

UNIVERSIDADE DO VALE DO RIO DOS SINOS  
UNIDADE ACADÊMICA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

ESTUDO DO DESEMPENHO DE CORRELAÇÕES DE ARRASTO SÓLIDO-GÁS NA  
SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE UM LEITO FLUIDIZADO BORBULHANTE

CATERINA GONÇALVES PHILIPSEN

Dissertação de Mestrado

São Leopoldo, março de 2012

ESTUDO DO DESEMPENHO DE CORRELAÇÕES DE ARRASTO SÓLIDO-GÁS NA  
SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE UM LEITO FLUIDIZADO BORBULHANTE

Caterina Gonçalves Philippsen

Trabalho submetido ao Programa de Pós-Graduação em  
Engenharia Mecânica da UNISINOS como pré-requisito  
parcial para a obtenção do título de Mestre em Engenharia  
Mecânica.

Mestre em Engenharia Mecânica

Orientador: Prof<sup>ª</sup>. Dr<sup>ª</sup> Flávia S. F. Zinani

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Helio Aparecido Navarro – Escola de Engenharia de São Carlos, EESC – USP  
Prof<sup>ª</sup>. Dr<sup>ª</sup> Maria Luiza Sperb Indrusiak – Universidade do Vale do Rio dos Sinos  
Prof. Dr. Conrad Y. Lee – Universidade do Vale do Rio dos Sinos

Ficha catalográfica

P552e Philippsen, Caterina Gonçalves

Estudo do desempenho de correlações de arrasto sólido-gás na simulação numérica de um leito fluidizado borbulhante / por Caterina Gonçalves Philippsen. – 2012.

79 f. : il., 30 cm.

Dissertação (mestrado) — Universidade do Vale do Rio dos Sinos, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, 2012.

Orientação: Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Flávia S. F. Zinani.

1. Leito fluidizado borbulhante. 2. Arrasto sólido-gás.  
3. Simulação numérica. 4. MFIX. I. Título.

CDU 621.6

Catálogo na Fonte:

Bibliotecária Vanessa Borges Nunes - CRB 10/1556

Universidade do Vale do Rio dos Sinos – UNISINOS

Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq

*Dedico este trabalho a minha família pelo  
apoio e compreensão.*

## ***Agradecimentos***

*A Deus pela oportunidade da realização deste trabalho.*

*A meus pais, minha irmã e meu marido pelo incentivo e por acreditarem em minha capacidade de desenvolver um bom trabalho.*

*Ao professor Dr. Leandro Dalla Zen pela bolsa CNPq e apoio.*

*A professora Dr<sup>a</sup> Flávia Zinani, pelo apoio e orientação no desenvolvimento do trabalho.*

*Aos colegas do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Unisinos pela amizade e apoio durante o curso.*

*Aos demais professores do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Unisinos que contribuíram para o desenvolvimento deste trabalho.*

*Ao CNPq pela bolsa de estudos concedida.*

## RESUMO

A queima de combustíveis sólidos em leito fluidizado é uma das tecnologias mais avançadas utilizadas em usinas de conversão de energia térmica. Atualmente, há uma crescente busca por um melhor entendimento dos processos hidrodinâmicos de fluidização e por modelos matemáticos capazes de prever com eficácia tais fenômenos. Neste trabalho, uma ferramenta de Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD), o código aberto MFIX (*Multiphase Flow with Interphase Exchanges*) é empregado na simulação numérica de escoamentos multifásicos em um leito fluidizado borbulhante (LFB). Na modelagem matemática do problema, emprega-se a abordagem Euleriana, ou seja, as fases gás e sólido particulado são consideradas como meios contínuos interpenetrantes. As equações de conservação de massa e quantidade de movimento são resolvidas para cada fase, e o acoplamento entre as fases é feito pelo termo de transferência de quantidade de movimento entre as fases, a qual se dá pelo arrasto sólido-gás. Este último pode ser modelado por correlações teóricas ou empíricas, dentre as quais se destacam as correlações de Gidaspow, Hill-Koch-Ladd (HKL), Syamlal e O'Brien e Arastoopour. No presente trabalho é avaliado o desempenho dessas correlações na simulação numérica de um leito fluidizado borbulhante com jato central de gás. Os resultados gerados utilizando os diferentes modelos são comparados com resultados experimentais disponíveis na literatura. O modelo de Syamlal e O'Brien requer menor tempo de processamento e apresenta independência de malha mesmo para malhas pouco refinadas, porém prevê bolhas muito menores do que as observadas experimentalmente. Os modelos de Gidaspow e HKL apresentam resultados com boa concordância com resultados experimentais, principalmente no que diz respeito ao formato das bolhas. Estes modelos requerem alto tempo de processamento e malhas bastante refinadas para apresentarem resultados independentes da discretização. Para o modelo de Arastoopour são apresentados resultados preliminares, os quais diferem bastante dos demais modelos e necessitam um estudo mais aprofundado.

**Palavras chave:** MFIX, leito fluidizado borbulhante, arrasto sólido-gás, simulação numérica.

## ABSTRACT

The burning of solids fuels in fluidized bed is one of the most advanced technologies used thermal energy power plants. Currently, there is a growing interest for a better understanding of the hydrodynamic processes of fluidization and mathematical models able to predict such phenomena effectively. In this work, Computational Fluid Dynamics (CFD) tool, the open source code MFI (Multiphase Flow With Interphase Exchanges) is used in the numerical simulation of multiphase flows in a bubbling fluidized bed. In the mathematical modeling of the problem, the Eulerian approach is employed, *i.e.* the particulate solid and gas phases are considered to be interpenetrating continua. The equations of mass and momentum are solved for each phase, and the coupling between phases is achieved via a momentum transfer term, which is caused by gas-solid drag. The latter can be modeled by theoretical or empirical correlations, among which stand out the correlations of Gidaspow, Hill-Koch-Ladd (HKL), Syamlal and O'Brien and Arastoopour. In the present work the performance of these correlations in the numerical simulation of a bubbling fluidized bed with a central jet of gas is studied. The results produced using different correlations are compared to experimental results available in the literature. The model of Syamlal and O'Brien requires less processing time and presents mesh independent results even for coarse meshes, but predicts much smaller bubbles than those observed experimentally. The models of HKL and of Gidaspow give results which show good agreement with experimental results, especially with regard to the shape of bubbles. These models require high processing time and very refined meshes to produce results independent of the discretization. For the Arastoopour model, preliminary results are presented, which differ greatly from other models and require further study.

**Keywords:** MFI, bubbling fluidized bed, gas-solid drag, numerical simulation.



## **LISTA DE ABREVIATURAS**

CFD Computational Fluid Dynamics.

CGTEE Companhia de Geração Térmica de Energia Elétrica.

CTCL Centro Tecnológico de Carvão Limpo.

EDP Equação Diferencial Parcial.

FORTTRAN Formula Translation.

FOUP First Order Upwind.

HKL Hill-Koch-Ladd.

KTGF Kinetic Theory of Granular Flow.

LFB Leito Fluidizado Borbulhante.

LFC Leito Fluidizado Circulante.

MFIX Multiphase Flow with Interphase eXchanges.

NETL National Energy Technology Laboratory.

RUC Representative Unit Cell Model.

SATC Associação Beneficente da Indústria Carbonífera de Santa Catarina.

## LISTA DE SÍMBOLOS

$\mathbf{C}$  – Componente de flutuação de  $\mathbf{c}$ .

$\mathbf{c}$  – Velocidade instantânea da fase sólida [m/s].

$C_D$  - Coeficiente de arrasto.

$C_\beta, C_{3\varepsilon}, C_\mu, C_{g\varepsilon}, C_{s\varepsilon}$  – Constantes do modelo de turbulência.

$d_p$  - Diâmetro da partícula [m].

$\mathbf{D}_s$  - Tensor taxa de deformação da fase sólida [ $s^{-1}$ ].

$e$  - Coeficiente de restituição.

$F$  - Fator de arrasto sólido-gás do modelo de Hill-Koch-Ladd.

$F_0, F_1, F_2$  e  $F_3$  - Coeficientes do modelo de arrasto Hill-Koch-Ladd.

$F_{gs}$  – Coeficiente para a força de interação da energia granular.

$\mathbf{g}$  - Aceleração da gravidade, [ $m/s^2$ ].

$g_0$  - Função de distribuição radial.

$I_{2D}$  - Segundo invariante do tensor taxa de deformação [ $s^{-1}$ ].

$\mathbf{I}_{gs}$  - Força de interação que representa a transferência da quantidade de movimento sólido-gás.

$k_g$  - Energia cinética turbulenta do gás [ $m^2/s^2$ ].

$k_s$  - Energia cinética turbulenta do sólido [ $m^2/s^2$ ].

$k_\theta$  - Coeficiente de difusão granular.

$K_1, K_2, K_3$  e  $K_4$  - Coeficientes do regime granular.

$L$  - Altura do leito [m].

$M_g$  – Massa molar [mol].

$p_g$  - Pressão do gás [Pa].

$p_s$  - Pressão do sólido, [Pa].

$\mathbf{q}_\theta$  – Fluxo difusivo da energia granular.

$R$  - Constante universal dos gases [ $Pa \cdot m^3 / (kmol \cdot K)$ ].

$Re$  - Número de Reynolds.

$\mathbf{S}$  - Tensor taxa de deformação das fases gasosa [Pa].

$t$  - Tempo [s].

$T_g$  - Temperatura do gás [K].

$v_g$  - Magnitude da velocidade superficial do gás [m/s].

$v_{g,jet}$  - Velocidade do gás no jato central [m/s].

$\mathbf{v}_n$  - Vetor velocidade do componente  $n$  [m/s].

$\mathbf{v}_g$  - Vetor velocidade do gás [m/s].

$\mathbf{v}_s$  - Vetor velocidade do sólido [m/s].

$V_r$  - Velocidade terminal da fase sólida [m/s].

$W$  - Largura do leito [m].

$X_{sg}$  - Constante do modelo de turbulência.

$x^*$  - Posição adimensional na direção  $x$ .

$y^*$  - Posição adimensional na direção  $y$ .

### *Símbolos Gregos*

$\alpha_g$  - Fração volumétrica do componente gás (fração de vazio).

$\alpha_g^*$  - Fração de vazio para mínima fluidização.

$\alpha_{mf}$  - Fração mássica de gás para mínima fluidização.

$\alpha_n$  - Fração volumétrica do componente  $n$  ( $n = g$ , gás ou  $n = s$ , sólido).

$\alpha_s$  - Fração volumétrica do componente sólido.

$\beta_{gs}$  - Função de arrasto sólido-gás.

$\beta_s$  - Função de arrasto sólido-sólido.

$\gamma_\theta$  - Taxa de dissipação da energia granular.

$\delta$  - Tensor identidade.

$\varepsilon_g$  - Dissipação turbulenta do gás [m<sup>2</sup>/s<sup>3</sup>].

$\varepsilon_s$  - Dissipação turbulenta do sólido [m<sup>2</sup>/s<sup>3</sup>].

$\eta_t$  - Relação entre  $\tau_{gs}^t$  e  $\tau_{gs}^x$ .

$\Theta$  - Temperatura granular [m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>].

$\lambda_s$  - Viscosidade volumétrica da fase sólida [kg/(m.s)].

$\mu_g$  - Viscosidade dinâmica da fase gasosa [kg/(m.s)].

$\mu_s$  - Viscosidade dinâmica da fase sólida [kg/(m.s)].

$\xi_\Gamma^2, \sigma_\varepsilon, \sigma_k$  - Constantes do modelo de turbulência.

$\Pi_{kg}, \Pi_{eg}, \Pi_{ks}$  - Interações turbulentas.

$\rho$  - Massa específica da mistura [kg/m<sup>3</sup>].

$\rho_g$  - Massa específica do gás [kg/m<sup>3</sup>].

$\rho_n$  - Massa específica do componente  $n$  (gás ou sólido) [kg/m<sup>3</sup>].

$\rho_{n'}$  - Massa específica efetiva do componente  $n$  (gás ou sólido) [kg/m<sup>3</sup>].

$\rho_s$  - Massa específica do sólido [kg/m<sup>3</sup>].

$\tau_g$  - Tensor tensão da fase gasosa [Pa].

$\tau_s$  - Tensor tensão da fase sólida [Pa].

$\tau_s^c$  - Escala de tempo colisional.

$\tau_{gs}^l$  - Escala de tempo integral Lagrangeano.

$\tau_g^t$  - Escala de tempo dos vórtices turbulentos.

$\tau_{gs}^x$  - Tempo de relaxação das partículas.

$\phi$  - Ângulo de atrito interno [graus].

$\phi_{gs}$  - Transferência da energia granular gás-sólido.

$\omega_c$  - Constante do modelo de turbulência.

#### *Sub-índices*

$g$  - Fase gasosa.

$s$  - Fase sólida.

$n$  e  $m$  - Índice da fase gasosa ou sólida.

#### *Super-índices*

$Col$  – Colisional.

$Kin$  – Cinético.

$P$  - Regime plástico.

$V$  - Regime viscoso.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 Classificação do leito fluidizado .....	16
Figura 2.1 Comparação da evolução do diâmetro da bolha ao longo da altura do LFB. ....	20
Figura 2.2 Frequência de borbulhamento previsto pelos modelos de arrasto em comparação com dados experimentais.....	23
Figura 2.3 Frequência de borbulhamento previsto pelo modelo de arrasto RUC modificado em comparação com dados experimentais. ....	24
Figura 2.4 Comparação da expansão do leito simulado com os dados experimentais.....	24
Figura 2.5 Comparação com dados experimentais dos perfis radiais da fração volumétrica de sólidos e velocidade axial das partículas dos diferentes modelos de arrasto.....	25
Figura 2.6 Comparação dos modelos de arrasto na distribuição de sólidos com distribuidor de gás completo e parcial. ....	26
Figura 2.7 Queda de pressão do leito previsto pelos modelos de arrasto em comparação com dados experimentais. ....	26
Figura 2.8 Expansão do leito previsto pelos modelos de arrasto em comparação com dados experimentais.....	27
Figura 3.1 Fluxo granular em regime viscoso e fluxo granular em regime plástico. ....	39
Figura 4.1 Geometria e colocação do problema. ....	50
Figura 4.2 Posições críticas do reator analisadas no presente estudo.....	52
Figura 4.3 Evolução da variação relativa da média temporal de $\alpha_s$ , e evolução da média temporal de $\alpha_g$ . ....	53
Figura 4.4 Média temporal (20 s a 40 s) da fração volumétrica de sólidos na posição $x^*=0,008$ ao longo da direção y. Comparação das quatro malhas para os três modelos de arrasto: Gidaspow, Syamlal e O'Brien, HKL.....	55
Figura 4.5 Média temporal (20 s a 40 s) da fração volumétrica da fase gasosa ( $\alpha_g$ ) previstos pelos modelos de arrasto de Gidaspow, Syamlal e O'Brien, HKL e Arastoopour.....	57
Figura 4.6 Média temporal (20 s a 40 s) da fração volumétrica de sólidos ( $\alpha_s$ ) ao longo do eixo y na posição $x^*=0,008$ previsto pelos modelos de arrasto de Gidaspow, Syamlal e O'Brien e HKL e Arastoopour. ....	58
Figura 4.7 Média temporal (20 s a 40 s) da fração volumétrica de sólidos ( $\alpha_s$ ) ao longo do eixo y para as posições críticas $x^* =0,5$ e $x^*=0,99$ . ....	59

Figura 4.8 Distribuição média da magnitude da velocidade superficial do gás ( $v_g$ ) previsto pelos modelos de arrasto de Gidaspow, Syamlal e O'Brien, HKL e Arastoopour.....	60
Figura 4.9 Vetores da velocidade superficial do gás, média temporal (20 a 40 s) previstos pelos modelos de arrasto de Gidaspow, Syamlal e O'Brien, HKL e Arastoopour.....	61
Figura 4.10 Distribuição média da magnitude da velocidade superficial do gás ( $v_g$ ) ao longo do eixo $x$ para as posições $y^* = 0,25$ e $y^* = 0,5$ .....	62
Figura 4.11 Comparação da concentração média de sólidos ( $\alpha_s$ ) ao longo do eixo $y^*$ para as três velocidades na posição $x^* = 0,5$ previsto pelos modelos de Gidaspow, Syamlal e O'Brien e HKL. ....	64
Figura 4.12 Frequência de desprendimento das bolhas em relação às malhas utilizadas previsto pelos quatro modelos de arrasto no intervalo de 30 s a 32 s. ....	65
Figura 4.13 Média da fração de vazio ( $\alpha_g$ ) ao longo da largura do leito. Análise do diâmetro médio das bolhas nas posições: $y^* = 0,25$ e $y^* = 0,5$ . ....	66
Figura 4.14 Ilustração do diâmetro e formato das bolhas previstas pelos quatro modelos de arrasto: Gidaspow, Syamlal e O'Brien, HKL e Arastoopour. ....	67
Figura 4.15 Comparação do formato de uma bolha formada em LFB aos 0,32 s.....	68

## SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO .....</b>	<b>15</b>
1.1 JUSTIFICATIVA .....	15
1.2 OBJETIVOS .....	19
<b>2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....</b>	<b>20</b>
<b>3 MODELAGEM MATEMÁTICA .....</b>	<b>28</b>
3.1 BALANÇO DE MASSA .....	30
<b>3.1.1 Equação de Estado.....</b>	<b>31</b>
3.2 BALANÇO DA QUANTIDADE DE MOVIMENTO .....	31
<b>3.2.1 Transferência da Quantidade de Movimento Fluido-Sólido .....</b>	<b>32</b>
1.2.1.1 Correlação de Arrasto de Gidaspow .....	33
3.2.1.2 Correlação de Arrasto de Syamlal e O'Brien .....	34
3.2.1.3 Correlação de Arrasto de Hill-Koch-Ladd .....	35
3.2.1.4 Correlação de Arrasto de Arastoopour .....	38
<b>3.2.2 Tensor das Tensões Viscosas da Fase Fluida.....</b>	<b>38</b>
<b>3.2.4 Tensor Tensão da Fase Sólida.....</b>	<b>38</b>
3.3 MODELO DE TURBULÊNCIA .....	43
<b>3.3.1 Modelagem de Turbulência para a Fase Contínua.....</b>	<b>43</b>
<b>3.3.2 Modelagem de Turbulência para a fase dispersa .....</b>	<b>45</b>
3.4 CONSERVAÇÃO DA ENERGIA GRANULAR .....	47
<b>4 RESULTADOS E DISCUSSÃO .....</b>	<b>50</b>
4.1 PROBLEMA .....	50
<b>4.1.1 Posições Críticas do Problema.....</b>	<b>52</b>
4.2 ANÁLISE DOS RESULTADOS .....	53
<b>4.2.1 Determinação do Regime Permanente.....</b>	<b>53</b>
<b>4.2.2 Estudo de Malha e Comparação com Resultados Experimentais.....</b>	<b>54</b>
<b>4.2.3 Estudo dos Modelos de Arrasto .....</b>	<b>56</b>
4.2.3.1 Fração volumétrica .....	56
4.2.3.2 Perfis de Velocidade .....	59
<b>4.2.4 Estudo da Variação da Velocidade do Jato.....</b>	<b>63</b>
4.2.4.1 Fração Volumétrica .....	63

<b>4.2.5 Estudo da Formação das Bolhas.....</b>	<b>64</b>
4.2.5.1 Frequência de Desprendimento das Bolhas.....	64
4.2.5.2 Diâmetro Médio das Bolhas .....	65
<b>CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS FUTURAS.....</b>	<b>70</b>
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>73</b>



## 1 INTRODUÇÃO

O presente trabalho trata de um estudo do desempenho de modelos de arrasto sólido-gás na simulação numérica de um leito fluidizado borbulhante, cuja modelagem matemática baseia-se no modelo de dois fluidos (Euler-Euler, ou Euleriano) e utiliza-se o modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  de Simonin, descrito por Benyahia (2005). No modelo Euleriano, cada fase, gás ou sólido, é tratada como um meio contínuo, cuja fração volumétrica é mapeada ao longo do domínio do problema. As equações usuais de balanço são válidas para cada fase, porém são acrescentados termos responsáveis por interações entre as fases. Entre eles, o termo de interação entre a fase gás e cada uma das fases sólidas nas equações da quantidade de movimento, desempenha um importante papel no modelo. Este termo pode ser composto por diferentes formas de contribuições, dentre os quais o arrasto sólido-gás geralmente é o mais significativo. O arrasto entre as fases gás e sólida é modelado na forma de correlações teóricas ou empíricas, as quais são funções das características e propriedades das fases envolvidas. No presente trabalho, algumas correlações usuais na literatura são utilizadas e seu desempenho comparado em resultados gerados na simulação numérica de um leito fluidizado borbulhante com um jato central, utilizando-se o código de volumes finitos MFIX.

Neste capítulo, são abordados alguns conceitos básicos para o entendimento do trabalho, sua justificativa e objetivos. No capítulo 2 é apresentada uma revisão bibliográfica que trata principalmente de trabalhos relevantes publicados dentro da mesma linha. O capítulo 3 apresenta o modelo matemático utilizado. São enfatizadas as correlações de arrasto sólido-gás, sua formulação e embasamento teórico. No capítulo 4 é apresentado o problema resolvido, os resultados numéricos obtidos e uma discussão dos mesmos. No capítulo 5 são feitas as conclusões e considerações finais. Logo após, são fornecidas as referências bibliográficas do presente trabalho.

### 1.1 JUSTIFICATIVA

A combustão em leito fluidizado é uma das tecnologias mais avançadas utilizada na geração de energia elétrica por meio da queima de combustíveis fósseis ou biomassa.

Atualmente, em comparação com caldeiras convencionais, esta tecnologia é uma das alternativas para a diminuição na emissão de gases poluentes como NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub> e particulados. O sistema de combustão em leito fluidizado é utilizado atualmente na indústria química, metalúrgica, petrolífera e na geração de energia térmica e elétrica.

Como definido por Kunii e Levenspiel (1991), a fluidização é uma operação em que um grupo de partículas sólidas se comporta como uma fase fluida contínua quando está em suspensão em um gás ou líquido. No entanto, Jaeger e Nagel (1992) afirmam que os materiais granulares podem se comportar como um fluido, mas não podem ser classificados como sólido ou líquido.

A técnica de combustão em leito fluidizado consiste na queima de um combustível sólido particulado, geralmente misturado a um substrato também particulado, enquanto o mesmo encontra-se fluidizado devido ao escoamento de um gás. As diferentes técnicas de combustão em leito fluidizado podem ser diferenciadas pelo regime de fluidização. Podem ser classificadas em quatro tipos: leito fixo, borbulhante, turbulento e circulante (Fig.1.1).

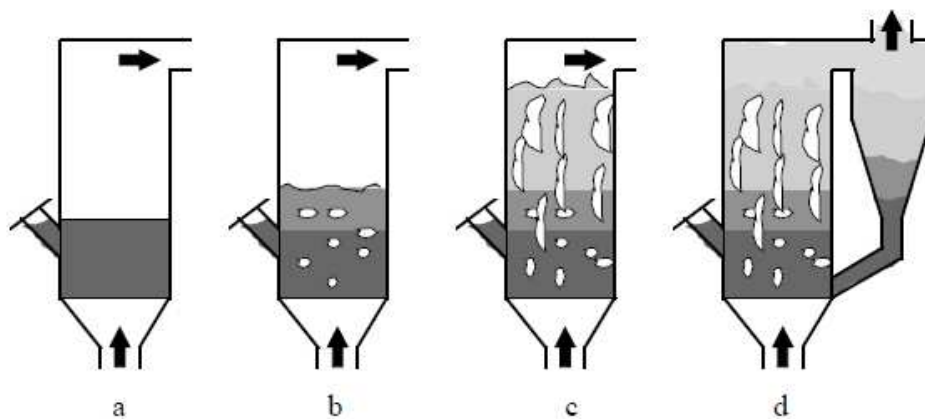


Figura 1.1 Classificação do leito fluidizado: (a) Fixo, (b) borbulhante, (c) turbulento e (d) circulante.

Fonte: Karppanen (2000).

No leito fixo a velocidade do gás é baixa, o que torna a força de arrasto entre o gás e as partículas dominante. Conforme a velocidade do gás é aumentada, a força de arrasto excede a força gravitacional e o leito se expande. Com a expansão o arrasto diminui e é balanceado pelo peso dos sólidos, o que mantém o leito fixo. Com o aumento da velocidade do gás, o leito se expande novamente e há formação de bolhas, o que caracteriza o leito fluidizado borbulhante (LFB). Aumentando mais a velocidade do gás, inicia-se um escoamento caótico, o que caracteriza o leito fluidizado turbulento. Quando a velocidade do gás é extremamente

alta, as partículas são transportadas para fora do leito, caracterizando o leito fluidizado circulante (LFC) (KARPPANEN, 2000).

O presente trabalho trata de um estudo hidrodinâmico de leitos fluidizados do tipo borbulhante caracterizados pela formação de bolhas e pela alta densidade de partículas. As bolhas se formam quando a velocidade do gás excede a velocidade de mínima fluidização, o que permite a recirculação das partículas e a mistura entre as fases (WU, 2003).

A eficiência da combustão está diretamente ligada às reações químicas e à transferência de calor. A mistura entre o particulado e a fase fluida tem grande importância neste processo de transferência de massa e energia (WU, 2003). Assim, um estudo numérico da hidrodinâmica do leito é de grande importância no aperfeiçoamento do processo, pois é o que determina a distribuição das fases e espécies envolvidas.

Na geração de energia elétrica, a combustão em LFB vem sendo estudada e aperfeiçoada por muitos pesquisadores. Dentre eles, o professor da Unisinos, Leandro Dalla Zen, vem realizando experimentos em uma caldeira multicomcombustível na CGTEE em São Jerônimo, RS. O professor Dalla Zen estuda a tecnologia de combustão em LFB utilizando diferentes combustíveis, como carvão mineral e biomassa, com foco no desenvolvimento de uma tecnologia nacional para construção de geradores de vapor em escalas maiores (ELETROBRAS, 2009).

Devido à grande complexidade da hidrodinâmica envolvida, a dinâmica dos fluidos computacional (CFD) de LFB é uma linha de pesquisa que vem ganhando importância na comunidade científica. Atualmente, a CFD é uma das principais ferramentas na busca do aperfeiçoamento desta tecnologia de combustão.

No presente trabalho, o código de dinâmica dos fluidos computacional MFIX, desenvolvido pelo NETL (*National Energy Technology Laboratory*), é utilizado como ferramenta para a análise da hidrodinâmica de fluidização em LFB. O código MFIX possui um modelo numérico para a simulação de escoamentos, com foco em reações químicas de combustão e gaseificação e transferência de calor em escoamentos fluido-sólidos densos ou diluídos. Os fundamentos teóricos do MFIX são baseados nas clássicas equações de conservação de massa e quantidade de movimento, estendidas de forma a incorporar múltiplas fases, acopladas a equações que modelam as interações entre as fases, como transferência de energia e reações químicas. Estes modelos de interações são baseados nas equações de cinética química, em correlações experimentais e, mais recentemente, em modelos derivados da Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares (KTGF). O modelo numérico do MFIX

baseia-se no método dos volumes finitos de Patankar (1980). O código MFIX atual (SYAMLAL *et al.*, 1993) incorpora melhorias, sendo constantemente atualizado e disponibilizado aos usuários em versões mais recentes.

O modelo hidrodinâmico no qual o código MFIX é construído, é um modelo Euleriano, ou seja, as fases são consideradas como contínuos interpenetrantes. As equações de movimento, massa e energia são resolvidas para cada fase. O modelo é fechado com equações para a fração volumétrica de cada fase, as quais devem somar um. O código acomoda uma fase gás e múltiplas fases sólidas. O modelo desenvolvido foi validado com dados experimentais em processos considerados fundamentais, como bolha de injeção única, injeções a jato (SYAMLAL E O'BRIEN, 1989), a segregação de partículas (SYAMLAL E O'BRIEN, 1988), a dinâmica de leito fluidizado circulante (O'BRIEN E SYAMLAL 1991, O'BRIEN E SYAMLAL 1993), e também as reações de escoamento em reatores de leito fluidizado circulante, leito fluidizado com tubos de transferência de calor imersos (ROGERS E BOYLE, 1991), leitos fluidizados com filtro, e em reatores de leito fluidizado a altas temperaturas (SYAMLAL *et al.*, 1993).

O MFIX é um código livre e aberto, o qual vem sendo desenvolvido por um time de pesquisadores do mais alto nível científico. Para a escolha da ferramenta numérica para a realização deste trabalho foram levadas em conta estas vantagens. No Brasil, alguns grupos de pesquisa vêm utilizando o aplicativo MFIX, como o grupo do CTCL (Centro Tecnológico de Carvão Limpo) na SATC, em Criciúma, SC, e também o grupo da Escola de Engenharia de São Carlos - Universidade de São Paulo, que já possui algumas publicações utilizando esta ferramenta (SILVA *et al.*, 2010, BRAUN *et al.*, 2010).

Uma das dificuldades encontradas na simulação numérica de escoamentos em leito fluidizado é a modelagem matemática dos complexos processos de interação entre as fases gás e sólida. Deen *et al.* (2006) afirma que, para avaliar o desempenho do leito fluidizado, é fundamental ter uma boa previsão da dinâmica e da formação das bolhas, pois são os principais responsáveis pela mistura e segregação no leito. Para uma correta previsão da formação de bolhas, também é essencial a utilização de um modelo de arrasto preciso. Hosseini *et al.* (2010), em um estudo sobre a distribuição dos sólidos e dos padrões de circulação em escoamentos sólido-gás, utilizando o código MFIX, afirma que o modelo de arrasto sólido-gás é um parâmetro chave na modelagem de LFB. A força de arrasto é descrita pelo produto de um coeficiente de arrasto e da velocidade relativa entre as fases. Richardson e Zaki (1954), Wen e Yu (1966), Syamlal e O'Brien (1993), Gidaspow (1986) e Hill, Koch e

Ladd (2001) foram alguns dos pesquisadores que apresentaram correlações que descrevem o arrasto entre as fases.

No presente trabalho, os modelos de arrasto sólido-gás de Gidaspow (1986), Syamlal e O' Brien (1993), Hill, Koch e Ladd (2001) e Arastoopour (1990) são empregados na análise da hidrodinâmica de um LFB. Tais modelos são investigados quanto à sua capacidade de prever parâmetros transientes e variáveis médias no tempo, através da comparação de resultados obtidos com resultados experimentais da literatura (GIDASPOW *et al.*, 1983a). Espera-se, com este trabalho, contribuir para o melhor entendimento das capacidades de cada modelo e das características dos resultados gerados pelos mesmos.

## 1.2 OBJETIVOS

O objetivo do presente trabalho é investigar, caracterizar e apontar diferenças entre os resultados para a hidrodinâmica de um LFB, gerados com o código MFIX, utilizando-se quatro distintos modelos de arrasto sólido-gás, os modelos de Gidaspow (1986), de Syamlal e O' Brien (1993), Hill, Koch e Ladd (2001) e Arastoopour (1990).

Como objetivo secundário, pode-se apontar a formação de expertise no uso do MFIX, um código livre e aberto, o qual vem sendo usado mundialmente e, assim, passar a integrar uma comunidade de pesquisadores que conta com colaboradores de renome internacional, desenvolvendo o que há de mais novo em termos de simulação numérica de escoamentos multifásicos e reativos.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo, é apresentada uma revisão bibliográfica na qual são citados os trabalhos mais relevantes relacionados ao tema do presente estudo.

Passalacqua e Marmo (2009) realizaram um estudo no qual avaliaram o efeito da introdução de tensores de atrito, considerando regime plástico para a fase particulada, em um modelo Euleriano multifásico baseado na teoria cinética do escoamento granular. Foram comparados os modelos de Johnson e Jackson (1987), Syamlal e O'Brien (1993) e Srivastava e Sundaresan (2003) com a teoria cinética de escoamentos granulares e dados experimentais. Neste estudo, os autores aplicaram os modelos na simulação de escoamento sólido-gás em LFB com jato central estudado por Gidaspow *et al.* (1983a). Os autores utilizaram a correlação de arrasto de Gidaspow para a transferência de quantidade de movimento. Os resultados mostram que a introdução de tensores de atrito entre os sólidos na simulação de LFB com jato, melhora a previsão do diâmetro das bolhas, no qual o modelo de Srivastava e Sundaresan apresentou dados mais próximos aos dados experimentais (Fig. 2.1).

