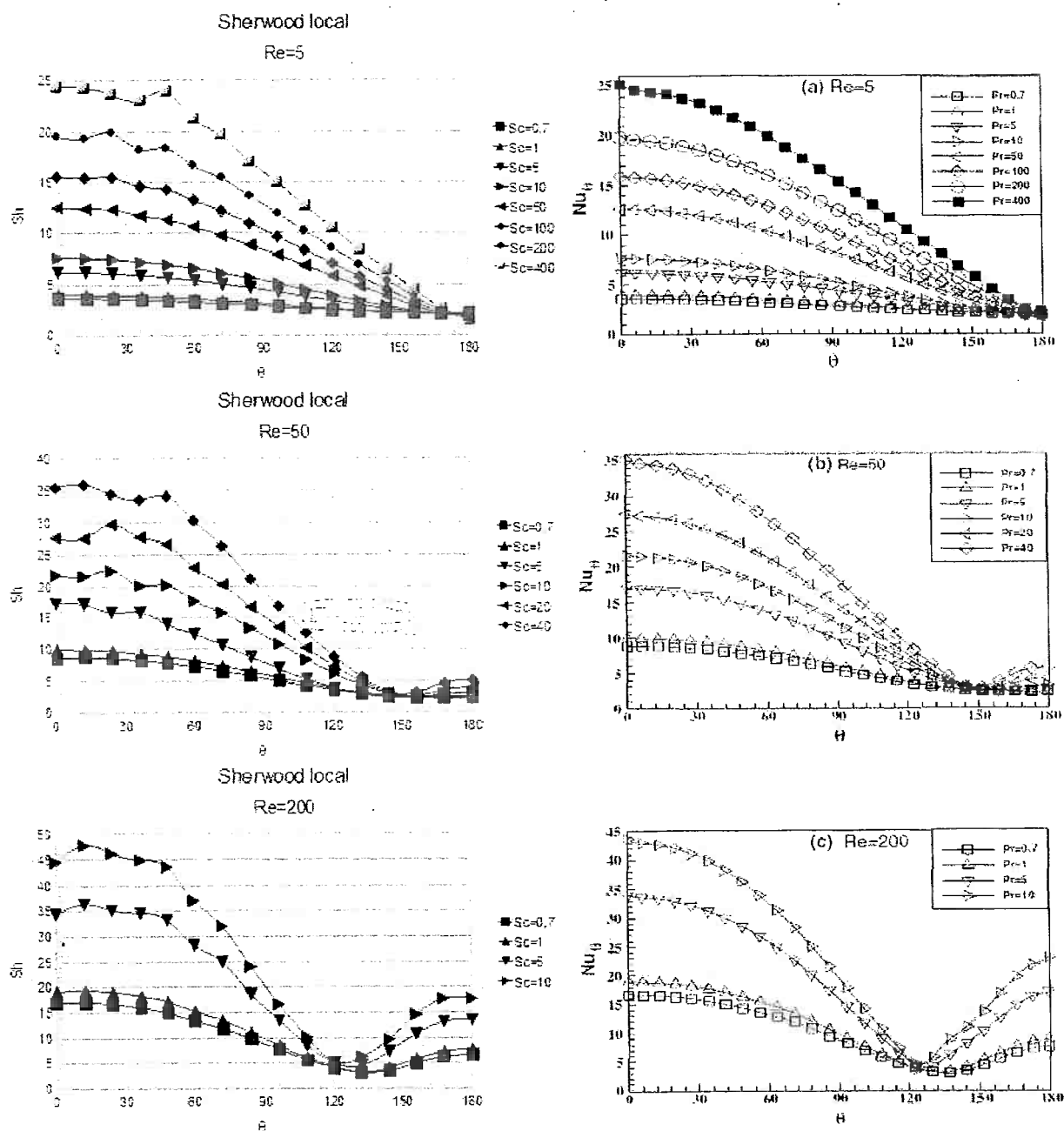


figura 17: Sh local em função de Re e Pe encontrados em [5] a direita e obtidos no presente trabalho a esquerda

Integrando o fluxo ao longo de toda a superfície esférica obtém-se o fluxo global, através do qual se calcula o número de Sherwood global. Para esse Sherwood global foi também feito um gráfico para fim de comparação.

