

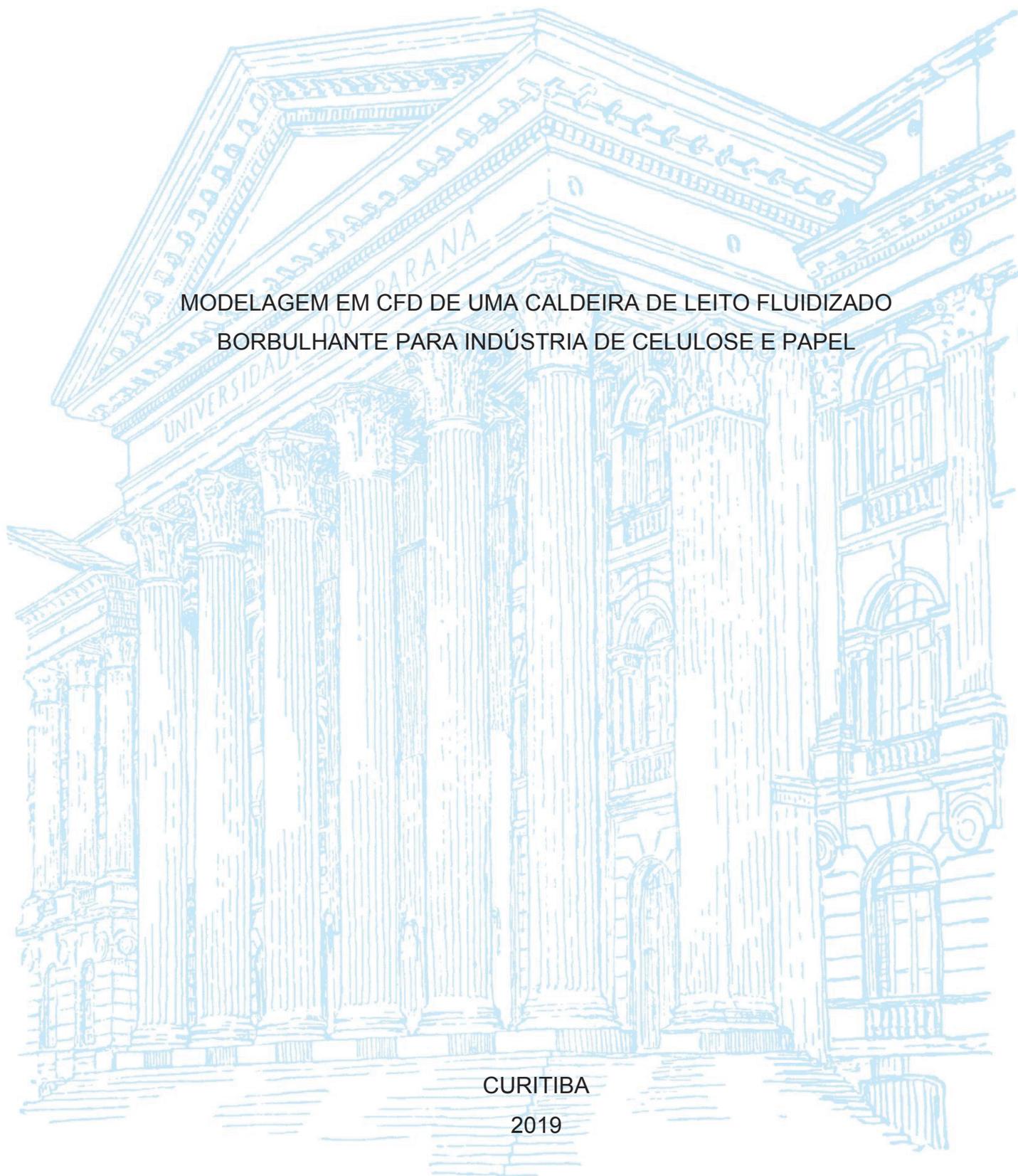
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

SARAH FERNANDES NALLI

MODELAGEM EM CFD DE UMA CALDEIRA DE LEITO FLUIDIZADO
BORBULHANTE PARA INDÚSTRIA DE CELULOSE E PAPEL

CURITIBA

2019



SARAH FERNANDES NALLI

MODELAGEM EM CFD DE UMA CALDEIRA DE LEITO FLUIDIZADO
BORBULHANTE PARA INDÚSTRIA DE CELULOSE E PAPEL

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Ciência dos Materiais, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Ciências e Engenharia dos Materiais.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Itsuo Yamamoto.

Coorientador: Prof. Dr. Osvaldo Vieira.

CURITIBA

2019

Catálogo na Fonte: Sistema de Bibliotecas, UFPR
Biblioteca de Ciência e Tecnologia

N172m

Nalli, Sarah Fernandes

Modelagem em CFD de uma caldeira de leite fluidizado borbulhante para indústria de celulose e papel [recurso eletrônico] / ISarah Fernandes Nalli. – Curitiba, 2019.

Dissertação – Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia, Programa de Pós – Graduação em Engenharia e Ciência dos Materiais, 2019.

Orientador: Carlos Itsuo Yamamoto. Coorientador: Osvaldo Vieira.

1. Energia – Indústria. 2. Biomassa. 3. Combustão. 4. escoamento multifásico. 5. Fluidodinâmica Computacional. I. Universidade Federal do Paraná. II. Yamamoto, Carlos Itsuo. III. Vieira, Osvaldo. IV. Título.

CDD: 662.88

Bibliotecária: Vanusa Maciel CRB- 9/1928

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em ENGENHARIA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da dissertação de Mestrado de **SARAH FERNANDES NALLI** intitulada: "**MODELAGEM EM CFD DE UMA CALDEIRA DE LEITO FLUIDIZADO BORBULHANTE PARA INDÚSTRIA DE CELULOSE E PAPEL**", sob orientação do Prof. Dr. CARLOS ITSUO YAMAMOTO, que após terem inquirido a aluna e realizado a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa.

A outorga do título de mestre está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 28 de Agosto de 2019.



CARLOS ITSUO YAMAMOTO
Presidente da Banca Examinadora (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)



MARCIA MULLER
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ)



ELITON FONTANA
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus pela sua bondade e misericórdia por me conceder a sabedoria durante esses dois anos.

Agradeço a minha família, em especial minha irmã e meu cunhado, Miguelangela Fernandes e Vanderlei Martelo Pimenta, que me apoiaram em todos os momentos, em todas as dificuldades devido à distância, sempre foram meu porto seguro. Agradeço também a minha família de Curitiba, Marlene, Antônio Carlos, Jaque, Jéssica, que me receberam com maior carinho em sua casa. E em especial a Jana e ao Luis por me ajudarem desde a época da graduação, compartilhando conhecimentos e ajudando na execução de mais um trabalho.

Agradeço ao meu orientador Dr. Carlos Itsuo Yamamoto e coorientador Dr. Osvaldo Vieira, pelos ensinamentos e pela confiança depositada em mim durante o mestrado. E a Klabin pela possibilidade de execução desse trabalho, disponibilizando sua estrutura e por todo suporte técnico dos funcionários que se dispuseram em ajudar.

Ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Ciência dos Materiais (PIPE), a UFPR e ao Laboratório LACAUT pela infraestrutura disponibilizada, em especial os funcionários Renato, Rubia e Cris por toda ajuda durante essa jornada. Agradeço igualmente a coordenação de Aperfeiçoamento de Nível Pessoal (CAPES) pelo financiamento da pesquisa.

Gostaria também de agradecer aos professores Dr. Éinton Fontana e Dr. Luiz Fernando de Lima, por compartilhar conhecimentos sobre o software utilizado durante o mestrado.

Aos meus amigos de mestrado, Dominicky, Maynara, Elivaldo, Julia e Matheus que tornaram essa jornada um pouco mais tranquila e divertida.

E também gostaria de agradecer aos meus amigos de Curitiba, Andrey, Renan e Vitor, e aos meus amigos da célula, Talitha, Queren, Hananda, Monik e Luis, que foram essenciais para a conquista de mais uma vitória. Sempre me deram apoio e incentivo para continuar este projeto e por sempre me escutar e dar conselhos nas horas mais críticas.

RESUMO

No setor de utilidades de uma indústria, as caldeiras são uma alternativa apropriada de sistema de contato gás-sólido para combustão da biomassa. Nas condições operacionais utilizadas, os regimes de escoamentos presentes na fluidização de partículas de areia com biomassa são leito fixo, fluidizado borbulhante e fluidizado circulante. No presente trabalho foi analisado um leito fluidizado borbulhante para a transformação de energia numa indústria de celulose e papel. A metodologia utilizada é composta por modelos de conservação de massa e energia e as simulações foram realizadas através do software ANSYS FLUENT 18.2, que permite a simulação de diferentes processos envolvendo Fluidodinâmica Computacional. A modelagem do processo considera condições bidimensionais e regime transiente na caldeira; e está baseada nos trabalhos realizados experimentalmente em escala laboratorial. Entretanto, ensaios fluidodinâmicos são realizados para obtenção de dados numéricos. Assim, o escoamento multifásico é analisado através da técnica da fluidodinâmica computacional usando uma abordagem Euleriana-Euleriana. Um dos parâmetros de controle que deve ser modelado é a velocidade mínima de fluidização que é obtida através de modelos propostos na literatura. Para o leito operando com misturas de biomassa e areia, a segregação que é indesejável e ocorre em determinados tipos de escoamentos em baixa velocidade. O modelo de arraste das partículas que está sendo estudado é o de Syamlal-O'Brien (1989) para representar o escoamento de partículas de areia ao longo do leito fluidizado.

Palavras-chave: Energia. Biomassa. Combustão. Escoamento multifásico. Leito fluidizado. Fluidodinâmica Computacional.

ABSTRACT

In the industrial environment, boilers are an appropriate alternative to the gas-solid contact system for biomass combustion. In operational conditions used, the flow patterns in fluidization of sand particles with biomass are fixed bed, bubbling fluidized and circulating fluidized. In the present work, it was analysed a bubbling fluidized bed for energy transformation in a cellulose and paper industry. The methodology used is composed by mass and energy conservation models and the simulations were realized by the software ANSYS FLUENT 18.2, which allows different process simulations involving computational fluid dynamics. The process modelling considers bi-dimensional conditions and transient-state in the boiler; and it is based in experimental laboratory scale works. However, fluid dynamics tests are realized to obtain numerical data. Thus, multiphase flow is analysed through computational fluid dynamics techniques using an Eulerian-Eulerian approach. One of the control parameters that must be modelled is the minimum fluidization velocity which is obtained through proposed models on the literature. For a bed operating with biomass and sand mixtures, the segregation is undesirable and occurs in certain types of flow at low velocities. The drag model that has been studied is Syamlal-O'Brien (1989) which represents sand particles flow at fluidized bed.

Keywords: Energy. Biomass. Combustion. Multiphase Flow. Fluidized Bed. Computational Fluid Dynamics.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1 - OS DIFERENTES TIPOS DE ESCOAMENTOS.	24
FIGURA 2 - CLASSIFICAÇÃO DE PARTÍCULAS SEGUNDO GELDART.....	25
FIGURA 3 - CURVA CARACTERÍSTICA DE FLUIDIZAÇÃO.	28
FIGURA 4 – DIAGRAMA DE SIMULAÇÃO DE PROCESSO.....	33
FIGURA 5 - TRÊS FASES DO ESCOAMENTO MUTLIFÁSICO.....	39
FIGURA 6 - REPRESENTAÇÃO GEOMÉTRICA TRIDIMENSIONAL DA CALDEIRA DE LEITO FLUIDIZADO BORBULHANTE DA KLABIN.	57
FIGURA 7 - REPRESENTAÇÃO DAS 6 ENTRADAS DE BIOMASSA NA CALDEIRA.	58
FIGURA 8 – REPRESENTAÇÃO DA GEOMETRIA BIDIMENSIONAL DA CALDEIRA 6 COM UNIDADES EM MILÍMETROS.....	60
FIGURA 9 - MALHAS COMPUTACIONAIS GERADAS E SUAS DIMENSÕES.	66
FIGURA 10 - SIMULAÇÃO PARA TESTE DE CONVERGÊNCIA DE MALHAS.....	67
FIGURA 11 - SIMULAÇÃO DO LEITO FLUIDIZADO PARA VELOCIDADE DE 0,45m/s.	68
FIGURA 12 - SIMULAÇÃO DO LEITO FLUIDIZADO PARA VELOCIDADE DE 0,55m/s.	69
FIGURA 13 - SIMULAÇÃO DO LEITO FLUIDIZADO PARA VELOCIDADE DE 0,65m/s.	69
FIGURA 14 – PERFIL DE FRAÇÃO VOLUMÉTRICA DE AREIA NO LEITO EM FUNÇÃO DA VELOCIDADE SUPERFICIAL.....	70
FIGURA 15 - FRAÇÃO VOLUMÉTRICA DE CAVACO NO LEITO EM FUNÇÃO DA VELOCIDADE.	71
FIGURA 16 - PERFIL DE FRAÇÃO VOLUMÉTRICA DA MISTURA EM FUNÇÃO DA VELOCIDADE.	72
FIGURA 17 – PERFIS MÉDIOS DE FRAÇÃO VOLUMÉTRICA DO LEITO PARA CADA FASE E PARA CADA MISTURA.....	73
FIGURA 18 - PERFIS MÉDIOS DE FRAÇÃO VOLUMÉTICA PARA DIFERENTES MISTURAS.....	75
FIGURA 19 - CÉLULA TRIDIMENSIONAL COM SEUS PONTOS VIZINHOS.	85
FIGURA 20 - LOCALIZAÇÃO DOS NÓS BASEADOS NA DIREÇÃO DO ESCOAMENTO.....	88

FIGURA 22 - RESTRIÇÕES DO LIMITADOR UNIVERSAL NO DIAGRAMA DE VARIÁVEL NORMALIZADA.....	89
FIGURA 23 - VOLUME DE CONTROLE PARA A EQUAÇÃO DE QUANTIDADE DE MOVIMENTO NA DIREÇÃO X.	96

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 – DIFERENTES TIPOS DE BIOMASSA EXISTENTES E SUA COMPOSIÇÃO, EM %M/M.	17
TABELA 2 – DIFERENTES TIPOS DE BIOMASSA EXISTENTES E SUA COMPOSIÇÃO, EM %M/M.	18
TABELA 3 - VALORES DAS CONSTANTES C1 E C2 DA EQUAÇÃO DE ERGUN MODIFICADA.....	31
TABELA 4 - ESTUDOS ENVOLVENDO FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL EM LEITOS FLUIDIZADOS.....	33
TABELA 7 - ABORDAGEM EULERIANA- EULERIANA.	40
TABELA 8 - EQUAÇÕES GOVERNANTES DA ABORDAGEM EULERIANA- EULERIANA PARA ESCOAMENTO GÁS-SÓLIDO EM LEITO FLUIDIZADO.....	42
TABELA 9 - COEFICIENTES E TERMOS DA TEMPERATURA GRANULAR.....	44
TABELA 10 - REPRESENTAÇÃO DAS EQUAÇÕES DAS TENSÕES VISCOSAS.	48
TABELA 11 - DIAMÊTRO MÉDIO DA AREIA UTILIZADA NO PROCESSO.	56
TABELA 12 – MALHAS COMPUTACIONAIS GERADAS.....	61
TABELA 13 - PARÂMETROS UTILIZADOS NA SIMULAÇÃO.	63
TABELA 14 - MALHAS COMPUTACIONAIS GERADAS.....	66
TABELA 15 - DADOS SIMULADOS DAS MISTURAS.....	72

LISTA DE ABREVIATURAS OU SIGLAS

- LACAUT - Laboratório de Análises de Combustíveis Automotivos.
CFD - *Computacional Fluid Dynamics*.
FOU - *First Order Upwind*.

LISTA DE SÍMBOLOS

A_b	Área da seção transversal do leito	[m ²]
A_l	Grau de alongamento	[-]
Ar	Número de Arquimedes	[-]
C_D	Coefficiente de arraste	[-]
C_{fr}	Coefficiente de atrito entre as fases sólidas	[-]
d_s	Diâmetro de partícula	[m]
e_{ss}	Coefficiente de restituição entre sólidos	[-]
g_{0lm}	Função de distribuição radial	[-]
\vec{g}	Aceleração gravitacional	[m.s ⁻²]
h	Posição axial	[m]
\bar{I}	Tensor unitário	[-]
$k_{\theta s}$	Coefficiente de difusão de temperatura granular	[kg.m ⁻² .s ¹]
L	Altura do leito de partículas	[m]
m	Massa	[kg]
N_c	Número de Courant $\equiv v_g \Delta t / \Delta y$	[]
P	Pressão	[Pa]
ΔP	Queda de pressão no leito	[Pa]
Re	Número de Reynolds $\equiv \rho v d \mu$	[-]
Δt	Passo de tempo	[s]
u	Velocidade superficial	[m.s ⁻¹]
\vec{v}	Velocidade	[m.s ⁻¹]
$v_{r,s}$	Velocidade terminal para a fase sólida	[m.s ⁻¹]
V	Volume	[m ³]
Δy	Tamanho da célula paralela ao fluxo	[m]

Símbolos gregos

α	Fração volumétrica	[-]
β	Coefficiente de troca de <i>momentum</i> entre fases	[kg.m ⁻³ .s ⁻¹]

$\gamma_{\theta s}$	Energia de dissipação colisional	[kg.m ⁻¹ .s ⁻³]
ε	Porosidade	[-]
Θ	Temperatura granular	[m ² .s ⁻²]
λ	Viscosidade <i>bulk</i>	[Pa.s]
μ	Viscosidade cisalhante	[Pa.s]
$\overline{\tau}$	Tensor das tensões	[N.m ⁻²]
ρ	Massa específica	[kg.m ⁻³]
σ	Desvio padrão	[-]
ϕ	Esfericidade	[-]
ϕ_{gs}	Troca de energia entre fases	[kg.m ⁻¹ .s ⁻³]

Subscritos

g	Fase fluida, gasosa
s	Fase granular, sólida
mf	Mínima fluidização

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	15
1.1 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL EM ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS	19
1.2 OBJETIVOS	20
1.2.1 Objetivo geral	21
1.2.2 Objetivos específicos.....	21
2 REVISÃO DE LITERATURA	22
2.1 OBTENÇÃO DE ENERGIA PELA COMBUSTÃO DA BIOMASSA EM CALDEIRAS	22
2.2 LEITOS FLUIDIZADOS	23
2.2.1 O fenômeno da fluidização	23
2.2.2 Caldeiras de Leito Fluidizado	26
2.2.3 Fluidodinâmica de Leitos Fluidizados.....	27
2.2.3.1 Velocidade mínima de fluidização e perda de carga	30
2.3 MÉTODOS NUMÉRICOS COMPUTACIONAIS	31
2.4 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL.....	32
3 MODELAGEM	36
3.1 MODELAGEM EM CFD (COMPUTACIONAL FLUID DYNAMICS).....	36
3.2 MODELAGEM DE ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS	36
3.3 MODELAGEM EULERIANA PARA LEITOS FLUIDIZADOS	41
3.3.1 Considerações	41
3.3.2 Equacionamento	41
3.3.2.1 Equações de Conservação.....	41
3.3.2.2 Teoria cinética granular	44
3.3.2.3 Transferência de quantidade de movimento entre as fases gás e sólidas ...	45
3.3.2.4 Transferência de quantidade de movimento entre diferentes fases sólidas .	46
3.3.2.5 Tensor de tensões entre a fases	47
3.3.2.5.1 Tensões Viscosas.....	47
3.3.2.5.2 Pressão de sólidos	49
3.4 CONDIÇÕES DE CONTORNO E CONDIÇÕES INICIAIS	49
3.4.1 Condições de contorno:.....	49
3.4.1.1 Condição de entrada	51
3.4.1.2 Condição de saída.....	51

3.4.1.3	Condição de parede	51
3.4.1.4	Condições de simetria e periódicas	52
3.4.1.5	Condição Inicial	53
3.4.2	Classificação do problema	53
3.5	CARACTERÍSTICAS NUMÉRICAS	53
4	FUNCIONAMENTO DA CALDEIRA E SIMULAÇÃO DO PROCESSO	55
4.1	MATERIAIS	55
4.2	CARACTERIZAÇÃO DAS PARTÍCULAS.....	55
4.2.1	Massa específica.....	55
4.2.2	Diâmetro médio	56
4.2.3	Porosidade	56
4.3	METODOLOGIA NUMÉRICA.....	57
4.3.1	Descrição da Geometria e das Condições de Contorno	57
4.4	DESCRIÇÃO DOS PARÂMETROS E MODELO NUMÉRICOS UTILIZADOS....	59
4.4.1	Malha Computacional.....	59
4.4.2	Método de solução do modelo	61
4.4.3	Parâmetros e modelos da simulação	63
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	65
5.1	ESTUDO DA MALHA COMPUTACIONAL	66
5.1.1	Expansão do Leito Fluidizado com areia.....	67
5.1.2	Adição de cavaco e simulação com velocidades diferentes.....	70
5.1.3	Leito Fluidizado composto por duas fases sólidas (misturas)	71
5.1.4	Leito fluidizado com partículas de diferentes diâmetros	72
6	CONCLUSÕES	77
7	RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	78
	REFERÊNCIAS.....	79
	ANEXO 1 – DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES GOVERNANTES.....	85

1 INTRODUÇÃO

Evolução e características gerais da combustão em leito fluidizado

A tecnologia de leito fluidizado para processos físicos e químicos vem sendo utilizada, após a segunda guerra mundial, na indústria química e na indústria de petróleo para diversas aplicações. Essa tecnologia de combustão se destaca principalmente a sua alta flexibilidade no uso de combustíveis sólidos e sua capacidade de atingir baixos níveis de emissões de óxidos de nitrogênio e enxofre sem necessidade de equipamentos de tratamento de gases muito complexos.

Uma fonte renovável que tem recebido muita atenção é o processo de gaseificação, que pode ser aplicado tanto ao carvão mineral quanto em matéria-prima de origem vegetal como madeira e bagaço de cana, a chamada biomassa (HIGMAN e van der BURGT, 2008). É importante notar que a biomassa pode ser queimada diretamente em uma caldeira, o que também vem sendo feito em algumas plantas de geração de energia elétrica. Entretanto, existe uma série de vantagens de se utilizar os gases obtidos da biomassa através de um processo termoquímico (gaseificação, pirólise), dentre as quais é possível citar: o aumento do poder calorífico do combustível, remoção de enxofre e nitrogênio do combustível, facilidade de transporte, e a possibilidade de utilizar ciclos a gás ao invés de ciclos a vapor em plantas de geração elétrica de pequeno porte (BASU, 2010).

O processo de gaseificação pode ser realizado em diferentes tipos de reatores, que são discutidos mais a frente. Entretanto, a gaseificação em reatores de leito fluidizado tem sido a preferencial para plantas de gaseificação de médio e grande portes, devido à possibilidade de gaseificadores de maior escala que os de leito fixo (GÓMEZ-BAREA; LECKNER, 2010). Este fato tem motivado diversos estudos sobre o comportamento do escoamento no interior dos reatores de leito fluidizado. Quando a operação de um leito fluidizado acontece em baixas temperaturas favorece diversos fatores, como: 1) produz baixas emissões de NO_x , que se forma a partir de 1400°C , segundo Jakobsen (2008). 2) a utilização de absorventes no leito, como por exemplo calcário (CaCO_3) em leitos fluidizados circulantes geralmente (FCC) para o controle de emissões de gases SO_x e 3) a queima de biomassa com relativo alto conteúdo de álcalis sem grandes problemas de aglomeração no leito (VAN LOO e KOPPEJAN, 2008).

Os principais combustíveis das indústrias, usinas e superpotências como EUA, Europa e China são o carvão e o petróleo, ambos de origem fóssil. Porém, a queima destes combustíveis libera uma enorme quantidade de gás carbônico que, em excesso e juntamente com metano e outros gases, causa um aumento continuado do estoque de poluentes (em particular do dióxido de carbono) na atmosfera, o que leva à intensificação do efeito estufa. Uma das principais consequências ocasionadas pelo uso excessivo dos combustíveis fósseis não renováveis é a desestabilização do clima, caracterizada pelo crescente aumento da temperatura média global da Terra, decorrente da intensificação do efeito estufa e fruto do aumento de emissão de gases poluentes na atmosfera. Essa desestabilização do sistema climático da Terra, bem como a crescente demanda de energia, levou pesquisadores de diversas partes do mundo a procurarem por metodologias novas e consideradas limpas na obtenção de combustíveis a partir de fontes renováveis de energia, os chamados combustíveis renováveis (LOHA et al., 2011). Então, a implementação de novas fontes renováveis e sustentáveis de energia pode constituir uma solução estratégica para evitar o colapso ambiental e também atender a demanda global de energia que cresce a cada dia.

A biomassa provém da absorção de CO₂ (dióxido de carbono) da atmosfera e convertido em matéria vegetal, quando acontece a fotossíntese, o que faz com que os combustíveis gerados a partir da biomassa sejam menos prejudiciais ao meio ambiente quando comprados aos combustíveis fósseis, utilizados em abundância em todo o mundo atualmente. Os produtos obtidos da biomassa são menos tóxicos e disponíveis em escala maior (PINHO, 2012; SONG; OZKAN, 2010). Existem dois tipos de biomassa: a biomassa virgem e a biomassa residual. Madeira, plantas, folhas e animais fazem parte do grupo do primeiro tipo de biomassa. Já o tipo residual, é constituída por diversos tipos de resíduos: sólidos, líquidos, agrícolas, animais e esgoto (PINHO, 2012).

Como é possível observar, os tipos de biomassa na TABELA 1 são compostas por carbono, hidrogênio e oxigênio, basicamente, tendo carbono em maior quantidade percentual (aproximadamente 50%). Por isso, muitos pesquisadores consideram a biomassa como sendo composta basicamente por carbono, para fins de simplificação. A biomassa também é caracterizada por sua grande variedade em relação a suas propriedades físicas, químicas, termodinâmicas e de transporte, como por exemplo:

massa específica, capacidade térmica, composição elementar, características termogravimétricas, poder calorífico e tamanho de partícula.

TABELA 1 – DIFERENTES TIPOS DE BIOMASSA EXISTENTES E SUA COMPOSIÇÃO, EM %M/M.

Tipo de biomassa	C	H	O	N	S
Cedro (madeira)	51,10	5,9	42,5	0,12	0,02
Serragem de madeira	46,2	5,1	35,4	1,5	0,06
Resíduo de óleo de oliva	50,7	5,89	36,97	1,36	0,3
Casca de arroz	45,8	6,0	47,9	0,3	0
Palha de arroz	38,61	4,28	37,16	1,08	0,65
Serragem de pinho	50,54	7,08	41,11	0,15	0,57
Abeto (madeira)	49,3	5,9	44,4	0,1	0
Casca de café	46,8	4,9	47,1	0,6	0,6
Café em pó	52,97	6,51	36,62	2,8	0,05
Lariço (madeira)	44,18	6,38	49,32	0,12	0
Resíduo de poda de videira	46,97	5,8	44,49	0,67	0,01
Vara de juta	49,79	6,02	41,37	0,19	0,05
Bagaço de cana-de-açúcar	48,58	5,97	38,94	0,2	0,05
Sabugo de milho	40,22	4,11	42,56	0,39	0,04
Caroço de pêssego	51,95	5,76	40,7	0,79	0,01
Palha de trigo	46,1	5,6	41,7	0,5	0,08
Haste do algodão	42,8	5,3	38,5	1,0	0,2
Palha	36,57	4,91	40,70	0,57	0,14
Madeira de cânfora	43,43	4,85	38,53	0,32	0,1
Faia (madeira)	48,27	6,36	45,2	0,14	0
Gramma (switchgrass)	47	5,3	41,4	0,5	0,1
Média	46,57	5,62	41,55	0,64	0,14
Desvio Padrão	4,37	0,74	3,83	0,64	0,21

onde C = carbono, H = hidrogênio, O = oxigênio, N = nitrogênio, S = enxofre

FONTE: Adaptado de Alauddin et al. (2010).

A tecnologia de utilização de biomassa para geração de energia é de extrema importância para a economia do Brasil. O Brasil possui uma área territorial que fornece condições favoráveis, regiões tropicais e chuvosas, para a produção da matéria-prima necessária para o processo e o uso energético em larga escala, o Brasil pode ser transformado em um dos maiores fornecedores de combustíveis renováveis do mundo, pelo fato da biomassa oferecer os melhores retornos dentre as outras fontes de energias renováveis (TURNER, 2004). A geração de energia a partir de biomassa é de interesse mundial já que, utilizada responsavelmente, é uma fonte de energia sustentável e renovável que permite a substituição de combustíveis fósseis por combustíveis equivalentes extraídos da biomassa.