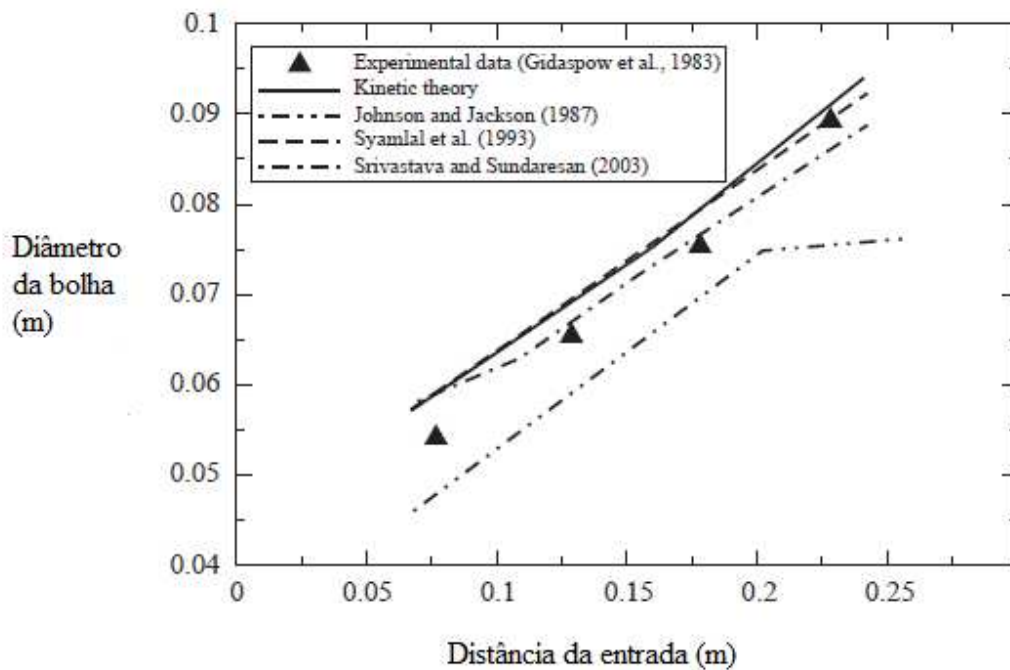


Figura 2.1 Comparação da evolução do diâmetro da bolha ao longo da altura do LFB.  
Fonte: Adaptado de Passalacqua e Marmo (2009).

Braun *et al.* (2010), utilizando o código MFIX, realizaram um estudo sobre o efeito da difusão numérica e a influência da malha computacional em um escoamento sólido-gás em LFB. Os autores utilizaram o modelo Euler-Euler para escoamento multifásico e a teoria cinética do escoamento granular aplicado ao problema estudado por Gidaspow *et al.* (1983a), no qual utilizaram a correlação de arrasto de Syamlal e O'Brien (1993) na transferência da quantidade de movimento sólido-gás. Neste estudo, os autores concluíram que, para evitar a difusão numérica, o método de discretização de alta ordem Superbee apresenta melhores resultados no formato das bolhas que o método de primeira ordem FOUP, podendo ser utilizado para malhas mais grosseiras. O método FOUP deve ser utilizado na simulação de LFB apenas para malhas bastante refinadas, o que aumenta o tempo computacional.

Milioli e Milioli (2010) apresentam um estudo sobre a precisão das previsões de um escoamento sólido-gás em LFC, no qual foi utilizado o código CFX e o modelo de arrasto de Gidaspow. Resultados médios foram obtidos em diferentes intervalos de tempo (5 s, 10 s, 15 s e 20 s) e comparados com dados experimentais e resultados de outras simulações encontradas na literatura. Os autores mostram que os resultados médios encontrados dependem do período em que foram analisados, mas não é possível afirmar que a falta de precisão numérica é o único fator responsável pelas grandes diferenças que aparecem nas comparações de simulações e dados experimentais.

Alguns autores investigaram especificamente o papel do modelo de arrasto sólido-gás nos resultados numéricos de diversas aplicações de escoamentos multifásicos sólido-gás. Entre os modelos mais utilizados, estão os modelos estudados no presente trabalho: o modelo de Gidaspow (1986), o modelo de Syamlal e O'Brien (1993) e o modelo de Hill, Koch e Ladd (2001).

Gidaspow (1986) desenvolveu um modelo de arrasto sólido-gás baseado na equação de Ergun (1952) para a fase densa, no qual relaciona o arrasto com a queda de pressão, e para a fase dispersa utiliza a equação de Wen e Yu (1966), baseado em dados experimentais quando as forças internas não são consideradas (LUNDBERG *et al.*, 2008).

O modelo desenvolvido por Syamlal e O'Brien (1993) baseia-se no modelo de partícula única proposto por Dalla Valle (1948) modificado pela correlação de velocidade terminal desenvolvido por Garside e Al-Dibouni (1977) baseado em dados experimentais de Richardson e Zaki (1954).

Já Hill *et al.* (2001) desenvolveram uma correlação de arrasto baseada nas simulações Lattice-Boltzmann que mais tarde recebeu uma extensão, desenvolvida por Benyahia *et al.*

(2006), que se aplica a todas as faixas de frações volumétricas (inclusive nulas) e *Re*. Este modelo é chamado Hill-Koch-Ladd (HKL) (BENYAHIA *et al.*, 2006 e MINETO, 2009).

Boemer *et al.* (1997), utiliza o modelo de arrasto de Syamlal e O'Brien (1993) e o código ANSYS FLUENT em um estudo sobre simulação Euleriana da formação de bolhas em duas dimensões de um leito fluidizado com jato. Neste trabalho, os autores citam os trabalhos de Boemer *et al.* (1995) e Löfstrand *et al.* (1995) que, ao compararem os modelos de Gidaspow (1986), Syamlal e O'Brien (1993) e Di Felice (1994) com resultados experimentais, observaram a superioridade do modelo de Syamlal e O'Brien.

Taghipour *et al.* (2005) em um estudo computacional e experimental da hidrodinâmica de leito fluidizado sólido-gás, comparou os modelos de arrasto de Syamlal e O'Brien, (1993) Gidaspow, (1986) e Wen e Yu, (1966). Foi utilizado o código ANSYS FLUENT e o modelo multifásico Euleriano integrado à teoria cinética dos escoamentos granulares. Os resultados encontrados são qualitativamente similares nas previsões dos perfis locais, instantâneo e médias no tempo, da queda de pressão e expansão do leito em comparação com resultados experimentais. A conclusão dos autores sugere mais estudos nesta área para a validação dos modelos CFD de leito fluidizado.

Du *et al.*(2006) apresentaram um estudo de CFD de leito de jorro (regime fluidodinâmico que ocorre com partículas de maior diâmetro sem a formação de bolhas), no qual avaliaram correlações de arrasto (Richardson e Zaki, 1954; Gidaspow, 1986; Di Felice, 1994; Syamlal e O'Brien, 1993 e Arastoopour, 1990). Neste estudo os autores concluíram que os modelos de Gidaspow, Syamlal e O'Brien e Arastoopour podem prever os padrões de escoamento, perfis médio e perfil da velocidade das partículas qualitativamente na simulação de leito de jorro. Entre estes três modelos, os autores afirmam que o modelo de Gidaspow apresentou resultados mais próximos aos dados experimentais. Os autores ainda ressaltam a importância da utilização de um bom modelo de arrasto na simulação de leitos de jorro, pois a força de arrasto é a única força de aceleração que atua nas partículas.

Ahuja e Patwardhan (2008), utilizando o código ANSYS FLUENT, apresentaram um estudo sobre a hidrodinâmica de um escoamento sólido-gás em leito fluidizado, utilizando a combinação de experimentos e simulações em CFD. Neste estudo, o autor utiliza o modelo de arrasto de Gidaspow, mas cita os trabalhos de Pugsley e Mckeen (2003), Taghipour *et al.* (2005), Krishna *et al.* (2001) e Du *et al.* (2006) que fizeram comparações de outros modelos de arrasto. Os autores utilizaram o modelo Euler-Euler para escoamento multifásico em duas dimensões integrado à teoria cinética de escoamento granular. Foram estudados os efeitos da



velocidade do gás, tipo de pulverizador, a presença de tubo de sucção, distribuição e padrões de circulação de sólidos. Os resultados encontrados oferecem uma base para futuros estudos sobre LFB. Pugsley e McKeen (2003) compararam quatro modelos de arrasto (Syamlal e O'Brien, 1993; Gidaspow, 1986; Ergun, 1952 e Gibilaro *et al.*, 1985) e encontraram um desvio significativo dos resultados experimentais quando utilizando o modelo de Syamlal e O'Brien. Krishna *et al.* (2001) utilizam o modelo de arrasto de Gidaspow para um sistema sólido-gás denso, pois o modelo de Syamlal e O'Brien, neste caso, apresentou valores baixos para a queda de pressão e expansão do leito.

Lundberg *et al.* (2008), utilizando o código ANSYS FLUENT, realizaram um estudo no qual foram comparados cinco modelos de arrasto com relação à frequência das bolhas. Os modelos analisados foram os de Syamlal e O'Brien (1993), Gidaspow (1986), Richardson e Zaki (1954), Hill-Koch-Ladd (2001) e RUC - *Representative Unit Cell Model* (1988). Os autores concluíram que os modelos de Gidaspow, Hill-Koch-Ladd e RUC apresentaram bons resultados em comparação com dados experimentais, no qual o modelo RUC modificado apresentou resultados melhores de acordo com o experimental Fig. (2.2) e (2.3).

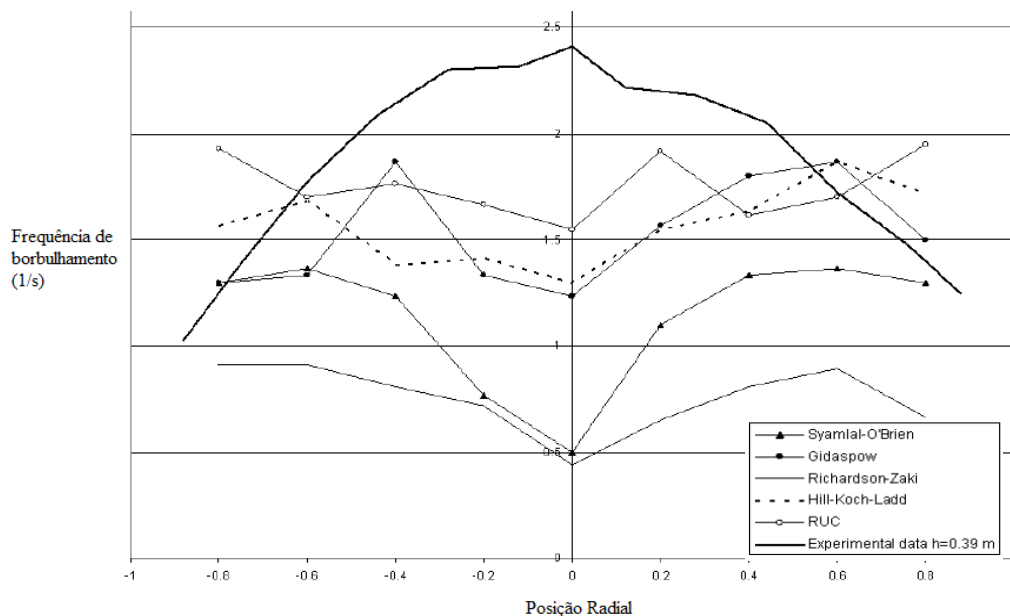


Figura 2.2 Frequência de borbulhamento previsto pelos modelos de arrasto em comparação com dados experimentais.

Fonte: Adaptado de Lundberg *et al.* (2008)

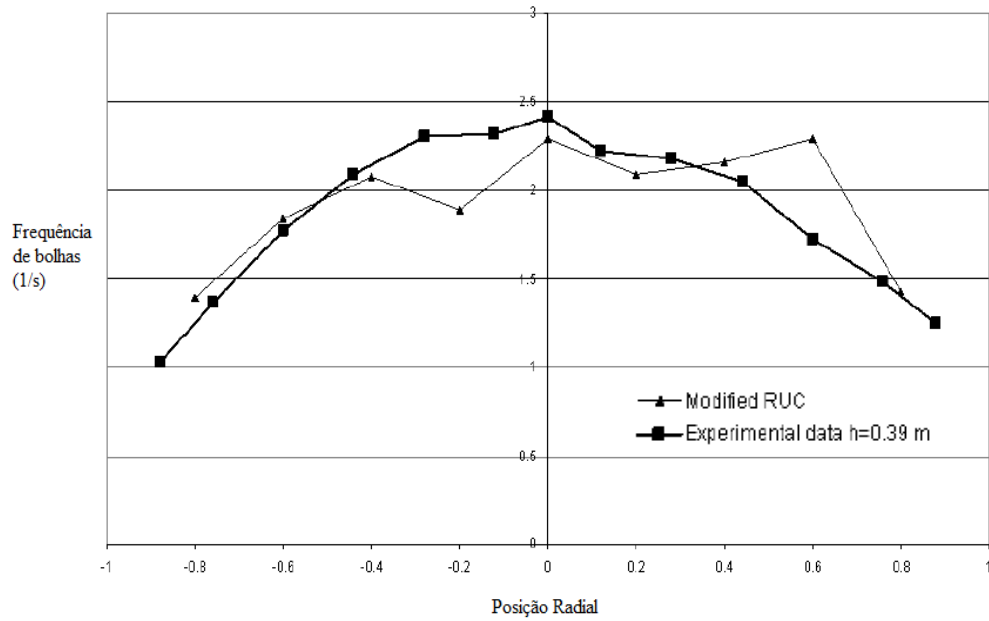


Figura 2.3 Frequência de borbulhamento previsto pelo modelo de arrasto RUC modificado em comparação com dados experimentais.  
 Fonte: Adaptado de Lundberg *et al.* (2008)

Behjat *et al.* (2008), em um estudo sobre os fenômenos da hidrodinâmica e transferência de calor em um reator de leito fluidizado, utilizou o código MFIX e, comparando com o modelo de arrasto de Gidaspow (1986), mostrou que o modelo de arrasto de Syamlal e O'Brien (1993) apresenta melhores previsões da expansão do leito e da hidrodinâmica de um escoamento sólido-gás, mas, na formação das bolhas, os dois modelos apresentam resultados similares (Fig. 2.4).

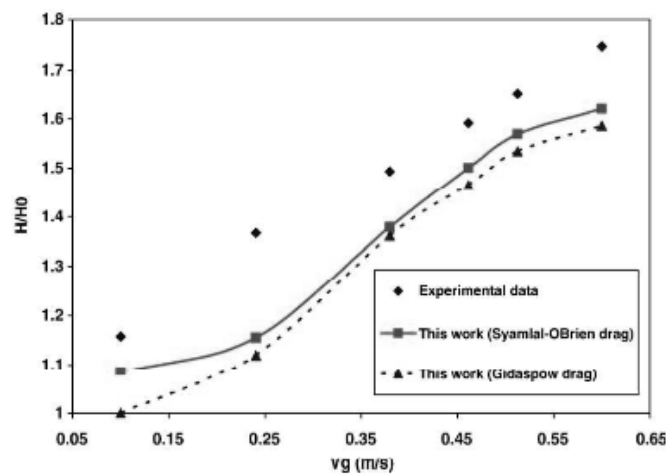


Figura 2.4 Comparação da expansão do leito simulado com os dados experimentais.  
 Fonte: Behjat *et al.* (2008).

Ramesh e Raajenthiren (2010) apresentam uma revisão de modelos de arrasto sólido-gás em LFC, com distribuição uniforme de gás, utilizando o código ANSYS FLUENT. Nesta revisão os autores utilizam os modelos de arrasto sólido-gás de Syamlal e O'Brien (1993), Gidaspow (1986) e Arastoopour (1990). O modelo de Syamlal e O'Brien (1993) sofreu modificações nos parâmetros que correspondem à velocidade de mínima fluidização. Neste estudo são comparados com dados experimentais a fração volumétrica dos sólidos e a velocidade axial das partículas (Fig. 2.5). O modelo de Syamlal e O'Brien modificado apresentou os melhores resultados em comparação com dados experimentais, no qual os modelos de arrasto de Gidaspow e Arastoopour apresentaram previsões similares. Os modelos de Syamlal e O'Brien e Gidaspow são modelos padrão no FLUENT, e o modelo de arrasto de Syamlal e O'Brien modificado foi implementado pelos autores.