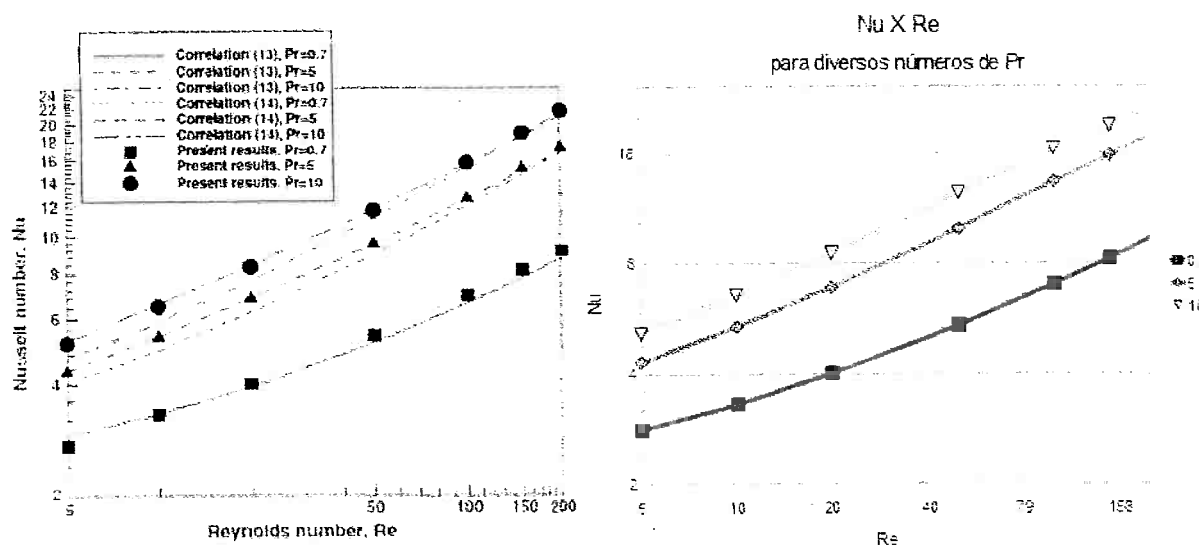


figura 18: Nu médio em função de Re

Na figura 18 temos a esquerda o gráfico encontrado na literatura mostrando valores do número de Nusselt em função de Reynolds para números de Prandtl iguais a 0,7, 5 e 10 conforme a legenda. A direita o mesmo gráfico foi feito a partir de resultados obtidos por meio Nusselt em função do número de Reynolds para Prandtl igual a 0,7; indicado pela linha azul, Prandtl igual a 5; representado pela linha laranja e Prandtl igual a 10; representado pela linha amarela, conforme a legenda.

3.3- A movimentação do contorno

Uma vez verificados os resultados relativos ao transporte de massa e fluidodinâmica designou-se ao modelo uma movimentação de contorno de modo a simular o crescimento da esfera. A simulação foi projetada de modo a unir a transferência de massa com fluido parado e a movimentação do contorno, de modo a reproduzir o efeito do crescimento de uma dendrita equiaxial demonstrando os resultados apontados em [14]. Conforme o modelagem matemática, seriam feitas simulações variando-se somente o número de Peclet uma vez que havendo apenas difusão a simulação se processaria conforme a equação (64).