Há propostas no Brasil para implantar a biomassa como fonte de energia, foi estabelecido o Plano de Expansão Decenal de Energia (PDE). Este plano é atualizado a cada ano, que estima os rumos energéticos que o Brasil poderá tomar na próxima década, prevê que a participação de fontes renováveis na capacidade instalada de geração elétrica no Sistema Interligado Nacional (SIN) terá um aumento de 83,8% em 2012 para 85,8% em 2022. A oferta interna ficará dividida da seguinte forma: 12,4% da energia proveniente de grandes hidrelétricas, 58,6% proveniente de termelétricas, combustíveis fósseis e nucleares e 29% oriundo de fontes renováveis, como eólicas, e biomassa, com ênfase no bagaço da cana de açúcar e no etanol (EPE, 2014).

Como é possível observar, que na TABELA 1 as biomassas são compostas basicamente de carbono, hidrogênio e oxigênio, tendo carbono em maior quantidade percentual (aproximadamente 50%).

TABELA 2 – DIFERENTES TIPOS DE BIOMASSA EXISTENTES E SUA COMPOSIÇÃO, EM %M/M.

Biomassa	Cinzas	MV	CF	U	LHV (MJ/kg)
Cedro (madeira)	0,3	80-82	18-20	0	19,26
Serragem de madeira	1,3	70,4	17,9	10,4	18,81
Resíduo de óleo de oliva	4,6	76	19,4	9,5	21,2
Casca de arroz	0,8	73,8	13,1	12,3	13,36
Palha de arroz	12,64	65,23	16,55	5,58	14,40
Serragem de pinho	0,55	82,29	17,16	0	20,54
Abeto (madeira)	0,3	74,2	17,1	8,4	18,5
Casca de café	1,0	74,3	14,3	10,4	16,54
Café em pó	1,0	71,8	16,7	10,5	22
Lariço (madeira)	0,12	76,86	14,86	8,16	19,45
Resíduo de poda de videira	2,06	78,16	19,78	0	17,91
Vara de juta	0,62	76-78	21,4 - 23,4	0	19,66
Bagaço de cana-de-açúcar	1,26	67-70	28,74 - 30,74	0	19,05
Sabugo de milho	2,97	71,21	16,11	9,71	16,65
Caroço de pêssego	0,65	81,3	18,1	8,53	21,6
Palha de trigo	6,1	75,8	18,1	0	17,2
Haste do algodão	4,3	72,3	15,5	7,9	15,2
Palha	8,61	64,98	17,91	8,5	14,6
Madeira de cânfora	0,49	72,47	14,75	12,29	17,48
Faia (madeira)	0,8	81	18	0	19,2
Gramma (<i>switchgrass</i>)	4,6	58,4	17,1	20	18,7
Média	2,62	73,67	17,79	6,77	18,16
Desvio Padrão	3,23	6,01	3,44	5,60	2,39

onde MV = material volátil, CF = carbono fixo, U = umidade

FONTE: Adaptado de Alauddin et al. (2010).

Entretanto, os componentes não estão presentes nas mesmas proporções nos diferentes tipos de biomassa considerando, o que explica a complexidade da avaliação da composição.

Na TABELA 2 é observa que a biomassa é basicamente composta por material volátil. Apesar de apresentar uma alta porcentagem de carbono em sua composição inicial, como visto na TABELA 1 TABELA 1 – DIFERENTES TIPOS DE BIOMASSA EXISTENTES E SUA COMPOSIÇÃO, EM %M/M.

, a quantidade de carbono fixo varia de 10 a 20%.

1.1 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL EM ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS

Por motivo da grande quantidade de variáveis envolvidas no processo de combustão que afetam as reações químicas e a eficiência do equipamento, como temperatura do leito, velocidade superficial dos gás e distribuição do tamanho das partículas, a utilização de experimentos em reatores de grande escala é muito custosa (RAVELLI *et al.*, 2008). Dessa forma, os estudos computacionais têm se apresentado como uma opção bastante viável para a otimização do processo de combustão.

Dentre os estudos computacionais, os mais utilizados são os modelos cinéticos e termodinâmicos (GÓMEZ-BAREA e LECKNER, 2010). Entretanto, estes dois métodos possuem algumas desvantagens, decorrentes de grande dependência de correlações empíricas para determinar grandezas que seriam calculadas pelo método de fluidodinâmica computacional (BASU, 2010). A utilização de correlações empíricas para contabilizar os efeitos hidrodinâmicos do escoamento faz com que os dados obtidos sejam válidos apenas para situações próximas àquelas em que essas correlações foram desenvolvidas. Desta maneira alterações na geometria do gaseificador, ou no padrão de fluidização do leito podem reduzir a exatidão de algumas das correlações utilizadas.

Uma alternativa à utilização destes modelos empíricos são os modelos de fluidodinâmica computacional (CFD), possuem como grande vantagem a sua generalidade de aplicações. Desta maneira, é possível simular diferentes condições de escoamento, em diferentes geometrias sem a necessidade de modificações drásticas na modelagem do problema (GÓMEZ-BAREA e LECKNER, 2010). Embora os modelos de CFD sejam utilizados há bastante tempo em diversas áreas da

engenharia, sua utilização em problemas de escoamento multifásico reativo é relativamente nova (SINGH *et al.*, 2013).

O modelo de fluidodinâmica computacional requer um elevado esforço de processamento, o que tornou seu uso limitado a poucos supercomputadores durante vários anos (BLAZEK, 2001). O grande salto na velocidade de processamento dos computadores, ocorrido entre o final do século XX e o começo do XXI, revolucionou a história deste método (TANNEHILL *et al.*, 1997).

SINGH *et al.* (2013) afirmam que simulações de CFD representam uma das melhores ferramentas para a predição de parâmetros críticos requeridos para controlar de forma eficiente a combustão. Devido a essas vantagens é importante a utilização deste método, para ajudar na otimização das condições operacionais e também no desenvolvimento de novas caldeiras.

Existem duas abordagens desenvolvidas para utilizar as técnicas de fluidodinâmica computacional em escoamentos gás-partículas, o modelo Euler-Euler e o modelo Euler-Lagrange, e o que difere um do outro é a forma em que cada uma dessas técnicas descreve a fase sólida (RANADE, 2002). No modelo Euler-Lagrange as partículas são acompanhadas individualmente, e no modelo Euler-Euler é feita a hipótese de que o leito de partículas possui um comportamento semelhante ao de um fluido. Para uma caldeira com um leito de partículas denso o modelo Euler-Lagrange não é uma opção viável com a mesma capacidade de processamento quanto o modelo de Euler-Euler que requer uma menor esforço computacional, assim esse modelo é mais interessante para a modelagem matemática (SINGH *et al.*, 2013).

Muitos estudos realizados utilizando o modelo Euler-Euler para descrever processos de combustão em leitos fluidizados ignoram o comportamento tridimensional do escoamento, utilizando um domínio bidimensional (SINGH *et al.*, 2013).

1.2 OBJETIVOS

O presente trabalho tem como principal objetivo desenvolver e implementar um modelo fenomenológico para descrever o comportamento da caldeira em leito fluidizado de 2 fases: bolha e densa. O modelo fenomenológico proposto deverá ser baseado na parte fluidodinâmica, que descreve o comportamento do leito fluidizado.

Este trabalho foi realizado integralmente no Laboratório de Combustíveis automotivos (LACAUT) da Usina Piloto de Tecnologia Química – bloco A da Universidade Federal do Paraná (UFPR).

1.2.1 Objetivo geral

Desenvolver e implementar um modelo fenomenológico transiente para descrever o comportamento da caldeira 06 de biomassa aquatubular de leite fluidizado borbulhante de 2 fases: bolha e densa. O modelo fenomenológico proposto deverá ser baseado na parte de *Computacional Fluid Dynamics* (CFD), que descreve o comportamento do leite fluidizado.

1.2.2 Objetivos específicos

Além de um objetivo geral do trabalho possui alguns objetivos mais pontuais para serem realizados.

1. Estudar e discretizar as equações dos parâmetros fluidodinâmicos necessários para a elaboração do modelo.
2. Analisar o comportamento fluidodinâmico do leite em condições de grande escala num sistema de combustão.
3. Elaborar modelos que possam fornecer resultados rápidos em diversas condições típicas de caldeiras industriais.
4. Comparar os resultados obtidos com modelos existentes e analisar o tempo de simulação em várias condições.

2 REVISÃO DE LITERATURA

2.1 OBTENÇÃO DE ENERGIA PELA COMBUSTÃO DA BIOMASSA EM CALDEIRAS

Bridgwater (2003) diz que a energia pode ser obtida da biomassa por processos térmicos, biológicos e físicos. Mckendry (2002) parte do princípio que a extração mecânica constitui um processo físico que possibilita a produção de biodiesel a partir de oleaginosas, porém resulta em custo maior de produção do que a extração de combustíveis fósseis. Já os processos biológicos consistem no uso de microrganismos que convertem uma fração da biomassa a etanol e outros compostos úteis, por meio da fermentação e da digestão anaeróbica (AHMED et al., 2012). A fermentação normalmente, composto essencialmente por metano (CH_4) e dióxido de carbono (CO_2). Os processos térmicos fazem uso da combinação de calor, agente oxidante, pressão e catalisadores para promover o craqueamento de compostos de menor massa molar que podem ser usados como matéria prima para diversos processos de obtenção de combustíveis.

Existem três tipos de processos termoquímicos utilizados em larga escala. A combustão, a pirólise e a gaseificação da biomassa.

De acordo com BASU (2010) na combustão da biomassa em caldeira de leito fluidizado, ocorre a queima da biomassa com ar a temperaturas altas, de 800 a 1000°C, convertendo a energia da biomassa em calor, produzindo energia mecânica e elétrica. Uma característica da biomassa necessária para este processo, é que a biomassa deve conter uma umidade inferior a 50%, pois caso contrário, ocorre um desperdício da energia no processo de vaporização da água. A combustão converte compostos sólidos ou líquidos em compostos gasosos, liberando energia por meio da quebra das ligações químicas dos compostos (CASTELLANOS, 2012a; PINHO, 2012), é utilizado uma quantidade significativa de oxigênio para a combustão completa da biomassa (REZAIYAN e CHEREMISINOFF, 2005) e o hidrogênio e carbono da reação são oxidados a CO_2 e H_2O (CASTELLANOS, 2012b).

Na pirólise acontece na ausência de agentes oxidantes, a uma temperatura de aproximadamente 500°C, com a formação de combustível líquido (bio-óleo), sólidos e frações gasosas. Já na gaseificação é um processo de oxidação parcial conduzido a alta temperatura, entre 800°C e 900°C e que ocorre na presença de

agentes oxidantes, compreendendo uma série de etapas térmicas e químicas que resulta em uma mistura gasosa de combustíveis.

Como a gaseificação e a combustão convertem compostos sólidos ou líquidos em compostos gasosos, mas ambos os processos possuem algumas diferenças. A gaseificação adiciona energia às ligações químicas dos produtos gasosos, enquanto a combustão libera energia por meio da quebra das ligações químicas dos compostos.

2.2 LEITOS FLUIDIZADOS

Em 1921, Fritz Winker criou a primeira demonstração de gaseificação do carvão em um leito fluidizado no fundo de um cadinho. Foi registrado em 1926, o primeiro uso comercial do leito fluidizado em larga escala para a gaseificação de carvão em pó buscando produzir gases combustíveis para motores. Atualmente devido aos problemas ambientais tem aumentado o interesse na gaseificação de biomassa para o qual gaseificadores de leito fluidizado são particularmente populares, ocupando em cerca de 20% do mercado (BASU, 2006).

Além da gaseificação, leitos fluidizados são empregados em uma gama de processos industriais como combustão, reações catalíticas, recobrimento, pirólise, secagem e granulação de sólidos, dentre outros tipos. A escolha de uso de leitos fluidizados nestes processos decorre do fato destes equipamentos proporcionarem uma mistura intensa entre as fases fluida e particulada, ocasionando taxas elevadas de transferência de calor e massa e uniformidade de distribuição de temperatura (KUNII e LEVENSPIEL, 1991).

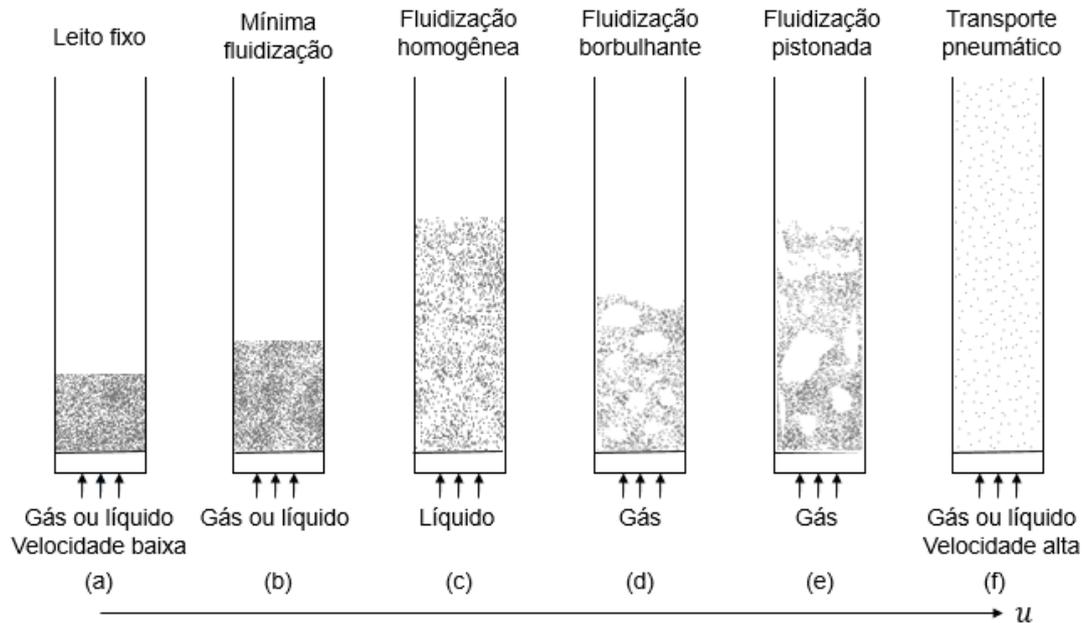
2.2.1 O fenômeno da fluidização

O fenômeno em que as partículas sólidas são transformadas num estado com características de fluido através da suspensão das mesmas em um gás ou líquido, é definido como fluidização (KUNII e LEVENSPIEL, 1991).

Vários regimes de escoamento podem acontecer quando um gás ou um líquido é forçado a escoar verticalmente para cima através de um leito de partículas sólidas. A medida que o escoamento do fluido aumenta, o leito adquire características distintas. A FIGURA 1 representa os tipos de escoamento, e os parâmetros básicos

para classificação são a velocidade superficial e a perda de pressão do fluido no leito que serão explicados mais à frente.

FIGURA 1 - OS DIFERENTES TIPOS DE ESCOAMENTOS.



FONTE: Adaptado de Kunii e Levenspiel (1991).

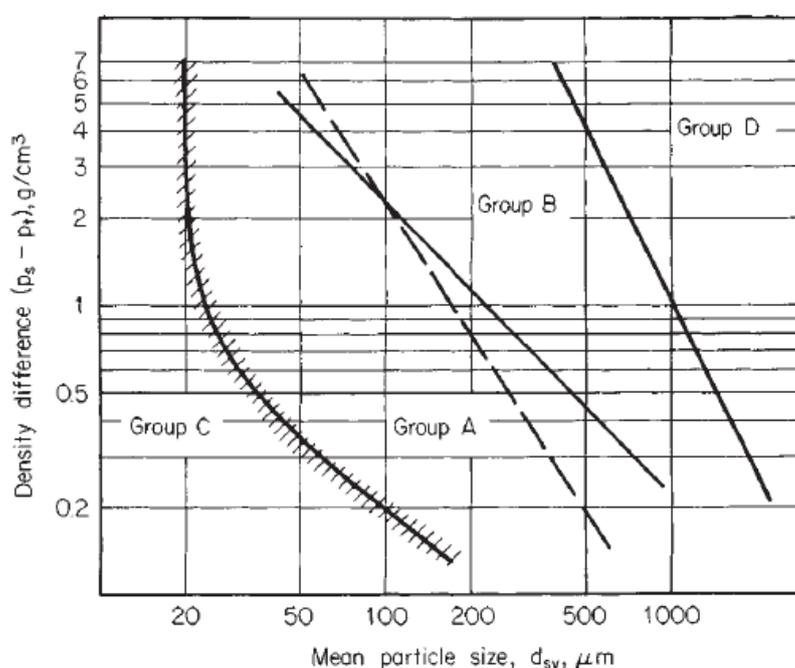
No leito fixo, o fluido ascende em baixa velocidade pelo leito de partículas sólidas, o fluido atravessa os espaços vazios entre as partículas estacionárias. A medida que a velocidade aumenta, as partículas se separam e começam a vibrar, até o momento em que a força gravitacional que age sobre as partículas é contrabalanceada pela força de arraste imposta pelo fluido, fazendo com que as partículas permaneçam suspensas, adquirindo características de um líquido, isso acontece no regime de mínima fluidização (KUNII e LEVENSPIEL, 1991).

Nos escoamentos líquido-sólido um aumento da velocidade acima da mínima fluidização geralmente resulta em uma leve expansão do leito, e por isso, o regime é definido fluidização homogênea ou particulada. O comportamento de sistemas gás-sólido difere dos escoamentos de sistemas líquido-sólido. Tem-se que no regime borbulhante o aumento da velocidade do gás causa grandes instabilidades no leito, como borbulhamento e canalização e o leito também não sofre tanta expansão, costuma ser semelhante a expansão do volume na mínima fluidização. As fases

atingem alta velocidades de escoamento, a agitação dos sólidos é intensificada, até o ponto em que a velocidade terminal das partículas é atingida e os sólidos menos densos são transportados para fora do leito (KUNII; LEVENSPIEL, 1991).

O fenômeno de fluidização depende das propriedades do material inerte particulado a ser empregado (YANG, 2003). GELDART (1973) propôs uma classificação para as partículas sólida através da análise do comportamento das partículas, com diferentes diâmetro e massa específica, ao serem fluidizados pelo ar. Na FIGURA 2 é apresentado o diagrama proposto por GELDART (1973).

FIGURA 2 - CLASSIFICAÇÃO DE PARTÍCULAS SEGUNDO GELDART.



FONTE: PERRY e GREEN, 1999.

Quando a velocidade do gás no interior do leito aumenta, a queda de pressão aumenta até se igualar ao peso do leito dividido pela área transversal. Essa velocidade é chamada como velocidade mínima e fluidização, u_{mf} . Quando este ponto é atingido, as partículas do grupo A se expande uniformemente antes do aparecimento de bolhas. As partículas desse grupo possuem pequenos tamanhos e massa específica e caracterizam-se por fluidizar facilmente. As partículas do grupo B é formada por uma variedade de materiais sendo a areia uns dos principais. Em relação ao grupo A, o regime de borbulhamento ocorre na velocidade de mínima fluidização ou pouco acima

desta, e o leito não expande tanto quanto as partículas do grupo A. A circulação de partículas no leito na ausência dessas bolhas é quase que desprezível. As partículas do grupo C são mais difíceis de fluidizar, pois os sólidos ascendem como um pistão ou ocorre a formação de canais de ar, as partículas são extremamente finas e apresentam um comportamento coesivo. O grupo D contém as partículas de maiores diâmetros e mais densas que dificilmente fluidizam, porém podem adquirir o comportamento de jorro (GELDART, 1973b).

2.2.2 Caldeiras de Leito Fluidizado

Para o processo de gaseificação da biomassa os reatores de leito fluidizados são mais utilizados, pois em relação ao de leito fixo, apresentam um alto grau de mistura, favorecendo a transferência de calor e de massa. De acordo com (BASU, 2010) um leito fluidizado possui sólidos granulares mantidos em semi-suspensão, em estado de fluidização, com a passagem de um fluido pelo leito de partículas, com uma velocidade suficiente para manter a fluidização destes sólidos, pois caso as partículas não sejam suspensas, pode ser formado um leito fixo, ou as mesmas podem ser arrastadas pelo agente fluidizante. As partículas de biomassa são inseridas no leito, com menos de 10 mm, com uma temperatura adequada para que o processo de gaseificação se inicie, com o leito constituído de proporções distintas de areia, asfalto e catalisadores, para obter o produto específico. Os agentes gaseificantes podem ser água, ar, oxigênio ou uma combinação dos mesmos (BASU, 2010).

Reatores que operam com baixa velocidade superficial apresentam perda de pressão através do leito que aumenta linearmente com a velocidade do fluido. Esse tipo de leito é caracterizado por uma faixa de velocidades variando entre 0 e U_{mf} , sendo esta chamada velocidade de mínima fluidização. Quando a velocidade mínima de fluidização é atingida, o equipamento passa a operar no estado chamado de mínima fluidização, ou fluidização incipiente, ocorrendo uma expansão do leito, assim as partículas são suspensas com a passagem do fluido, provocando a separação e a movimentação intensa das partículas (KUNII e LEVENSPIEL, 1991). A perda de carga das partículas durante o escoamento de mínima fluidização se iguala ao peso das próprias partículas no leito (GIDASPOW, 1994).

Os reatores mais utilizados são os de leito fluidizado, pois são eficientes na transferência de calor e de massa entre as fases existentes no interior de um reator.

Em particular, este trabalho trata da modelagem e simulação de uma caldeira de leito fluidizado com 2 fases: bolha e densa.

2.2.3 Fluidodinâmica de Leitos Fluidizados

Para que a fluidização das partículas sólidas ocorra no leito é necessária uma velocidade mínima de fluidização (u_{mf}), pois se a velocidade de inserção do gás no leito for menor que a velocidade mínima de fluidização, não ocorre a fluidização das partículas e o leito permanece fixo.

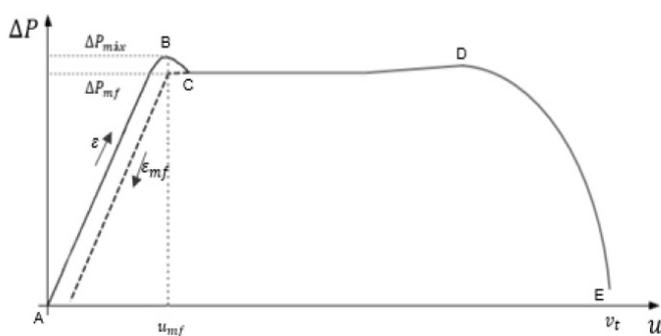
A velocidade superficial, U , que é definida como a velocidade média do fluido na direção axial, desconsiderando a presença de partículas dentro do equipamento e considerando as mesmas condições de temperatura e pressão do gás. Então, é considerado que a velocidade superficial é proporcional ao fluxo mássico de fluido (SOUZA-SANTOS, 2004).

Se ligeiramente a velocidade superficial aumentar, acontecerá a formação de bolhas no leito e por consequência a canalização do fluido, com agitação mais violenta e movimentação mais vigorosa dos sólidos suspensos. A velocidade mínima de borbulhamento é a velocidade com que as bolhas se formam no interior da caldeira e quando é atingida a velocidade mínima, o leito não se expande muito além do volume que caracteriza o regime de mínima fluidização, assim é atingido o chamado regime de fluidização borbulhante e os equipamentos que operam nesse regime são chamados de leito fluidizado borbulhante (SOUZA-SANTOS, 2004). O regime pode ser mantido em uma ampla faixa de velocidades, sendo que a perda de pressão ao longo do leito é praticamente constante nessa faixa. Nesse regime, as bolhas formadas são visíveis, com fronteira bem definida, e praticamente livres de partículas em seu interior.

O fenômeno de *slug* ocorre quando o tamanho das bolhas aumenta juntamente com o aumento da velocidade superficial, atingindo um ponto máximo no qual a bolha ocupa quase toda a área transversal do leito, formada pela coalescência de bolhas menores. O regime de fluidização intermitente ocorre a partir do *slug*, em quem as bolhas atravessam o leito, arrastando uma grande quantidade de sólidos e explodindo ao atingir a superfície, com isso, é possível observar grandes variações na perda de pressão do leito.

A medida que a velocidade superficial aumenta, a fronteira das bolhas é atravessada pelas partículas sólidas até as denteções entre as regiões não sejam mais perceptíveis, como no regime fluidizado borbulhante. Esse é o regime de fluidização turbulenta. Se a velocidade superficial é superior à velocidade de fluidização turbulenta, então tem-se o início de um regime de fluidização rápida, que é caracterizado pelo arraste das partículas, em consequência das altas velocidades aplicadas, superiores a velocidade terminal dos sólidos. Nos leitos fluidizados circulantes há um ligeiro arraste de partículas, e para que as partículas não sejam perdidas no processo nem contaminarem as etapas subsequentes do processo é necessária uma etapa posterior de separação gás-sólido. O transporte pneumático das partículas ocorre quando a velocidade superficial é superior à velocidade terminal de queda livre das partículas. Os reatores que operam nesse regime são chamados de leito fluidizado circulante. A variação da perda de pressão no leito com o aumento da velocidade superficial pode ser observada na FIGURA 3, para todos os regimes de escoamentos considerados.

FIGURA 3 - CURVA CARACTERÍSTICA DE FLUIDIZAÇÃO.



FONTE: Adaptado de KUNII e LEVENSPIEL (1991).

A região de leito fixo, é representada pela região AB onde a perda de carga é aproximadamente proporcional à velocidade do gás. Nesta região, a queda de pressão no leito é dada pela equação de Ergun (Equação 1.1).

Ainda analisando a FIGURA 3, a perda de carga no leito fixo aumenta até um valor máximo (B) que é pouco maior do que a queda de pressão de mínima fluidização (C). Isso, ocorre, pois no início da fluidização, a altura do leito aumenta, o que provoca uma perda na resistência, com isso a perda de carga é reduzida. Esse fenômeno é

mais comum de ser observado em leitos fluidizados de diâmetros pequenos e em casos em que as partículas foram compactadas inicialmente no leito (GIDASPOW, 1994; KUNII; LEVENSPIEL, 1991; RHODES, 2008).

Na região CD o regime é o fluidizado e a queda de pressão no leito é dada pelo equilíbrio de forças entre o arraste e a força gravitacional (Equação 2.1). Neste trecho, a perda de carga se mantém praticamente constante e essa observação é explicada pelo fato de que na fluidização as partículas se comportam como líquido. Logo, quando um gás é introduzido no fundo de um tanque que contém um líquido de baixa viscosidade, a pressão necessária para injeção é aproximadamente a pressão estática do líquido e é independente do fluxo de gás (KUNII e LEVENSPIEL, 1991).

$$\Delta PA = AL_{mf}(1 - \varepsilon_{mf})(\rho_s - \rho_g)g \quad (2.1)$$

A velocidade de fluidização aumenta com o diâmetro e massa específica da partícula, além de ser afetada pelas propriedades dos fluidos (RHODES, 2008). Para misturas binárias, a velocidade mínima de fluidização de uma função dos dois componentes e das suas proporções relativas no sistema (CHIBA et al., 1979). Os parâmetros da velocidade mínima de fluidização e da perda de carga serão detalhados nas próximas seções.

O fluxo de gás em leitos fluidizados é limitada de um lado pela velocidade mínima de fluidização e por outro pela velocidade que transporta os sólidos. Este limite superior é aproximadamente a velocidade terminal das partículas (E) (KUNII e LEVENSPIEL, 1991). De acordo com o escoamento do gás, o leito se expande para minimizar a resistência, a partir da velocidade de mínima fluidização (GIDASPOW, 1994). A altura do leito, e conseqüentemente a porosidade, é considerada uma função somente do tempo devido ao fato da superfície do leito ser desigual e oscilar bastante. A variação da porosidade nos regimes de fluidização ocorre devido à presença das bolhas, quanto maior sua frequência e tamanho, maior fração de vazios no leito em um determinado instante (KUNII e LEVENSPIEL, 1991).

O fenômeno de segregação pode acontecer em escoamentos gás-sólido em leito fluidizado com a presença de duas ou mais fases sólidas. A segregação é uma função da diferença entre massa específica e diâmetro das partículas. Um sistema com partículas de diferentes massas específicas e mesmo diâmetro exibe uma maior

separação entre os componentes do que misturas com partículas de tamanhos diferentes e massas específicas semelhantes. A medida que a velocidade aumenta a taxa de segregação diminui (CHIBA et al., 1979; KUNII e LEVENSPIEL, 1991; OLIVEIRA, 2012).