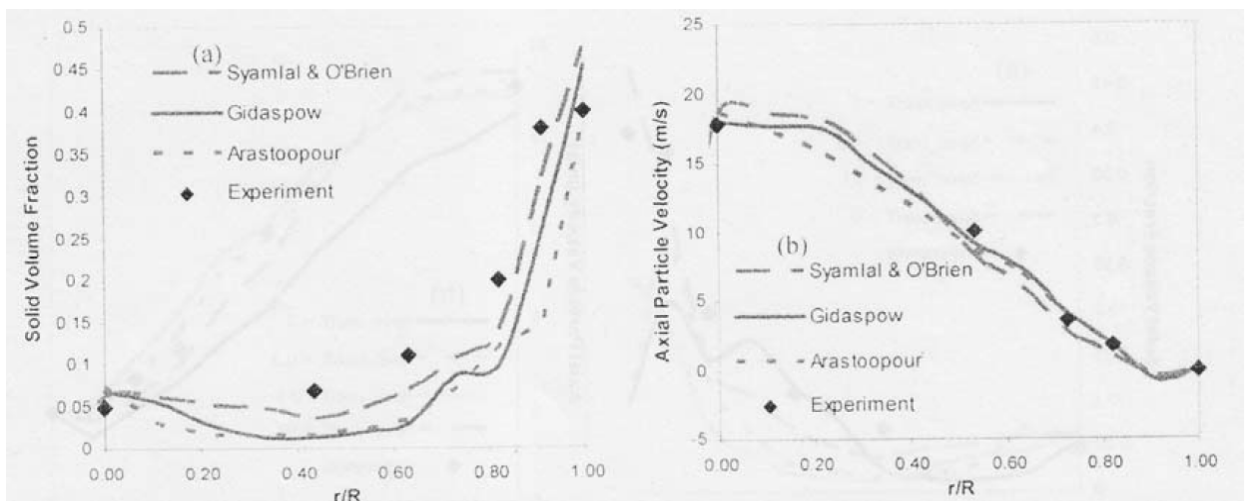


Figura 2.5 Comparação com dados experimentais dos perfis radiais da fração volumétrica de sólidos e velocidade axial das partículas dos diferentes modelos de arrasto.

Fonte: Ramesh e Raajenthiren (2010).

Hosseini *et al.* (2010) utilizaram o código MFIX em um estudo de CFD da distribuição de sólidos e padrões de circulação em leito fluidizado sólido-gás. O modelo Euleriano para escoamento multifásico integrado à teoria cinética do escoamento granular foi utilizado. Os autores afirmam que o modelo de arrasto é um parâmetro chave na modelagem de gás em leito fluidizado, o qual é necessário ser otimizado. Por isso são avaliados os modelos de Syamlal e O'Brien, Gidaspow e Arastoopour (Fig. 2.6). Para o caso de distribuição de gás uniforme, o modelo de Arastoopour é utilizado por apresentar previsões em concordância com dados experimentais. Já no caso de distribuição parcial, o modelo de Syamlal e O'Brien é o mais indicado.

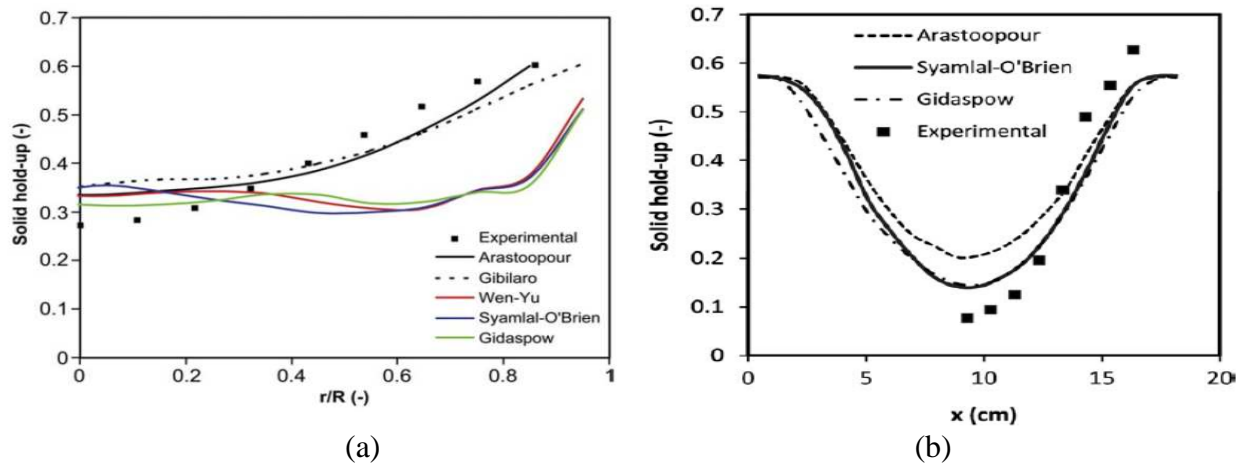


Figura 2.6 Comparação dos modelos de arrasto na distribuição de sólidos com distribuidor de gás (a) completo e (b) parcial.  
Fonte: Hosseini *et al.* (2010).

Recentemente, Esmaili e Mahinpey (2011) apresentaram um estudo sobre o ajuste de correlações de arrasto sólido-gás na simulação de LFB, no qual utilizaram o código ANSYS FLUENT e a abordagem Euler-Euler. Neste trabalho os autores utilizam onze modelos de arrasto sólido-gás (Richardson e Zaki, 1954; Gidaspow, 1986; Syamlal e O'Brien ajustado, 1993; Gibilaro, 1985; Arastoopour, 1990; Hill Koch Ladd, 2001; Zhang-Reese, 2003; RUC, 1988; Di Felice, 1994, Di Felice ajustado, 1994 e Wen-Yu, 1966). Os resultados são comparados com dados experimentais em relação à expansão do leito e queda de pressão (Fig. (2.7) e (2.8)). Os autores ainda comparam as simulações de leito fluidizado em três e duas dimensões.

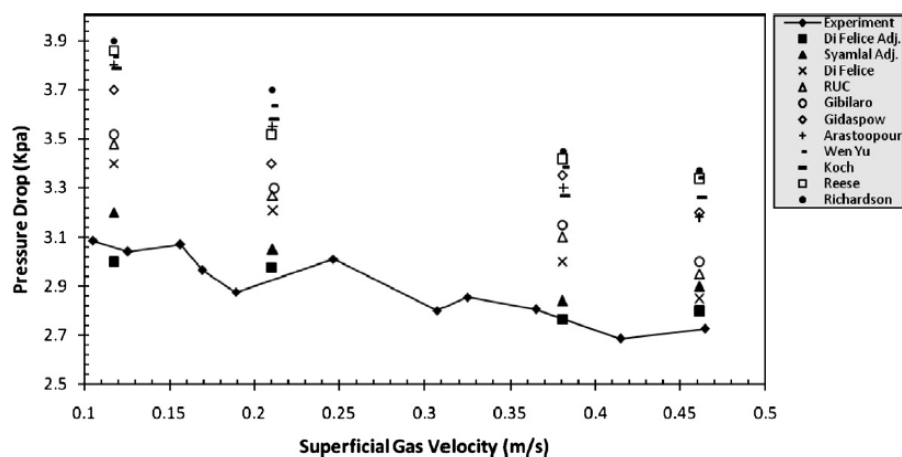


Figura 2.7 Queda de pressão do leito previsto pelos modelos de arrasto em comparação com dados experimentais.  
Fonte: Esmaili e Mahinpey (2011).

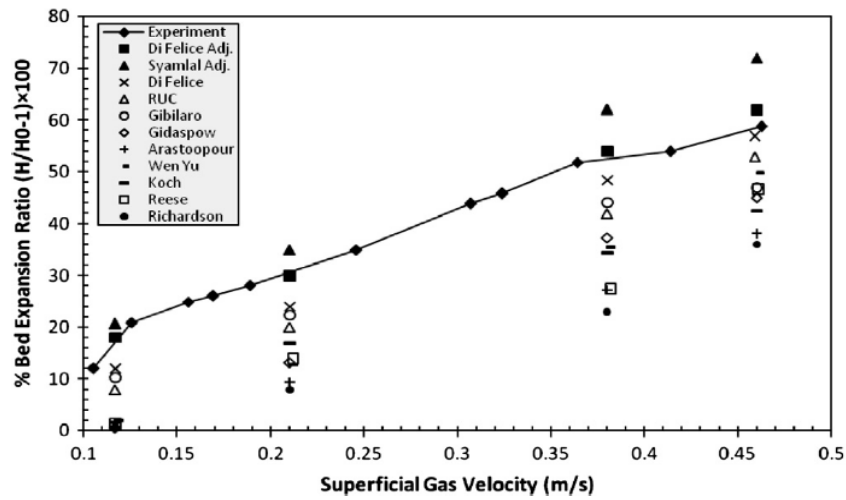


Figura 2.8 Expansão do leito previsto pelos modelos de arrasto em comparação com dados experimentais.

Fonte: Esmaili e Mahinpey (2011).

Concluiu-se que o modelo de arrasto de Di Felice ajustado apresenta previsões no comportamento hidrodinâmico mais precisas, e que as simulações tridimensionais consomem um tempo computacional maior, mas apresentam resultados com maior concordância em relação aos dados experimentais.

### 3 MODELAGEM MATEMÁTICA

Este capítulo descreve a modelagem matemática dos problemas abordados no presente trabalho, a qual se baseia na teoria hidrodinâmica para escoamentos multifásicos do tipo sólido-gás particulado. As equações descritas nesta seção foram adaptadas de Syamlal *et al.* (1993) e atualizações por Benyahia *et al.* (2009), as quais compõem o manual teórico do código MFIX.

Algumas definições são importantes para o estabelecimento do modelo matemático utilizado. Estas definições são enumeradas a seguir.

- Mistura: é um meio material constituído por dois ou mais componentes, os quais são diferenciados por sua composição química ou pela fase em que se encontram.
- Espécie: é cada espécie química presente na mistura.
- Fase: é uma quantidade de matéria a qual se encontra no mesmo estado físico, *i.e.*, sólido, líquido ou gasoso. No caso de escoamentos particulados, podem-se definir várias fases sólidas.
- Fase sólida: é uma quantidade de matéria no estado sólido, caracterizada por sua massa específica e granulometria.

No código MFIX a mistura pode ser constituída da fase gasosa adicionada de uma ou mais fases sólidas, ou seja, de  $M$  fases sólidas. A mistura consiste, então, ao todo, de  $M + 1$  fases. Para os escoamentos de interesse no presente trabalho, a mistura constitui-se da fase gasosa adicionada de uma fase sólida.

Escoamentos multifásicos costumam ser abordados utilizando dois modelos, Euler-Euler ou Euler-Lagrange. No primeiro deles, cada uma das fases é modelada como um meio contínuo a partir de um referencial Euleriano fixo no espaço. No modelo Euler-Lagrange, o meio fluido (gás ou líquido) é modelado a partir de um referencial Euleriano, enquanto que para a fase particulada a equação do movimento de Newton é aplicada explicitamente a partir de um referencial Lagrangeano, fixo sobre cada partícula. Portanto, o modelo Euleriano utiliza um sistema de referência fixo no espaço, e no modelo Lagrangeano as coordenadas do sistema de referência seguem cada partícula durante o seu movimento.

O custo computacional de aplicações utilizando a abordagem Lagrangeana é muito elevado quando comparado com a abordagem Euleriana. Por isso, a abordagem Euler-Euler é

a mais utilizada em simulações computacionais de aplicações em leito fluidizado. Boemer *et al.* (1997) afirma que a abordagem Euleriana associada à teoria cinética de escoamentos granulares (KTGF), descreve o processo de formação das bolhas do leito com boa concordância com medições realizadas.

No presente trabalho, utiliza-se o modelo Euler-Euler, no qual se assume que cada componente ocupa todo o domínio do problema. Sendo assim, as espécies são consideradas como contínuos interpenetrantes e suas concentrações ao longo do domínio são caracterizadas por suas respectivas frações volumétricas. Dentro da modelagem Euleriana, ainda se pode utilizar duas abordagens alternativas, conhecidas como modelo homogêneo e modelo não homogêneo. Na abordagem do modelo homogêneo, um campo de escoamento comum é compartilhado por todas as fases, bem como outros campos relevantes, tais como temperatura e turbulência. As equações para a mistura são obtidas pelo somatório, sobre todas as fases, das equações de transporte para cada uma das fases, resultando em uma única equação para a propriedade transportada. No modelo não homogêneo, utilizado no presente trabalho, são estabelecidas equações de transporte das quantidades envolvidas no problema para cada um dos componentes da mistura. Assume-se que cada componente tenha seu próprio campo de velocidade e pressão (ANSYS INC., 2005).

Também é importante que se explicitem alguns símbolos matemáticos que são utilizados ao longo do trabalho para denotar as grandezas a elas relacionadas:

$\alpha_n$ : Fração volumétrica da fase  $n$ . Representa a concentração em volume da espécie  $n$  na mistura, a qual pode variar temporal e espacialmente. Tem-se ainda que, localmente,

$$\sum_{n=1}^{M+1} \alpha_n = 1 \quad (3.1)$$

$\rho_n$ : Massa específica da espécie  $n$ , ou seja, é a massa específica da espécie  $n$  pura.

$\rho_n^*$ : Massa específica efetiva da espécie  $n$ , Eq.(3.2).

$$\rho_n^* = \alpha_n \rho_n \quad (3.2)$$

$\rho$  - Massa específica da mistura, a qual é dada por:

$$\rho = \sum_{n=g,s} \alpha_n \rho_n \quad (3.3)$$

Assim sendo, na Eq. (3.4),  $\alpha_g$  representa a fração volumétrica da fase fluida, e  $\alpha_s$  representa a fração volumétrica da fase sólida.

$$\alpha_g + \alpha_s = 1 \quad (3.4)$$

### 3.1 BALANÇO DE MASSA

O princípio de conservação de massa assegura que a massa de um sistema fechado não varia com o tempo. No caso de um volume de controle em que são permitidas entradas e saídas de massa, a variação da quantidade de massa no sistema aberto se dá por um balanço entre as entradas e saídas, o qual é matematicamente descrito pela equação da continuidade (*e.g.*, BEJAN, 1990):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (3.5)$$

onde  $\mathbf{v}$  é o vetor velocidade.

No caso de um sistema multicomponente, por este mesmo princípio, a variação temporal da massa específica da espécie  $n$  é igual à taxa com que este componente é produzido ou consumido através de processos químicos ou pela mudança de fase. Esta produção se dá à custa de uma taxa de consumo de outros dos  $M + 1$  componentes, e vice-versa, de forma que se mantenha o balanço de massa total expresso pela Eq. (3.5). Sendo assim, pode-se escrever a equação da continuidade para cada componente da mistura conforme a Eq. (3.6):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_n \rho_n) + \nabla \cdot (\alpha_n \rho_n \mathbf{v}_n) = 0 \quad (3.6)$$

onde  $\mathbf{v}_n$  é a velocidade da fase  $n$ .



### 3.1.1 Equação de Estado

A fase fluida pode ser modelada obedecendo a Lei do gás ideal, ou como um fluido incompressível. No presente trabalho, a fase fluida é modelada como um do gás ideal, cuja equação de estado é representada pela Eq. (3.7):

$$\rho_g = \frac{p_g M_g}{RT_g} \quad (3.7)$$

onde  $M_g$  é a massa molar da fase gasosa,  $R$  é a constante universal dos gases,  $T_g$  é a temperatura termodinâmica do gás e  $p_g$  é a pressão do gás. Esta aproximação é considerada apropriada para o ar a pressões próximas à pressão atmosférica.

## 3.2 BALANÇO DA QUANTIDADE DE MOVIMENTO

O balanço da quantidade de movimento, ou o balanço das forças em um volume de controle, é baseado na formulação da Segunda Lei do movimento de Newton. Em um volume de controle, com fluxo de massa constante, a quantidade de movimento é obtida através do produto da massa pela velocidade no centro de massa (ZOHDI, 2007).

As equações do movimento são baseadas em balanços de quantidade de movimento, realizados sobre um volume de controle, para cada um dos componentes da mistura. Para a fase gasosa, este balanço é dado pela Eq. (3.8), e para a fase sólida é dado pela Eq.(3.9):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g) = -\alpha_g \nabla p_g + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_g + \alpha_g \rho_g \mathbf{g} - \mathbf{I}_{gs} \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s \mathbf{v}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \mathbf{v}_s \mathbf{v}_s) = -\alpha_s \nabla p_g + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_s + \alpha_s \rho_s \mathbf{g} + \mathbf{I}_{gs} \quad (3.9)$$

No lado esquerdo das Eq. (3.8) e (3.9), o primeiro termo representa a taxa de variação em função do tempo da quantidade de movimento e o segundo termo é a advecção da quantidade de movimento. O primeiro e segundo termo à direita da equação representam as forças de superfície, o terceiro termo representa as forças de campo (devido à gravidade  $\mathbf{g}$ ) e o último termo representa a transferência de quantidade de movimento entre as fases. Nas Eq.