É importante algum comentário em relação à mudança na geometria do problema. Ao iniciar os testes com movimentação de contorno encontrou-se inúmeras dificuldades para que houvesse convergência no software utilizado, a solução possível requeria um computador além da capacidade de que dispunha,

de modo que foi imprescindível aproveitar a simetria do problema na direção Φ . Um modelo bidimensional economizou memória suficiente para que tal problema fosse simulado sem prejuízo aos resultados; contudo foi necessário estabelecer novos parâmetros para definir a malha usada, o que gerou outro estudo desta a fim de estabelecer o grau de refinamento necessário. Para manter certa uniformidade entre os modelos optou-se por fixar uma taxa de crescimento de grãos e variar o número de elementos na aresta circular que representa a superfície da esfera, do mesmo modo feito para a simulação modelada em três dimensões.

Novamente foram feitas simulações para a obtenção do número de Sherwood na condição mais severa do problema de transferência de massa. Utilizando $Re=200$ e $Sc=10$ fizeram-se simulações para 100, 200, 250, 300 e 500 elementos na aresta da esfera. O valor foi comparado com a relação encontrada em [4]. O resultado dessa análise apontou que 200 elementos na superfície seriam adequados para realizar a simulação nessa etapa. Foi também simulada a transferência sem movimentação no fluido e com contorno estático, isso permitiria checar se a malha forneceria o resultado esperado para essa situação onde Sh deveria ser igual a 2 conforme a relação $Sh = 2 + 0,6 Re^{1/2} Sc^{1/3}$ (72).

A avaliação da malha também foi útil para reproduzir no modelo com nova geometria uma situação previamente testada e com resultado bem conhecido, com isso certifica-se que na transposição do antigo modelo tridimensional para o bidimensional não houve prejuízo no que se refere à precisão do modelo nem algum erro na sua implementação. A curva $ReXNu$ para diferentes valores de Prandtl foi refeita e pode ser conferida na figura 19.

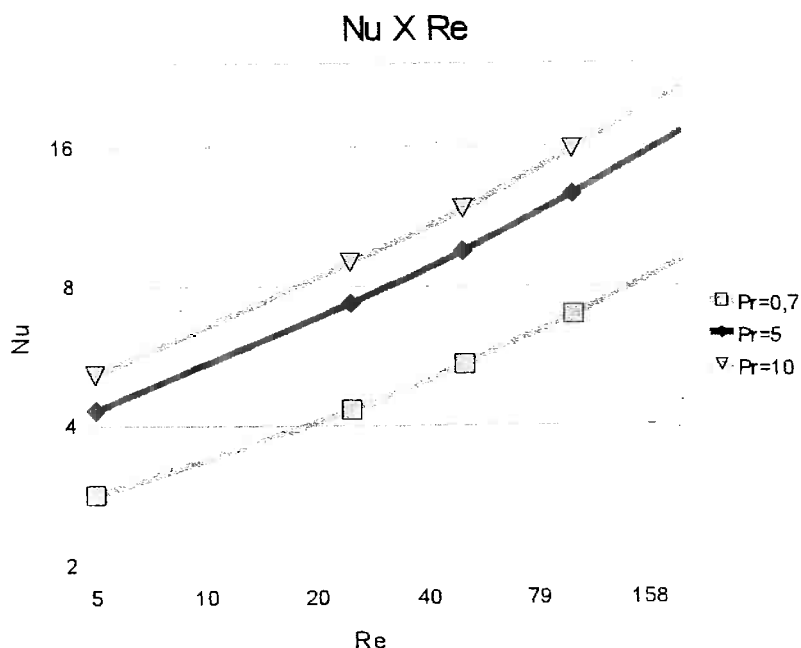


figura 19: Nu em função de Re obtidos pelo modelo bidimensional

Na simulação onde há crescimento da esfera foi ainda necessário estipular um valor inicial para a esfera. O modelo assume raio inicial igual à zero, algo que não poderia ser reproduzido já que o software descaracterizava a aresta circular quando esta era muito menor que o subdomínio e este deveria ter uma dimensão tal que o tamanho máximo da esfera não impusesse ao contorno externo os efeitos da difusão. Implementou-se uma circunferência com o menor raio possível e, no intuito de verificar se haveria grande prejuízo ao resultado, realizou-se a mesma simulação para uma circunferência de raio dez vezes maior; a ideia era avaliar a discrepância de resultados ao final da simulação para os diferentes raios iniciais. Obtendo-se valores próximos foi possível afirmar que um raio inicial ainda menor não alteraria o resultado, portanto o menor raio possível para o software era adequado para a simulação mesmo que não se pudesse afirmar ser nulo.