2.2.3.1 Velocidade mínima de fluidização e perda de carga

Inicialmente foram usadas correlações empíricas, mas a forma funcional proposta por Wen e Yu (1966) é atualmente a mais aceita. Segundo a premissa de Wen e Yu, no ponto de mínima fluidização, a perda de carga calculada pela equação de Ergun para leitos fixos se iguala à perda de carga do leito fluidizado. Portanto, escrevendo a perda de carga por unidade de altura do leito, temos que, representada pela Equação 2.2:

$$150 \frac{(1 - \varepsilon_{mf})^2}{\varepsilon_{mf}^3} \frac{\mu_g U_{mf}}{\phi_s d_s^2} + 1,75 \frac{(1 - \varepsilon_{mf})}{\varepsilon_{mf}^3} \frac{\rho_g U_{mf}^2}{\phi_s d_p} = (1 - \varepsilon_{mf})(\rho_s - \rho_g)g \quad (2.2)$$

em que a perda de carga do leito é simplificada por $\frac{\Delta P}{L} = (1 - \varepsilon_{mf})(\rho_s - \rho_g)g$

A viscosidade e a massa específica do gás, são representadas por μ_g e ρ_g , respectivamente; ρ_p , ϕ_s e d_p são a densidade, a esfericidade e o diâmetro médio das partículas, respectivamente. Assim, uma simplificação do cálculo da velocidade de mínima fluidização foi proposta por BOTTERILL e BESSANT (1976) na Equação 2.3:

$$U_{mf} = Re_{mf}(\sqrt{C_1^2 + C_2 Ar} - C_1) \quad (2.3)$$

O número de Reynolds (Re) é um coeficiente adimensional que relaciona as forças de inércia ($\rho_g \cdot U$) e as forças viscosas ($\frac{D}{\mu}$) existentes num escoamento, dados pela Equação 2.4:

$$Re_{mf} = \frac{\rho_g U_{mf} d_s}{\mu_g} \quad (2.4)$$

Onde Ar é o número de Arquimedes é um coeficiente que relaciona as forças gravitacionais e as forças viscosas de um escoamento e pode ser obtido a partir da Equação 2.5 BOTTERILL e BESSANT (1976).

$$Ar = \frac{\rho_g(\rho_s - \rho_g)gd_s^3}{\mu_g^2} \quad (2.5)$$

Os parâmetros ϕ_s e ε_{mf} são de difícil medição, vários autores tem proposto soluções sem necessidade de conhecer esses valores, então para $0,001 < Re_p < 4000$, Wen e Yu (1966) mostraram que para um grupo de materiais particulados assume-se que $1/(\phi_s \cdot \varepsilon_{mf}^3) \approx 14$ e $(1 - \varepsilon_{mf})/(\phi_s^2 \cdot \varepsilon_{mf}^3) \approx 1$. As constantes C_1 e C_2 dependem de ϕ_s e ε_{mf} , e usando as aproximações chegaram aos seguintes valores das constantes: $C_1 = 33,7$ e $C_2 = 0,0408$ para sistemas de partículas finas. O uso da equação de Ergun usando as constantes C_1 e C_2 calculadas experimentalmente para o cálculo da velocidade de mínima fluidização é conhecido como método da equação de Ergun modificada. Ao longo dos anos foram propostos vários valores de C_1 e C_2 , alguns dos mais importantes são mostrados na TABELA 3 abaixo.

TABELA 3 - VALORES DAS CONSTANTES C1 E C2 DA EQUAÇÃO DE ERGUN MODIFICADA.

Autores	C_1	C_2	Observação
1. Wen e Yu (1966)	33,7	0,0408	Partículas do grupo A.
2. Grace (1982)	27,2	0,0408	Partículas do grupo A, B.
3. Thonglimp <i>et al.</i> (1984)	19,9	0,0320	Alta temperatura
4. Chitester <i>et al.</i> (1984)	28,7	0,0494	Partículas grandes (B ou D).
5. Nakmura <i>et al.</i> (1985)	33,95	0,0465	Alta temperatura

FONTE: FLETCHER *et al.* (1992).

2.3 MÉTODOS NUMÉRICOS COMPUTACIONAIS

Como citado anteriormente, o conjunto de equações utilizados no modelo contínuo para representação do meio poroso, se trata de um conjunto de equações diferenciais e algébricas que em conjunto descrevem, ou tentam, descrever os fenômenos existentes.

Atualmente existem três métodos principais de discretização sendo estes: Método das Diferenças Finitas (MDF), Método dos Elementos Finitos (MEF) e Métodos dos Volumes Finitos (MVF).

O MDF é o método mais simples dos três métodos de discretização e de certa forma é a base de desenvolvimento dos outros dois. A ideia deste método é representar as derivadas em termos de diferenças finitas. Ele apresenta uma forma simplificada de resolução das equações e uma precisão muito boa; contudo, a implementação dele em geometrias muito complexas pode ser muito difícil. Por outro lado, o MEF e o MVF são métodos mais fáceis de serem implementados em geometrias complexas e são muito empregados em tais casos. O MEF se trata de um método de aproximação de equações diferenciais parciais por meio de equações diferenciais ordinárias. Embora o MEF seja tão bom quanto o MVF em termos de discretização, ele apresenta certas restrições quando a sua estabilidade. Por fim, o MVF apresenta propriedades conservativas o que garante estabilidade para a sua aplicação. Este método se baseia na resolução numérica das equações de transporte na sua forma integral, onde os termos divergentes são convertidos em integrais de superfície; desta forma, o método realiza balanços das propriedades do sistema em cada volume de controle da geometria (MALISKA, 1995).

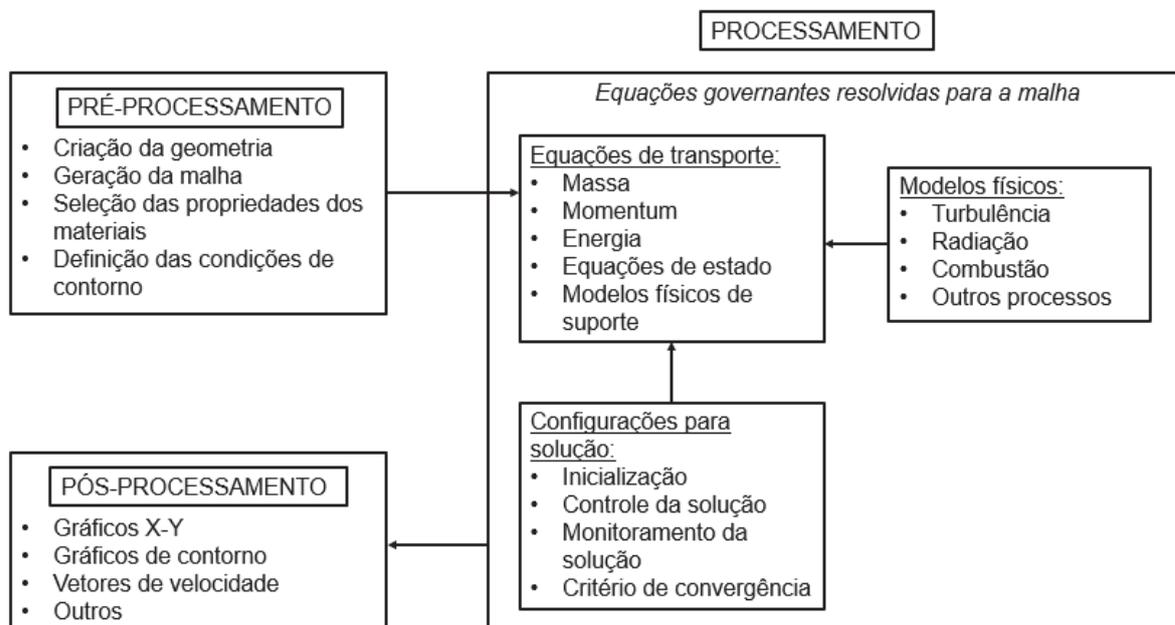
2.4 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Com o avanço dos computadores e softwares, o uso do CFD como complemento de experimentos físicos para investigar a complexa fluidodinâmica do leito tem aumentado nos últimos anos. A fluidodinâmica computacional (CFD) consiste na análise de sistemas envolvendo escoamentos fluidos, transferências de calor, reações químicas e demais fenômenos associados, através de simulações numéricas. Este método envolve técnicas de discretização para o tratamento dos fenômenos de transporte chave destes sistemas: a difusão e a convecção (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

O diagrama representado pela FIGURA 4 – DIAGRAMA DE SIMULAÇÃO DE PROCESSO.FIGURA 4 demonstra a sequencia para realizar a simulação de

processos no FLUENT, ou em outro software de simulação em Fluidodinâmica Computacional.

FIGURA 4 – DIAGRAMA DE SIMULAÇÃO DE PROCESSO.



FONTE: O Autor (2018).

Nos últimos anos, pesquisadores realizaram diversos estudos com relação à utilização da fluidodinâmica computacional na simulação numérica de problemas de escoamento multifásico. Na TABELA 4 alguns trabalhos relevantes que utilizaram esta técnica para leitos fluidizados.

TABELA 4 - ESTUDOS ENVOLVENDO FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL EM LEITOS FLUIDIZADOS.

Autores	Descrição
Van Wachem et al. (1998)	Simularam o comportamento de leitos fluidizados borbulhantes compostos de partículas do grupo B de Geldart em diferentes condições de fluidização, utilizando o software CFX 4.1. Os resultados foram comparados com as equações dispostas pela literatura.
Sofialidis e Faltsi (2001)	Realizaram uma simulação fluidodinâmica tridimensional de um reator de leito fluidizados borbulhante, operando com madeira e com leito formado por areia. O código utilizado nessa simulação foi o FLUENT 5 e a validação da mesma foi realizada utilizando dados experimentais. Neste trabalho foi utilizado um modelo de pirólise que considera a divisão do reator em duas zonas, a de pirólise flamejante

	<p>(FP), localizada na entrada do reator, e a de redução do <i>char</i> (CR), localizada acima da outra zona. Além disso, foi considerado que na primeira zona não existe formação de CO e H₂, e parte dos voláteis é craqueada em CH₄. Na segunda região ocorrem as reações heterogêneas entre o <i>char</i> e o restante dos voláteis. Para a descrição dos efeitos fluidodinâmicos, os autores adotaram uma abordagem Euler-Lagrange, com a utilização do modelo de turbulência k-ε. De forma geral os resultados apresentaram concordância satisfatória com os dados experimentais, com exceção das emissões de CO e CO₂. Os autores observam que a modelagem adequada para o processo de pirólise é de extrema importância para a obtenção de resultados precisos.</p>
Taghipour et al. (2005)	<p>Estudaram a fluidodinâmica de um leito fluidizado gás-sólido experimentalmente e computacionalmente. Nas simulações realizadas no software FLUENT 6.0, três modelos de arraste foram comparados (Syamlal-O'Brien, Gidaspow e Wen e Yu) e os resultados foram verificados com os obtidos experimentalmente.</p>
Hulme et al. (2005)	<p>Realizaram experimentos e simulações (FLUENT 6.0.20) em um leito fluidizado com contas de vidro. Um estudo paramétrico foi realizado para determinar o efeito de parâmetros como passo de tempo, escolha das equações constitutivas e atrito nas simulações. Usando um modelo multifásico euleriano-euleriano baseado no modelo de duas fases de Anderson e Jackson (1967). Simulações reproduzindo as condições experimentais foram feitas e as propriedades comparadas foram: altura do leito, queda de pressão no leito, diâmetro das bolhas, distribuição das bolhas e velocidade axial das bolhas.</p>
Cooper e Coronella (2005)	<p>Estudaram a fluidodinâmica de um leito fluidizado gás-sólido compostos por duas fases sólidas (coque e rutilo) com diferentes diâmetros e massas específicas. Os parâmetros de simulação (método de solução, malha, modelo de arraste e fator de empacotamento máximo) e condições operacionais (velocidade do gás, localização de entrada e reposição das partículas) foram investigados e seus efeitos sobre a formação de bolhas e segregação foram computados. As simulações foram realizadas utilizando o software FLUENT 6.0.</p>
Cornelissen et al. (2007)	<p>Simularam a fluidodinâmica de leitos fluidizados líquido-sólido 2D. Neste trabalho foram comparados dois modelos de arraste (Wen e Yu e Gidaspow) e duas possibilidades para entrada do líquido no leito (uniforme ou através de orifícios discretos). Os efeitos dos parâmetros de método de solução do modelo pelo software FLUENT 6.1.22 também foram examinados, como passo de tempo e</p>

	<p>critério de convergência. O refinamento da malha e o coeficiente de restituição também foram alterados nas simulações. Qualitativamente os resultados das simulações foram similares aos obtidos experimentalmente por alguns autores.</p>
Yu et al.(2007)	<p>Simularam o processo de gaseificação de carvão em um reator de leito fluidizado borbulhante, a partir de uma abordagem Euler-Euler. Os autores consideraram que a tensão resultante da fricção entre partículas poderia ser desprezada, a intensidade da colisão das partículas não varia com a temperatura, a radiação térmica pode ser desprezada e as partículas são isotérmicas. Os efeitos turbulentos foram contabilizados através do modelo $k-\epsilon$. Baseados em dados experimentais os autores modelaram os processos de secagem e de pirólise como instantâneos. Para a pirólise secundária foi utilizado um modelo estequiométrico. A composição dos gases produzidos foi comparada com dados experimentais para diferentes de operações, apresentando boa concordância.</p>
Behjat et al. (2008)	<p>Estudaram a fluidodinâmica e a transferência de calor em reator de leito fluidizado gás-sólido com duas fases sólidas. Dados experimentais de expansão do leito obtidos por Taghipour et al. (2005) foram utilizados para comparação com os obtidos computacionalmente através do modelo proposto. Os modelos de arraste de Syamlal-O'Brien e Gidaspow foram estudados. A distribuição de temperatura das fases dentro do reator também foi computada considerando a fluidodinâmica do leito e o calor gerado pela reação de polimerização.</p>
Luna (2013)	<p>Estudou a influência de diversos modelos de arrasto e do coeficiente de restituição para um escoamento gás-sólido em leito fluidizado. Foi utilizado um modelo euleriano-euleriano para um leito fluidizado em 2D. As simulações foram realizadas utilizando o código computacional MFIX. Os dados obtidos de cada modelo foram comparados com os dados experimentais obtidos por Taghipour et al. (2005).</p>
Tagliaferri et al. (2013)	<p>Simularam o escoamento multifásico gás-sólido composto por duas fases sólidas em leito fluidizado utilizando o software Fluent 12. As misturas binárias consistiam em areia e esferas de vidro com massas específicas semelhantes e diâmetros diferentes. O fenômeno da segregação foi analisado. Diferentes esquemas de discretização espacial foram examinados.</p>

3 MODELAGEM

Muitos modelos fluidodinâmicos utilizados para operação de leitos fluidizados são discutidos em diversos trabalhos da literatura CHOI e RAY (1985), (FERNANDES e BATISTA, 1999); (HATZANTONIS *et al.*, 2000); (KIASHEMSHAKI *et al.*, 2006); (KIM *et al.*, 2000); (SADAKA *et al.*, 2002). Uma caldeira de leito fluidizado borbulhante é admitida neste trabalho. Como já dito, o leito é constituído por duas fases: uma fase densa, formada por partículas sólidas e gás, chamada de emulsão, e uma fase bolha, formada somente por gás, livre de partículas. Então com o avanço dos recursos computacionais, a fluidodinâmica computacional vem sendo a técnica mais adequada para solucionar as complicadas equações matemáticas que descrevem o comportamento dos fluidos em movimento, possibilitando melhoras no projeto, dimensionamento e otimização de leitos fluidizados.

3.1 MODELAGEM EM CFD (COMPUTACIONAL FLUID DYNAMICS)

Modelos em CFD são utilizados para detalhar o estudo da fluidodinâmica dentro de um leito (GÓMEZ-BAREA e LECKNER, 2010). Os modelos empíricos podem apresentar limitações na validação do modelo para condições diferentes das que as correlações deste foram descritas. Os modelos CFD para estes casos são apresentados como uma opção aos modelos puramente empíricos, pois possuem uma vasta possibilidade de aplicações e permitem a simulação de diferentes condições de escoamento evitando mudanças significativas na modelagem do problema (VERISSIMO, 2014)

3.2 MODELAGEM DE ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS

A modelagem do escoamento gás-partícula pode ser realizada utilizando uma abordagem Euler-Euler ou Euler-Lagrange.

No modelo de Euler-Lagrange, a fase fluida é tratada como continua pela resolução das equações de Navier-Stokes, enquanto a fase particulada é tratada como discreta e possui sua trajetória computada individualmente. As leis de Newton são usadas para descrever o movimento das partículas e pode-se prever com exatidão sua localização e como a quantidade de movimento e energia são trocados entre as fases. Devido ao grande esforço computacional para o mapeamento individual das partículas, essa abordagem é indicada quando a fase sólida ocupa uma

pequena fração volumétrica, como é o caso de *spray dryers* e da combustão do carvão e de combustíveis líquidos (ANSYS FLUENT THEORY GUIDE, 2013).

O método Euler-Euler consiste na utilização de variáveis de campo para todas as fases, fluída e particulada. Na abordagem Euler-Euler, ambas as fases são tratadas como contínuas e inter-penetrantes, assim o volume de uma fase não pode ser ocupado pela outra. Surge então, o conceito de fração volumétrica das fases que equivale ao espaço ocupado por cada fase no sistema. A fração volumétrica é função do espaço e do tempo e possui somatório igual a um. As leis de conservação de massa e quantidade de movimento são satisfeitas para as fases, juntamente com equações constitutivas – que são obtidas empiricamente ou pela aplicação da teoria cinética granular – para que ocorra a consistência matemática do modelo (ANSYS FLUENT THEORY GUIDE, 2013).

Quando essa abordagem é utilizada surgem termos de interação desconhecidos nas equações governantes de ambas as fases, ocasionando um problema de fechamento do conjunto de equações. Existem três tipos de leis de fechamento que são utilizadas para modelar estes termos adicionais, e as classifica como:

- 1) Leis Topológicas: descrevem a distribuição espacial de quantidades específicas das fases. E para escoamento de tubo unidimensional modelos de misturas bifásicas em que a concentração radial ou a distribuição de velocidade de uma das fases podem ser necessárias.
- 2) Leis Constitutivas: descrevem propriedades físicas das fases usando axiomas ou dados experimentais. Elas especificam como os parâmetros físicos de uma fase interage com outra, mas não descreve o fenômeno de transferência de massa, momento ou energia através da interface entre as fases.
- 3) Leis de transferência: descrevem as interações entre as fases gás e particulada, e entre diferentes fases sólidas. São modeladas com o uso de equações empíricas para descrever a interação entre as fases ocorrendo pela interface.

No modelo Euler-Lagrange a posição e o estado de cada partícula individual são acompanhados através do tempo e do espaço, através da integração das equações de movimento, energia e massa para cada partícula do sistema

(OEVERMANN *et al.*, 2009). Normalmente, quando esta abordagem é utilizada, os campos de escoamento da fase fluída são obtidos usando o modelo Euleriano. Dependendo do grau de acoplamento do escoamento, as soluções de ambas as fases podem interagir entre si, de maneira que se torna necessária a adoção de um procedimento de solução iterativa (RANADE, 2002).

As vantagens de se utilizar o modelo Euler- Lagrange são a capacidade que o modelo consegue predizer com exatidão a trajetória de cada partícula e o controle sobre fenômenos em nível de partícula, como a redução do diâmetro da partícula devido à reações químicas (RANADE, 2002). Entretanto, no leito de um reator industrial, por exemplo, ou até mesmo laboratorial, podem existir milhares ou milhões de partículas suspensas, acarretando em um custo computacional que torna esse tipo de simulação praticamente inviável. Os estudos utilizando a abordagem Euler-Lagrange normalmente utilizam poucas partículas no leito, ou simulam apenas alguns segundos de operação do reator.

Por outro lado, o modelo Euler-Euler requer um esforço computacional consideravelmente menor em leitos com muitas partículas, além de fornecer campos médios de escoamento, os quais são convenientes para facilitar decisões quantificáveis para o desenvolvimento de novos gaseificadores (YU *et al.*, 2007). No entanto, como ele necessita de algumas correlações empíricas ou semi-empíricas para o fechamento das equações, é necessário realizar validações com dados experimentais dos modelos escolhidos (HERZOG *et al.*, 2012).

O modelo Euler-Euler é ideal para leitos densos, ou seja, quando a fração volumétrica das partículas é maior do que 10% da fração do leito, a qual corresponde ao caso dos reatores de leito fluidizado. Já para leitos dispersos, caso dos reatores de leito de arraste, o modelo Euler-Lagrange é recomendado (RANADE, 2002).

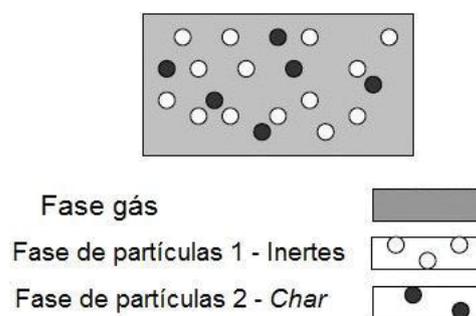
Mesmo utilizando o modelo Euler-Euler a modelagem de um problema de combustão ou gaseificação em um reator de leito fluidizado tridimensional é necessário um tempo de simulação muito elevado, por isso que a maioria dos estudos realizados sobre estes assuntos utiliza um domínio bidimensional.

XIE *et al.* (2008^a) discutiram até onde é válida esta metodologia, uma vez que existem fenômenos específicos tridimensionais agindo sobre o leito fluidizado. Assim, eles apresentaram um estudo analisando a influência do sistema de coordenadas escolhido, cartesiano ou cilíndrico, e do número de dimensões utilizadas, bidimensionais (2D) ou tridimensionais (3D), sobre o escoamento isotérmico sem

reações químicas em um leito fluidizado, usando uma abordagem Euler-Euler. Os autores também analisaram para três tipos de fluidização: borbulhante, pistonado e turbulento e concluíram que o sistema de coordenadas cilíndrico 2D apresentou resultados não físicos, devido à hipótese de axissimetria inerente a este sistema e também este trabalho demonstrou que também é válido utilizar um sistema de coordenadas cartesianas 2D para prever a fluidização de partículas em um reator cilíndrico ou retangular operando em regime borbulhante. Contudo, os autores destacam que para os demais padrões de fluidização é necessário tomar cuidados adicionais, por exemplo, com o aumento da velocidade superficial a contribuição dos termos não axiais do escoamento, ignorados na formulação 2D, os erros em relação à formulação 3D também aumentam. Além da diferença entre os resultados obtidos para cada tipo de formulações o tempo necessário para cada simulação também é apresentado. Como já é esperado, as simulações tridimensionais são muito mais trabalhosas e demandam mais tempo e custo, o que tem inviabilizado este tipo de simulação. É possível observar que os autores desconsideraram as equações de energia e as reações químicas.

Uma forma simples de se modelar o escoamento durante o processo de gaseificação em um reator LFB (leito fluidizado borbulhante) é quando se considera as partículas de combustível sólidas se transformam rapidamente em *char*, e o encolhimento das partículas pode ser desprezado. Logo, considerando a existência de partículas de um material inerte, o leito de partículas é formado apenas por duas fases sólidas e uma fase gás, como representado na FIGURA 5 (PINHO, 2012).

FIGURA 5 - TRÊS FASES DO ESCOAMENTO MULTIFÁSICO



Fonte: PINHO (2012).

Existem três diferentes modelos sob a abordagem Euler-Euler que podem ser aplicados a escoamentos multifásicos: o modelo de volume de fluidos, o modelo de mistura e o modelo euleriano.

Um resumo das características de cada modelo é disposto na TABELA 5.

TABELA 5 - ABORDAGEM EULERIANA- EULERIANA.

Modelo	Método de solução	Aplicações
Volume de fluidos	Um único conjunto de equações da quantidade de movimento é compartilhado pelas fases, e as frações volumétricas de cada fluido em cada célula computacional são calculadas em todo domínio.	Adequado para situações que envolvem dois ou mais fluidos imiscíveis onde a posição da interface é de interesse: fluxos em superfícies livres, movimento de bolhas grandes e etc.
Mistura	Resolve uma equação da quantidade de movimento para a mistura e prescreve velocidades relativas para as fases dispersas	Fluxos de bolhas, sedimentação e ciclones.
Euleriano	Resolve um conjunto de equações da continuidade de movimento para cada fase. O acoplamento das equações da quantidade de movimento é realizado através dos coeficientes de pressão e troca na interface. Para fluxos granulares as propriedades são obtidas pela aplicação da teoria cinética. A transferência de quantidade de movimento entre as fases é dependente do tipo de mistura que está sendo modelada.	Colunas borbulhantes, suspensão de partículas e leitos fluidizados.

FONTE: ANSYS FLUENT GUIDE (2013).

A abordagem Euler-Euler é basicamente uma extensão de fórmulas matemáticas de um sistema monofásico para sistemas multifásicos. Isto representa uma das dificuldades do modelo, visto que embora para a fase fluida, os coeficientes de transporte possam ser razoavelmente representados por aqueles de escoamentos em fase única; para a fase sólida, esta aproximação não é suficiente. Isto porque se deve levar em conta as interações entre partículas e gás e as colisões entre partículas nos coeficientes de transportes dos sólidos (TAGHIPOUR et al., 2005).

Como visto, o modelo euleriano é o que se mostra mais adequado para descrever a fluidodinâmica de leitos fluidizados e por isso as equações que norteiam esta modelagem são descritas nas seções seguintes.

3.3 MODELAGEM EULERIANA PARA LEITOS FLUIDIZADOS

3.3.1 Considerações

O sistema em estudo consiste no escoamento gás-sólido em um leito fluidizado borbulhante de uma caldeira de biomassa para a produção de energia de uma indústria de papel e celulose. Dois tipos de fases existem nesse processo: uma fase densa, formada por partículas sólidas e gás (emulsão) e uma fase bolha, formada somente por gás, livre de partículas.

Para o estabelecimento do modelo algumas hipóteses são adotadas. As principais considerações estão dispostas a seguir:

- 1) Regime transiente;
- 2) Escoamento bidimensional em x e y;
- 3) Partículas consideradas esféricas;
- 4) Escoamento multifásico composto por fases contínuas e interpenetrantes;
- 5) Sem reação química;
- 6) Força de sustentação e força de massa virtual são insignificantes quando comparadas às forças de arraste e de gravidade.

3.3.2 Equacionamento

3.3.2.1 Equações de Conservação

Antes de apresentar as equações governantes é necessário definir o conceito de uma variável chamada fração de volume. Esta definição baseia-se no fato das fases contínuas do escoamento serem interpenetrantes. Entretanto, não é possível que mais de uma fase ocupe uma mesma posição no espaço em um determinado tempo. A fração de mistura da fase gasosa é α_g e a fase particulada é $\alpha_{s,i}$, onde i é o número da fase sólida, e M é o número total de fases sólidas, expressa pela (Equação 3.5). Desta forma, é possível definir uma massa específica efetiva para a fase gás, $\rho_{g'}$, e para a fase sólida, $\rho_{s',m}$, como:

$$\rho_{g'} \triangleq \varepsilon_g \rho_g \quad (3.1)$$

$$\rho_{sm} \triangleq \varepsilon_{sm} \rho_{sm} \quad (3.2)$$

A abordagem Euler-Euler emprega as leis de conservação de massa e quantidade de movimento para cada fase levando-se em consideração o volume que cada uma ocupa no sistema. Estas leis de conservação são as equações que governam o modelo e são mostradas na TABELA 6.

GIDASPOW (1994) desenvolveu dois modelos de equações para um escoamento gás-partículas, chamados de modelos A e B, e consideram a mesma equação de continuidade. Entretanto, no modelo A as equações de conservação de quantidade de movimento contém o campo de pressão da fase fluída para as equações de ambas as fases.

TABELA 6 - EQUAÇÕES GOVERNANTES DA ABORDAGEM EULERIANA-EULERIANA PARA ESCOAMENTO GÁS-SÓLIDO EM LEITO FLUIDIZADO.