(3.8) e (3.9),  $p_g$  é a pressão do gás,  $\tau$  é o tensor tensão da fase,  $\mathbf{I}_{gs}$  representa as forças de interação da transferência da quantidade de movimento entre a fase gás e a fase sólida.

### 3.2.1 Transferência da Quantidade de Movimento Fluido-Sólido

A transferência da quantidade de movimento entre a fase fluida e a fase sólida, também chamada de força de interação, é representada nas Eq. (3.8) e (3.9) por  $\mathbf{I}_{gs}$ .

Para generalizar as equações de um sistema de uma única partícula e descrever as forças de interação em um sistema formado por várias partículas, é necessário levar em conta outros fatores.

- O efeito de aproximação de outras partículas implica que a força de arrasto passa a depender também da fração de volume de sólidos, além do número de Reynolds de cada partícula. Este efeito deve ser descrito por equações formuladas a partir de dados experimentais.
- Para a formulação da densidade de partículas, deve ser utilizado um tamanho médio de acordo com as suas superfícies. No caso de haver partículas de diferentes tamanhos, é necessário utilizar uma ou mais frações que as diferenciem, baseando-se nas suas médias.

Johnson *et al.* (1990), em uma revisão sobre os mecanismos de interações em escoamentos do tipo fluido-sólidos, identificaram oito diferentes mecanismos de interação. São eles: força de arrasto, flutuação, efeito da massa virtual, força de sustentação de Saffman, força de Magnus, força de Basset, força de Faxen e forças causadas pelas diferenças de temperatura e massa específica. A força de arrasto é causada pelas diferentes velocidades entre as fases gasosa e sólida, causando atrito entre a superfície do sólido e o fluido. A flutuação ocorre devido ao gradiente de pressão do fluido. O efeito de massa virtual é causado pela aceleração relativa entre as fases gasosa e sólida. A força de sustentação de Saffman aparece devido aos gradientes de velocidade do fluido. A força de Magnus é devido ao spin das partículas. A força de Basset depende do histórico do movimento da partícula no fluido. A força de Faxen é uma correção que se aplica ao efeito de massa virtual e à força de Basset, que levam em conta os gradientes de velocidade do fluido (SYAMLAL *et al.*, 1993).

Devido à grande diferença de densidade entre as fases, apenas a força de arrasto tem sido considerada na maioria dos estudos atualmente (AHUJA E PATWARDHAN, 2008). No

presente trabalho, consideram-se somente os efeitos de arrasto na transferência da quantidade de movimento fluido-sólidos, descrito pela Eq. (3.10):

$$\mathbf{I}_{gs} = \beta_{gs} (\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s) \quad (3.10)$$

A força de arrasto (Eq. 3.10) é modelada em função do coeficiente da quantidade de movimento na interface, ou função de arrasto ( $\beta_{gs}$ ), e da velocidade relativa entre as fases. A força é determinada a partir do fator de arrasto ( $C_D$ ), ou a partir da queda de pressão por unidade de comprimento (MINETO, 2009).

Para generalizar a correlação do arrasto, de uma única fase sólida para várias fases sólidas, as partículas são consideradas idênticas, de mesmo diâmetro e mesma massa específica. Esta fase pode ser representada pela fração de volume de uma única fase sólida  $\alpha_s$ , ou por  $M$  diferentes fases sólidas, representada pela soma de suas respectivas frações de volume. Apenas uma equação da quantidade de movimento existe para o primeiro caso.

Correlações para  $\beta_{gs}$  podem ser formuladas a partir de correlações para a queda de pressão no escoamento de gás através de um leito empacotado (leito na condição de mínima fluidização), como a correlação de Ergun (1952), que dá origem à correlação de Gidaspow (1986) para  $\beta_{gs}$ . Outro modo é a obtenção do modelo de arrasto a partir de correlações para a velocidade terminal (velocidade uniforme quando ocorre o equilíbrio entre as forças de arrasto e gravitacional) em um leito fluidizado, expresso como função da fração de vazio e do número de Reynolds. Desse modo foi obtida a correlação de Syamlal e O'Brien (1993).

No presente trabalho, são analisadas as correlações de arrasto de Gidaspow (1986), Syamlal e O'Brien (1993), Arastoopour *et al.* (1990) e Hill-Koch-Ladd (2001).

#### 1.2.1.1 Correlação de Arrasto de Gidaspow

O modelo de arrasto de Gidaspow (1986) utiliza a equação de Ergun (1952) para a fase densa, onde  $\alpha_g < 0,8$ , e para a fase dispersa, onde  $\alpha_g \geq 0,8$  utiliza a equação de Wen e Yu (1966) (MINETO, 2009).

O modelo de arrasto de Wen e Yu é baseado nos dados experimentais de Richardson e Zaki (1954), válido quando as forças internas são desprezadas e o comportamento do fluxo é dominado pelas forças viscosas. Este modelo é descrito pela Eq. (3.11) quando  $\alpha_g \geq 0,8$ . O

fator de arrasto  $C_D$ , neste modelo, é para uma partícula esférica quando  $Re < 1000$ . A equação de Ergun, através de meios porosos, relaciona o arrasto com a queda de pressão, também descrito na Eq. (3.11) quando  $\alpha_g < 0,8$ . Esta equação é uma combinação da equação de Kozeny Carman, que descreve a viscosidade para um número de Reynolds baixo, e a equação de Burke Plummer, que descreve a cinética para um número de Reynolds alto (LUNDBERG *et al.*, 2008).

$$\beta_{gs} = \begin{cases} \frac{3}{4} C_D \frac{\rho_g \alpha_g \alpha_s |\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s|}{d_p} \alpha_g^{-2,65} & \alpha_g \geq 0,8 \\ \frac{150 \alpha_s (1 - \alpha_g) \mu_g}{\alpha_g d_p^2} + \frac{1,75 \rho_g \alpha_s |\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s|}{d_p} & \alpha_g < 0,8 \end{cases} \quad (3.11)$$

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re} (1 + 0,15 Re^{0,687}) & Re < 1000 \\ 0,44 & Re \geq 1000 \end{cases} \quad (3.12)$$

$$Re = \frac{\rho_g \alpha_g |\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s| d_p}{\mu_g} \quad (3.13)$$

onde  $\mu_g$  é a viscosidade dinâmica da fase gasosa e  $d_p$  é o diâmetro da partícula.

### 3.2.1.2 Correlação de Arrasto de Syamlal e O'Brien

O modelo de arrasto proposto por Syamlal e O'Brien (1987 e 1993), assume que o número de Arquimedes, que relaciona as forças gravitacionais com as forças viscosas, é o mesmo para uma única partícula ou para um sistema de partículas. Considerando uma única partícula esférica, o modelo é descrito pela Eq. (3.14) e modificado pela correlação da velocidade terminal ( $V_r$ ). A correlação da velocidade terminal é a velocidade terminal de uma partícula em um sistema, dividido pela velocidade terminal de uma única esfera (LUNDBERG *et al.*, 2008).

$$\beta_{gs} = \frac{3 \alpha_s \alpha_g \rho_g}{4 V_r^2 d_p} C_D |\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s| \quad (3.14)$$

Na Eq. (3.14),  $d_p$  é o diâmetro da partícula e  $C_D$  é o fator de arrasto baseado no modelo de partícula única proposto por Dalla Valle (1948) e descrito na Eq. (3.15).

$$C_D = \left[ 0,63 + 4,8 \sqrt{\frac{V_r}{Re}} \right]^2 \quad (3.15)$$

A correlação da velocidade terminal  $V_r$  é baseada no modelo de dados experimentais de Richardson e Zaki (1954) que, para várias fases sólidas, pode ser calculada por uma única correlação numérica, mas uma formula explícita não pode ser derivada. Para uma formula fechada,  $V_r$  pode ser derivada por uma correlação semelhante desenvolvido por Garside e Al-Dibouni (1977) (Eq. 3.16).

$$V_r = 0,5 \left( A - 0,06Re + \sqrt{(0,06Re)^2 + 0,12Re(2B - A) + A^2} \right) \quad (3.16)$$

onde,

$$A = \alpha_g^{4,14} \quad (3.17)$$

e

$$B = \begin{cases} 0,8\alpha_g^{1,28} & \alpha_g \leq 0,85 \\ \alpha_g^{2,65} & \alpha_g > 0,85 \end{cases} \quad (3.18)$$

O número de Reynolds ( $Re$ ) utilizado no modelo de arrasto de Syamlal e O'Brien é descrito pela Eq. (3.13).

### 3.2.1.3 Correlação de Arrasto de Hill-Koch-Ladd

A correlação de arrasto Hill-Koch-Ladd (HKL), proposta por Hill *et al.* (2001), é baseada nas simulações Lattice-Boltzmann. O modelo de arrasto HKL apresenta resultados precisos dentro do intervalo de frações de vazio e número de Reynolds utilizados. Mas nas simulações de leito fluidizado, esta correlação apresenta falhas para toda gama de frações de vazio, inclusive nulas, e números de Reynolds. Benyahia *et al.* (2006), desenvolveram uma

extensão da correlação de arrasto HKL que se aplica a toda gama de frações nulas e números de Reynolds. A extensão desenvolvida mistura a correlação de arrasto HKL com limitações conhecidas da função de arrasto sólido-gás, no qual as equações de HKL foram utilizadas como relações constitutivas para o modelo de arrasto sólido-gás. Esta modificação utilizou a conectividade natural entre as diferentes funções nos pontos de intersecção, e quando as funções não se cruzam, utiliza-se um fator de ponderação para obter uma boa transição, eliminando assim a descontinuidade do coeficiente de arrasto.

O modelo de arrasto HKL, tendo o fator de arrasto ( $C_D$ ) já incluído, é definido pela Eq. (3.19) (BENYAHIA, 2009):

$$\beta_{gs} = 18\mu_g (1 - \alpha_s)^2 \alpha_s \frac{F}{d_p^2} \quad (3.19)$$

O fator de arrasto ( $F$ ) é um fator adimensional que relaciona o número de Reynolds com a concentração de partículas (Eq. (3.20), (3.21) e (3.22)).

$$F = 1 + \frac{3}{8} Re \quad \begin{cases} \alpha_s \leq 0,01 \\ Re \leq \frac{(F_2 - 1)}{\left(\frac{3}{8} - F_3\right)} \end{cases} \quad (3.20)$$

$$F = F_0 + F_1 Re^2 \quad \begin{cases} \alpha_s > 0,01 \\ Re \leq \frac{F_3 + \sqrt{F_3^2 - 4F_1(F_0 - F_2)}}{2F_1} \end{cases} \quad (3.21)$$

$$F = F_2 + F_3 Re \quad \begin{cases} \alpha_s \leq 0,01 & Re > \frac{(F_2 - 1)}{\left(\frac{3}{8} - F_3\right)} \\ \alpha_s > 0,01 & Re > \frac{F_3 + \sqrt{F_3^2 - 4F_1(F_0 - F_2)}}{2F_1} \end{cases} \quad (3.22)$$

Os coeficientes são determinados pelas Eq. (3.23) a (3.28):

$$F_0 = \left\{ (1-w) \left[ \frac{1 + 3\sqrt{\frac{\alpha_s}{2}} + \left(\frac{135}{64}\right)\alpha_s \ln(\alpha_s) + 17,14\alpha_s}{1 + 0,681\alpha_s - 8,4\alpha_s^2 + 8,16\alpha_s^3} \right] + w \left[ 10 \frac{\alpha_s}{(1-\alpha_s)^3} \right] \right\}, \quad 0,01 < \alpha_s < 0,4 \quad (3.23)$$

$$F_0 = 10 \frac{\alpha_s}{(1-\alpha_s)^3}, \quad \alpha_s \geq 0,4 \quad (3.24)$$

$$F_1 = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\alpha_s}} / 40 & 0,01 < \alpha_s \leq 0,1 \\ 0,11 + 0,00051 \exp(11,6\alpha_s) & \alpha_s > 0,1 \end{cases} \quad (3.25)$$

$$F_2 = \left\{ (1-w) \left[ \frac{1 + 3\sqrt{\frac{\alpha_s}{2}} + \left(\frac{135}{64}\right)\alpha_s \ln(\alpha_s) + 17,89\alpha_s}{1 + 0,681\alpha_s - 11,03\alpha_s^2 + 15,41\alpha_s^3} \right] + w \left[ 10 \frac{\alpha_s}{(1-\alpha_s)^3} \right] \right\}, \quad \alpha_s < 0,4 \quad (3.26)$$

$$F_2 = 10 \frac{\alpha_s}{(1-\alpha_s)^3}, \quad \alpha_s \geq 0,4 \quad (3.27)$$

$$F_3 = \begin{cases} 0,9351\alpha_s + 0,03667 & \alpha_s < 0,0953 \\ 0,0673 + 0,212\alpha_s + 0,0232/(1-\alpha_s)^5 & \alpha_s \geq 0,0953 \end{cases} \quad (3.28)$$

O número de Reynolds é baseado no raio das partículas:

$$Re = \frac{\rho_g (1-\alpha_s) |\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s| d_p}{2\mu_g} \quad (3.29)$$

e

$$w = e^{(-10(0,4-\alpha_s)/\alpha_s)} \quad (3.30)$$

### 3.2.1.4 Correlação de Arrasto de Arastoopour

A correlação de arrasto de Arastoopour *et al.* (1990) é uma modificação da correlação de Gibilaro *et al.* (1985). Esta correlação pode ser utilizada em todas as faixas de fração volumétrica de sólidos. Esta correlação não existe na distribuição do código MFIX, e foi adicionada ao código durante a realização deste trabalho, através da modificação das rotinas em FORTRAN do modelo. O coeficiente de arrasto ( $C_D$ ) é dado por Gibilaro *et al.* (1985).

$$\beta_{gs} = \left( \frac{17,3}{Re} + 0,336 \right) \frac{\rho_g}{d_s} |\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s| (1 - \alpha_g) \alpha_g^{-2,8} \quad (3.31)$$

Onde  $Re$  é descrito na Eq.(3.13).

### 3.2.2 Tensor das Tensões Viscosas da Fase Fluida

O tensor tensão para a fase fluida, sendo gás ou líquido, é representada pela Eq. (3.32).

$$\boldsymbol{\tau}_g = 2\mu_g \mathbf{S} \quad (3.32)$$

onde  $\mathbf{S}$  é o tensor taxa de deformação descrito na Eq.(3.33):

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{v}_g + (\nabla \mathbf{v}_g)^T) - \frac{1}{3} \nabla \cdot \mathbf{v}_g \boldsymbol{\delta} \quad (3.33)$$

onde  $\boldsymbol{\delta}$  é o tensor identidade.

### 3.2.4 Tensor Tensão da Fase Sólida

A transferência da quantidade de movimento na fase particulada ocorre devido ao escoamento contínuo e pelo contato de curto prazo entre as partículas. Mas, em escoamentos densos com baixas taxas de cisalhamento, o contato entre as partículas em longo prazo, como o deslizamento ou rolamento, torna-se dominante na geração de tensões, gerando grandes quantidades de energia térmica a ser dissipada. (LINDBORG, 2007).



Conforme Jaeger e Nagel (1992), os materiais granulares não podem ser classificados como sólidos ou líquidos, pois apresentam comportamentos muito diferentes das demais substâncias. Para a análise de um leito em fluidização, o conjunto de partículas sólidas é considerado como um fluido.

O escoamento granular pode ser classificado como um regime viscoso ou de cisalhamento rápido, quando surge devido à transferência da quantidade de movimento pelo movimento de translação e rotação das partículas. Outra classificação para o fluxo granular é o regime plástico ou de cisalhamento lento, que pelo fato das partículas estarem em contato permanente ocorre a transferência de quantidade de movimento devido ao atrito entre eles. As colisões entre as partículas são inelásticas, o que causa a dissipação de energia cinética em calor. Já as colisões entre as moléculas de gás denso são elásticas. Estes dois modelos de escoamento granular, viscoso e plástico, estão ilustrados na Fig. (3.1) (SYAMLAL E O'BRIEN, 1993 e LINDBORG, 2007).



Figura 3.1 (a) fluxo granular em regime viscoso e (b) fluxo granular em regime plástico.

Para descrever as tensões dos regimes, viscoso e plástico, Johnson e Jackson (1987) propuseram um modelo que descreve o cisalhamento de um fluxo granular, de acordo com as teorias destes regimes, adicionando duas equações. Neste trabalho, utilizando o MFIX, a combinação das teorias do regime viscoso e plástico, ocorre ao introduzir a condição  $\alpha_g^*$  para a fração de vazio para a mínima fluidização.