A transferência de massa com movimentação do contorno foi analisada quantitativamente por meio do cálculo do número de Sherwood associado. Nesse caso é possível afirmar, uma vez que não há movimentação do fluido no entorno da esfera, que $Sh = f(Pe_v)$. Encontra-se na literatura essa relação entre o número de Peclet associado à velocidade de crescimento da esfera e o número de Sherwood

para a condição de estado quasi-estacionário. A relação é brevemente deduzida de acordo com a solução de Martorano-Gandin-Beckermann:

$$\text{Tem-se que } \frac{\delta}{D_g} = \frac{1 - Iv(Pe)}{2} \quad (73),$$

onde δ é a chamada espessura efetiva de difusão, D_g é o diâmetro da esfera e Iv é a função de Ivantsov.

A solução obtida tem por objetivo, a partir das definições de Sherwood e da espessura efetiva de difusão, encontrar uma relação entre o número de Sherwood e o número de Peclet.

O número de Sherwood em função do perfil de concentração adimensional é o que se vê abaixo.

$$Sh = \frac{-\partial C^*}{\partial r^*} \bigg|_{r^*=0.5} = \frac{-\partial[(C-C_0)/(C_s-C_0)]}{\partial(r/D_g)} \bigg|_{\frac{r}{D_g}=0.5} \quad (74)$$

é possível também relacionar a espessura de difusão com o perfil de concentração

$$\delta = \frac{C_s - C_0}{\frac{-\partial C}{\partial r} \big|_{r=D_g/2}} \quad (75)$$

igualando as equações acima obtemos

$$\frac{(C_s - C_\infty) D_g}{(C_s - C_\infty) Sh} \quad (76) \text{ portanto } \frac{\delta}{D_g} = \frac{1}{Sh} \quad (77)$$

O que nos leva a

$$Sh = \frac{2}{1 - Iv(Pe)} \quad (78)$$

Por meio dessa relação é possível simular a transferência de massa com movimentação de contorno para uma série de valores de Peclet e compará-la com a

solução dada acima para a condição de estado quasi-estacionário. Para a simulação do crescimento da esfera arbitrou-se seu diâmetro final como sendo igual a 1; o mesmo diâmetro usado nos casos onde não havia movimentação de contorno, o que manteve a coerência com os valores adimensionais escolhidos nas demais simulações. Simulou-se então o crescimento da esfera para uma série de valores de velocidade de crescimento (V_g) constante, adotando-se como instante final t aquele onde $V_g \cdot t = D_g$, ou seja $t = D_g / V_g$.

Depois de concluída cada simulação extraiu-se o fluxo de massa do instante final e integrou-o em toda a superfície, para então calcular o coeficiente de transferência de massa global e obter o número de Sherwood. Foi construído o gráfico onde se vê no eixo das abcissas o número de Peclet, imposto por meio da velocidade de crescimento da esfera, e no eixo das ordenadas o número de Sherwood encontrado a partir do fluxo de transferência de massa no caso da presente simulação ou calculado a partir da equação (78) (figura 20).