Equações governantes	
1. Conservação de massa:	
(a) Fase fluída (primária-g)	
	$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g) = 0 \quad (3.3)$
(b) Fase sólida i (secundária – s)	
	$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_{s,i} \rho_{s,i}) + \nabla \cdot (\alpha_{s,i} \rho_{s,i} \vec{v}_g) = 0 \quad (3.4)$
(c) Fração volumétrica	
	$\alpha_g + \sum_{i=1}^M \alpha_{s,i} = 1 \quad (3.5)$
2. Conservação da quantidade de movimento:	
(a) Fase fluída (primária – g)	
	$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g \vec{v}_g) = -\alpha_g \nabla P + \nabla \cdot \bar{\tau}_g + \alpha_g \rho_g \vec{g} + \sum_{i=1}^2 \beta_{gs,i} (\vec{v}_{s,i} - \vec{v}_g) \quad (3.6)$
(b) Fase sólida i (secundária – s)	
	$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_{s,i} \rho_{s,i} \vec{v}_{s,i}) + \nabla \cdot (\alpha_{s,i} \rho_{s,i} \vec{v}_{s,i} \vec{v}_{s,i}) = -\alpha_{s,i} \nabla P + \nabla \cdot \bar{\tau}_{s,i} + \alpha_{s,i} \rho_{s,i} \vec{g} + \beta_{gs,i} (\vec{v}_g - \vec{v}_{s,i}) \quad (3.7)$
3. Temperatura granular	
	$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho_{s,i} \alpha_{s,i} \theta_{s,i}) + \nabla \cdot (\rho_{s,i} \alpha_{s,i} \vec{v}_{s,i} \theta_{s,i}) \right] \quad (3.8)$
	$= (-P_{s,i} \bar{I} + \bar{\tau}_{s,i}) : \nabla v_{s,i} + (k_{\theta_{s,i}} \nabla \theta_{s,i}) - \gamma_{\theta_{s,i}} + \phi_{gs,i}$

O primeiro termo das equações da continuidade (Equação 3.3 e 3.4) representam o acúmulo de massa por unidade de volume e o segundo termo o fluxo de massa convectivo no volume de controle. Como não há massa adicionada ou gerada no sistema, os termos descritos das equações de conservação de massa são iguais a zero.

Da mesma maneira, o primeiro termo, da esquerda, das equações de conservação de *momentum* (Equações 3.6 e 3.7) indica o acúmulo de quantidade de movimento e o segundo representa o transporte de *momentum* por convecção em cada fase.

A transferência de quantidade de movimento entre as fases ocorre devido a mecanismos moleculares e as forças externas. Assim, o primeiro termo da direita (Equação 3.6 e 3.7) representa a quantidade de movimento devido ao gradiente de pressão, e o segundo termo é o tensor das tensões viscosas. Os dois últimos termos estão relacionados com as forças gravitacional e de arraste, respectivamente. Para a fase sólida ainda, há um tempo adicional na (Equação 3.7), necessário para contabilizar a troca de momentum devido às colisões entre as partículas, denominado pressão de sólidos (P_s) (TAGHIPOUR et al., 2005). Para isso, é utilizado os conceitos da teoria cinética granular descrita por (LUN et al., 1984).

Um terceiro balanço é necessário para suplementar os balanços de conservação de massa e quantidade de movimento. Este balanço contabiliza a energias das partículas e é denominado de temperatura granular (LUNA, 2013).

Os dois primeiros termos da direita da Equação 3.8 representam a geração de energia devido ao cisalhamento na fase particulada e os efeitos de difusão através do gradiente da temperatura granular, respectivamente. Os dois termos seguintes estão relacionados com a dissipação de energia devido às colisões inelásticas entre as partículas e com a troca de energia entre as fases devido aos seus movimentos e flutuações (WACHEM et al., 1998).

Nos itens seguintes, as equações constitutivas serão abordadas. Essas equações são necessárias para que ocorra a consistência matemática do modelo.

3.3.2.2 Teoria cinética granular

A abordagem euleriana-granular considera a fase sólida como um meio contínuo constituído de sólido e gás intersticial, e, para descrever suas propriedades físicas, a Teoria Cinética Granular descrita em detalhes por (LUN et al., 1984), a partir de uma analogia à Teoria Cinética dos Gases, pode ser utilizada.

Assim, como para um gás, a intensidade das flutuações e interações entre as moléculas (que é proporcional à temperatura) determina as tensões presentes no meio, a viscosidade e a pressão; a energia cinética associada com as flutuações da velocidade é a considerada como a responsável pelas propriedades e tensões na fase sólida. Para representar esta energia das partículas é introduzida uma variável para descrever a temperatura “pseudotérmica” na fase particulada, denominada de temperatura granular (BÉTTEGA et al., 2009). Este balanço da energia granular é necessário para suplementar os balanços de conservação de massa e quantidade de movimento para ambas as fases (LUNA, 2013).

Os coeficientes de difusão e as equações devido às colisões e aos movimentos previstos na equação da temperatura granular são relações empíricas determinadas por pesquisadores e alguns deles estão dispostos na TABELA 7.

TABELA 7 - COEFICIENTES E TERMOS DA TEMPERATURA GRANULAR.

Termos da Temperatura granular	
1. Coeficiente de difusão	
Syamlal et al. (1993):	
$k_{\theta_s} = \frac{15d_s\alpha_s\sqrt{\theta_s\pi}}{4(41-33\eta)} \left[1 + \frac{12}{5}\eta^2(4\eta-3)\alpha_s g_{olm} + \frac{16}{15\pi}(41-33\eta)\eta\alpha_s g_{olm} \right]$	(3.9)
$\eta = \frac{1}{2}(1 + e_{ss})$	
2. Dissipação de energia	
Lun et al. (1984):	
$\gamma_{\theta_m} = \frac{12(1 - e_{ss}^2)g_{olm}}{d_s\sqrt{\pi}} \rho_s \alpha_s^2 \theta_s^{3/2}$	(3.10)
3. Transferência de energia devido ao movimento das fases	
Gidaspow et al. (1992):	
$\phi_{gs} = -3\beta_{gs}\theta_s$	(3.11)

FONTE: ANSYS FLUENT GUIDE (2018).

3.3.2.3 Transferência de quantidade de movimento entre as fases gás e sólidas

Para este trabalho foram considerados apenas os efeitos provocados pela força de arrasto, devido as diferenças de velocidade entre as fases, pela força de empuxo causada por gradientes de pressão na fase gasosa e pela transferência de massa entre as fases, SYAMLAL *et al.* (1993) estudou a (Equação 3.12) e sugeriu utilizar para modelar o termo de transferência de quantidade de movimento entre as fases gás e sólida:

$$\vec{I}_{gm} = -\varepsilon_{sm}\nabla P_g - F_{gm}(\vec{V}_{sm} - \vec{V}_g) + R_{0m} [\xi_{0m}\vec{V}_{sm} + \bar{\xi}_{0m}\vec{V}_g] \quad (3.12)$$

onde o primeiro termo do lado direito da equação representa a força de empuxo e o segundo termo a força de arraste entre a fase sólida e a fase gás. O terceiro termo representa a transferência de quantidade de movimento devido a transferência de massa entre a fase gasosa e a fase sólida.

Os termos ξ_{0m} e $\bar{\xi}_{0m}$ calculados por:

$$\xi_{0m} = \begin{cases} 1 \rightarrow \text{para } R_{0m} < 0 \\ 0 \rightarrow \text{para } R_{0m} \geq 0 \end{cases} \quad (3.13)$$

$$\bar{\xi}_{0m} = 1 - \xi_{0m} \quad (3.14)$$

Segundo PANNALA e SYAMLAL (2011), o termo F_{gm} é o coeficiente de arrasto entre as fases gás e sólida, e pode ser modelado com o auxílio de dados experimentais ou com um modelo baseado em simulações de Lattice-Boltzmann. A partir de simulações de Lattice-Boltzmann, o autor BEETSTRA *et al.* (2007) desenvolveram uma expressão para o coeficiente de arrasto. Primeiramente ele desenvolveu uma equação para escoamentos monodispersos e, posteriormente, fez algumas alterações para gerar uma expressão válida para escoamentos polidispersos. As comparações realizadas com outros métodos mais tradicionais como as equações de Ergun e de Wen e Yu, sugerem resultados mais precisos quando a nova expressão é utilizada. A expressão desenvolvida em BEETSTRA *et al.* (2007) para o coeficiente de arrasto é dado por:

$$F_{gm} = 180 \frac{\mu_g (1 - \varepsilon_g)^2}{d_{sm}^2 \varepsilon_g} + 18 \frac{\mu_g}{d_{sm}^2} \varepsilon_g^3 (1 - \varepsilon_g) \left(1 + 1.5 \sqrt{1 - \varepsilon_g}\right) + 0.31 \frac{\left[\frac{1}{\varepsilon_g} + 3\varepsilon_g(1 - \varepsilon_g) + 8.4Re_m^{-0.343}\right]}{\left[1 + 10^{3(1-\varepsilon_g)}Re_m^{-0.5-2(1-\varepsilon_g)}\right]} \quad (3.15)$$

onde μ_g é a viscosidade dinâmica da fase gás, d_{pm} é o diâmetro das partículas da fase sólida m e Re_m é o número de Reynolds, que pode ser calculado por:

$$Re_m = \frac{d_{pm} |\vec{V}_{sm} - \vec{V}_g| \rho_g}{\mu_g} \quad (3.16)$$

As três forças que são consideradas na (Equação 3.12) não são as únicas interações entre as fases. Algumas dessas forças, são as de Basset, que depende da trajetória do movimento da partícula através do fluido, de Saffman, que representa a força de sustentação sobre as partículas, de Magnus, que contabiliza a força gerada pela rotação das partículas, dentre outras. SYAMLAL *et al.* (1993) considera que estas forças são menos importantes para o escoamento do que as três contribuições consideradas. Todavia, (JAKOBSEN, 2008) observou que embora as contribuições destas forças sejam pequenas em escoamento borbulhante, ainda existe pouco conhecimento sobre a influência deste termo sobre o escoamento. Devido ao pouco conhecimento sobre a formulação SYAMLAL (1993) utiliza destes argumentos para desprezar estes termo em sua formulação.

3.3.2.4 Transferência de quantidade de movimento entre diferentes fases sólidas

Em relação à transferência de quantidade de movimento entre as fases sólidas, admite-se que o principal responsável pela variação da quantidade de movimento por interação entre as fases sólidas é o arrasto decorrente da diferença de velocidade das partículas, devido ao pouco conhecimento sobre essa interação. Dessa forma os autores PANNALA e SYAMLAL (2011) utilizam uma expressão levando em conta apenas o arrasto entre as fases sólidas, representada pela (Equação 3.17):

$$\vec{I}_{ml} = -F_{sml}(\vec{V}_{sl} - \vec{V}_{sm}) \quad (3.17)$$

Syamlal (1987) utilizou a expressão derivada da teoria cinética para o coeficiente de arrasto para entre as fases sólidas, representada pela Equação 3.18:

$$F_{sml} = \frac{3(1 + e_{ss}) \left(\frac{\pi}{2} + C_f \frac{\pi^2}{8} \right) \rho_{sl} \rho_{sm} (d_{sl} + d_{sm})^2 g_{0lm} |\vec{v}_{sm} - \vec{v}_{sl}|}{2\pi(\rho_{sl} d_{sl}^3 + \rho_{sm} d_{sm}^3)} \quad (3.18)$$

onde C_f é o coeficiente de fricção entre as fases, e_{lm} é o coeficiente de restituição entre as diferentes fases sólidas, ρ_s , d_p e \vec{v}_s , são, respectivamente, a massa específica, o diâmetro das partículas e o vetor de velocidade referentes à uma das fases sólidas. O termo g_{0lm} é conhecido como função de distribuição radial, que pode ser vista como o aumento da probabilidade de colisões entre as partículas à medida que a concentração da fase sólida aumenta (RANADE, 2002). Então para um leito disperso, g_{0lm} vale um, e quando o leito está muito denso, de maneira que o movimento das partículas é impossibilitado, g_{0lm} assume um valor infinito (RANADE, 2002; VAN WACHEM, 2003). Para uma mistura de esferas rígidas a expressão utilizada para este termo foi derivada em LEBOWITZ (1964).

$$g_{0lm} = \frac{1}{\varepsilon_g} + \frac{3d_{sl}d_{sm}}{\varepsilon_g^2(d_{sl} + d_{sm})} \sum_{k=1}^M \frac{\varepsilon_{sk}}{d_{sk}} \quad (3.19)$$

3.3.2.5 Tensor de tensões entre a fases

Considerando que o gás se comporta como um fluido newtoniano, o tensor de tensões viscosas pode ser dado:

3.3.2.5.1 Tensões Viscosas

As tensões viscosas e a pressão contribuem junto com as forças atuantes nas fases para o transporte de *momentum*.

De acordo com LUNA (2013), na fase primária, o tensor das tensões é modelado assumindo a hipótese de Stokes, considera o gás como um fluido newtoniano. Já para a fase secundária, também é necessário a descrição destas tensões, visto que a abordagem euleriana-granular considera a fase sólida em um meio contínuo, e isso acontece devido a analogia que é feita com a teoria cinética dos gases. A TABELA 8 resume estes termos.

TABELA 8 - REPRESENTAÇÃO DAS EQUAÇÕES DAS TENSÕES VISCOSAS.

Tensões Viscosas

1. Tensor das tensões viscosas

(a) Fase fluida (primária - g)

$$\bar{\tau}_g = \alpha_g \mu_g (\nabla \vec{v}_g + \nabla \vec{v}_g^T) + \left(\alpha_g \lambda_g - \frac{2}{3} \alpha_g \mu_g \right) \nabla \cdot v_g \bar{I} \quad (3.20)$$

(b) Fase sólida i (secundária - s)

$$\bar{\tau}_{s,i} = \alpha_{s,i} \mu_{s,i} (\nabla \vec{v}_{s,i} + \nabla \vec{v}_{s,i}^T) + \left(\alpha_{s,i} \lambda_{s,i} - \frac{2}{3} \alpha_{s,i} \mu_{s,i} \right) \nabla \cdot v_{s,i} \bar{I} \quad (3.21)$$

2. Viscosidade cisalhante

Syamlal et al. (1993):

$$\mu_{s,i} = \frac{4}{5} \alpha_{s,i} \rho_{s,i} d_{s,i} g_{0lm} (1 + e_{ss}) \left(\frac{\Theta_{s,i}}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \alpha_{s,i} + \frac{\alpha_{s,i} \rho_{s,i} d_{s,i} \sqrt{\Theta_{s,i} \pi}}{6(3 - e_{ss})} \left[1 + \frac{2}{5} (1 + e_{ss}) (3e_{ss} - 1) \alpha_{s,i} g_{0lm} \right] \quad (3.22)$$

3. Viscosidade Bulk

Lun et al. (1984):

$$\lambda_{s,i} = \frac{4}{3} \alpha_{s,i} \rho_{s,i} d_{s,i} g_{0lm} (1 + e_{ss}) \left(\frac{\Theta_{s,i}}{\pi} \right)^{1/2} \quad (3.23)$$

FONTE: ANSYS FLUENT THEORY GUIDE (2013).

O tensor tensão viscosa de sólidos surge devido à troca de momentum por translação e colisão das partículas, e contém a viscosidade devido ao cisalhamento ($\mu_{s,i}$) e a viscosidade *bulk* ($\lambda_{s,i}$). A viscosidade de cisalhamento representa a resistências ao movimento e é constituída de um componente colisional e cinético. Existe um termo de atrito, a viscosidade friccional, que pode ser adicionado para escoamentos em que a fase sólida é densa e atinge o limite de empacotamento. Já a viscosidade *bulk* representa a resistência à compressão e expansão do meio (ANSYS FLUENT GUIDE, 2013).

3.3.2.5.2 Pressão de sólidos

Uma força normal na fase sólida resultante da constante interação entre as partículas é chamada de pressão de sólidos (VAN WACHEM e SASIC, 2007) e ocorre devido a dois mecanismos principais: cinético e colisional. SYAMLAL et al. (1993) propôs a seguinte (Equação 3.24) para a pressão de sólidos.

$$P_s = 2\rho_s(1 + e_{ss})\alpha_s^2 g_{0lm}\Theta_s \quad (3.24)$$

onde e_{ss} (o fluent usa um valor padrão de 0,9) é o coeficiente de restituição, g_{0lm} é a função de distribuição radial e Θ_s é temperatura granular.

Esta equação não contabiliza o efeito de outras fases no sistema, quando há mais de uma fase sólida presente no escoamento. Portanto, é comumente utilizado outras equações para modelar a pressão de sólidos em sistemas compostos por misturas binárias. De acordo com GIDASPOW (1994) a partir de uma formulação geral de pressão na presença de outras fases pode ser escrita da forma da (Equação 3.25).

$$P_q = \alpha_q \rho_q \Theta_q + \left(\sum_{p=1}^N \frac{d_{pq}^3}{d_q^3} p_{c,qp} \right) \rho_q \Theta_q \quad (3.25)$$

onde $p_{c,qp}$ é a parte colisional da pressão entre as fases q e p.

3.4 CONDIÇÕES DE CONTORNO E CONDIÇÕES INICIAIS

3.4.1 Condições de contorno:

As condições de contorno são aquelas responsáveis por configurar o problema diferencial cuja solução é desejada, de maneira que é necessário conhecer ou estimar, com base no comportamento físico do escoamento, o comportamento das grandezas físicas nas fronteiras da região delimitada para se obter a solução do problema. Existem quatro tipos de equações diferenciais parciais que definem as condições de contorno (HOFFMANN e CHIANG, 2000):

- (i) Condição de Dirichlet: quando o valor da grandeza é prescrito ao longo do contorno;

$$\phi_w = \phi_0, \text{ na parede} \quad (3.26)$$

onde ϕ é uma grandeza qualquer.

- (ii) Condição de Contorno de Neumann: quando o gradiente normal de uma variável é especificado ao longo do contorno,

$$c \left(\frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} \right)_w = q_{\phi_w}, \text{ na parede} \quad (3.27)$$

onde c é uma constante, \vec{n} é o vetor normal à condição de contorno e q_{ϕ_w} é o fluxo de ϕ através do contorno.

- (iii) Condição de contorno mista: quando algumas partes do contorno possuem diferentes condições de contorno, por exemplo:

$$c_1 \left(\frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} \right)_w + c_2 \phi_w = c_3 \phi_0, \text{ na região 1 da parede.} \quad (3.28)$$

$$c \left(\frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} \right)_w = q_{\phi_w}, \text{ na região 2 da parede.} \quad (3.29)$$

- (iv) Condição de contorno de Robin: quando a condição imposta no contorno for uma combinação linear das condições de Dirichlet e de Neumann,

$$c_1 \left(\frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} \right)_w + c_2 \phi_w = c_3 \phi_0, \text{ na parede} \quad (3.30)$$

onde c_1 , c_2 e c_3 são constantes.

Em problemas de mecânica dos fluidos computacional normalmente é utilizada uma nomenclatura diferente para designar as condições de contorno.

3.4.1.1 Condição de entrada

É a condição de contorno através da qual a vizinhança se comunica com o domínio da solução (RANADE, 2002). Na entrada do leito o fluxo de ar é somente na direção axial (eixo y) e a velocidade dos sólidos na entrada é nula.

3.4.1.2 Condição de saída

Existem três tipos de condições de saída, escoamento completamente desenvolvido na saída, escoamento com elevado número de Peclet próximo a saída com corrente livre. A condição de escoamento mais comum encontrada na literatura é a de completamente desenvolvido na saída e consegue-se fazer o uso da condição de Neumann com fluxo ϕ sendo igual a zero (FAN e ZHU, 1998). Logo na saída do leito a pressão é definida (pressão atmosférica) e o gradiente de velocidade do ar nulo.

3.4.1.3 Condição de parede

Para um escoamento multifásico existem três possibilidades de condições de contorno para a equação de conservação de quantidade de movimento, que estão listadas a seguir:

- (i) Condição de não-escorregamento: a componente tangencial da velocidade na parede é zero. É comumente empregada para a fase fluida em paredes consideradas rígidas.

$$v = 0 \quad (3.31)$$

- (ii) Condição de livre-escorregamento: a componente normal da velocidade na parede e o gradiente de velocidade normal à parede são iguais a zero. Geralmente, é empregada em escoamentos monofásicos quando a delimitação do contorno não é uma parede sólida:

$$u = 0 \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial \vec{n}} = 0 \quad (3.33)$$

onde u é a componente normal à parede e \vec{U} é o vetor velocidade na parede.

- (iii) Condição de escorregamento parcial: foi desenvolvida por JOHNSON e JACKSON (1987) (*apud* SYAMLAL *et al.*, 1993) para contabilizar os efeitos de fricção e de colisão entre as partículas e a parede sólida do domínio considerado. Quando se utiliza esta equação a equação de conservação de energia granular deve ser resolvida.

Normalmente, para a fase gás a condição de não-escorregamento é normalmente empregada. Já para a fase sólida não existe uma condição de contorno universal, de maneira que são encontrados na literatura trabalhos utilizando cada umas das três condições citadas acima.

Para a equação de temperatura são utilizadas as condições de Dirichlet, de Neumann e Robin, dependendo da situação. Para as equações de espécies a condição de Neumann é empregada em situações onde a parede é rígida, com fluxo igual a zero.

3.4.1.4 Condições de simetria e periódicas

Quando se tem uma simetria do escoamento ou exista um processo repetitivo provocado pela natureza de um equipamento, é possível reduzir o tamanho do domínio computacional através de condições de contorno especiais (RANADE, 2002). Estas condições de contorno fictícias ajudam a simplificar situações específicas. No caso de uma simetria do escoamento, a condição de simetria pode ser imposta. Esta condição impõe que a componente normal da velocidade e os gradientes normais à superfície imaginária são iguais a zero.

Quando a geometria física do problema em questão ou o padrão do escoamento esperado possui uma natureza repetitiva, uma condição de contorno cíclica, ou periódica, pode ser utilizada para reduzir o domínio computacional (RANADE, 2002). A aplicação de uma condição cíclica impõe que o valor de todas as variáveis em uma superfície 1 é igual ao das variáveis na superfície 2, ou seja:

$$\phi_{S1} = \phi_{S2} \quad (3.34)$$

onde ϕ_{S1} e ϕ_{S2} correspondem, respectivamente, as variáveis na superfície do plano 1 e na parede do sólido em questão.

3.4.1.5 Condição Inicial

A condição inicial deve representar o valor de uma determinada grandeza no instante $t = 0s$, ou o passo inicial de um método iterativo. Em determinadas situações o escoamento durante o regime transiente é de interesse da simulação. Para estas situações é fundamental uma condição inicial fisicamente fiel a realidade. As condições iniciais devem ser especificadas para todas as variáveis envolvidas na solução do problema. Para simulações de leitos fluidizados, é comum definir a velocidade inicial das fases sólidas como sendo zero (SYAMLAL *et al.*, 1993). No leito foi considerado que há uma altura estática definida, junto com a porosidade inicial definida.

3.4.2 Classificação do problema

Analisando a consistência matemática do problema através do cálculo dos graus de liberdade é possível afirmar que o mesmo é consistente determinado, admitindo-se apenas uma solução, visto que o número de incógnitas é igual ao número de equações, resultando no grau de liberdade igual a zero. Desta forma, o modelo será utilizado nas simulações para reproduzir o comportamento do processo já dimensionado quando operado em diferentes condições (PERLINGEIRO, 2005).

3.5 CARACTERÍSTICAS NUMÉRICAS

O método de volumes finitos foi utilizado para discretizar as equações governantes apresentada no capítulo 3. O primeiro passo para a utilização do método de volumes finitos consiste na divisão do domínio de interesse em pequenos volumes de controle. Em seguida as equações de conservação são integradas sobre estes volumes de controle, assim para obter as equações discretizadas para as equações governantes. De acordo com PATANKAR (1980), a maior vantagem de se utilizar o método de volumes finitos é que a solução obtida satisfaz os princípios de conservação de massa, quantidade de movimento e energia para qualquer grupo de

volume de controle sobre todo o domínio. As equações governantes foram discretizadas no anexo 1.

A não-linearidade da equação de conservação da quantidade de movimento é a principal dificuldade na resolução das equações governantes de qualquer problema envolvendo escoamento de fluídos. Contudo, há a necessidade de realizar uma linearização das equações discretizadas de quantidade de movimento. Uma das formas mais utilizadas é a combinação das equações de continuidade e de quantidade de movimento para a obtenção de uma equação para a pressão do escoamento (RANADE, 2002). O método mais comum utilizando este princípio, é o método SIMPLE, um dos métodos de acoplamento velocidade-pressão empregados. O método SIMPLE utiliza um procedimento iterativo para calcular o campo de velocidades, partindo de uma estimativa inicial para o campo de pressões. Este procedimento é realizado através de uma correção para os campo de velocidade e de pressão, que são calculados em cada iteração, até que as equações de conservação de quantidade de movimento e de continuidade sejam satisfeitas (PATANKAR, 1980).

Devido às grandes diferenças entre o escoamento monofásico, para o qual o método SIMPLE foi desenvolvido, e o escoamento multifásico, são necessárias algumas modificações no método SIMPLE (van der HOEF *et al.*, 2007; JAKOBSEN, 2008; RANADE, 2002; SYAMLAL *et al.*, 1993). Algumas modificações foram realizadas, entre elas, uma equação de correção para a fração volumétrica da fase sólida e o desacoplamento dos termos de interação entre fases das equações de quantidade de movimento e de energia. Para o desacoplamento da interação entre as fases, é recomendado o uso de um Algoritmo de Eliminação Parcial (PEA).

A utilização do método SIMPLE para a fase sólida de um escoamento multifásico ocasiona dificuldades de convergência do processo iterativo, para resolver este problema e acelerar a taxa de convergência para o escoamento multifásico é a utilização de uma equação de correção de fração volumétrica da fase sólida. Para a fase fluida utiliza-se a equação de correção de pressão. Portanto, a compressibilidade do fluído é calculada diretamente, por isso que a convergência do algoritmo melhora (VAN der HOEF, 2006).

Para a realização da análise da fluidodinâmica de partículas de areia em leito fluidizado para combustão de biomassa. Foi realizado estudo para simular a CALDEIRA 06 de leito fluidizado borbulhante da Klabin no *Fluent* do ANSYS 18.2 com

o intuito de explorar o comportamento do escoamento via CFD, para obter os dados de queda de pressão no leito em função da velocidade do ar. O *software Fluent ANSYS 18.2* contém amplos recursos de modelos físicos necessários para modelar fluxo, turbulência, transferência de calor e reações para aplicações nas indústrias.

4 FUNCIONAMENTO DA CALDEIRA E SIMULAÇÃO DO PROCESSO

4.1 MATERIAIS

Para gerar vapor para as turbinas é realizado a queima de cascas de Eucalipto e Pinus, junto com um material inerte, a areia, de baixo custo comumente utilizado em caldeiras de leito fluidizado por fornecer estabilidade ao processo além de melhorar a transferência de calor.

4.2 CARACTERIZAÇÃO DAS PARTÍCULAS

Algumas propriedades físicas serão apresentadas, como por exemplo, massa específica, diâmetro médio de partícula, porosidade e esfericidade.

4.2.1 Massa específica

Através do método da picnometria é possível obter a massa específica do material. O método consiste em calibrar o picnômetro com água destilada, preencher com a amostra até aproximadamente um quarto do seu volume ter sua massa determinada utilizando uma balança analítica. Em seguida, o volume do picnômetro é preenchido com um fluido – água para areia e querosene para o compósito – e sua massa também é registrada. As bolhas de ar são retiradas com o uso do banho ultrassônico. O procedimento descrito é realizado em triplicata para permitir maior confiabilidade nos valores obtidos. A massa específica da amostra é então calculada pela seguinte Equação 4.1:

$$\rho = \frac{m}{V_{pic} - V_f} \quad (4.1)$$

em que m é a massa da amostra, V_{pic} é o volume do picnômetro e V_f é o volume de fluido adicionado, que pode ser obtido com o auxílio de sua massa específica.

4.2.2 Diâmetro médio

Para obter o diâmetro médio das partículas é utilizada a técnica de peneiramento. As peneiras de Tyler Bertel com aberturas de 600 e 500 μm são utilizadas para selecionar as partículas de acordo com esta faixa granulométrica. Agita-se a amostra com o auxílio de uma base vibratória por um intervalo de tempo suficiente até que se obtenha massa constante em cada peneira. O diâmetro da partícula é obtido pela média aritmética entre as aberturas das peneiras. Na TABELA 9 são fornecidos os diâmetros da areia utilizado no processo da Klabin.