Regime plástico se  $\alpha_g \leq \alpha_g^*$

Regime viscoso se  $\alpha_g > \alpha_g^*$

Em um regime de escoamento rápido, a formulação dos tensores vem sendo desenvolvido e revisado por muitos pesquisadores: Bagnold (1954); Ogawa, Umemura e Oshima (1980); Shen e Akerman (1982); Haff (1983); Savage (1984); Jenkins (1987); Boyle

e Massoudi (1989). Dentre eles, Savage e Jeffrey (1981) e Jenkins e Savage (1983) derivaram as expressões dos tensores tensão, ao descrever a transferência da quantidade de movimento por colisão, utilizando a teoria cinética dos gases. A energia cinética, que representa um fluxo granular rápido, é transformada em energia cinética de flutuação aleatória das partículas, e depois é dissipada em forma de calor devido às colisões inelásticas, onde a energia cinética de flutuação é descrita pela temperatura granular ( $\Theta$ ). Para leito fluidizado, os tensores de fluxo granular rápido são incluídos nos modelos de fluxo de duas fases, por exemplo, Syamlal, 1987c; Boyle e Massoudi, 1989; Sinclair e Jackson, 1989; Ding e Gidaspow, 1990; Louge *et al.*, 1991.

Lun *et al.* (1984) desenvolveu a teoria cinética para partículas esféricas, homogêneas e inelásticas que influencia os termos de viscosidade. Utiliza-se esta teoria para descrever os tensores para múltiplas fases granulares. Assim, as equações abaixo expressam os tensores para a fase sólida em regime viscoso, onde a Eq. (3.34) descreve a pressão granular, também chamado de modelo de turbulência de Simonin (BENYAHIA, 2005) para a pressão dos sólidos.

$$p_s^v = \alpha_s \rho_s \Theta + K_1 \alpha_s^2 \Theta \quad (3.34)$$

$$K_1 = 2(1+e)\rho_s g_0 \quad (3.35)$$

sendo  $g_0$  a função de distribuição radial e,  $e$  é o coeficiente de restituição.

Em um modelo de dois fluidos aplicado a um escoamento sólido-gás denso em leito fluidizado, o nível do coeficiente de restituição tem grande influência para a obtenção de resultados que estejam em conformidade com os dados experimentais. (LINDBORG *et al.*, 2007). No presente trabalho, as simulações compreendem somente uma fase sólida, e a função distribuição radial é calculado pela correlação de Carnahan-Starling (MFI, 2011), descrito na Eq. (3.36):

$$g_0 = \frac{1 - 0,5\alpha_s}{(1 - 0,5\alpha_s)^3} \quad (3.36)$$

O tensor granular em regime viscoso é expresso pela Eq. (3.37):

$$\boldsymbol{\tau}_s^v = \left[ -p_s^v + \lambda_s^v \nabla \cdot \mathbf{v}_s \right] \boldsymbol{\delta} + 2\mu_s^v \mathbf{S} \quad (3.37)$$

onde,  $\mathbf{S}$  é o tensor taxa de deformação, descrito anteriormente pela Eq. (3.33) e  $\boldsymbol{\delta}$  é o tensor identidade. Os termos  $\mu_s^v$  e  $\lambda_s^v$  do tensor granular são os coeficientes de viscosidade dinâmica e volumétrica, respectivamente, para a fase sólida.

$$\mu_s^v = K_3 \alpha_s \sqrt{\Theta} \quad (3.38)$$

$$\lambda_s^v = K_2 \alpha_s \sqrt{\Theta} \quad (3.39)$$

sendo as constantes,

$$K_2 = \frac{4d_p \rho_s (1+e) \alpha_s g_0}{3\sqrt{\pi}} - \frac{2}{3} K_3 \quad (3.40)$$

e

$$K_3 = \frac{d_p \rho_s}{2} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{3(3-e)} \left[ 1 + 0,4(1+e)(3e-1) \alpha_s g_0 \right] + \frac{8\alpha_s g_0 (1+e)}{5\sqrt{\pi}} \right\} \quad (3.41)$$

Os tensores de um fluxo granular de regime plástico são descritos por teorias desenvolvidas a partir do estudo da mecânica dos solos, em que se assume o comportamento dos materiais independente da taxa de tensão (por exemplo Tuzun *et al.*, 1982 e Jackson, 1983). Conforme descrito anteriormente, em um regime plástico ocorre atrito entre as partículas que gera os tensores no escoamento. Estes tensores são descritos por modelos fenomenológicos, diferente de um fluxo granular rápido. A teoria da mecânica dos solos utiliza a ideia de uma função de campo. Esta função define a região no qual o material se comportará elasticamente, no espaço das tensões, e o ponto das tensões é encontrado durante a deformação plástica. Se a elasticidade não for considerada, o material permanecerá rígido. Outro componente da mecânica dos solos é a regra de escoamento. Esta regra determina a relação entre os componentes de tensão e taxas dos tensores das tensões (SYAMLAL E O'BRIEN, 1993 e MINETO, 2009).

A teoria do estado crítico, desenvolvido pela *Cambridge School of Soil Mechanics* foi detalhada por Jackson (1983), o qual descreve a consolidação e dilatação de um fluxo granular. Para um regime plástico, geralmente é utilizado uma função similar. A Eq. (3.42) descreve a compressão para fase sólida e representa o termo de pressão para o escoamento, semelhante às teorias geralmente utilizadas para este tipo de fluxo (JENIKE, 1987).

$$p_s^p = \alpha_s \left[ 10^{25} (\alpha_g^* - \alpha_g)^{10} \right] \quad (3.42)$$

No MFIX foi incluído o tensor tensão dos sólidos, baseado na teoria do estado crítico. Esta inclusão é feita com a generalização tridimensional (GRAY E STILES, 1988) de uma função de produção (PITMAN E SCHAEFFER, 1987), onde a pressão dos sólidos tende a zero quando chega ao limite de zero atrito interno. Esta é uma condição utilizada para diminuir o tempo de consumo computacional de um fluxo de regime plástico. No código MFIX existe a opção de uma formulação mais simples, proposto por Schaeffer (1987), em que mesmo quando há várias fases sólidas, o cálculo é feito apenas para os sólidos da primeira fase (Eq. 3.43).

$$\boldsymbol{\tau}_s^p = 2\mu_s^p \mathbf{D}_s \quad (3.43)$$

onde,  $\mathbf{D}_s$  é o tensor taxa de deformação da fase sólida:

$$\mathbf{D}_s = \frac{1}{2} \left[ \nabla \mathbf{v}_s + (\nabla \mathbf{v}_s)^T \right] \quad (3.44)$$

$$\mu_s^p = \frac{10^{25} (\alpha_g^* - \alpha_g)^{10} \sin \phi}{2\sqrt{I_{2D}}} \quad (3.45)$$

$$I_{2D} = \frac{1}{6} \left[ (\mathbf{D}_{s11} - \mathbf{D}_{s22})^2 + (\mathbf{D}_{s22} - \mathbf{D}_{s33})^2 + (\mathbf{D}_{s33} - \mathbf{D}_{s11})^2 \right] + \mathbf{D}_{s12}^2 + \mathbf{D}_{s23}^2 + \mathbf{D}_{s31}^2 \quad (3.46)$$

A Eq. (3.46) representa o segundo invariante do tensor taxa de deformação. Para estabilizar o cálculo computacional, os cálculos dos tensores são feitos implicitamente, além de ser estabelecido um limite máximo de viscosidade, pois esses valores podem ser grandes

em um fluxo de regime plástico, tornando-se infinito quando  $\mu_g$  tende a zero. Estes cálculos exigem uma boa quantidade de tempo computacional, sendo que ao definir o ângulo ( $\phi$ ) do atrito interno igual a zero, os cálculos computacionais do tensor de fluxo plástico pode ser desativados. Sem estes tensores, em leito fixo, os cálculos podem prever a circulação de sólidos não-físicos.

De acordo com a análise linear das equações do fluxo granular (SCHAEFFER, 1987 e SCHAEFFER E PITMAN, 1988), os cálculos podem alcançar grandes instabilidades, no qual inclui os tensores de atrito. Apesar desta formulação ser provisória, está inserido no código MFIX.

### 3.3 MODELO DE TURBULÊNCIA

O modelo de turbulência utilizado no presente trabalho e inserido no código MFIX, é o modelo de turbulência  $k$ - $\varepsilon$  de Simonin, descrito por Benyahia (2005) nas Eq. (3.47) à Eq. (3.68). Este modelo é um dos mais utilizados em simulação por apresentar, na maioria dos casos, resultados com boa precisão (INOUE, 2005).

No modelo  $k$ - $\varepsilon$ ,  $k$  representa a energia cinética turbulenta, descrito na Eq.(3.47), e  $\varepsilon$  descreve a taxa de dissipação turbulenta.

$$k_g = \frac{1}{2} \overline{u'_g u'_g} \quad (3.47)$$

#### 3.3.1 Modelagem de Turbulência para a Fase Contínua

$$\alpha_g \rho_g \left[ \frac{\partial k_g}{\partial t} + \mathbf{v}_g \cdot \nabla k_g \right] = \nabla \cdot \left( \alpha_g \frac{\mu_g^t}{\sigma_k} \nabla k_g \right) + \alpha_g \boldsymbol{\tau}_g \cdot \nabla \mathbf{v}_g + \Pi_{kg} - \alpha_g \rho_g \varepsilon_g \quad (3.48)$$

$$\alpha_g \rho_g \left[ \frac{\partial \varepsilon_g}{\partial t} + \mathbf{v}_g \cdot \nabla \varepsilon_g \right] = \nabla \cdot \left( \alpha_g \frac{\mu_g^t}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon_g \right) + \alpha_g \frac{\varepsilon_g}{k_g} C_{g\varepsilon} \boldsymbol{\tau}_g \cdot \nabla \mathbf{v}_g + \Pi_{\varepsilon g} - \alpha_g \rho_g C_{s\varepsilon} \frac{\varepsilon_g^2}{k_g} \quad (3.49)$$

Nas Eq. (3.48) e (3.49) os dois termos a esquerda da equação descrevem, respectivamente, o termo transiente e o termo advectivo. O primeiro termo do lado direito da equação descreve a taxa de difusão turbulenta, o segundo termo do lado direito descreve a

taxa de produção e o termo seguinte descreve a interação turbulenta. O último termo descreve a taxa de dissipação turbulenta.

O tensor  $\tau_g$  é o tensor tensão da fase gasosa descrito pela Eq. (3.32), e  $\mu_g^t$  é a viscosidade turbulenta do gás descrita pela Eq.(3.50).

$$\mu_g^t = \rho_g C_\mu \frac{k_g^2}{\varepsilon_g} \quad (3.50)$$

onde  $C_\mu = 0,09$ .

As interações turbulentas são descritas pelas Eq. (3.51) e (3.52). O modelo utiliza as constantes empíricas:  $\sigma_k = 1,0$ ,  $\sigma_\varepsilon = 1,3$ ,  $C_{g\varepsilon} = 1,44$  e  $C_{s\varepsilon} = 1,92$  (BENYAHIA, 2005).

$$\Pi_{kg} = \beta(k_{gs} - 2k_g) \quad (3.51)$$

$$\Pi_{\varepsilon g} = C_{3\varepsilon} \left( \frac{\varepsilon_g}{k_g} \right) \Pi_{kg} \quad (3.52)$$

sendo  $\beta$  o coeficiente de arrasto,  $C_{3\varepsilon} = 1,22$  e

$$k_{gs} = \frac{n_t}{1 + (1 + X_{sg})n_t} (2k_g + 3X_{sg}\Theta_s) \quad (3.53)$$

onde  $X_{sg}$  é uma constante do modelo de Simonin (Eq. 3.54),

$$X_{sg} = \frac{\alpha_s \rho_s}{\alpha_g \rho_g} \quad (3.54)$$

e  $n_t$  é a relação entre a escala de tempo integral Lagrangeano, Eq. (3.56), e o tempo de relaxação das partículas, Eq. (3.57).

$$n_t = \frac{\tau_{gs}^t}{\tau_{gs}^x} \quad (3.55)$$

$$\tau_{gs}^t = \frac{\tau_g^t}{\sqrt{1 + C_\beta \xi_r^2}} \quad (3.56)$$

$$\tau_{gs}^x = \frac{\alpha_s \rho_s}{\beta} \quad (3.57)$$

onde

$$C_\beta = 1,8 - 1,35 \cos^2(\theta) \quad (3.58)$$

$$\xi_r^2 = \frac{3|U|^2}{2k_g} \quad (3.59)$$

e  $\tau_g^t$  é escala de tempo dos vórtices turbulentos:

$$\tau_g^t = \frac{3}{2} C_\mu \frac{k_g}{\varepsilon_g} \quad (3.60)$$

### 3.3.2 Modelagem de Turbulência para a fase dispersa

$$\alpha_s \rho_s \left[ \frac{\partial \Theta}{\partial t} + \mathbf{v}_s \cdot \nabla \Theta \right] = \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s k_s \nabla \Theta) + \alpha_s \rho_s \tau_s \nabla \cdot \mathbf{v}_s + \Pi_{ks} - \alpha_s \rho_s \varepsilon_s \quad (3.61)$$

O primeiro e o segundo termo do lado esquerdo da equação são respectivamente os termos transiente e advectivo. O primeiro termo do lado direito da equação descreve a taxa de difusão, o segundo termo descreve a taxa de produção, o termo seguinte descreve a interação turbulenta e o último termo descreve a taxa de dissipação.

A temperatura granular é representada por  $\Theta$ ,  $\tau_s$  é o tensor tensão da fase sólida (Eq.3.37) e  $k_s$  é a condutividade da energia turbulenta dos sólidos, descrito pela Eq.(3.62) (BENYAHIA, 2005).

$$k_s = \alpha_s \rho_s (k_s^{kin} + k_s^{col}) \quad (3.62)$$

onde

$$k_s^{kin} = \left( \frac{9}{10k_{gs}\eta_t} + \frac{3}{2}\Theta(1 + \bar{\omega}_c \alpha_s g_0) \right) \left( \frac{9/5}{\tau_{gs}^x} + \frac{\xi_c}{\tau_s^c} \right)^{-1} \quad (3.63)$$

onde  $\eta_t$  é descrito na Eq. (3.55),  $\tau_s^c$  é a escala de tempo colisional e  $\bar{\omega}_c$  uma constante do modelo de Simonin:

$$\tau_s^c = \frac{d_p}{6\alpha_s g_0 \sqrt{16\Theta/\pi}} \quad (3.64)$$

$$\bar{\omega}_c = \frac{(1+e)^2(2e-1)}{100} \quad (3.65)$$

$$k_s^{col} = \frac{18}{5}\alpha_s g_0 \frac{(1+e)}{2} \left( k_s^{kin} + \frac{5}{9}d_p \sqrt{\frac{\Theta}{\pi}} \right) \quad (3.66)$$

O termo  $\varepsilon_s$  é a dissipação da energia fluante dos sólidos devido às colisões entre as partículas, descrito pela Eq. (3.67).

$$\varepsilon_s = 12(1-e^2)\alpha_s^2 \rho_s g_0 \frac{\Theta^{3/2}}{d_p} \quad (3.67)$$

O termo  $\Pi_{ks}$  é o termo de interação de turbulência, Eq. (3.68):

$$\Pi_{ks} = \beta(k_{gs} - 3\Theta) \quad (3.68)$$



### 3.4 CONSERVAÇÃO DA ENERGIA GRANULAR

A teoria cinética dos escoamentos granulares (KTGF) é baseada na oscilação das partículas esféricas, lisas e ligeiramente inelásticas, na qual se utiliza uma equação da temperatura granular ( $\Theta$ ) para determinar a energia cinética turbulenta das partículas, através da derivação de uma relação constitutiva para descrever o tensor tensão da fase sólida. Esta energia cinética é apenas do componente aleatório flutuante da velocidade da partícula.

$$\frac{3}{2}\Theta = \frac{1}{2}\langle \mathbf{C}^2 \rangle \quad (3.69)$$

onde  $\mathbf{C}$  é o componente de flutuação da velocidade instantânea ( $\mathbf{c}$ ) da fase sólida definido por:

$$\mathbf{c} = \mathbf{v}_s + \mathbf{C} \quad (3.70)$$

O transporte de energia granular da fase sólida é governado pela relação descrita na Eq. (3.71):

$$\frac{3}{2}\alpha_s \rho_s \left[ \frac{\partial \Theta}{\partial t} + \mathbf{v}_s \cdot \nabla \Theta \right] = \left[ \mathbf{S}_s : \nabla \mathbf{v}_s - \nabla \cdot \mathbf{q}_\theta - \gamma_\theta + \phi_{gs} \right] \quad (3.71)$$

onde  $\gamma_\theta$  é a taxa de dissipação de energia granular devido à colisões inelásticas,  $\mathbf{q}_\theta$  é o fluxo difusivo de energia granular, e o termo  $\phi_{gs}$  representa a transferência de energia granular entre as fases sólida e gás.