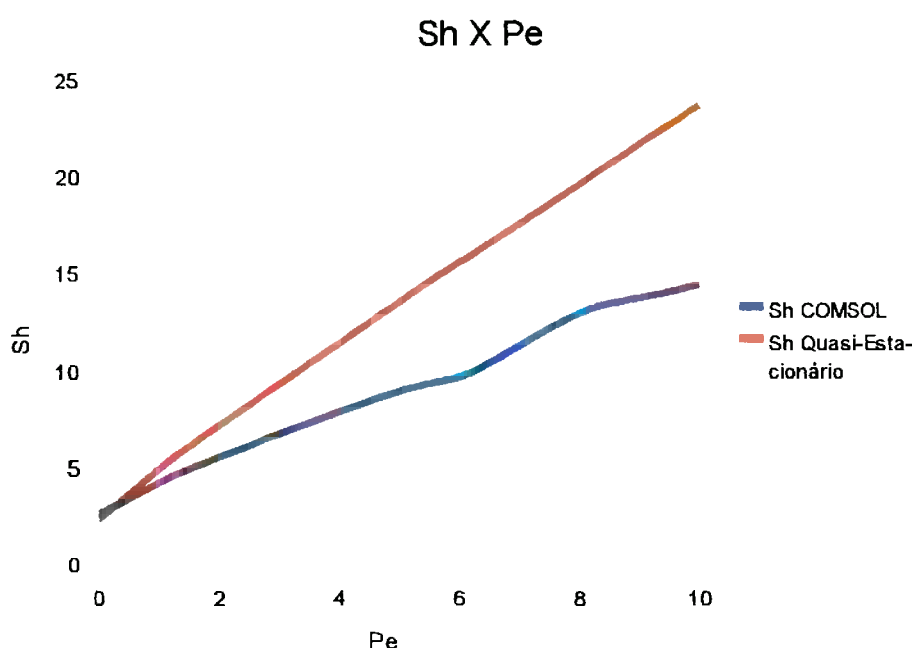


figura 20: Sh em função de Pe

O que se vê é uma maior proximidade entre os resultados quanto menor a velocidade de crescimento da esfera, o que indica que para velocidades crescentes a condição de estado quasi-estacionário não é mais satisfeita.

Conclusões

O trabalho teve início com a simulação do escoamento de um fluido ao redor de uma esfera. Os dados extraídos do modelo permitiram a análise do coeficiente de arrasto, campo de pressões, vorticidade e linhas de corrente que puderam ser comparados a dados presentes na literatura como pôde ser visto. Dessa primeira parte, que tinha como objetivo principalmente validar o modelo conclui-se que, conforme visto nas figuras 11, 12, 13 e 14, o modelo apresentou até então resultados confiáveis.

Seguiu-se realizando simulações para avaliar então a transferência de massa por meio de difusão e convecção, a partir das quais obteve-se primeiramente a figura 16 onde se compara o perfil de concentração obtido por meio do software com outro oriundo de correlação analítica. Em seguida obteve-se a figura 17 de onde foi possível confrontar valores de Nusselt em função de número de Reynolds. Nessa etapa do trabalho as comparações permitem afirmar que ainda há boa aderência entre os resultados calculados por meio do software e aqueles encontrados na literatura, ou seja, a transferência de massa está também sendo modelada corretamente.

Por fim simulou-se o caso onde a transferência de massa por difusão ocorre simultaneamente à movimentação do contorno. A correlação conhecida (78) permite estabelecer uma relação entre o número de Peclet e o número de Sherwood na condição de estado quasi-estacionário. No modelo, o número de Peclet foi inserido por meio da definição da velocidade de crescimento da esfera e o número de Sherwood calculado após a simulação. A figura 20 indica um desvio entre o número de Sherwood calculado no modelo e o número de Sherwood calculado a partir da correlação, sendo que esse desvio é tanto maior quanto maior a velocidade de crescimento da esfera. Isso permite concluir que conforme o número de Peclet aumenta, ou seja, a velocidade de crescimento da esfera aumenta; o problema deixa de estar em estado quasi-estacionário, a correlação (78) é válida para números pequenos de Peclet.