TABELA 9 - DIAMÊTRO MÉDIO DA AREIA UTILIZADA NO PROCESSO.

Distribuição Granulométrica da Areia da Caldeira 06		
[mm]	Passante	Retido
4,760	100,00%	0,00%
2,000	95,00%	5,00%
1,000	80,00%	15,00%
0,500	50,00%	30,00%
0,297	20,00%	30,00%
0,105	2,00%	18,00%
Finos	0,00%	2,00%

FONTE: Treinamento caldeira 06 Klabin.

4.2.3 Porosidade

A porosidade do leito de partículas é determinada através do método da proveta. O método consiste em preencher uma proveta com a amostra e registrar a massa. A porosidade é então obtida pela Equação 4.2 a seguir:

$$\varepsilon = \frac{V - V_p}{V} \quad (4.2)$$

Em que ε é a porosidade do leito, V é o volume da proveta e V_p é o volume de partículas adicionadas que pode ser calculada pela razão entre sua massa medida e a massa específica.

O volume de massa de dentro da caldeira 06 foi estabelecido como sendo 1/3 do seu volume total, logo a porosidade do leito da caldeira é de aproximadamente 2/3.

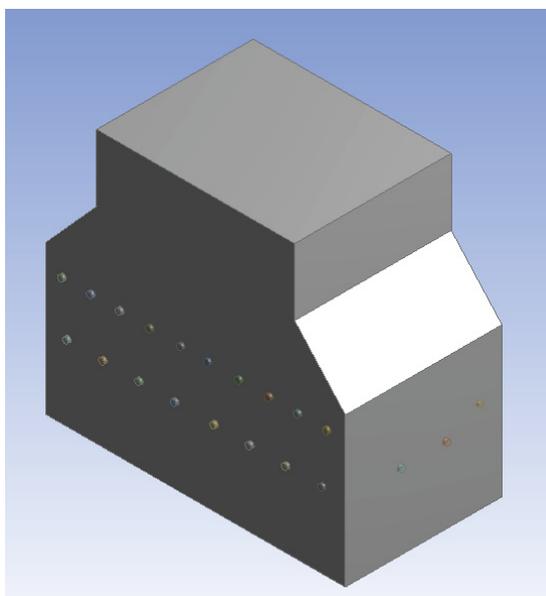
4.3 METODOLOGIA NUMÉRICA

4.3.1 Descrição da Geometria e das Condições de Contorno

Neste trabalho, as situações simuladas possuem geometrias bidimensionais. Com a realização de uma comparação entre os resultados e o tempo computacional das simulações, obtivemos resultados apresentados nas próximas seções.

A geometria desenvolvida para representar a caldeira 06 da Klabin engloba a fornalha, as entradas de biomassa e as entradas de ar primária e secundária. Para gerar a geometria da caldeira 06 de biomassa de leito fluidizado borbulhante foi utilizado o *DesignModeler* do ANSYS 18.2. A FIGURA 6 ilustra de forma geral a geometria que representa o equipamento estudado.

FIGURA 6 - REPRESENTAÇÃO GEOMÉTRICA TRIDIMENSIONAL DA CALDEIRA DE LEITO FLUIDIZADO BORBULHANTE DA KLABIN.



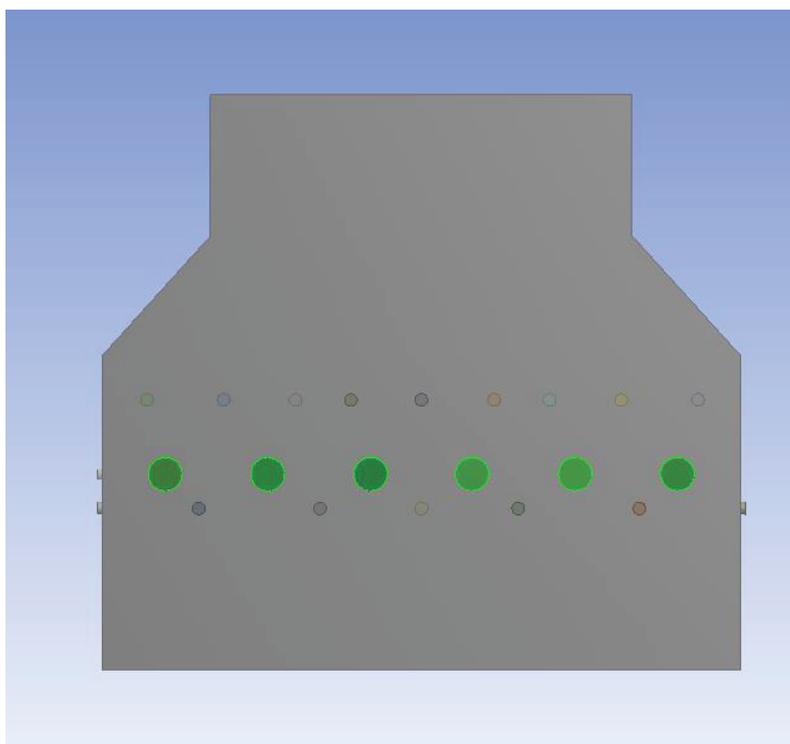
FONTE: O autor (2018).

Devido a dificuldade de visualização das dimensões da caldeira do material fornecido pela Klabin foi necessário reproduzir a geometria para melhor visualização e para utilização nas simulações em 3D. Entretanto, a geometria escolhida para

realizar as simulações é representada pela FIGURA 8, por conta do elevado tempo computacional requerido, para geometrias tridimensionais, algumas condições de contorno foram estabelecidas.

A caldeira possui 17 entradas de ar secundário inferior e as 19 entradas de ar secundário superior ao longo do leito, são dispostas de forma entrelaçada com o objetivo de manter um alto grau de turbulência na região inferior da fornalha para que uma boa mistura dos gases de combustão favoreça a queima da biomassa. As 6 entradas de biomassa se localizam entre as entradas de ar secundário inferior e superior apenas na parte traseira da caldeira, representado pela FIGURA 7.

FIGURA 7 - REPRESENTAÇÃO DAS 6 ENTRADAS DE BIOMASSA NA CALDEIRA.



FONTE: O autor (2018).

4.4 DESCRIÇÃO DOS PARÂMETROS E MODELO NUMÉRICOS UTILIZADOS

Em se tratando de modelos numéricos, a descrição física correta do problema não garante resultados coerentes. A escolha de modelos e parâmetros numéricos

podem gerar variações significativas nos resultados de simulações, ou até mesmo ocasionar erros na execução do código. Existem alguns parâmetros que influenciam os resultados do problema como o tamanho dos elementos da malha, o tamanho dos passos de tempo, os métodos de discretização dos termos convectivos das equações governantes e os resíduos mínimos para determinar a convergência do processo iterativo.

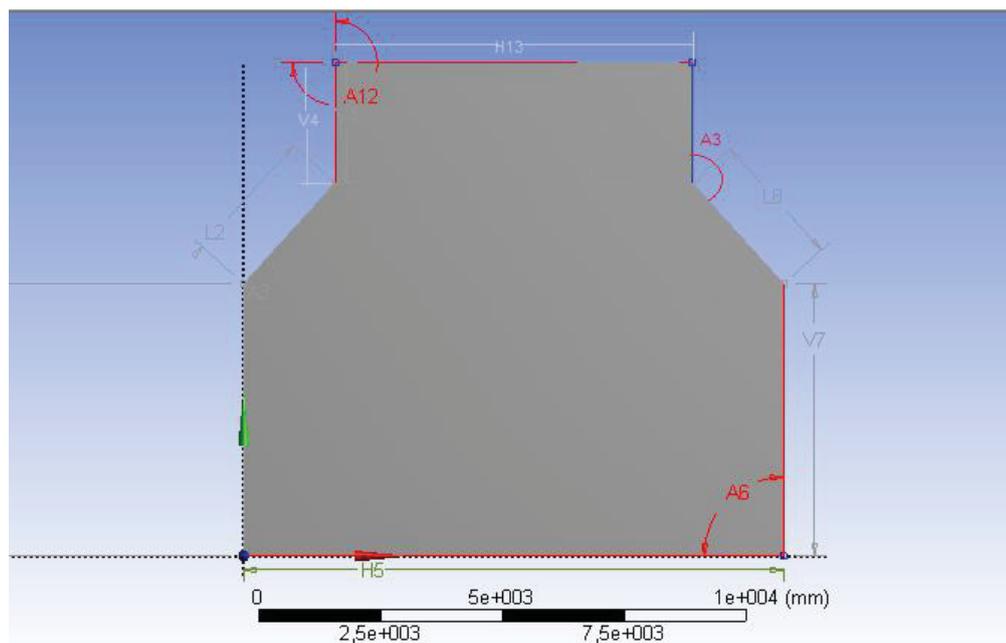
4.4.1 Malha Computacional

Para resolver as equações do modelo por meio da fluidodinâmica computacional é necessário a subdivisão do domínio em um número maior de subdomínios para que as equações sejam discretizadas e resolvidas. Isso resulta na criação de uma malha de células. O grau do refinamento da malha é um fator de extrema importância, pois a precisão da solução depende do número de células presentes na malha computacional (TU et al.,2008).

A influência da malha sobre os resultados é analisada na seção 5.1. O tempo computacional menor necessário se opta por utilizar um passo de tempo variável durante as simulações. Os menores passos de tempo possíveis definidos são, respectivamente, 10^{-3} e 10^{-10} , embora na maioria das simulações o menor passo de tempo necessário tenha sido da ordem de 10^{-5} .

Nos casos com coordenadas retangulares 2D, a malha é constituída por intervalos nas direções x e y , com tamanho de elemento de $4,0 \times 10^{-2}$ m. A representação da geometria do problema com a localização das condições de contorno e a divisão das paredes do reator em quatro regiões pode ser visualizada na FIGURA 8. Uma observação muito importante, é sobre a entrada de gases no leito através dos bicos de distribuição de ar ou “grid”, localizado no inferior da caldeira, não foi modelado numericamente. Para considerar o efeito do distribuidor sobre o escoamento foi considerado que os agentes gaseificadores entram no reator com um perfil de velocidade plano.

FIGURA 8 – REPRESENTAÇÃO DA GEOMETRIA BIDIMENSIONAL DA CALDEIRA 6 COM UNIDADES EM MILÍMETROS.



Legenda: L2 = 2806,4mm; H5= 11066mm; H13= 7316,1mm; A3 = 138,08°; V4 = 2466,8mm; V7= 5613,4mm;

FONTE: O autor (2018).

O objetivo de uma parte do trabalho consiste em selecionar uma malha adequada e viável às simulações, esta malha será estudada. Este estudo se baseia na comparação entre os resultados obtidos pela simulação de um caso geral, nas diferentes malhas computacionais. As propriedades confrontadas são queda de pressão e perfil de fração volumétrica de sólidos. A escolha da malha é realizada de acordo com a metodologia apresentada por VAN WANCHEN (2000). Caso a diferença entre as propriedades obtidas por duas malhas seja inferior a 4%, a malha de menor quantidade de elementos será escolhida, visto que o tempo de simulação será menor.

A malha bidimensional do projeto foi gerada utilizando o *software* ANSYS *Mesh*. Inicialmente foi gerada uma malha, que infelizmente não obteve sucesso pois o processador do computador não conseguiu realizar em um tempo não muito extenso, possuía um tamanho de elemento de $5 \times 10^{-3} \text{m}$. Outros tamanhos de elementos testados geraram outros tipos de malha que são mostrado, a TABELA 10 exhibe as malhas a serem testadas e seus parâmetros.

TABELA 10 – MALHAS COMPUTACIONAIS GERADAS.

	Malha 1	Malha 2	Malha 3
Dimensão dos elementos (m)	3×10^{-2}	4×10^{-2}	5×10^{-2}
Total de Elementos	109.970	62.378	39.876
Total de nós	110.584	62.844	40.247

Na geração das malhas computacionais, a fase sólida é tratada como meio contínuo e a abordagem Euler-Euler é uma abordagem estatística. Assim, a dimensão dos elementos sobre os quais está sendo avaliada as propriedades da fase, além disso, tem a possibilidade de ter a presença de uma quantidade significativa de partículas. Seguindo a esses critérios, as dimensões dos elementos da malha que serão testados o modelo será $3 \times 10^{-2} \text{m}$, $4 \times 10^{-2} \text{m}$ e $5 \times 10^{-2} \text{m}$ e foi verificado se esses tamanhos estão razoáveis.

No caso geral, o tamanho do elemento para obter uma malha refinada e de acordo com as condições de processador foi de $4 \times 10^{-2} \text{m}$. Mesmo que não seja a malha mais refinada a malha 2, simulou o processo em 10h foi escolhida devido ao maior tempo que a malha 1, que simulou o mesmo processo em 12 horas.

Para este trabalho consiste em um leito fluidizado composto por areia a uma velocidade aproximada de $2u_{mf}$. Devido a areia ser responsável em gerar e manter o regime de fluidização durante a combustão. Uma velocidade acima da mínima fluidização é adotada para evitar as instabilidades do sistema nesta condição. Os parâmetros e modelos nas simulações teste da malha estão dispostos na TABELA 11.

4.4.2 Método de solução do modelo

Para resolver as equações do modelo foi utilizado o software ANSYS FLUENT 18.2. O software resolve o conjunto de equações governantes e constitutivas pelo método dos volumes finitos. O método de discretização mais comumente utilizado, devido a sua simplicidade estabilidade, é o método *Upwind* de primeira ordem (FOU). Alguns autores mostram que os métodos de primeira ordem não conseguem descrever o processo de formação de bolhas de maneira realista, fazendo com que o uso de métodos de ordem superior para simulações de processos em que existe formação de bolhas. Contudo, para os métodos de segunda ordem é necessário significativamente um tempo computacional maior para realizar a simulação. Para evitar muito tempo de simulação e obter resultados de ordem superior, é observado

na literatura que o método de primeira ordem FOU seja utilizado durante o regime transiente do escoamento, e um método de segunda ordem seja utilizado durante o regime pseudo-permanente do escoamento (RANADE, 2002). Neste caso vamos trabalhar apenas com o regime transiente então o método de primeira ordem FOU será utilizado.

Pelo fato de o escoamento ser multifásico, o algoritmo que será sugerido é o *Phase Coupled SIMPLE*. O esquema de discretização que será utilizado nas modelagens será o *Upwind* de primeira ordem durante.

As simulações já realizadas estão sendo efetuadas em regime transiente, para a solução evolui pela resolução das equações em determinados passos de tempo. Logo, quanto menor o passo de tempo escolhido, mais precisa é a solução, porém maior tempo de processamento será necessário (HULME et al., 2005). O número de Courant (Equação 4.4) é um adimensional que auxilia na escolha do passo do tempo.

$$N_c = v_g \frac{\Delta t}{\Delta y} \quad (4.4)$$

Em que v_g é a velocidade do gás, Δy é a dimensão de uma célula paralela ao fluxo do gás e Δt é o passo de tempo.

Com base na velocidade de convergência e em uma precisão satisfatória para os resultados, um número máximo de Courant de 0,3 foi proposto (GOBIN, 2003). Os números de Courant ainda menores podem ser utilizados para a simulação de leitos fluidizados, originando resultados satisfatórios (CORNELISSEN et al., 2007 e HULME et al., 2005).

Os modelos de arraste de Gidaspow (1994) e Syamlal-O'brien (1989) original e parametrizado são testados preliminarmente. O modelo que melhor representar o escoamento das partículas de areia e biomassa, através da comparação com os dados experimentais, será utilizado nas futuras simulações.

4.4.3 Parâmetros e modelos da simulação

Nas simulações desta pesquisa foram empregados os parâmetros e modelos de acordo com as características do leito fluidizado em estudo, com as partículas adotadas e com base em estudos semelhantes dispostos na literatura. A TABELA 11 é referente aos parâmetros e modelos utilizados nas simulações.

TABELA 11 - PARÂMETROS UTILIZADOS NA SIMULAÇÃO.

Parâmetro/modelo	Descrição/valor
Equações do modelo:	
Modelo de arraste gás-sólido	Syamlal-O'Brien parametrizado (1987)
Modelo de arraste sólido-sólido	Syamlal (1987)
Viscosidade cisalhante	Syamlal <i>et al.</i> (1993)
Viscosidade <i>bulk</i>	Lun <i>et al.</i> (1984)
Viscosidade Friccional	nenhuma
Pressão de sólidos (areia)	Syamlal <i>et al.</i> (1993)
Pressão de sólidos (cavaco)	Lun <i>et al.</i> (1984)
Temperatura granular	constante
Coefficiente de distribuição radial	Syamlal <i>et al.</i> (1993)
Coefficiente de restituição para colisões	0,9 (HULME <i>et al.</i> , 2005; TAGHIPOUR <i>et al.</i> , 2005; ZIMMERMANN <i>et al.</i> , 2005)
Materiais:	
Areia	Massa específica 2567 kg/m ³
Cavaco	Massa específica 380 kg/m ³
Ar	Massa específica 1,187 kg/m ³
	Viscosidade 1,84x10 ⁻⁵ kg/ms
Condições de Contorno:	
Entrada	Velocidade de gás definida
Saída	Pressão definida
Parede	Deslizamento livre para sólidos (VAN WACHEM <i>et al.</i> , 2007)
Limite de empacotamento máximo	(1-ε)
Condição inicial:	
Areia	α _s =0,6

Mistura	$\alpha_{s,areia} = 0,45; \alpha_{s,cavaco} = 0,55$
Altura do leito de partículas	0,6m

Geometria:

Altura da caldeira	10,17m
Largura da caldeira	11,06m

Método de solução:

Critério de convergência	10^{-3}
Passo de tempo	0,0001s
Número de passos de tempo	10000

Para uma dada velocidade de ar injetada no leito, esses parâmetros e modelos são empregados para simular os leitos fluidizados compostos por uma fase sólida (areia ou cavaco) ou duas fases sólidas (misturas de cavaco e areia).

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo são apresentados e analisado os dados obtidos via simulação CFD que serão expostos, analisados e comparados com os dados da literatura. Antes de uma análise física do problema estudado, são realizadas avaliações a respeito de alguns parâmetros numéricos do problema. Resultado referentes à influência do tamanho da malha sobre os resultados e as diferenças que são geradas pelo uso dos tamanhos de elemento entre as malhas do sistema de coordenadas retangulares 2D. Em seguida, são avaliadas formas de reduzir o tempo computacional das simulações, incluindo uma avaliação do tempo computacional para uma mesma condição de simulação. O uso de diferentes condições iniciais para reduzir o tempo computacional dos métodos de discretização e das tolerâncias utilizadas sobre os resultados.

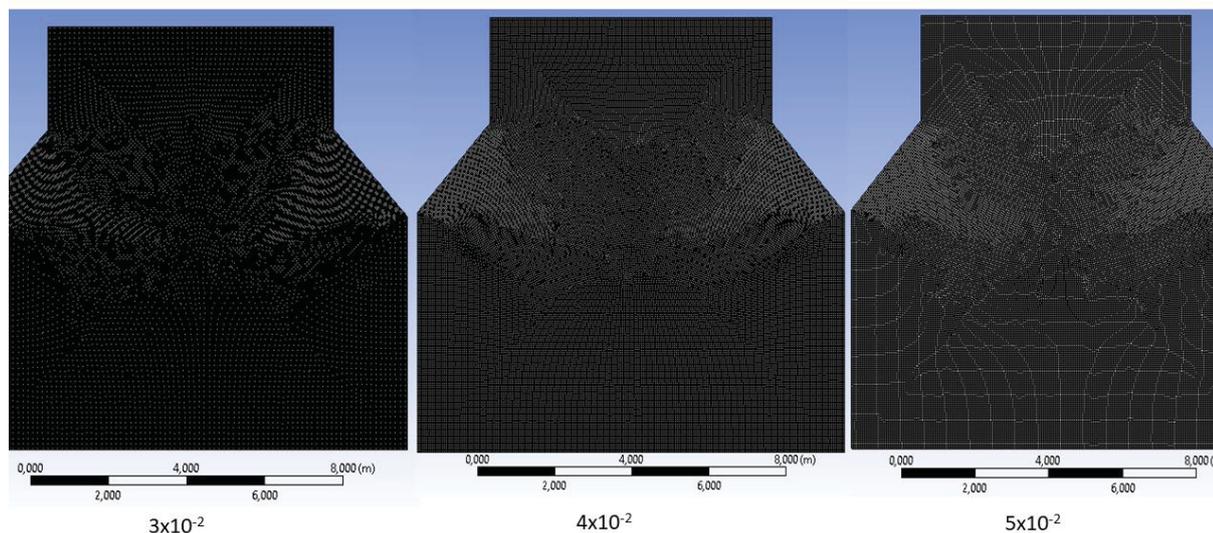
Depois das análises referentes aos aspectos numéricos é apresentada a análise física do problema através das simulações. Primeiramente, os dados da altura do leito expandido são obtidos pelas simulações e comparados com os dados fornecidos pela Klabin, assim para tamanhos diferentes de diâmetros do cavaco e da areia. Onde várias situações foram confrontadas com os dados fornecidos pela Klabin, seguido por uma análise sobre o comportamento fluidodinâmico do leito.

A análise do comportamento fluidodinâmico inclui uma avaliação sobre o começo do escoamento turbulento, verificar quais são as velocidades que o sistema deve operar para obter os resultados de acordo com a realidade da caldeira na usina. Para obter esses resultados foram simulados em diferentes condições. Primeiramente, é simulado o processo possuindo apenas um tipo de material (areia) assim representando o “START” da caldeira. Seguido, as simulações da mistura (areia+cavaco) foram simuladas para diferentes velocidades e diâmetros dos dois materiais nas condições iniciais, devido a falta de estudos para simulações com misturas de materiais com diâmetros diferentes, os modelos de SYAMLAL *et al.* (1993) e GIDASPOW (1994).

5.1 ESTUDO DA MALHA COMPUTACIONAL

Para a realização do teste de independência da malha, foram geradas três malhas bidimensionais estruturadas conforme discutido na FIGURA 9 são apresentas as malhas geradas e a dimensão dos seus elementos.

FIGURA 9 - MALHAS COMPUTACIONAIS GERADAS E SUAS DIMENSÕES.



A TABELA 12 exibe os valores de qualidade do elemento (mais próximo de 1 a malha é melhor, mais próximo de 0 a qualidade é menor), da média (maior que 0,8 a malha está adequada) e o desvio padrão (quanto mais próximo de 0 melhor).

TABELA 12 - MALHAS COMPUTACIONAIS GERADAS.

	Malha 1	Malha 2	Malha 3
Qualidade do elemento	0,99947	0,99947	0,99946
Média	0,9549	0,9566	0,9556
Desvio Padrão	$5,95 \times 10^{-2}$	$6,15 \times 10^{-2}$	$6,29 \times 10^{-2}$
Tempo de simulação (h)	12h	10h	7h

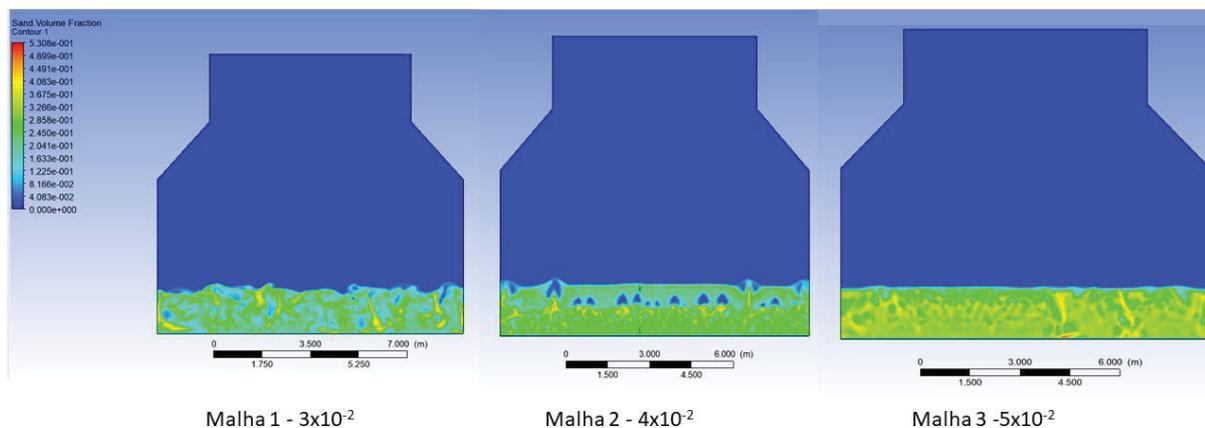
Devido ao elevado custo operacional das simulações envolvendo a malha 1 com 109.970 elementos, a análise do impacto das malhas foi realizada utilizando simulações de 4 s, que não atingiram o regime estacionário. No entanto, mesmo sem atingir o regime estacionário, é possível avaliar se a independência de malha foi atingida.

Deve-se notar ainda que para um estudo de convergência espacial as simulações devem em princípio ser executadas com passos de tempo constantes, uma vez que variações no passo de tempo seriam diferentes de uma malha para outra.

Pela análise da TABELA 12 nota-se que as diferenças relativas para malhas sucessivas foram de pouca relevância, indicando que o refinamento da malha só vale até um certo ponto, e que esses tamanhos de malhas utilizados conseguiram realizar o resultado para as condições simuladas. Uma malha muito refinada de 5×10^{-3} m foi testada, mas o tempo de geração da própria malha foi muito elevado, fazendo com que ela fosse descartada dos estudos. No atual trabalho foram geradas três malhas bidimensionais estruturadas para a realização do teste de independência da malha conforme discutido na seção 4.4.1.

Na FIGURA 10 - SIMULAÇÃO PARA TESTE DE CONVERGÊNCIA DE MALHAS. FIGURA 10 exibe o perfil de fração volumétrica de sólidos (somente areia) para as três malhas geradas, ao longo da simulação.

FIGURA 10 - SIMULAÇÃO PARA TESTE DE CONVERGÊNCIA DE MALHAS.



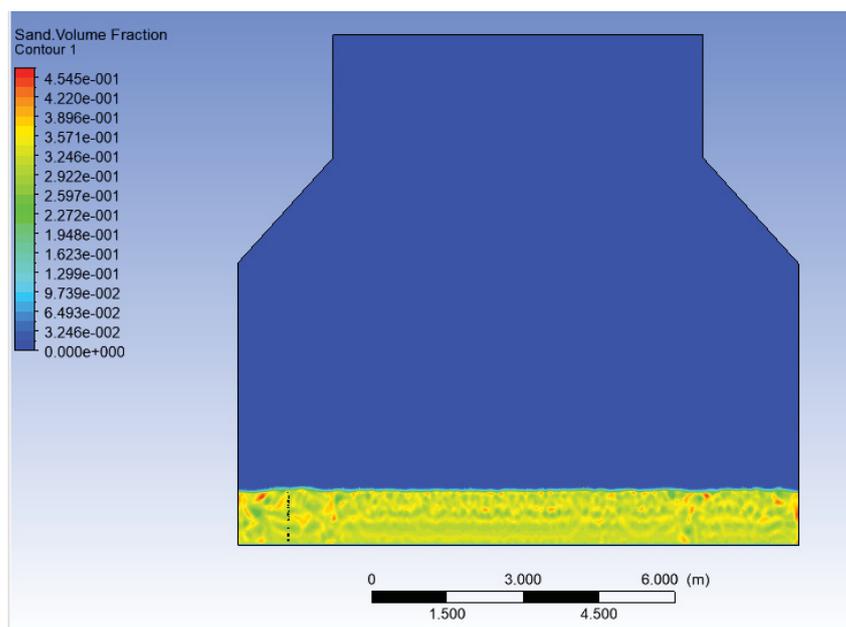
Pela análise qualitativa do perfil de fração volumétrica de sólido observa-se que, para a malha 2, é possível visualizar com melhor definição as bolhas de ar formadas. Já que para as demais malhas este fato não é visualizado, e devido ao menor tempo de processamento para gerar o resultado da simulação para o mesmo, por isso, a malha 2 foi a escolhida.

5.1.1 Expansão do Leito Fluidizado com areia

Para o estudo da altura do leito expandido ao realizarem na inicialização da caldeira, várias velocidades superficiais do ar foram examinadas. As FIGURA 11,

FIGURA 12 e FIGURA 13 exibem os perfis de fração volumétrica de sólidos para o leito expandido composto apenas por areia, em função da velocidade superficial para $t = 1,4s$. Foram simulados para as velocidades de $0,45m/s$, $0,55m/s$ e $0,65m/s$ para verificar a altura de expansão do leito no “START” da caldeira com altura inicial do leito de $0,6m$.