O fluxo difusivo de energia granular é dado pela Eq. (3.72):

$$\mathbf{q}_\theta = -k_\theta \nabla \Theta \quad (3.72)$$

onde os termos de contribuição cinética e colisional foram negligenciados (SYAMLAL *et al.*, 1993). O coeficiente de difusão de energia granular,  $k_\theta$ , é descrito pela Eq. (3.73):

$$k_\theta = \frac{15d_p \rho_s \alpha_s \sqrt{\pi \Theta}}{4(41 - 33\eta)} \left[ 1 + \frac{12}{5} \eta^2 (4\eta - 3) \alpha_s g_0 + \frac{16}{15\pi} (41 - 33\eta) \eta \alpha_s g_0 \right] \quad (3.73)$$

sendo

$$\eta = \frac{(1+e)}{2} \quad (3.74)$$

onde  $e$  é o coeficiente de restituição.

O termo  $\gamma_\theta$  é representado pela expressão derivada por Lun *et al.* (1984):

$$\gamma_\theta = K_4 \alpha_s^2 \Theta^{3/2} \quad (3.75)$$

em que  $K_4$  é definido na Eq. (3.76).

$$K_4 = \frac{12(1-e^2)\rho_s g_0}{d_p \sqrt{\pi}} \quad (3.76)$$

O termo  $\phi_{gs}$  representa a transferência de energia granular entre a fase sólida e a fase fluida. Fisicamente, ele representa a transferência para o fluido da energia cinética das flutuações aleatórias das velocidades das partículas. Uma expressão para essa transferência foi proposta por Ding e Gidaspow (1990) na forma dada pela Eq. (3.77):

$$\phi_{gs} = -3F_{gs} \Theta \quad (3.77)$$

onde  $F_{gs}$  é o coeficiente para a força de interação entre a fase fluida e a fase sólida.

O MFIX também possibilita a utilização de uma versão algébrica da temperatura granular  $\Theta$ . Esta versão foi obtida a partir da equação de energia de Lun *et al.* (1984), em que a dissipação da energia granular é local. Não são consideradas as contribuições por convecção e difusão, apenas os termos de dissipação e geração (Syamlal 1987c). Portanto, a equação de energia granular algébrica é expressa pela Eq. (3.78).

$$\Theta = \left[ \frac{-K_1 \alpha_s \text{tr}(\mathbf{D}_s) + \sqrt{K_1^2 \text{tr}^2(\mathbf{D}_s) \alpha_s^2 + 4K_4 \alpha_s (K_2 \text{tr}^2(\mathbf{D}_s) + 2K_3 \text{tr}(\mathbf{D}_s^2))}}{2\varepsilon_s K_4} \right]^2 \quad (3.78)$$

Utilizar a equação diferencial parcial, teoricamente fornece resultados mais precisos, mas para fluxos densos, os resultados obtidos utilizando a equação algébrica são bons. Considerar a temperatura granular constante pode fornecer resultados aceitáveis, mas a forma algébrica é mais indicada. Para a simulação de leito fluidizado borbulhante, foi encontrado um intervalo de  $10^{-5} < \Theta < 0,1 \text{ m}^2/\text{s}^2$  para limitar a temperatura granular (BOEMER, 1997).

## 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 4.1 PROBLEMA

O problema abordado nas simulações numéricas deste trabalho é baseado em um problema proposto por Gidaspow *et al.* (1983a) no artigo *Fluidization in Two-Dimensional Beds With a Jet. 1. Experimental Porosity Distributions*. Este artigo apresenta resultados referentes à distribuição da porosidade para leitos bidimensionais com injeção de gás através de um jato central, com geometrias circular e retangular. Este último é a base para a definição das simulações a seguir. A geometria do problema é ilustrada na Fig. (4.1).

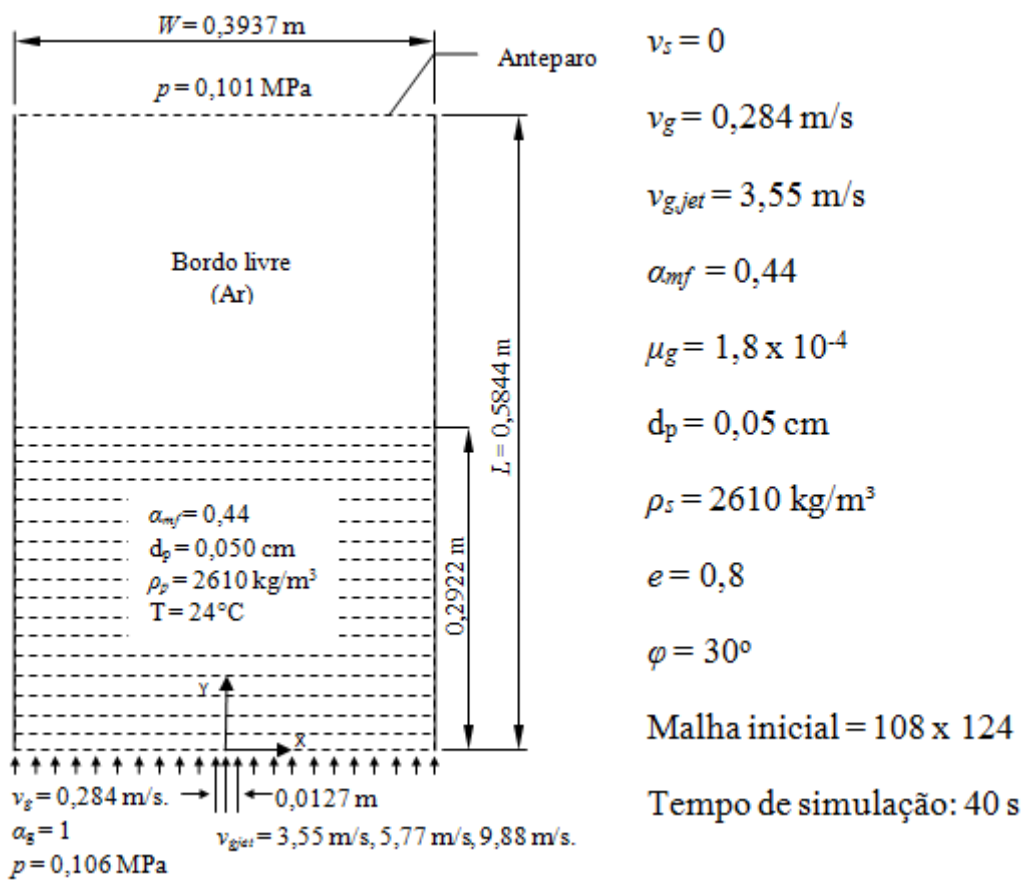


Figura 4.1 Geometria e colocação do problema.

Fonte: Adaptado de Gidaspow (1994).

Trata-se de um reator bidimensional, de 0,3937 m de largura por 0,5844 m de altura. Inicialmente, o reator é preenchido até uma altura de 0,2922 m por esferas de diâmetro igual a 500  $\mu\text{m}$  e massa específica igual a 2610  $\text{kg/m}^3$ . O gás (ar a 24 °C) passa através dessas esferas na condição de mínima fluidização, na qual sua fração mássica é  $\alpha_g = 0,44$  e sua velocidade  $v_g = 0,284$  m/s. A partir do instante  $t = 0$ , passa-se a injetar gás através de uma fenda central de 0,0127 m em um jato com velocidade  $v_{g,Jet}$ . A partir daí, começa a expansão do leito e a formação de bolhas, que são transportadas desde o fundo do reator até a superfície superior do leito, promovendo a mistura e a transferência de quantidade de movimento. Foram processados 40 s de simulação a partir de  $t = 0$  s.

A demanda computacional para o processamento deste problema, empregando as malhas utilizadas no presente trabalho e detalhadas no item 4.2.2, é bastante grande. O número de variáveis para o modelo multifásico bidimensional, isotérmico, com uma fase gás e somente uma fase sólida e modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  são consideráveis (são as 10, a seguir: velocidade do gás em  $x$ , velocidade do gás em  $y$ , velocidade da fase sólida em  $x$ , velocidade da fase sólida em  $y$ , pressão do gás, pressão da fase sólida, temperatura granular, fração volumétrica de gás,  $k$  e  $\varepsilon$ ), onde foi resolvida uma equação diferencial parcial (EDP) para o cálculo da temperatura granular. Todas as variáveis são calculadas a cada passo de tempo para cada volume de controle. Os tamanhos de volumes de controle empregados exigem o uso de passos de tempo bastante reduzidos e, além disso, a cada passo de tempo o processo é iterativo, o que torna o processamento de 40 s de simulação, com passo de tempo variável e com valor inicial igual a  $10^{-4}$  s, bastante lento. As simulações das malhas mais refinadas chegam a demorar 20 dias em um computador com processador Intel Core i7 de 2.8 GHz. Sendo assim, pode-se dizer que o processamento de 40 s de simulação de todos os casos considerados foi bastante pesado em termos de tempo.

Os perfis temporais médios de velocidade e fração mássica, da fase sólida e da fase gasosa, foram analisados em diferentes posições da geometria, utilizando-se diferentes modelos de arrasto sólido-gás (Gidaspow, Syamlal e O'Brien e Hill-Koch-Ladd) e variando-se a velocidade de injeção de gás através da fenda central, ( $v_{g,jet} = 3,55$  m/s, 5,77 m/s e 9,88 m/s). O modelo de arrasto de Arastoopour também foi utilizado em algumas simulações, mas não foi feita uma análise detalhada deste modelo.

#### 4.1.1 Posições Críticas do Problema

A análise dos resultados foi realizada em determinadas posições críticas do reator. Estas posições estão ilustradas na Fig. (4.2). Considerando como a origem do sistema de coordenadas o centro da base do reator, podem-se definir as posições adimensionais:  $y^* = y/L$  e  $x^* = (x-W/2)/(W/2)$ . O foco do presente estudo foram linhas na direção  $y$  nas posições  $x^* = 0,008, 0,5$  e  $0,99$  e linhas na direção  $x$  em  $y^* = 0,25$  e  $0,5$ . Nestas posições foram analisadas: a distribuição média da fração volumétrica da fase gasosa e da fase sólida, e a distribuição média da magnitude da velocidade do gás. Não foi realizada uma análise de simetria.

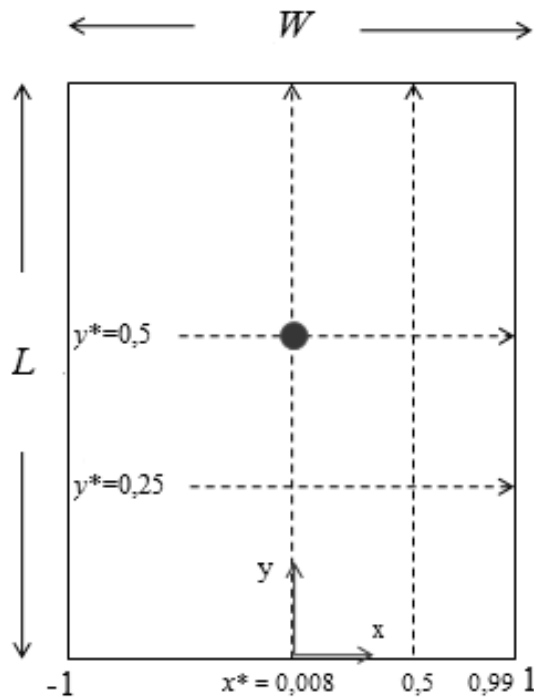


Figura 4.2 Posições críticas do reator analisadas no presente estudo.

O ponto em destaque, aproximadamente no centro da geometria ( $x^* = 0,008$  e  $y^* = 0,5$ ), ilustra o volume de controle o qual foi analisado para a determinação do regime permanente.

## 4.2 ANÁLISE DOS RESULTADOS

### 4.2.1 Determinação do Regime Permanente

Como ressaltam Milioli e Milioli (2010), as análises dos resultados médios no tempo em estudos de leito fluidizado dependem fortemente do período de análise sobre o qual se realizam estas médias. Devido ao longo tempo requerido para as simulações no presente trabalho, foram feitos alguns testes preliminares a fim de se determinar se os resultados médios seriam afetados pelo tempo de simulação, pois o interesse está em se analisar os resultados médios quando o leito está operando em regime permanente.

Para a determinação do tempo de simulação necessário para se atingir o regime permanente, foi monitorada ao longo do tempo a variável fração volumétrica de sólidos,  $\alpha_s$ , na posição central do reator, ( $x^* = 0,008$  e  $y^* = 0,5$ ). Considerou-se que o regime permanente foi atingido após a taxa de variação relativa da média temporal de  $\alpha_s$  atingir um valor inferior a  $5 \cdot 10^{-4}$ . A Fig. (4.3) ilustra a variação relativa da média temporal de  $\alpha_s$  ao longo do tempo, para uma malha  $124 \times 108$  volumes de controle nas direções  $x$  e  $y$ , respectivamente, e velocidade do jato, igual a  $v_{g,jet} = 3,55$  m/s. Foram utilizados os três modelos de arrasto sólido-gás de interesse no presente trabalho.

Para todas as simulações foram encontrados resultados semelhantes, por isso optou-se por considerar as médias temporais de regime permanente aquelas realizadas entre 20 s e 40 s de simulação.

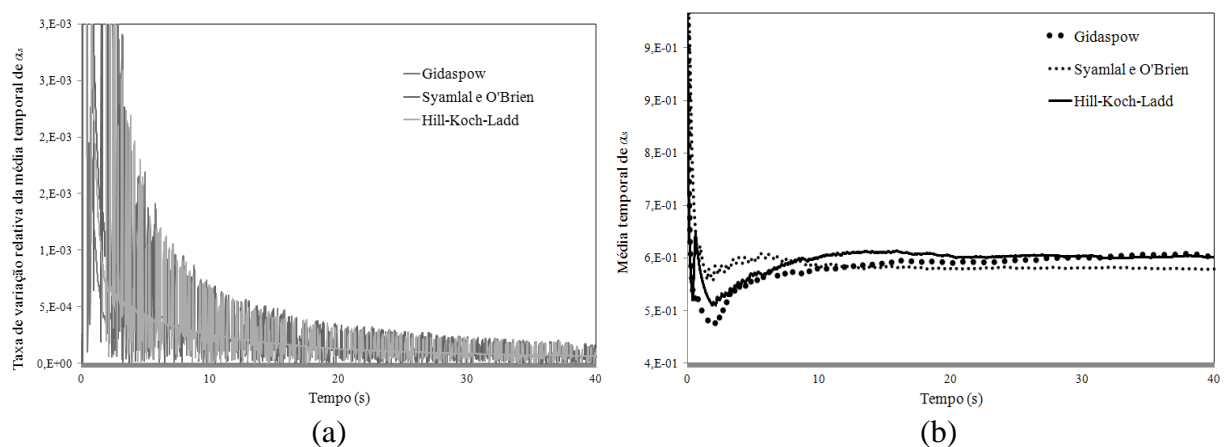


Figura 4.3 (a) Evolução da variação relativa da média temporal de  $\alpha_s$ , e (b) Evolução da média temporal de  $\alpha_s$ .

#### 4.2.2 Estudo de Malha e Comparação com Resultados Experimentais

A fim de se determinar a relação entre os resultados obtidos e o grau de refino de malha, foram simulados casos utilizando quatro malhas para os três modelos de arrasto (Gidaspow, Syamlal e O'Brien e HKL). Utilizou-se velocidade do jato central  $v_{g,jet} = 3,55$  m/s e, inicialmente, uma malha de 108 x 124 volumes de controle nas direções  $y$  e  $x$ , respectivamente. A segunda malha utilizada é 50% mais refinada (162 x 186), posteriormente 100% mais refinada (216 x 248), e ainda uma última malha mais refinada (270 x 310). A tabela (4.1) descreve os tamanhos dos volumes de controle utilizados.

Tabela 1 Tamanho dos volumes de controle utilizados.