Bibliografia

- [1]JOHNSON, T. A., PATEL, V. C. 1999 Flow past a sphere up to a Reynolds number of 300. *J. Fluid Mech.* **378**, 19-70.
- [2]LE CLAIR, B. P., HAMIELEC, A. E., PRUPPACHER, H. R. 1969 A Numerical Study of the Drag on a Sphere at Low and Intermediate Reynolds Numbers. *J. of Atmospheric Sciences* **27**, 308-315.
- [3]ATEFI, G. H., NIAZMAND, H., MEIGOUNPOORY, M. R. 2007 Numerical Analysis of 3-D Flow Past a Stationary Sphere with Slip Condition at Low and Moderate Reynolds Numbers. *J. of Dispersion Science and Technology* **28**, 591-602
- [4]WHITAKER, S 1972 Forced Convection Heat Transfer Correlations for Flow in Pipes, Past Flat Plates, Single Cylinders, Single Spheres and for Flow in Packed Beds and Tube Bundles. *AIChE Journal* **18**, 361-371
- [5]DHOLE, S. D., CHHABRA, R. P., ESWARAN, V. 2006 A numerical study on the forced convection heat transfer from an isothermal and isoflux sphere in the steady symmetric flow regime. *Int. Journal of Heat and Mass Transfer* **49**, 984-994
- [6]BADILLO, A., CEYNAR, D., BECKERMANN, C. 2007 Growth of equiaxed dendritic crystals settling in an undercooled melt, Part 2: Internal solid fraction. *J. Of Crystal Growth* **309**, 216-224
- [7]INCROPERA F. P., DEWITT D. P. Fundamentals of Heat and Mass Transfer. *John Wiley e Sons Inc.*1996
- [8]RAPPAZ, M., THEVOZ, P. H. 1987 Solute Diffusion Model for Equiaxed Dendritic Growth: Analytical Solution. *Acta metall* **12**, 2929-2933
- [9]BRODKEY, R. S. The Phenomena of Fluid Motions. La Vergne: *Addison Weasley Pub. Co.* 1967
- [10]BENNETT, C. O., MYERS, J. E. Fenômenos de Transporte

Quantidade de Movimento Calor e Massa. São Paulo: McGraw-Hill do Brasil 1978

[11] DIXON, A. G., TASKIN, M. E., NIJEMEISLAND, M., STITT, E. H. 2010 Systematic mesh development for 3D CFD simulation of fixed beds: Single sphere study. *Computers and Chemical Engineer* **35**, 1171-1185

[12] SINGH, A. K., MAZUMDAR, D. 1997 Mass Transfer between Solid and Liquid in a Gas-Stirred Vessel. *Metallurgical and Materials Transactions B* **28**, 95-102

[13] ROMKES, S. J. P., DAUTZENBERG, F. M., VAN DEN BLEEK, C. M., CALIS, H. P. A. 2003 CFD modeling and experimental validation of particle-to-fluid mass and heat transfer in a packed bed at very low channel to particle diameter ratio. *Chemical Engineer Journal* **96**, 3-13

[14] MARTORANO, M. A., BECKERMANN, C., GANDIN, Ch.-A. 2003 A Solutal Interaction Mechanism for the Columnar-to-Equiaxed Transition in Alloy Solidification. *Metallurgical and Materials Transactions A* **34**, 1657-1674

[15] BOUCHET, G., MEBAREK, M., DUSEK, J. 2006 Hydrodynamic forces acting on a rigid fixed sphere in early transitional regimes. *European Journal of mechanics B/Fluids* **25**, 321-336

[16] RIMON, Y., CHENG, S. I. 1969 Numerical Solution of a Uniform Flow over a Sphere at Intermediate Reynolds Numbers. *The Physics of Fluids* **12**, 949-959

[17] SHUYAN, W., XU, Y., HUILIN, L., LONG, Y., SHUAI, W., YONLONG, D. 2009 CFD studies on mass transfer of gas-to-particle cluster in a circulating fluidized bed. *Computer and Chemical Engineering* **33**, 393-401