FIGURA 11 - SIMULAÇÃO DO LEITO FLUIDIZADO PARA VELOCIDADE DE $0,45m/s$.



Verifica-se nas FIGURA 11, FIGURA 12 e na FIGURA 13, para uma velocidade superficial de $0,45m/s$, $0,55m/s$ e $0,65m/s$, respectivamente, no CFD-Post foi escolhido a função linha para determinar a altura do leito após a simulação, obteve-se uma altura de $1,18m$, $1,35m$ e $1,80m$.

FIGURA 12 - SIMULAÇÃO DO LEITO FLUIDIZADO PARA VELOCIDADE DE 0,55m/s.

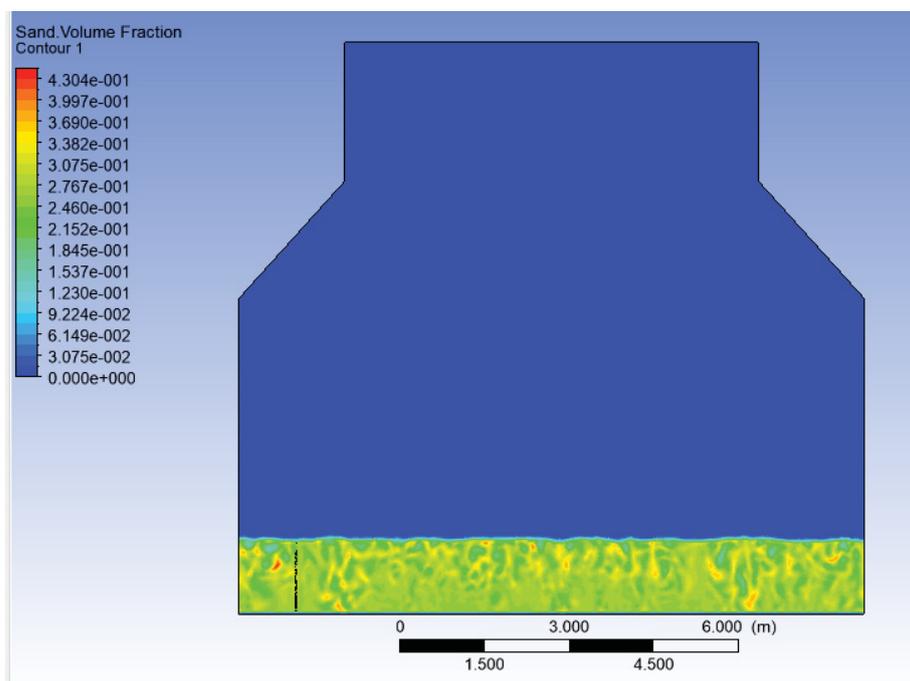
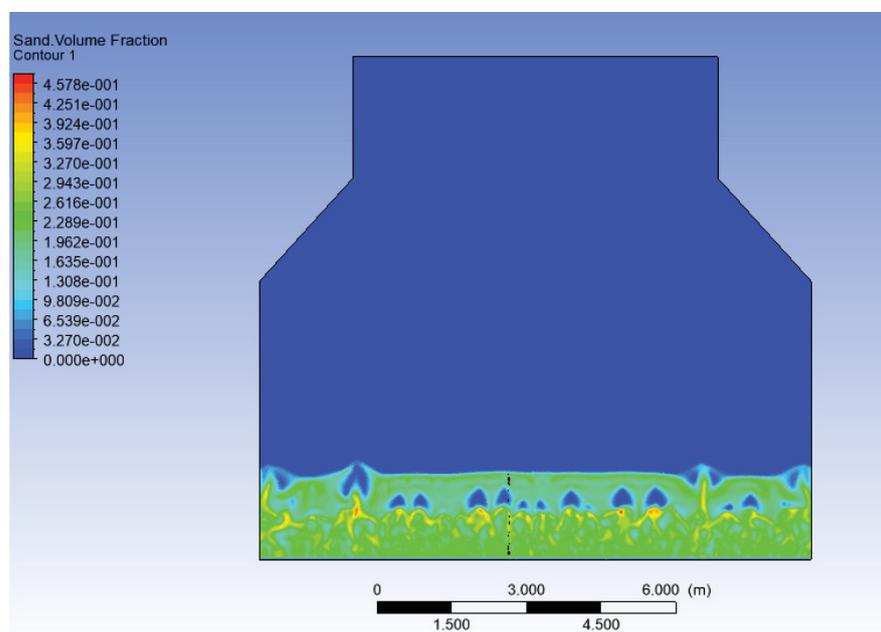


FIGURA 13 - SIMULAÇÃO DO LEITO FLUIDIZADO PARA VELOCIDADE DE 0,65m/s.



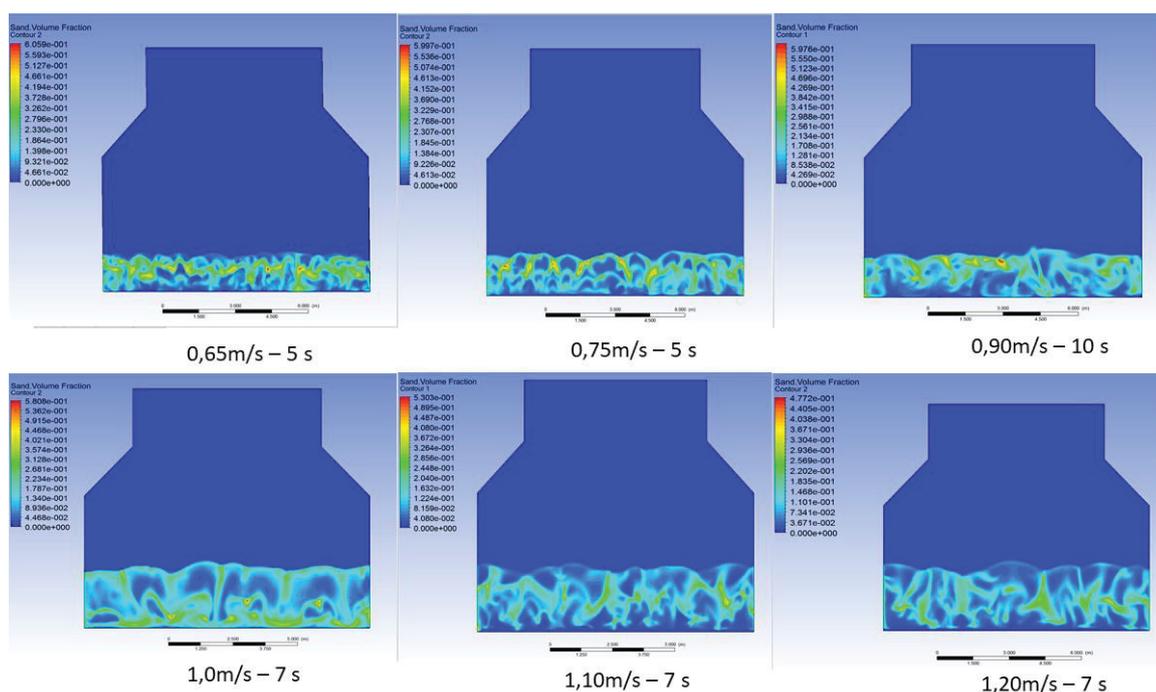
É possível observar que para esta condição não há escoamento turbulento. Logo, é possível aplicar a função linha do CFD-Post e obter as alturas de expansão do leito. As alturas fornecidas pela equipe da Klabin afirmam que a expansão do leito

fica, aproximadamente, a uma altura de 1,20m, o que mostra que as simulações estão de acordo com a informações.

5.1.2 Adição de cavaco e simulação com velocidades diferentes

Para análise do comportamento do leito em várias condições iniciais e situações que podem acontecer no dia-a-dia no processo na usina, foram realizadas simulações com adição de cavaco no leito. A fração volumétrica inicial de areia e cavaco foi de, 0,45 e 0,55, respectivamente. As velocidades superficiais na entrada do *freeboard* de 0,65m/s a 1,2m/s o diâmetro do cavaco e da areia foram 0,05m e 0,0005m. As partículas foram consideradas como perfeitamente esféricas. A FIGURA 14 representa a fração volumétrica do comportamento do leito para areia para as velocidades de 0.65m/s, 0.75m/s, 0.90m/s, 1.0m/s, 1.10m/s e 1.20m/s.

FIGURA 14 – PERFIL DE FRAÇÃO VOLUMÉTRICA DE AREIA NO LEITO EM FUNÇÃO DA VELOCIDADE SUPERFICIAL.



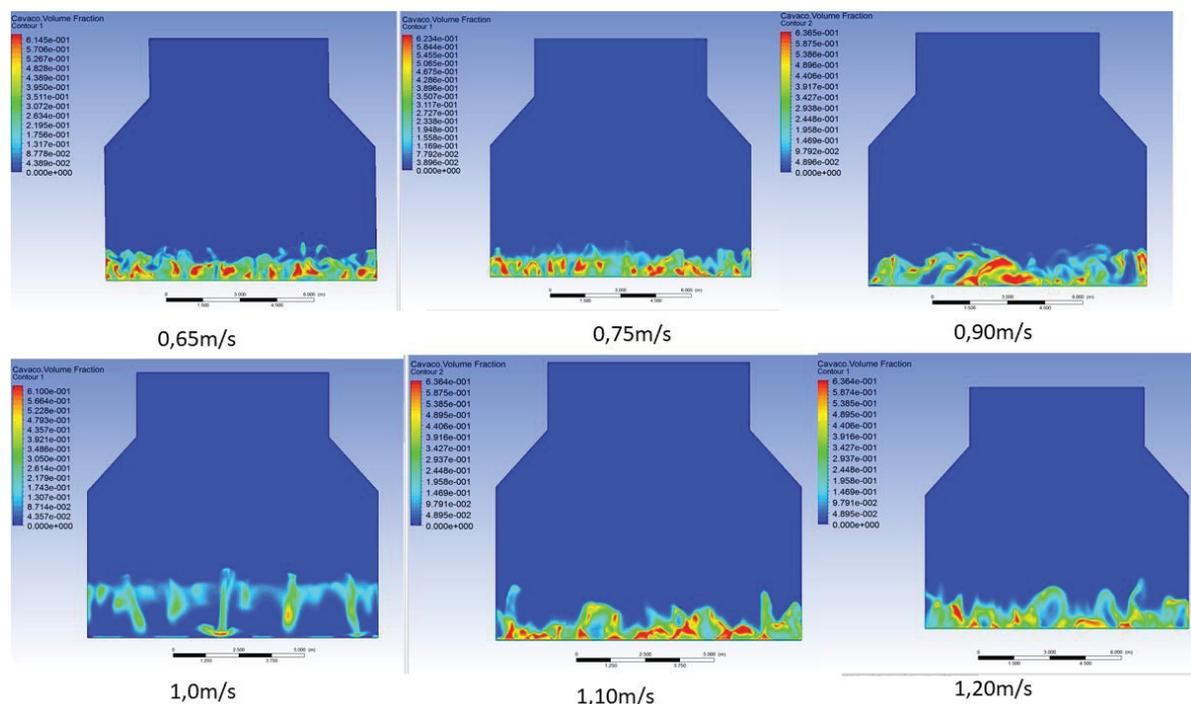
Com o aumento da velocidade do ar, para ambos os casos, as bolhas se tornam maiores e o leito se expande. Outro fator a se observar é que, para velocidades superficiais maiores o regime de fluidização é o pulsado e a interface do leito apresenta flutuações com o tempo. Essas observações estão em conformidade com os experimentos tirados da literatura, observações semelhantes foram feitas por VERISSIMO (2014) na simulação de partículas de leito fluidizado borbulhante.

5.1.3 Leito Fluidizado composto por duas fases sólidas (misturas)

Com a adição do cavaco é possível verificar se há a segregação ou não. O fenômeno de segregação pode acontecer em escoamentos gás-sólido em leito fluidizado com a presença de duas ou mais fases sólidas. A segregação é uma função da diferença entre massa específica e diâmetro das partículas. Um sistema com partículas de diferentes massas específicas e mesmo diâmetro exibe uma maior separação entre os componentes do que misturas com partículas de tamanhos diferentes e massas específicas semelhantes. A medida que a velocidade aumenta a taxa de segregação diminui (CHIBA et al., 1979; KUNII e LEVENSPIEL, 1991; OLIVEIRA, 2012).

A FIGURA 15 representa a fração volumétrica da distribuição do cavaco no leito em função da velocidade.

FIGURA 15 - FRAÇÃO VOLUMÉTRICA DE CAVACO NO LEITO EM FUNÇÃO DA VELOCIDADE.

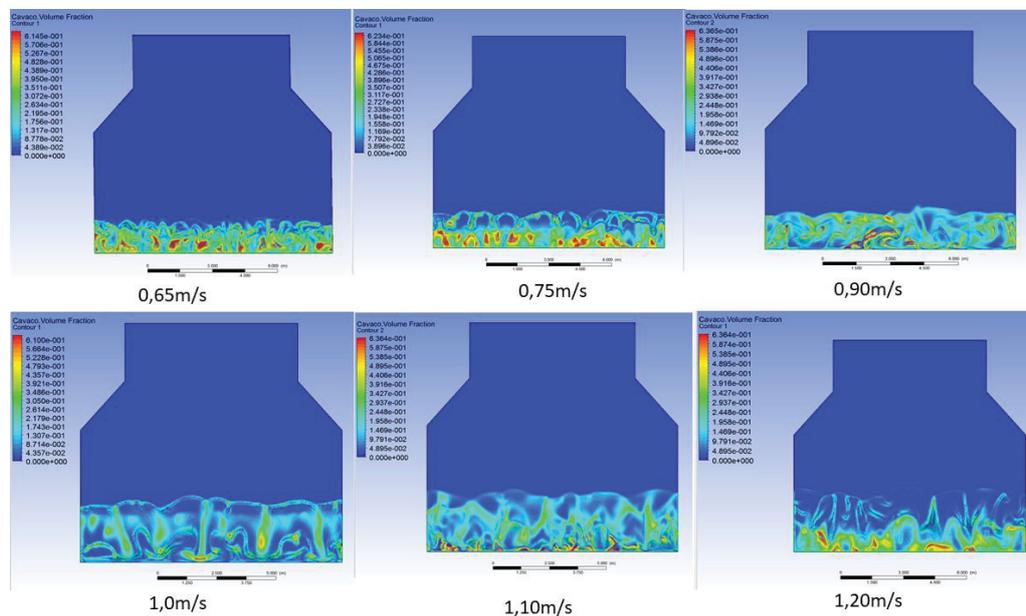


Pode-se observar que para a velocidade de 1,0m/s o modelo conseguiu mostrar o esperado. O cavaco como possui a menor densidade está na parte de cima do leito. Na mistura a areia se mantém na interface.

Foram realizadas as simulações para o leito utilizando areia com diâmetro médio de 0,0005m e diâmetro do cavaco com 0,05m. A FIGURA 16 apresenta as

frações volumétricas para o leito com areia e cavaco com diâmetros constantes em função da velocidade.

FIGURA 16 - PERFIL DE FRAÇÃO VOLUMÉTRICA DA MISTURA EM FUNÇÃO DA VELOCIDADE.



Neste caso nota-se que para maiores velocidade o leito está mais homogêneo, as partículas estão mais distribuídas e a segregação é menor.

5.1.4 Leito fluidizado com partículas de diferentes diâmetros

Para a análise do fenômeno de segregação também foram simulados uma mistura (areia + cavaco) com partículas de diâmetro diferentes de cavaco(d_C) e de areia(d_A), pois devido a impossibilidade de utilizar em um mesmo modelo diversos diâmetros, logo as simulações foram realizadas separadamente, a uma velocidade superficial fixa de 0,9m/s. A TABELA 13 mostra as alturas do leito após a simulação que é apresentada na FIGURA 18 na simulação das misturas, e a diferença de pressão no leito.

TABELA 13 - DADOS SIMULADOS DAS MISTURAS.

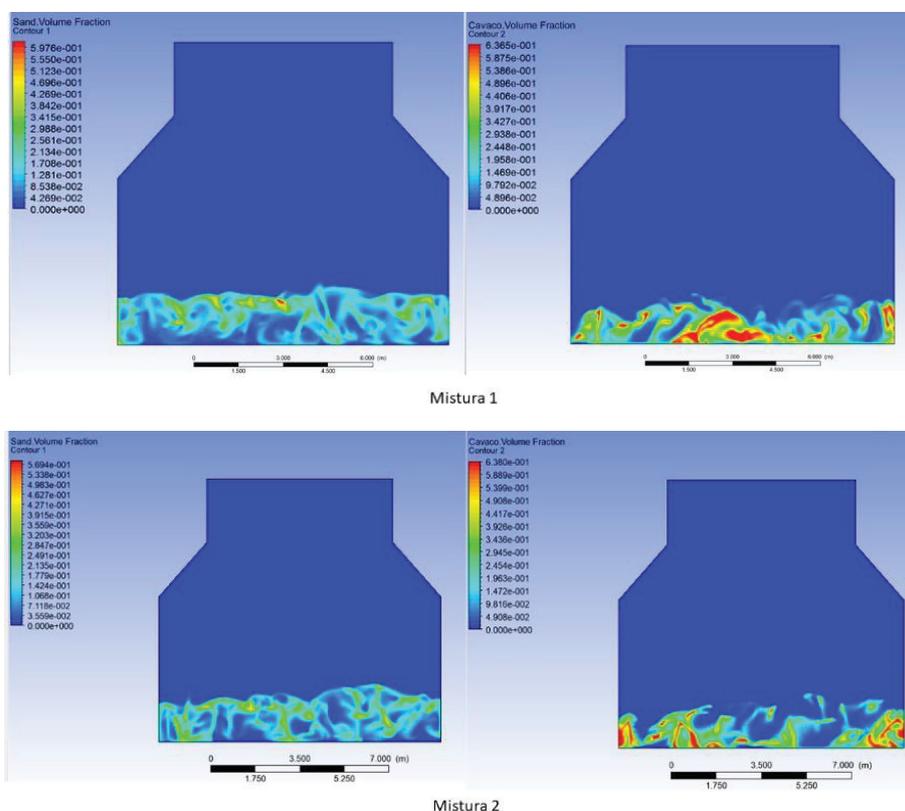
Material	Altura do Leito expandido(m)	ΔP (Pa)
Mistura 1 ($d_C=0,05$ m; $d_A=0,0005$ m)	2,0	3478,76
Mistura 2 ($d_C=0,08$ m; $d_A=0,0005$ m)	2,2	3377,36

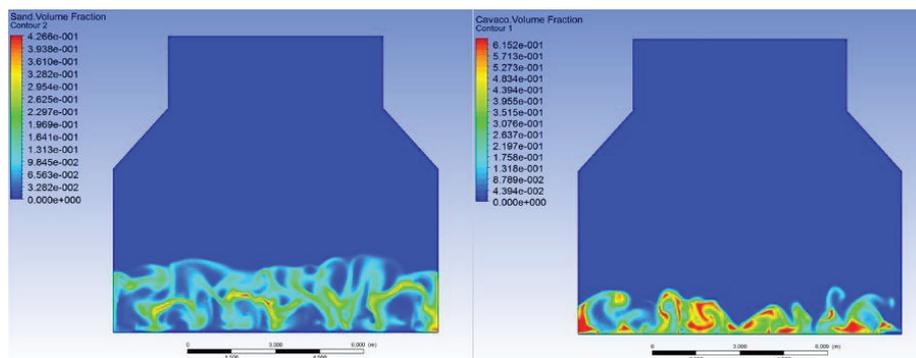
Mistura 3 (dC=0,05 m; dA=0,0004 m)	2,5	3473,35
Mistura 4 (dC=0,05 m; dA=0,00035 m)	3	3465,95
Mistura 5 (dC=0,1 m; dA=0,00035 m)	3,7	3046,91
Mistura 6 (dC=0,15 m; dA=0,00035 m)	2,7	3219,49

Observa-se que para velocidades menores a segregação entre os materiais é mais visível, essas observações foram semelhantes com as de CHIBA et al. (1979) e OLIVEIRA (2012), que a segregação é mais difícil de ser visível para materiais de massa específica semelhantes.

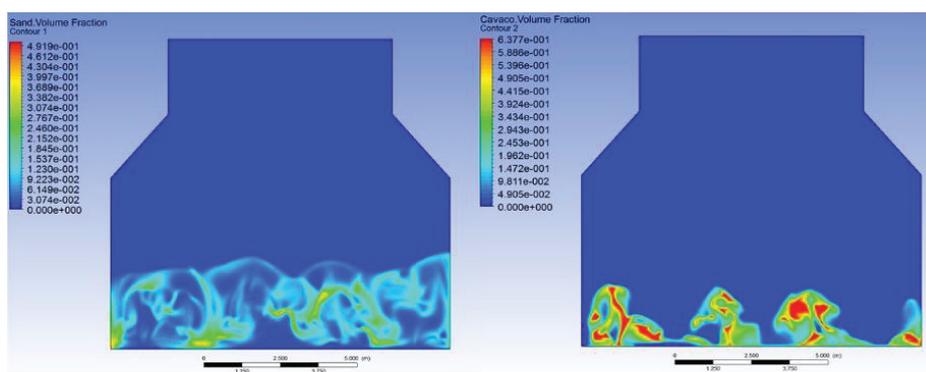
A FIGURA 17 mostra as frações volumétrica de cada fase para cada mistura.

FIGURA 17 – PERFIS MÉDIOS DE FRAÇÃO VOLUMÉTRICA DO LEITO PARA CADA FASE E PARA CADA MISTURA.

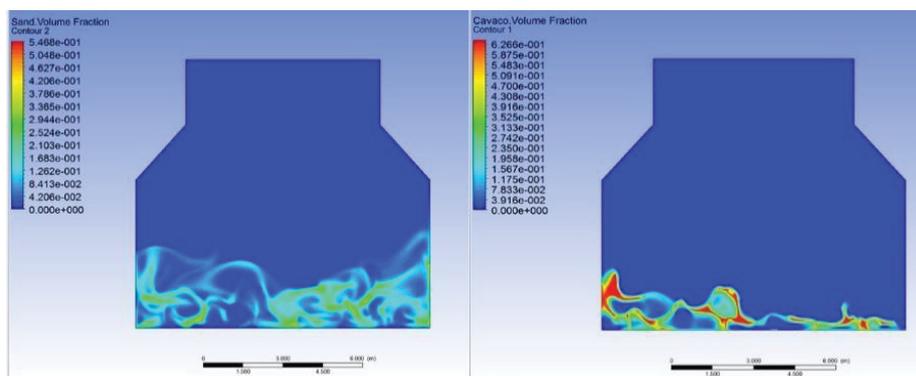




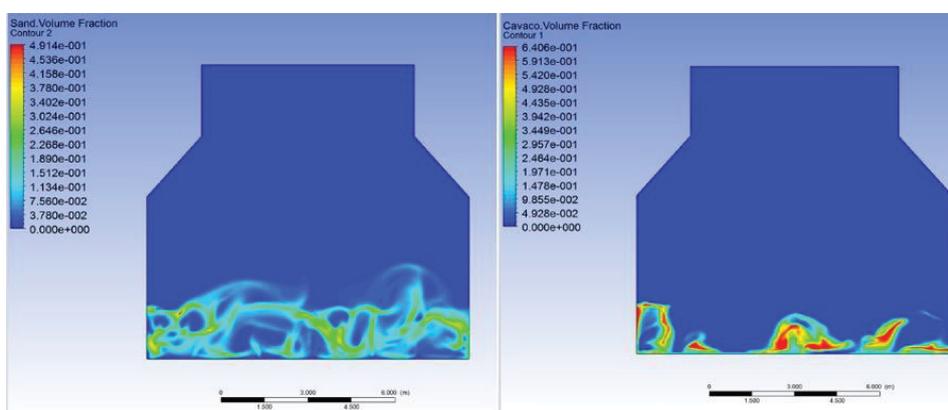
Mistura 3



Mistura 4



Mistura 5



Mistura 6

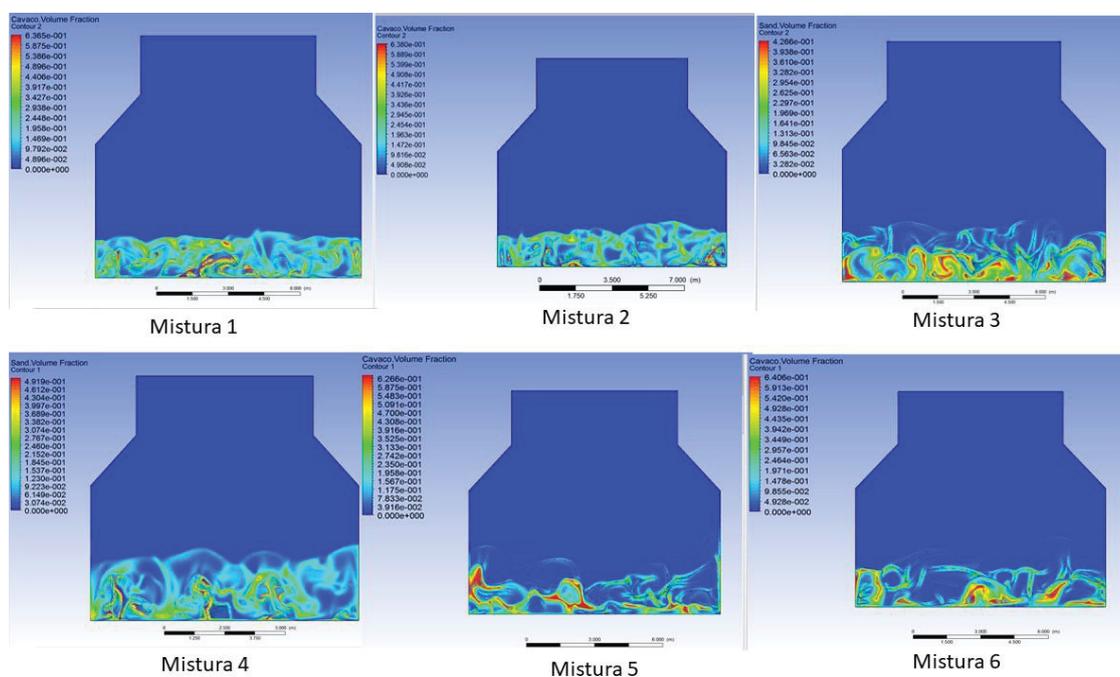
Pode-se observar que, para posições próximas à interface, a fração volumétrica de cavaco é maior que a composição inicial. Este fato indica a ocorrência do fenômeno de segregação nas misturas em velocidades baixas. HUILIN et al. (2003)

analisaram a segregação em misturas binárias de diferentes diâmetros em leito fluidizado e de jorro, respectivamente, e obtiveram resultados semelhantes. Entretanto, nos sistemas desta pesquisa, a segregação ocorre, devido a diferença de massa específica e de diâmetro entre a areia e o cavaco.

Já para as velocidades mais altas nota-se, através da análise da FIGURA 16, que a fração volumétrica de cavaco se altera ao longo da posição axial. Isso garante o fato de que a velocidade superficial do gás também influencia no fenômeno de segregação, e a medida que a velocidade aumenta a taxa de segregação diminui.

A FIGURA 18 exibe os perfis médio de fração volumétrica de cavaco e areia, para diferentes misturas numa mesma velocidade.

FIGURA 18 - PERFIS MÉDIOS DE FRAÇÃO VOLUMÉTRICA PARA DIFERENTES MISTURAS.



Pela análise das FIGURA 17 e FIGURA 18, que para uma velocidade intermediária, e em todas as misturas, o fenômeno da segregação é mais evidente, visto q eu ocorre a concentração de cavaco na base do leito e de areia na interface, devido ao diâmetro da partícula ser muito menor. Para velocidades mais altas, observa-se que as partículas estão melhor distribuídas no leito, por isso, há locais que a segregação acontece, embora não seja muito significativo.

Desta forma, para uma velocidade mais baixa, o efeito da gravidade sobre as partículas é mais significativo quando comparado a força de arraste, e as partículas maiores tendem a se depositar na base do leito, para este caso. Já para velocidades

maiores, o efeito da força de arraste minimiza o fenômeno da segregação, e as partículas se encontram mais distribuídas no leito.

Avaliar a segregação neste processo é importante, pois, no processo se faz o uso de um inerte para garantir o estabelecimento do regime de fluidização e altas taxas de transferência de calor. Assim, a segregação não é desejável, visto que quanto mais homogênea for a distribuição do inerte no leito, mais eficiente é a transferência de calor entre as partículas.

6 CONCLUSÕES

Este capítulo apresenta as conclusões obtidas com a realização desta pesquisa. A metodologia numérica se mostrou adequada para obtenção dos dados necessários à investigação da fluidodinâmica de partículas de areia e cavaco em leito fluidizado.

Com o estudo da fluidodinâmica computacional das partículas em leito fluidizado conclui-se que:

- O modelo de arraste de Syamlal-O'Brien (1989) parametrizado adotado é capaz de descrever o escoamento de partículas de cavaco e areia em leito fluidizado;
- Os perfis de fração volumétrica de sólidos bem reproduzidos através dos parâmetros e equações selecionadas na simulação;
- As misturas 1, 2, 3, 4, 5 e 6 apresentaram segregação quando submetidas às respectivas velocidades de escoamento do ar de 0,65; 0,75; 0,90; 1,0; 1,1 e 1,20m/s, enquanto que, para velocidades maiores, as partículas se encontram mais distribuídas no leito;
- O fenômeno de segregação ocorre devido às diferenças de massa específica e diâmetro de partículas. Para as velocidade mais baixas de escoamento do ar, após um período de operação, o cavaco se concentra na base do leito enquanto a areia se concentra na interface gás-sólido;
- A mistura 4 é a sugerida para a combustão de biomassa por apresentar uma razão volumétrica satisfatória entre o cavaco e a areia, entretanto, velocidades mais altas de escoamento do ar devem ser utilizadas para evitar a ocorrência de segregação.

7 RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

A seguir são apresentadas algumas sugestões para trabalhos futuros, a fim de dar continuidade a esta pesquisa e mais apoio a área de utilidades da Klabin:

- Estudar a segregação das misturas de cavaco e areia no leito fluidizado para velocidades maiores, com a injeção de calor e reação de combustão ocorrendo durante o processo.
- Analisar o comportamento do sistema frente as alterações do diâmetro das partículas de cavaco e na altura do leito;
- Propor modelos de arraste gás-sólido e sólido-sólido para representar o escoamento de cavaco e areia em leito fluidizado, e inseri-lo nas simulações através da UDF (user-defined-function).
- Simular condições operacionais com variação de temperatura;
- Realizar um estudo dos parâmetros envolvidos nas simulações, e seus efeitos sobre os resultados, como alterações no esquema de discretização das equações, no coeficiente de restituição e no passo de tempo.
- Implementar um modelo Euleriano-Granular para verificar o comportamento de cada partícula separada, visualizando o seu trajeto dentro do leito. Variação no diâmetro e velocidade ao longo do processo de combustão

REFERÊNCIAS

AHMED, T. Y. et al. Mathematical and computational approaches for design of biomass gasification for hydrogen production: A review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 16, n. 4, p. 2304–2315, 2012.

ALAUDDIN, Z. A. B. Z. et al. Gasification of lignocellulosic biomass in fluidized beds for renewable energy development: A review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, 2010.

BASU, P. **Combustion and Gasification in Fluidized Beds**. Boca Raton, FL: Taylor & Francis Group CRC Press, 2006.

BASU, P. Biomass Gasification and Pyrolysis. 2010.

BEETSTRA, R.; VAN DER HOEF, M. A.; KUIPERS, J. A. M. Numerical study of segregation using a new drag force correlation for polydisperse systems derived from lattice-Boltzmann simulations. **Chemical Engineering Science**, v. 62, n. 1–2, p. 246–255, 2007.

BÉTTEGA, R.; CORRÊA, R. G.; FREIRE, J. T. Scale-up study of spouted beds using computational fluid dynamics. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 87, n. April, p. 193–203, 2009.

BLAZEK, J. **Computacional Fluid Dynamics: Principles and Applications**. Oxford, Reino Unido. 2001.

BOTTERILL, J. S. M.; BESSANT, D. J. The Flow Properties of Fluidized Solids. v. 14, 1976.

BRIDGWATER, A. V. Renewable fuels and chemicals by thermal processing of biomass. **Chemical Engineering Journal**, v. 91, n. 2–3, p. 87–102, 2003.

CASTELLANOS, A. B. V. **ANÁLISE UNIDIMENSIONAL DETELHADA DA GASEIFICAÇÃO DE BAGAÇO DE CANA EM REATOR DE LEITO FLUIDIZADO BORBULHANTE**. [s.l.] Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2012a.

CASTELLANOS, A. B. V. **ANÁLISE UNIDIMENSIONAL DETELHADA DA GASEIFICAÇÃO DE BAGAÇO DE CANA EM REATOR DE LEITO FLUIDIZADO BORBULHANTE**. [s.l.] Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2012b.

CHIBA, T. et al. Fluidisation Particle Mixtures. v. 22, p. 255–269, 1979.

CORNELISSEN, J. T. et al. CFD modelling of a liquid – solid fluidized bed. v. 62, p. 6334–6348, 2007.

DARTEVELLE, S. **From Model Conception to Verification and Validation , A Global Approach to Multiphase Navier-Stoke Models with an Emphasis on Volcanic Explosive Phenomenology**. [s.l.] Los Alamos, Novo México, 2007.

EPE, E. DE P. E. Eficiência Energética e Geração Distribuída. **Ministerio de Minas e Energia**, p. 1–89, 2014.

FAN, L.-S.; ZHU, C. **Principles of Gas-Solid**. Ed. Cambridge University Press. Cambridge, UK. 576 p. 1998.

FERNANDES, F. A. N.; BATISTA, L. M. F. L. Chemical Properties Modeling for Polyethylene Production. **Computers and Chemical Engineering**, v. 23, p. S803–S806, 1999.

FERZIGER, J. H.; PERIC, M. **Computacional Methods for Fluid Dynamics**. Ed. Springer ed. Berlim, Alemanha. 426p. 2002.

FLETCHER, J. V; DEO, M. D.; HANSON, F. V. Re-examination of minimum fluidization velocity correlations to Group B sands and coked sands applied I-LgRemf. v. 69, n. 0, p. 147–155, 1992.

GELDART, D. Types of FluidiZation. **Powder Technology**, v. 7, p. 285–292, 1973a.

GELDART, D. Types of FluidiZation. **Powder Technology**, v. 7, p. 285–292, 1973b.

GIDASPOW, D. **Multiphase Flow and Fluidization. Continuum and Kinetic Theory Descriptions**. 1994 .

GOBIN, A. Fluid dynamic numerical simulation of a gas phase polymerization reactor. v. 1220, n. February, p. 1199–1220, 2003.

GÓMEZ-BAREA, A.; LECKNER, B. Modeling of biomass gasification in fluidized bed. **Progress in Energy and Combustion Science**, 2010.

GUENTHER, C.; SYAMLAL, M. **The effect of numerical diffusion on simulation of isolated bubbles in a gas – solid fluidized bed**. p. 142–154, 2001.

HAMZEHEI, M. **Study of Hydrodynamics and Heat Transfer in the Fluidized Bed Reactors**. Em: Belmiloudi, A. **Heat Transfer - Mathematical Modelling, Numerical Methods and Information Technology**, 1 ed., Cap. 14, Rijeka, Croácia, InTech. 2011

HATZANTONIS, H.; YIANNOULAKIS, H.; YIAGOPOULOS, A.; KIPARISSIDES, C. **Recent developments in modeling gas-phase catalyzed olefin polymerization fluidized-bed reactors : The efect of bubble size variation on the reactor 's performance**. v. 55, 2000.

HERZOG, N. et al. A comparative study of different CFD-codes for numerical simulation of gas – solid fluidized bed hydrodynamics. **Computers and Chemical Engineering**, v. 39, p. 41–46, 2012.

HIGMAN, C.; van der BURGT, M. **Gasification**. Gulf Professional Publishing/Elsevier Science. Burlington, MA. 2008.

HOFFMANN, K. A.; CHIANG, S. T. **Computacional Fluid Dynamics - Volume 1**. Wichita, KS, 2000.

HUILIN, L.; YURONG, H.; GIDASPOW, D. Hydrodynamic modelling of binary mixture in a gas bubbling fluidized bed using the kinetic theory of granular flow. **Chemical Engineering Science**, v. 58, n. 7, p. 1197–1205, 2003.

HULME, I. et al. CFD Modeling and Validation of Bubble Properties for a Bubbling Fluidized Bed. p. 4254–4266, 2005.

JAKOBSEN, H. A. **Chemical Reactor Modeling: Multiphase Reactive Flows**. Norway. 1296p. 2008.

JOHNSON, P. C.; JACKSON, R. **Frictional-collisional equations of motion particulate flows and their application to chutes**. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 210, p. 501–535, 1987.

K.-Y. CHOI, W. R.; **The dynamic behaviour of fluidized bed reactors for solid catalysed gas phase**. 1985.

KIASHEMASHAKI, A.; MOSTOUFI, N.; SOTUDEH-GHAREBAGH, R. **Two-phase modeling of a gas phase polyethylene fluidized bed reactor**. v. 61, p. 3997–4006, 2006.

KIM, Y. J.; LEE, J. M.; KIM, S. D. **Modeling of coal gasification in an internally circulating fluidized bed reactor with draught tube**. v. 79, p. 69–77, 2000.

KUNII, D.; LEVENSPIEL, O. **Fluidization Engineering**. Newton, MA: [s.n.].
LEBOWITZ, J. L. Exact solution of generalized Percus-Yevick equation for a mixture of hard spheres. **Physical Review**, v. 133, p. 895–899, 1964.

LEONARD, B. .; MOKHTARI, S. Beyond First-Order Upwind: The Ultra-Sharp Alternative for Non-Oscillatory Steady-State Simulation of Convection. v. 30, n. January, p. 729–766, 1990.

LOHA, C.; CHATTERJEE, P. K.; CHATTOPADHYAY, H. Performance of fluidized bed steam gasification of biomass – Modeling and experiment. **Energy Conversion and Management**, v. 52, n. 3, p. 1583–1588, 2011.

LUN, B. C. K. K.; SAVAGE, S. B.; JEFFREY, D. J. **Kinetic theories for granular flow : inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield**. v. 140, 1984.

LUNA, C. M. R. **Estudo numérico de modelos de arrasto e do coeficiente de restrição no escoamento gás-sólido em leito fluidizado**. Universidade Estadual Paulista, 2013.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional: Fundamentos e Coordenadas Generalizadas**. Florianópolis - SC: Laboratória de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor - SINMEC, 1995.

MCKENDRY, P. Energy production from biomass (part 2): Conversion technologies. **Bioresource Technology**, v. 83, n. 1, p. 47–54, 2002.

OEVERMANN, M.; GERBER, S.; BEHRENDT, F. Euler – Lagrange / DEM simulation of wood gasification in a bubbling fluidized bed reactor. **Particuology**, v. 7, p. 307–316, 2009.

OLIVEIRA, T. J. P. **Aspectos fluidodinâmicos de misturas binárias de resíduo de tabaco e areia em leito fluidizado**. UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA, 2012.

PANNALA, S.; SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T. J. **Computational Gas-Solids Flows and Reacting Systems: Theory, Methods and Practice**. 2011.

PATANKAR, S. V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Estados Unidos: 1980.

PEREIRA, M. et al. The effect of numerical diffusion and the influence of computational grid over gas – solid two-phase flow in a bubbling fluidized bed. **Mathematical and Computer Modelling**, v. 52, n. 9–10, p. 1390–1402, 2010.

PERLINGEIRO, C. A. G.; **Engenharia de Processos: análise, simulação, otimização e síntese de processos químicos**. São Paulo. Blucher, 2005.

PERRY, R. H.; GREEN, D. W. **Perry's Chemical Engineers' handbook**. 7th ed. ed. 1999.

PINHO, J. M. D. **Simulação Euleriana da Gaseificação de Bagaço de Cana-de-Açúcar em Reator de Leito Fluidizado Borbulhante**. Dissertação de M.Sc. COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil. 2012..

RANADE, V. V. **COMPUTATIONAL FLOW MODELING FOR CHEMICAL REACTOR ENGINEERING**. San Diego, CA. 2002.

RAVELLI, S. Æ.; PERDICHIZZI, A.; BARIGOZZI, G. **Description , applications and numerical modelling of bubbling fluidized bed combustion in waste-to-energy plants**. v. 34, p. 224–253, 2008.

REZAIYAN, J.; CHEREMISINOFF, N. O. **Gasification Technologies: A Primer for Engineers and Scientists**. Boca Raton, FL. 2005 .

RHODES, M. **Introduction to Particle Technology – Second Edition**. 2th. ed. [s.l.] John Wiley & Sons Ltd, 2008.

SADAKA, S. S.; GHALY, A. E.; SABBAH, M. A. **Two phase biomass air-steam gasification model for fluidized bed reactors: Part II - Model sensitivity.** *Biomass and Bioenergy*, v. 22, n. 6, p. 463–477, 2002.

SINGH, R. I.; BRINK, A.; HUPA, M. **CFD modeling to study fluidized bed combustion and gasification.** v. 52, 2013.

SONG, H.; OZKAN, U. S. Economic analysis of hydrogen production through a bio-ethanol steam reforming process: Sensitivity analyses and cost estimations. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 35, n. 1, p. 127–134, 2010.

SOUZA-SANTOS, M. L. **Solid Fuels Combustion and Gasification and Gasification. Modeling, Simulation and Equipment Operation.** 1 ed ed. New York: 2004.

SOUZA, M. P. DE. **Efeitos numéricos na simulação de escoamentos gás-sólido em leito fluidizado borbulhante utilizando a teoria cinética dos escoamentos granulares.** UNESP, SP, Brasil, 2009.

SYAMLAL, M. **MFIX documentation numerical technique.** Morgantown, WV. United States. 1998.

SYAMLAL, M.; ROGERS, W.; O'BRIEN, T. J. **MFIX Documentation Theory Guide.** Morgantown, West Virginia, U.S. Department of Energy. 1987 .

SYAMLAL, M.; ROGERS, W.; O'BRIEN, T. J. **MFIX Documentation Theory Guide.** Morgantown, West Virginia, U.S. Department of Energy. 1993.

TAGHIPOUR, F.; ELLIS, N.; WONG, C. **Experimental and computational study of gas – solid fluidized bed hydrodynamics.** v. 60, p. 6857–6867, 2005.

TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. **Computaciona Fluid Mechanics and Heat Transfer.** Washington, DC. 1997.

TAYLOR, P.; DARWISH, M. S.; MOUKALLED, F. H. **Numerical Heat Transfer , Part B: Fundamentals : An International Journal of Computation and Methodology NORMALIZED VARIABLE AND SPACE FORMULATION METHODOLOGY FOR HIGH-RESOLUTION SCHEMES.** n. October 2012, p. 37–41, 2007.

TURNER, J. A. **Sustainable Hydrogen Production.** *Science*, v. 305, n. 5686, p. 972–974, 2004.

TU, J.; YEOH, G. H.; LIU, C. **Computational Fluid Dynamics. A practical Approach.** 1 ed. Elsevier, 2008.

VAN der HOEF, M.A.; YE, M.; van SINT ANNALAND, M.; ANDREWS, A. T.; SUNDARESAN, S.; KUIPERS, J.A. M. **Multi-scale modeling of gas-fluidized beds.** *Advances in Chemical Engineering* 31. p. 65-149. 2006.

VAN LOO, S.; KOPPEJAN, J. **The Handbook of Biomass Combustion & Co-firing**. London, UK. 2008.

VAN WACHEM, B. G. M.; ALMSTEDT, A. E. Methods for multiphase computational fluid dynamics. **Chemical Engineering Journal**, v. 96, n. 1–3, p. 81–98, 2003.

VAN WACHEM, B.; SASIC, S. Derivation, Simulation and Validation of a Cohesive Particle Flow CFD Model. **AIChE Journal**, v. 54, n. 1, p. 9–19, 2007.

VERISSIMO, G. L. **Estudo computacional da gaseificação de bagaço de cana-de-açúcar em um reator de leito fluidizado**. 2014.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method**. 2 edition. 2007.

WACHEM, B. G. M. VAN et al. **Eulerian Simulations of Bubbling Behaviour in Gas-Solid Fluidised Beds**. v. 22, 1998.

WEN, C. Y.; YU, Y. H. **A Generalized Method for Predicting the Minimum Fluidization Velocity**. p. 610–612, 1966.

XIE, N.; BATTAGLIA, F.; PANNALA, S. **Effects of using two- versus three-dimensional computational modeling of fluidized beds Part I , hydrodynamics**. **Powder Technology**, v. 182, p. 1–13, 2008.

YANG, W.-C. **Handbook of Fluidization and Fluid-Particle systems**. Taylor & Francis Group LLC, 2003. v. 79

YU, L.; LU, J.; ZHANG, X. **Numerical simulation of the bubbling fluidized bed coal gasification by the kinetic theory of granular flow (KTGF)**. v. 86, p. 722–734, 2007.

ZIMMERMANN, S.; TAGHIPOUR, F. **CFD Modeling of the Hydrodynamics and Reaction Kinetics of FCC Fluidized-Bed Reactors**. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 44, p. 9818–9827, 2005.

ANEXO 1 – DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES GOVERNANTES

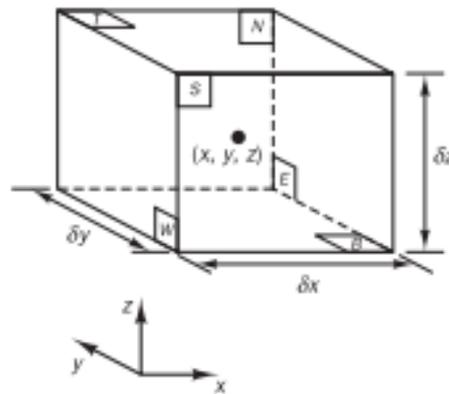
DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE TRANSPORTE

Ao invés de discretizar todas as equações já apresentadas, será considerada a equação de transporte para uma grandeza geral Y , que pode representar velocidade, temperatura, fração mássica, ou, no caso da continuidade, ser igual a um. A equação de conservação para a grandeza Y é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_m \rho_m Y) + \nabla \cdot (\mathbf{E}_m \rho_m Y) = \nabla \cdot (\Gamma_Y Y) + R_Y \quad (\text{A.1})$$

Onde o primeiro termo do lado esquerdo da equação representa o acúmulo da propriedade Y no volume de controle, e é chamado de termo transiente, enquanto que o segundo representa a convecção da propriedade Y . O primeiro termo do lado direito da equação representa a difusão da propriedade Y e o segundo termo representa um termo dessa propriedade.

FIGURA 19 - CÉLULA TRIDIMENSIONAL COM SEUS PONTOS VIZINHOS.



Fonte: (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

As seis faces são etiquetadas por N, S, E, W, T and B, que representam North, South, East, West, Top e Bottom. O elemento central está localizado na posição (x, y, z) .

Utilizando o método dos volumes finitos e integrando a (Equação A.1) em relação ao volume de controle mostrado na FIGURA 19, tem-se:

$$\int_{V.C.} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_m \rho_m Y)_P dV + \int_{V.C.} \nabla \cdot (\varepsilon_m \rho_m v_{mi} Y)_P dV = \int_{V.C.} \nabla \cdot (\Gamma_Y \nabla Y)_P dV + \int_{V.C.} R_{YP} dV \quad (A.2)$$

A integração do termo transiente fornece:

$$\int_{V.C.} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_m \rho_m Y)_P dV \approx [(\varepsilon_m \rho_m Y)_P - (\varepsilon_m \rho_m Y)_P^0] \frac{\Delta V}{\Delta t} \quad (A.3)$$

sendo o ΔV é volume da célula, Δt é o passo de tempo e o sobrescrito 0 denota um valor referente ao passo de tempo anterior.

Antes de realizar a integração do termo fonte é necessário fazer a sua linearização, como descrito em PATANKAR (1980):

$$R_{YP} = \bar{R}_{YP} - R'_{YP} Y_P \quad (A.4)$$

e a integração do termo fonte é dada por:

$$\int_{V.C.} R_{YP} dV \approx \bar{R}_{YP} \Delta V - R'_{YP} Y_P \Delta V \quad (A.5)$$

A integração do termo difusivo é dada por:

$$\begin{aligned} \int_{V.C.} \nabla \cdot (\Gamma_Y \nabla Y)_P dV &\approx \left(\Gamma_Y \frac{\partial Y}{\partial x} \right)_e A_e - \left(\Gamma_Y \frac{\partial Y}{\partial x} \right)_w A_w \\ &+ \left(\Gamma_Y \frac{\partial Y}{\partial y} \right)_n A_n - \left(\Gamma_Y \frac{\partial Y}{\partial y} \right)_s A_s + \left(\Gamma_Y \frac{\partial Y}{\partial y} \right)_t A_t - \left(\Gamma_Y \frac{\partial Y}{\partial y} \right)_b A_b \end{aligned} \quad (A.6)$$

Os fluxos difusivos são calculados através de interpolação linear (PATANKAR, 1980; VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007). Por simplicidade será apresentado a seguir apenas o termo referente à face leste da célula do volume de controle:

$$\left(\Gamma_Y \frac{\partial Y}{\partial x} \right)_e \approx (\Gamma_Y)_e \frac{(Y_E - Y_P)}{\Delta x_e} \quad (A.7)$$

Sendo que Δx_e é a distância entre os pontos P e E , mostrados na FIGURA 19.

Em PATANKAR (1980), é mostrado que os coeficientes de difusão devem ser calculados por uma média harmônica entre os valores dos coeficientes nos centros dos nós vizinhos. Novamente apresentando apenas o coeficiente da face leste, é possível escrever:

$$(\Gamma_Y)_e = \frac{(\Gamma_Y)_P(\Gamma_Y)_E}{f_e(\Gamma_Y)_P + (1 - f_e)(\Gamma_Y)_E} \quad (\text{A.8})$$

onde f_e é definido por:

$$f_e = \frac{\Delta x_E}{\Delta x_P + \Delta x_E} \quad (\text{A.9})$$

O termo Δx_P é o espaçamento da célula do volume de controle centrada no ponto P.

Por fim, a integração do termo convectivo é dada por:

$$\begin{aligned} \int_{V.C.} \nabla \cdot (\varepsilon_m \rho_m v_{mi} Y)_P dV &\approx (\varepsilon_m \rho_m Y)_e (u_m)_e A_e - (\varepsilon_m \rho_m Y)_w (u_m)_w A_w \\ &+ (\varepsilon_m \rho_m Y)_n (u_m)_n A_n - (\varepsilon_m \rho_m Y)_s (u_m)_s A_s + (\varepsilon_m \rho_m Y)_t (u_m)_t A_t \\ &- (\varepsilon_m \rho_m Y)_b (u_m)_b A_b \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

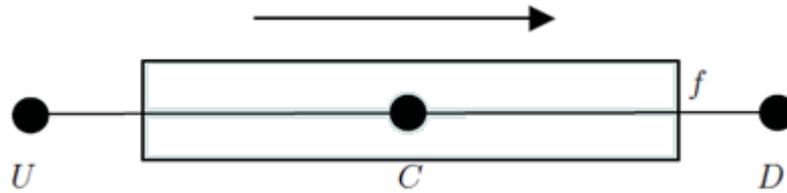
Notando que os valores de $\varepsilon_m \rho_m Y$ nas faces não são conhecidos, torna-se importante o desenvolvimento de uma expressão que consiga calcular estes valores em função dos pontos discretos conhecidos. A escrita correta destes termos é extremamente importante para qualidade dos resultados que serão obtidos, para casos onde os efeitos convectivos são dominantes (SOUZA, 2009).

A forma mais comumente conhecida para obter os termos convectivos consiste na utilização do método *Upwind* de Primeira Ordem (FOU) (DARTEVELLE, 2007). O método FOU possui as vantagens dele ser bastante estável e de ser fácil implementação, reduzindo o tempo computacional (PEREIRA et al., 2010). Mas em desvantagens, por apresentar uma elevada difusão numérica, o que reduz a acurácia dos resultados (HOFFMANN et al., 2000; PEREIRA et al., 2010; VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

De acordo com MALALASEKERA (2007), uma alternativa para melhorar a acurácia dos resultados consiste na utilização de métodos de ordem superior para calcular os termos convectivos das equações de transporte. Entretanto, para escoamentos que possuem número de Peclet local muito elevado, aliados a gradientes muito intensos, os métodos de ordem superior tendem a oscilar, gerando resultados não físicos (FERZIGER, 2002; DARWISH e MOUKALLED, 2007). Para limitar os resultados obtidos pelos métodos de ordem superior, LEONARD e

MOKHTARI (1990) desenvolveram a ideia de um limitador universal como função de um valor normalizado de Y .

FIGURA 20 - LOCALIZAÇÃO DOS NÓS BASEADOS NA DIREÇÃO DO ESCOAMENTO



Fonte: (SOUZA, 2009).

Usando a notação de SYAMLAL (1998), representada na **Erro! Fonte de referência não encontrada.**, o valor normalizado da grandeza Y , pode ser escrito como:

$$\tilde{Y} = \frac{Y - Y_U}{Y_D + Y_U} \quad (\text{A.11})$$

SYAMLAL (1998) lista quatro restrições para que o limitador universal na face f satisfaça as condições necessárias para que o método seja limitado:

O valor Y_f deve estar entre Y_C e Y_D , logo:

$$\tilde{Y}_c \leq \tilde{Y}_f \leq 1 \quad \text{para} \quad 0 \leq \tilde{Y}_c \leq 1 \quad (\text{A.12})$$

Esta condição inclui o caso especial em que $Y_C = Y_D$, no qual $Y_f = Y_C = Y_D$.

Portanto, tem-se:

$$\tilde{Y}_f = 1 \quad \text{para} \quad \tilde{Y}_c = 1 \quad (\text{A.13})$$

Se $Y_C = Y_U$, tem-se que $Y_f = Y_C = Y_U$. Então:

$$\tilde{Y}_f = 0 \quad \text{para} \quad \tilde{Y}_c = 0 \quad (\text{A.14})$$

Para evitar a não unicidade quando $\tilde{Y}_c \rightarrow 0$ a fronteira OB tem uma pequena inclinação positiva e finita. Isto introduz uma restrição adicional:

$$\tilde{Y}_f = \frac{\tilde{Y}_c}{c} \quad \text{para} \quad 0 \leq \tilde{Y}_c \leq c \quad (\text{A.15})$$

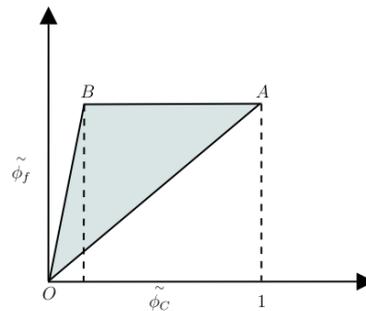
Em que c é uma constante. Para esquema com variação temporal c é a direção normal do número de Courant, definido como:

$$\sigma \triangleq \frac{u\Delta t}{\Delta x} \quad (\text{A.16})$$

Sendo que u é a componente da velocidade na direção x e Δx é o passo espacial na direção x .

Para comportamentos não monótonos ($\tilde{Y}_c \leq 0$ ou $\tilde{Y}_c \leq 1$), o limitador não impõe qualquer restrição, além daquela na qual as interpolações devem ser contínuas com respeito a \tilde{Y}_c , ou seja, \tilde{Y}_f é a curva que deve passar pelos pontos (0,0) e (1,1) com $\partial\tilde{Y}_f/\partial\tilde{Y}_c > 0$ e finita.

FIGURA 21 - RESTRIÇÕES DO LIMITADOR UNIVERSAL NO DIAGRAMA DE VARIÁVEL NORMALIZADA.



Fonte: (SOUZA, 2009).

As restrições impostas podem ser observadas graficamente através do diagrama de variável normalizada (NVD), mostrado na FIGURA 21. Qualquer método de ordem superior deve produzir um valor de \tilde{Y}_f que passe pela região sombreada da FIGURA 21 para evitar oscilações (GUENTHER e SYAMLAL, 2001). Dessa forma, VERSTEEG e MALALASEKERA (2007) afirmam que uma condição necessária e suficiente para que um método seja de segunda ordem é que a função representativa de \tilde{Y}_f passe pelo ponto (0.5,0.75).

Limitação dos métodos de discretização de segunda ordem

Existem duas formas de limitar os métodos de segunda ordem, evitando oscilações não físicas. A primeira delas envolve a utilização de fator para realizar a limitação do método de ordem superior. A segunda utiliza uma combinação entre os métodos de ordem superior e de primeira ordem, de maneira a aliar a estabilidade e a limitação dos métodos de primeira ordem com a acurácia dos métodos de ordem superior. Ambas as maneiras de limitar os métodos de discretização de ordem superior são detalhados a seguir.

Fator de limitação Downwind

Uma forma de limitar os métodos de ordem superior de maneira implícita é através da utilização do fator de *Downwind*, ou simplesmente DWF (SOUZA, 2009). A grande vantagem da utilização do fator DWF consiste na manutenção do sistema septadiagonal obtido da discretização das equações (SYAMLAL, 1998). GUENTHER e SYAMLAL (2001) definem o fator DWF como:

$$DWF \triangleq \frac{Y_f - Y_C}{Y_D - Y_C} = \frac{\tilde{Y}_f - \tilde{Y}_C}{1 - \tilde{Y}_C} \quad (\text{A.17})$$

Dessa forma, as restrições para o limitador universal podem ser escritas como:

$$0 \leq DWF \leq 1 \quad \text{para} \quad 0 \leq \tilde{Y}_C \leq 1 \quad (\text{A.18})$$

Uma vez determinado o valor de DWF, o valor de Y_f é obtido reescrevendo a Equação (A.17) como:

$$Y_f = DWF Y_D + (1 - DWF) Y_C \quad (\text{A.19})$$

Com o objetivo de facilitar a inserção deste fator no equacionamento do problema, é definido um fator de convecção ponderado, ξ a partir do fator DWF, o qual pode ser calculado uma vez sem necessidade de verificação adicional na direção do fluxo (SOUZA, 2009). Este fator é normalmente definido como:

$$\xi \triangleq \begin{cases} DWF, & u \geq 0 \\ 1 - DWF, & u < 0 \end{cases} \quad (\text{A.20})$$

Então o valor de Y na face leste passa a ser dado por:

$$Y_e = \xi_e Y_E + \bar{\xi}_e Y_P \quad (\text{A.21})$$

onde $\bar{\xi}_f = 1 - \xi_f$ e $f = e, w, n, s, t$, ou b . Para as demais faces as equações obtidas são semelhantes a Equação (A.21).

O termo convectivo passa então a ser escrito como:

$$\begin{aligned} \int_{V.C.} \nabla \cdot (\varepsilon_m \rho_m v_{mi} Y) dV &\approx [\xi_e (\varepsilon_m \rho_m Y)_E + \bar{\xi}_e (\varepsilon_m \rho_m Y)_P] (u_m)_e A_e \\ &- [\xi_w (\varepsilon_m \rho_m Y)_P + \bar{\xi}_w (\varepsilon_m \rho_m Y)_W] (u_m)_w A_w \\ &+ [\xi_n (\varepsilon_m \rho_m Y)_N + \bar{\xi}_n (\varepsilon_m \rho_m Y)_P] (v_m)_n A_n \\ &- [\xi_s (\varepsilon_m \rho_m Y)_P + \bar{\xi}_s (\varepsilon_m \rho_m Y)_S] (v_m)_s A_s \\ &+ [\xi_t (\varepsilon_m \rho_m Y)_T + \bar{\xi}_t (\varepsilon_m \rho_m Y)_P] (w_m)_t A_t \\ &- [\xi_b (\varepsilon_m \rho_m Y)_P + \bar{\xi}_b (\varepsilon_m \rho_m Y)_B] (w_m)_b A_b \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Substituindo as Equações (A.3), (A.5-7) e (A.22) na Equação (A.2), obtém-se uma equação da forma:

$$a_P Y_P = \sum_{nb} a_{nb} Y_{nb} + S_P \quad (\text{A.23})$$

Onde o termo S_P retém a contribuição dos termos transientes e da integral do termo fonte linearizado.

SYAMLAL (1998) recomenda que, antes de utilizar a Equação (A.23) para calcular o valor de Y , sejam realizadas algumas manipulações matemáticas envolvendo a equação da continuidade. O objetivo destas manipulações é evitar grandes variações nos valores de Y_f , potencialmente induzidos por pequenos

desbalanceamentos de massa, os quais podem ocorrer durante o processo iterativo (DARTEVELLE, 2007).

Entretanto, antes de realizar este procedimento algumas alterações no termo fonte da equação da continuidade são importantes. De acordo com SYAMLAL (1998) a inclusão do termo fonte da equação da continuidade ($\sum_l R_{lm}$) dificulta a convergência do código, elevando o tempo de computação do problema. Além disso, sua inclusão no coeficiente central desestabiliza as iterações quando $\sum_l R_{lm} < 0$. Logo, é necessário reescrever este termo de maneira que sua contribuição para o coeficiente a_p não seja negativa. Utilizando a definição da função colchete, tem-se que:

$$\llbracket R \rrbracket = \begin{cases} 0, & R \leq 0 \\ R, & R > 0 \end{cases} \quad (\text{A.24})$$

Da equação (A.24) segue que:

$$R = \llbracket R \rrbracket - \llbracket -R \rrbracket \quad (\text{A.25})$$

Logo, o termo de transferência de massa na interface pode ser escrito como:

$$\Upsilon_P \sum_l R_{lm} = \Upsilon_P \left[\sum_l R_{lm} \right] - \Upsilon_P \left[- \sum_l R_{lm} \right] \quad (\text{A.26})$$

Agora é possível utilizar o procedimento descrito por SYAMLAL (1998) e DARTEVELLE (2007), o qual é detalhado a seguir:

- (i) Obter a forma discretizada da equação da continuidade, a qual é obtida da mesma forma que a derivação da equação (A.23),
- (ii) Multiplicar a equação da continuidade por Υ_P ,
- (iii) Subtrair a equação (A.23) da equação obtida no passo 2.

Após a aplicação do passo (iii) do procedimento acima, é obtida uma equação de mesma forma que a eq. (A.23). No entanto, os coeficientes desta nova equação são diferentes dos coeficientes da eq. (A.23). Estes coeficientes são mostrados a seguir:

$$a_E = D_e - \xi_e (\varepsilon_m \rho_m)_E (u_m)_e A_e \quad (\text{A.27a})$$

$$a_W = D_w - \xi_w (\varepsilon_m \rho_m)_W (u_m)_w A_w \quad (\text{A.27b})$$

$$a_N = D_n - \xi_n(\varepsilon_m \rho_m)_N (u_m)_n A_n \quad (\text{A.27c})$$

$$a_S = D_s - \xi_s(\varepsilon_m \rho_m)_S (u_m)_s A_s \quad (\text{A.27d})$$

$$a_T = D_t - \xi_t(\varepsilon_m \rho_m)_T (u_m)_t A_t \quad (\text{A.27e})$$

$$a_B = D_b - \xi_b(\varepsilon_m \rho_m)_B (u_m)_b A_b \quad (\text{A.27f})$$

$$a_P = \sum_{nb} a_{nb} + a_P^0 + R'_Y \Delta V + \left[\sum_l R_{lm} \right] \Delta V \quad (\text{A.27g})$$

$$S_P = a_P^0 \Upsilon_P^0 + R'_Y \Delta V + \Upsilon_P \left[- \sum_l R_{lm} \right] \Delta V \quad (\text{A.27h})$$

$$a_P^0 = \frac{(\varepsilon_m \rho_m)_P^0}{\Delta t} \Delta V \quad (\text{A.27i})$$

$$D_f = (\Gamma_Y)_f \frac{A_f}{\Delta x_f} \quad (\text{A.27j})$$

onde $f = e, w, n, s, t$ ou b .

Método da correção deferida

O método DWF possui uma ênfase maior nos valores das variáveis à jusante do que nos valores à montante da célula da malha, o que, casos, pode dificultar a convergência da solução (DARTEVELLE, 2007). Outra forma de limitar os métodos de ordem superior é através da utilização da correção deferida, que utiliza as propriedades de estabilidade de um método de primeira ordem, normalmente o método FOU, para obter um sistema algébrico idêntico ao dado pela eq. (A.23) (GUENTHER e SYAMLAL, 2001). Após a solução deste sistema, alguns termos fontes são adicionados para capturar a precisão dos métodos de ordem superior, ou seja, a eq. (A.23) é reescrita como:

$$a_P \Upsilon_P = \sum_{nb} a_{nb} \Upsilon_{nb} + S_P + S_{DC} \quad (\text{A.28})$$

A equação (A.28) é obtida através da soma e subtração dos termos de discretização com o método FOU com os termos de convecção discretização com um método de ordem superior. Dessa maneira, a diferença entre os termos obtidos pelo método FOU, com os termos obtidos pelo método de ordem superior são combinados no último termo da eq. (A.28). Por outro lado, os termos discretizados com o método FOU aparecem implicitamente nos coeficientes a_p e a_{nb} (GUENTHER e SYAMLAL, 2001). Logo o termo fonte adicional, S_{DC} , pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
S_{DC} = & (\varepsilon_m \rho_m)_w (\Upsilon_w^{FOU} - \Upsilon_w^{HO}) (u_m)_w A_w \\
& - (\varepsilon_m \rho_m)_e (\Upsilon_e^{FOU} - \Upsilon_e^{HO}) (u_m)_e A_e \\
& - (\varepsilon_m \rho_m)_s (\Upsilon_s^{FOU} - \Upsilon_s^{HO}) (u_m)_s A_s - (\varepsilon_m \rho_m)_n (\Upsilon_n^{FOU} - \Upsilon_n^{HO}) (u_m)_n A_n \\
& - (\varepsilon_m \rho_m)_b (\Upsilon_b^{FOU} - \Upsilon_b^{HO}) (u_m)_b A_b - (\varepsilon_m \rho_m)_t (\Upsilon_t^{FOU} - \Upsilon_t^{HO}) (u_m)_t A_t
\end{aligned} \tag{A.29}$$

Onde os sobrescritos *FOU* e *HO* denotam, respectivamente, os termos derivados com o método FOU e com um método de ordem superior.

É importante notar que, quando houver convergência, os termos derivados com o método FOU, presentes nos coeficientes a_p e a_{nb} , vão se cancelar com os termos presentes em S_{DC} . Portanto, quando a convergência for atingida, não existira nenhuma contribuição líquida dos termos Υ_f^{FOU} na equação (A.28), em que $f = e, w, n, s, t$ ou b . Logo, a solução convergida possuirá a precisão do método de ordem superior utilizado.

Considerando a notação da **Erro! Fonte de referência não encontrada.**, os termos Υ_f^{FOU} e Υ_f^{HO} podem ser escritos respectivamente, como:

$$\Upsilon_f^{FOU} = \begin{cases} \Upsilon_C, & \text{se } u_m \geq 0 \\ \Upsilon_D, & \text{se } u_m < 0 \end{cases} \tag{A.30a}$$

$$\Upsilon_f^{HO} = \xi_f \Upsilon_D + \ddot{\xi}_f \Upsilon_C \tag{A.30b}$$

em que o fator de ponderação ξ_f é calculado pela equação (A.20) e o fator de ponderação $\ddot{\xi}_f$ é dado por $\ddot{\xi}_f = 1 - \xi_f$. Observa-se ainda que, adotado a

notação utilizada na equação (A.29) e ilustrada na FIGURA 19, $f = e, w, n, s, t$ ou b , com D e C iguais a P, E, W, N, S, T ou B.

PARTICULARIDADE DAS EQUAÇÕES DE QUANTIDADE DE MOVIMENTO

As equações de conservação da quantidade de movimento possuem algumas diferenças em relação as demais equações de conservação. Os termos do tensor de tensões, presente nas equações de conservação de quantidade de movimento, corresponde, basicamente, ao termo difusivo da equação de conservação para a grandeza geral Υ . Entretanto, como a equação de quantidade de movimento é uma equação vetorial, este termo possui complicações adicionais em relação ao termo difusivo da equação (A.1). Além disso, as equações também contêm uma contribuição da pressão, a qual não possui correspondência na equação (A.1), que é tratada como uma força de superfície, de maneira que ela pode ser integrada da mesma maneira que a utilizada para a equação de conservação geral.

A discretização das equações de quantidade de movimento utiliza uma malha defasada em relação à malha das grandezas escalares, como a pressão. A principal vantagem de se utilizar uma malha defasada é a obtenção de um forte acoplamento entre as velocidades e a pressão, o que ajuda a evitar problemas de convergência e oscilações nos campos de pressão e velocidade (PATANKAR, 1980).

A equação de conservação de quantidade de movimento na direção x , para uma fase m , pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_m \rho_m u_m) + \frac{\partial}{\partial x}(\varepsilon_m \rho_m u_m u_m) = -\varepsilon_m \frac{\partial P_m}{\partial x} \\ + \frac{\partial \tau_m}{\partial x} + \varepsilon_m \rho_m g_x + I_{gs}^x + \sum_{m,x} S_{u_m} \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Sendo que I_{gs}^x é o termo que contabiliza as interações com as demais fases k e $\sum_{m,x} S_{u_m}$ é um termo fonte que contabiliza termos adicionais tais como os termos decorrentes da utilização de um sistema de coordenadas cilíndricas para a

da velocidade nos pontos vizinhos (SYAMLAL, 1998). Logo, considerando a equação (A.31) obtém-se:

$$(u_m)_E = f_E(u_m)_p + (1 - f_E)(u_m)_e \quad (\text{A.32a})$$

$$(v_m)_N = f_p(v_m)_{NW} + (1 - f_p)(\mu_m)_{NE} \quad (\text{A.32b})$$

O valor da grandeza $\varepsilon_m \rho_m$ no ponto central, e a viscosidade, μ_m , no ponto N, são calculados de maneira similar, respectivamente, como:

$$(\varepsilon_m \rho_m)_p = f_p(\varepsilon_m \rho_m)_p + (1 - f_p)(\varepsilon_m \rho_m)_E \quad (\text{A.33a})$$

$$(\mu_m)_N = f_p(\mu_m)_{NW} + (1 - f_p)(\varepsilon_m \rho_m)_E \quad (\text{A.33b})$$

onde os termos f_E e f_p são calculados por:

$$f_E = \frac{\Delta x_e}{\Delta x_p + \Delta x_e} \quad (\text{A.34a})$$

$$f_p = \frac{\Delta x_E}{\Delta x_W + \Delta x_E} \quad (\text{A.34b})$$

A integração do termo referente a pressão na equação (A.31) é dada por:

$$\int_{V.C.} \left(\varepsilon_m \frac{\partial P_m}{\partial x} \right)_p dV = (\varepsilon_m)_p [(P_g)_E - (P_g)_W] A_p \quad (\text{A.35})$$

em que $A_p = \Delta V / \Delta x_p$.

A integração do termo referente a tensão viscosa é dada por:

$$\begin{aligned} \int_{V.C.} \left(\frac{\partial \tau_m}{\partial x} \right)_p dV &= \int_{V.C.} \left(\frac{\partial 2\mu_m D_{m,xx}}{\partial x} + \frac{\partial 2\mu_m D_{m,xy}}{\partial x} + \frac{\partial 2\mu_m D_{m,xz}}{\partial x} \right)_p dV \\ &+ \int_{V.C.} \left(\frac{\partial v_m \text{tr}(\bar{D}_m)}{\partial x} \right)_p dV \end{aligned}$$

e os termos v_m e \bar{D}_m são, respectivamente, a viscosidade volumétrica e o tensor de cisalhamento da fase m .

O termo referente as interações entre as fases pode ser escrito como (DARTEVELLE, 2007):

$$I_{gs}^x = \beta_{gs}(u_{sm} - u_g) \quad (\text{A.37})$$

em que subscrito sm denota as fases sólidas, e o termo β_{gs} é um coeficiente que representa todos os termos de interação entre as fases. A integração da equação (A.37) fornece:

$$\int_{V.C.} (I_{gs}^x)_p dV = \beta_{gs}(u_g - u_s)_p \quad (\text{A.38})$$

A equação discretizada da equação de conservação de quantidade de movimento da fase m na direção x pode ser então escrita por:

$$a_p(u_m)_p = \sum_{nb} a_{nb}(u_m)_{nb} + b_p + [\beta_{gs}(u_m - u_k)_p] \Delta V \quad (\text{A.39})$$

e os coeficientes da equação (A.39) são dados por:

$$a_e = D_E - \xi_E(\varepsilon_m \rho_m)_e (u_m)_E A_E \quad (\text{A.40a})$$

$$a_w = D_W - \bar{\xi}_W(\varepsilon_m \rho_m)_w (u_m)_W A_W \quad (\text{A.40b})$$

$$a_n = D_N - \xi_N(\varepsilon_m \rho_m)_n (u_m)_N A_N \quad (\text{A.40c})$$

$$a_s = D_S - \bar{\xi}_S(\varepsilon_m \rho_m)_s (u_m)_S A_S \quad (\text{A.40e})$$

$$a_t = D_T - \xi_T(\varepsilon_m \rho_m)_t (u_m)_T A_T \quad (\text{A.40f})$$

$$a_b = D_B - \bar{\xi}_B(\varepsilon_m \rho_m)_b (u_m)_B A_B$$

$$a_p = \sum_{nb} a_{nb} + a_p^0 + R'_{u_m} \Delta V + \left[\sum_l R_{lm} \right] \Delta V + S' \quad (\text{A.40g})$$

$$\begin{aligned} b_p = & a_p^0 u_m^0 + \bar{R}_{u_m} \Delta V + u_m \left[- \sum_l R_{lm} \right] \Delta V \quad (\text{A.40h}) \\ & + (\varepsilon_m \rho_m)_e g_x \Delta V \\ & + \left\{ [\lambda_m \text{tr}(\bar{D}_m)]_e - [\lambda_m \text{tr}(\bar{D}_m)]_w A_p + \bar{S} \right. \\ & \left. - (\varepsilon_m)_p [(P_m)_E - (P_m)_W] A_p \right\} \end{aligned}$$

$$a_p^0 = \frac{(\varepsilon_m \rho_m)_p^0}{\Delta t} \Delta V \quad (\text{A.40i})$$

$$D_F = (u_m)_F \frac{A_F}{\Delta x_F} \quad (\text{A.40j})$$

E $F = E, W, N, S, B$ ou T , g_x corresponde à aceleração gravitacional na direção x . Os termos S' e \bar{S} podem conter as contribuições que aparecem devido a utilização de um sistema de coordenadas cilíndricas e das tensões cisalhantes. Observa-se que para a fase gás $\varepsilon_{sm} = 0$, logo o ultimo termo da equação (A.39) só será diferente de zero para as fases sólidas.

DERIVAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE CORREÇÃO DE PRESSÃO E DE PRAÇÃO DE VAZIO

As equações discretizadas de quantidade de movimento para as fases gás e sólidas são dadas, respectivamente por:

$$(a_g)_p (u_g)_p = \sum_{nb} (a_g)_{nb} (u_g)_{nb} + b_g + [\beta_{gs} (u_s - u_g)_p] \Delta V \quad (\text{A.41a})$$

$$(a_s)_p (u_s)_p = \sum_{nb} (a_s)_{nb} (u_s)_{nb} + b_s + [\beta_{gs} (u_g - u_s)_p] \Delta V \quad (\text{A.41b})$$

Considerando primeiramente a fase gás deve-se notar que, inicialmente, as equações discretizadas de quantidade de movimento são calculadas utilizando o campo de pressões, P_g^* , e de fração de vazio, ε_g^* , do passo anterior. Desta forma, campos de velocidade estimados para as fases gás e sólidas são obtidos por:

$$\begin{aligned} & \left[(a_g)_P + \frac{(a_s)_P \Delta V \beta_{gs}}{(a_s)_P + \Delta V \beta_{gs}} \right] (u_g^*)_P & (A.42a) \\ & = \sum_{nb} (a_g)_{nb} (u_g^*)_{nb} + b_g \\ & + \frac{\Delta V \beta_{gs}}{(a_s)_P + \Delta V \beta_{gs}} \left[\sum_{nb} (a_s)_{nb} (u_s^*)_{nb} + b_s \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left[(a_s)_P + \frac{(a_g)_P \Delta V \beta_{gs}}{(a_g)_P + \Delta V \beta_{gs}} \right] (u_s^*)_P & (A.42b) \\ & = \sum_{nb} (a_s)_{nb} (u_s^*)_{nb} + b_s \\ & + \frac{\Delta V \beta_{gs}}{(a_g)_P + \Delta V \beta_{gs}} \left[\sum_{nb} (a_g)_{nb} (u_g^*)_{nb} + b_g \right] \end{aligned}$$

Os valores calculados (u_m^*) diferem dos valores reais por uma correção, logo valores reais são calculados por (HAMZEHEI, M., 2011).

$$(u_m)_e = (u_m^*)_e + (u'_m)_e \quad (A.43a)$$

$$(P_m)_E = (P_m^*)_E + (P'_m)_E \quad (A.43b)$$

É possível obter equações aproximadas para a correção do campo de velocidade das fases, substituindo as equações (A.42a) e (A.42b) nas equações (A.43a) e (A.43b), e desprezando as contribuições dos termos convectivos, como a pressão da fase sólida, obtém-se:

$$\begin{aligned}
& \left[(a_g)_P + \frac{(a_s)_P \Delta V \beta_{gs}}{(a_s)_P + \Delta V \beta_{gs}} \right] (u'_g)_P & (A.44a) \\
& = \sum_{nb} (a_g)_{nb} (u'_g)_{nb} + b_g \\
& + \frac{\Delta V \beta_{gs}}{(a_s)_P + \Delta V \beta_{gs}} \left[\sum_{nb} (a_s)_{nb} (u'_s)_{nb} + b_s \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left[(a_s)_P + \frac{(a_g)_P \Delta V \beta_{gs}}{(a_g)_P + \Delta V \beta_{gs}} \right] (u'_s)_P & (A.44b) \\
& = \sum_{nb} (a_s)_{nb} (u'_s)_{nb} + b_s \\
& + \frac{\Delta V \beta_{gs}}{(a_g)_P + \Delta V \beta_{gs}} \left[\sum_{nb} (a_g)_{nb} (u'_g)_{nb} + b_g \right]
\end{aligned}$$

Subst. as equações acima, e equações similares para as demais componentes da velocidade na equação de continuidade da fase gás, é obtida uma equação para a correção de pressão expressa como:

$$a_P(P'_g)_P = \sum_{nb} a_{nb}(P'_g)_{nb} + b \quad (A.45)$$

e os coeficientes da equação são dados por:

$$a_E = \left\{ (\varepsilon_g \rho_g)_E \xi_e + (\varepsilon_g \rho_g)_P \bar{\xi}_e \right\} d_{ge} A_e \quad (A.46a)$$

$$a_W = \left\{ (\varepsilon_g \rho_g)_P \xi_w + (\varepsilon_g \rho_g)_W \bar{\xi}_w \right\} d_{gw} A_w \quad (A.46b)$$

$$a_N = \left\{ (\varepsilon_g \rho_g)_N \xi_n + (\varepsilon_g \rho_g)_P \bar{\xi}_n \right\} d_{gn} A_n \quad (A.46c)$$

$$a_S = \left\{ (\varepsilon_g \rho_g)_P \xi_s + (\varepsilon_g \rho_g)_S \bar{\xi}_s \right\} d_{gs} A_s \quad (A.46d)$$

$$a_T = \left\{ (\varepsilon_g \rho_g)_T \xi_t + (\varepsilon_g \rho_g)_P \bar{\xi}_t \right\} d_{gt} A_t \quad (\text{A.46e})$$

$$a_B = \left\{ (\varepsilon_g \rho_g)_P \xi_b + (\varepsilon_g \rho_g)_B \bar{\xi}_b \right\} d_{gb} A_b \quad (\text{A.46f})$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B \quad (\text{A.46g})$$

$$b = \left\{ \left[\frac{(\varepsilon_g \rho_g)_P - (\varepsilon_g \rho_g)_P^0}{\Delta t} \right] \Delta V + [(\varepsilon_g \rho_g)_E \xi_e + (\varepsilon_g \rho_g)_P \bar{\xi}_e] u_{ge}^* A_e \right. \\ \left. + [(\varepsilon_g \rho_g)_P \xi_w + (\varepsilon_g \rho_g)_W \bar{\xi}_w] u_{gw}^* A_w \right. \\ \left. + [(\varepsilon_g \rho_g)_N \xi_n + (\varepsilon_g \rho_g)_P \bar{\xi}_n] u_{gn}^* A_n \right. \\ \left. + [(\varepsilon_g \rho_g)_P \xi_s + (\varepsilon_g \rho_g)_S \bar{\xi}_s] \right\} \quad (\text{A.46h})$$

Em relação a correção de fração volumétrica, é necessário a utilização de uma equação de estado para a pressão da fase sólida, de forma:

$$P_m = P_m(\varepsilon_m) \quad (\text{A.47})$$

Esta metodologia considera a compressibilidade da fase sólida, definida pela equação (A.50), diretamente na obtenção do campo de fração volumétrica, o que ocasiona uma melhora na taxa de convergência do procedimento.

$$K_m \triangleq \frac{\partial P_m}{\partial \varepsilon_m} \quad (\text{A.48})$$

A velocidade real da fase sólida também é calculada pela equação (A.43). Já a correção de velocidade para a fase sólida, u'_s , relacionada com a correção do campo de pressão por:

$$(u'_s)_e = e_e [(P'_s)_P + (P'_s)_E] \quad (\text{A.49})$$

Sendo que e_e é uma constante de proporcionalidade.

A fração volumétrica também pode se expressa em termos de um valor estimado e de um valor de correção, ou seja, é possível escrever que:

$$(\varepsilon_m)_e = (\varepsilon_m^*)_e + (\varepsilon'_m)_e \quad (\text{A.50})$$

Integrando a equação da continuidade para a fase sólida, utilizando as equações (A.43), (A.49) e (A.50), é possível obter uma equação para a correção de fração volumétrica de forma:

$$a_P(\varepsilon'_{ms})_P = \sum_{nb} a_{nb}(\varepsilon)_{nb} + b \quad (\text{A.51})$$

E os coeficientes da equação são dados por:

$$a_E = [(\varepsilon_{ms}\rho_{ms})_e^* e_e (K_m)_E - \xi_e (\rho_{ms})_E (u_{ms}^*)_e] A_e \quad (\text{A.51a})$$

$$a_W = [(\varepsilon_{ms}\rho_{ms})_w^* e_w (K_m)_W + \bar{\xi}_w (\rho_{ms})_W (u_{ms}^*)_w] A_w \quad (\text{A.51b})$$

$$a_N = [(\varepsilon_{ms}\rho_{ms})_n^* e_n (K_m)_N - \xi_n (\rho_{ms})_N (u_{ms}^*)_n] A_n \quad (\text{A.51c})$$

$$a_S = [(\varepsilon_{ms}\rho_{ms})_s^* e_s (K_m)_S + \bar{\xi}_s (\rho_{ms})_S (u_{ms}^*)_s] A_s \quad (\text{A.51d})$$

$$a_T = [(\varepsilon_{ms}\rho_{ms})_t^* e_t (K_m)_T - \xi_t (\rho_{ms})_T (u_{ms}^*)_t] A_t \quad (\text{A.51e})$$

$$a_B = [(\varepsilon_{ms}\rho_{ms})_b^* e_b (K_m)_B + \bar{\xi}_b (\rho_{ms})_B (u_{ms}^*)_b] A_b \quad (\text{A.51f})$$

$$a_P = (\rho_m)_P [\bar{\xi}_e (u_{ms}^*)_e A_e - \xi_w (u_{ms}^*)_w A_w + \bar{\xi}_n (u_{ms}^*)_n A_n - \xi_s (u_{ms}^*)_s A_s + \bar{\xi}_t (u_{ms}^*)_t A_t - \xi_b (u_{ms}^*)_b A_b] \quad (\text{A.51g})$$

$$b = \left\{ [(\varepsilon_g \rho_g)_P - (\varepsilon_g \rho_g)_P^0] \Delta V + [(\varepsilon_g \rho_g)_E \xi_e + (\varepsilon_g \rho_g)_P \bar{\xi}_e] u_{ge}^* A_e + [(\varepsilon_g \rho_g)_P \xi_w + (\varepsilon_g \rho_g)_W \bar{\xi}_w] u_{gw}^* A_w + [(\varepsilon_g \rho_g)_N \xi_n + (\varepsilon_g \rho_g)_P \bar{\xi}_n] u_{gn}^* A_n + [(\varepsilon_g \rho_g)_P \xi_s + (\varepsilon_g \rho_g)_S \bar{\xi}_s] u_{gs}^* A_s \right\} \quad (\text{A.51h})$$