$x$ (m)	n° VC <sub><math>x</math></sub>	$\Delta x$ (m)	$y$ (m)	n° VC <sub><math>y</math></sub>	$\Delta y$ (m)
0,3937	124	0,003175	0,5844	108	0,005411
0,3937	186	0,002117	0,5844	162	0,003607
0,3937	248	0,0015875	0,5844	216	0,0027055
0,3937	310	0,00127	0,5844	270	0,0021644

A comparação dos resultados do perfil de fração de sólidos,  $\alpha_s$ , ao longo do eixo  $y$  na posição  $x^* = 0,008$ , são ilustrados na Fig. (4.4). Estes resultados são comparados aos resultados experimentais retirados de Gidaspow *et al.* (1983a).

Comparando-se os três modelos de arrasto com os dados experimentais, observa-se que, próximo a  $y^* = 0$ , o valor de  $\alpha_s$  previsto pelo modelo numérico é subestimado. Isso se deve à implementação da condição de contorno. Exige-se que se imponha uma fração de sólidos na fronteira, a qual, neste caso, é imposta como zero.

Para os resultados utilizando-se o modelo de Gidaspow (Fig. 4.4 a), observa-se uma grande variação no perfil de fração de sólidos conforme a malha é refinada. Observa-se a concordância de resultados entre as duas malhas mais grosseiras e as duas mais refinadas. No entanto, todas apresentam resultados em torno da medida experimental. As malhas mais finas tendem a prever um valor mais alto de  $\alpha_s$  na porção superior do leito. Como os dados experimentais não provêm medidas nessas posições, não se pode corroborar o real comportamento.



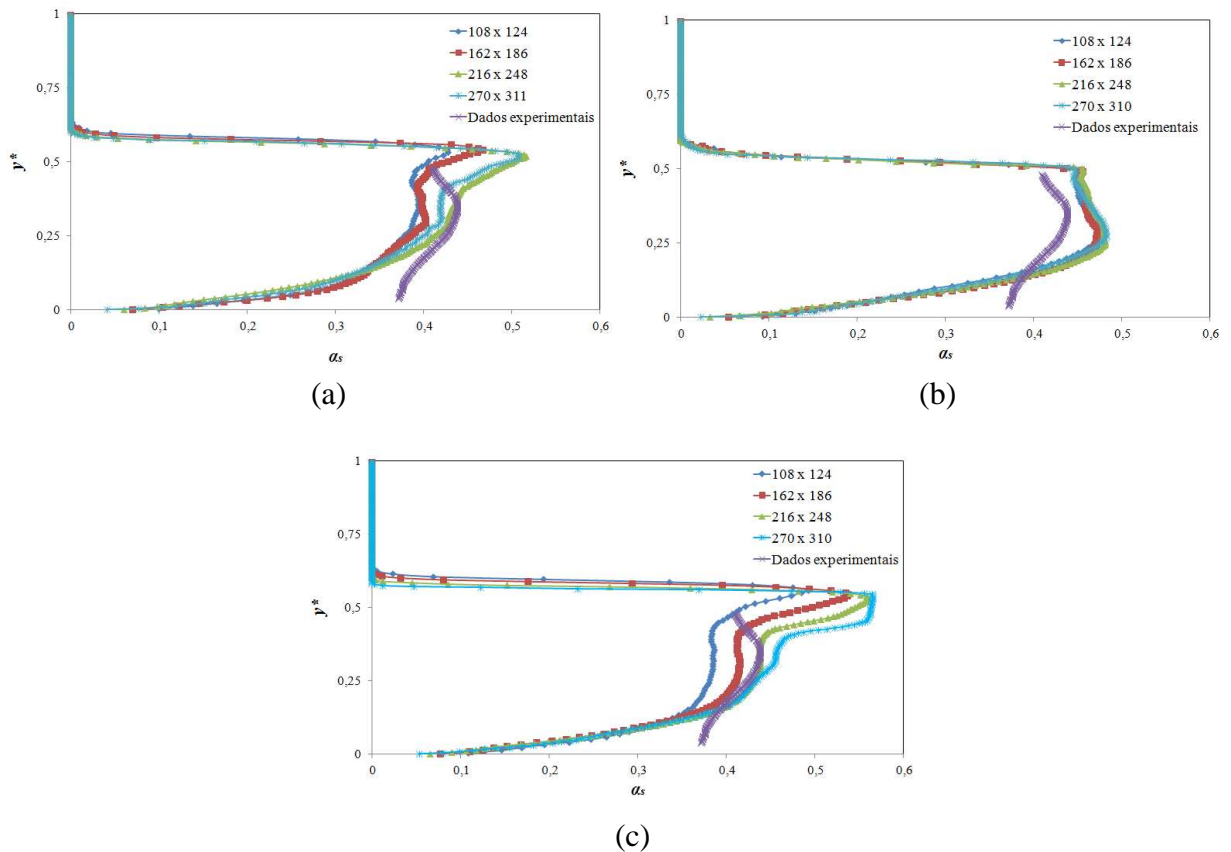


Figura 4.4 Média temporal (20 s a 40 s) da fração volumétrica de sólidos na posição  $x^*=0,008$  ao longo da direção  $y$ . Comparação das quatro malhas para os três modelos de arrasto: (a) Gidaspow, (b) Syamlal e O'Brien, (c) HKL.

Observa-se que, com o modelo de Syamlal e O'Brien (Fig. 4.4b), a convergência de malha foi atingida para as malhas menos refinadas. O perfil de distribuição dos sólidos ao longo da direção  $y$ , previsto utilizando-se este modelo, não está exatamente em concordância com os dados experimentais, mas apresenta um perfil bastante semelhante. Na altura  $y^* = 0,5$ , este modelo não prevê o pico de concentração de partículas previsto pelos outros dois modelos.

Os resultados para o modelo HKL (Fig. 4.4c) apresentam uma relativa variação mesmo entre as duas malhas mais refinadas. Além disso, quanto mais refinada a malha, maior é a concentração de partículas prevista na posição superior do leito (em torno de  $y^* = 0,5$ ).

Conclui-se que os modelos de Gidaspow e HKL são mais sensíveis ao refinamento da malha e que tendem a prever um pico de concentração de sólidos na posição superior do leito. Todos os resultados apresentaram-se dentro de uma faixa próxima aos resultados

experimentais, no entanto, não se pode concluir sobre a melhor performance de um dos modelos somente através da observação do perfil de concentração de partículas

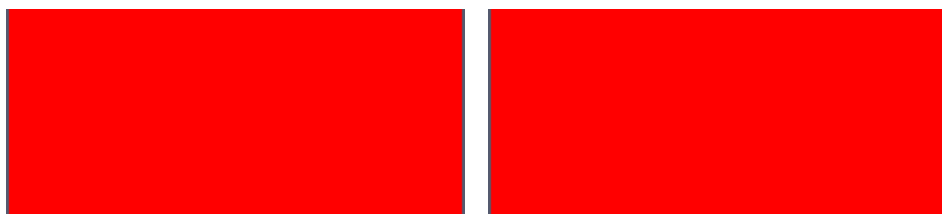
#### 4.2.3 Estudo dos Modelos de Arrasto

Os resultados analisados a seguir, foram obtidos nas simulações realizadas para a malha 216 x 248 volumes de controle, e velocidade do jato,  $v_{g,jet}$ , igual a 3,55 m/s, utilizando-se os modelos de arrasto de Gidaspow, Syamlal e O'Brien e HKL. Para o modelo de arrasto de Arastoopour *et al.* (1990) foram analisados os resultados obtidos para a malha 162 x 186 volumes de controle e velocidade do jato de  $v_{g,Jet} = 3,55$  m/s.

##### 4.2.3.1 Fração volumétrica

O campo de fração volumétrica de gás,  $\alpha_g$ , obtido para os diferentes modelos de arrasto é ilustrado na Fig. (4.5). Estas imagens foram feitas no pós-processador de dados Paraview, e representam a média de  $\alpha_g$ , distribuída por toda a geometria do reator de leito fluidizado. Estas médias foram retiradas do intervalo de tempo de 20 s a 40 s.

Observa-se que o modelo de HKL prevê uma região de maior concentração de sólidos no centro da geometria. O modelo de Gidaspow prevê um perfil semelhante ao modelo de HKL, mas com uma menor concentração de sólidos no centro da geometria. O modelo de Syamlal e O'Brien, o qual apresenta a menor expansão do leito, difere bastante dos demais modelos. O modelo de arrasto de Arastoopour apresenta uma previsão de perfil médio de  $\alpha_g$  bastante diferente dos demais modelos. O modelo prevê a maior expansão do leito, o maior número de partículas se concentra próximo às paredes do reator, enquanto que na região central do leito a fração volumétrica de gás é maior. O modelo ainda apresenta, na região ao redor do jato próximo a base do reator, maior fração volumétrica de gás que os modelos de Gidaspow, Syamlal e O'Brien e HKL.



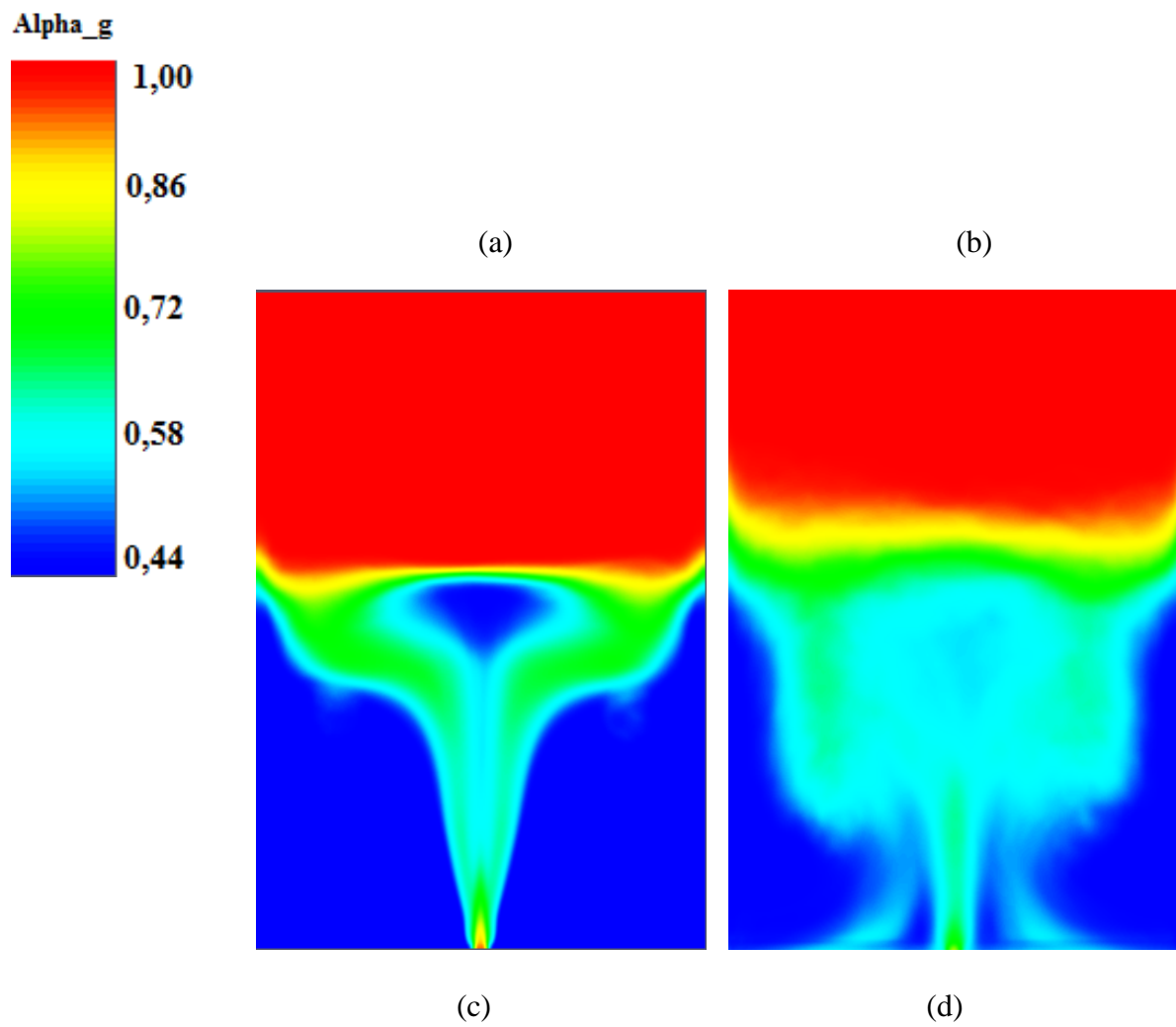


Figura 4.5 Média temporal (20 s a 40 s) da fração volumétrica da fase gasosa ( $\alpha_g$ ) previstos pelos modelos de arrasto de (a) Gidaspow, (b) Syamlal e O'Brien, (c) HKL e (d) Arastoopour.

O perfil da fração volumétrica de sólidos,  $\alpha_s$ , ao longo do eixo  $y$  previsto pelos quatro modelos de arrasto, é ilustrado nas Fig. (4.6) e (4.7), no qual os modelos de Gidaspow, Syamlal e O'Brien e HKL são analisados com os resultados obtidos com a malha 216 x 248, e o modelo de Arastoopour é analisado com os resultados obtidos com a malha 162 x 186.

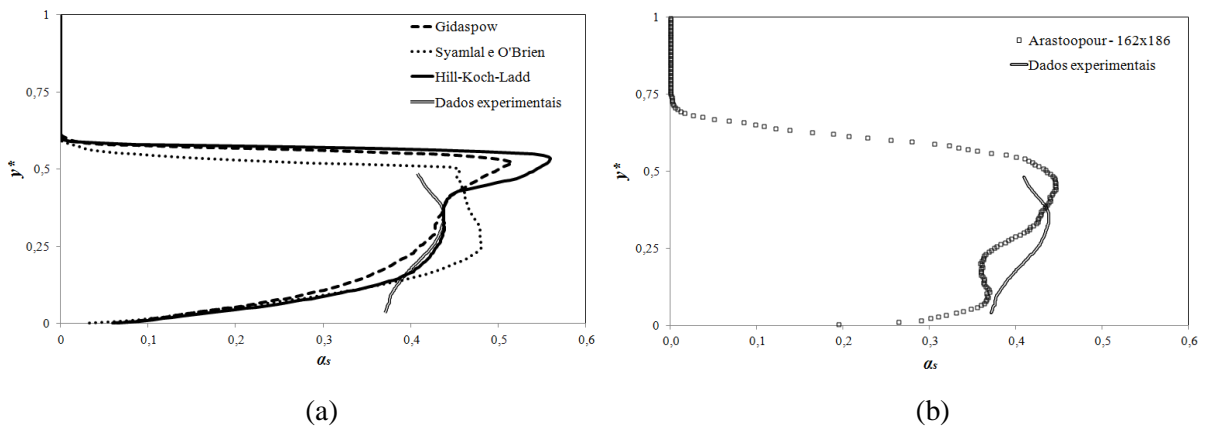


Figura 4.6 Média temporal (20 s a 40 s) da fração volumétrica de sólidos ( $\alpha_s$ ) ao longo do eixo  $y$  na posição  $x^*=0,008$  previsto pelos modelos de arrasto de (a) Gidaspow, Syamlal e O'Brien e HKL e (b) Arastoopour.

Na Fig. (4.6a), verifica-se a confirmação dos resultados anteriores (item 4.2.2), de que o modelo de HKL prevê a maior concentração de sólidos próximo a altura  $y^* = 0,5$ , e o modelo de Syamlal e O'Brien prevê uma maior concentração de sólidos na região abaixo ( $y^* = 0,25$ ), o que explica o perfil ilustrado na Fig.(4.5b), mas difere dos dados experimentais. Nesta altura os modelos de HKL e Gidaspow apresentam resultados em concordância com os dados experimentais, principalmente o modelo de HKL. Na região próxima à base do reator, a concentração de sólidos é menor para os três modelos de arrasto, devido a condição de contorno ( $\alpha_s = 0$ ) mencionado anteriormente.

O modelo de Arastoopour (Fig. 4.6b) apresenta uma previsão para a concentração de partículas próxima à altura  $y^* = 0,75$ , área de bordo livre, maior que o previsto pelos outros modelos, o que está de acordo com a previsão de maior expansão do leito. Na região central do leito ( $y^* = 0,25$ ) a concentração de partículas é menor, o que explica o perfil ilustrado na Fig. (4.5d), mas é uma previsão que não está de acordo com os dados experimentais. A concentração de partículas na região próxima a base do reator é maior que o previsto pelos demais modelos, o qual é bastante próximo aos dados experimentais.

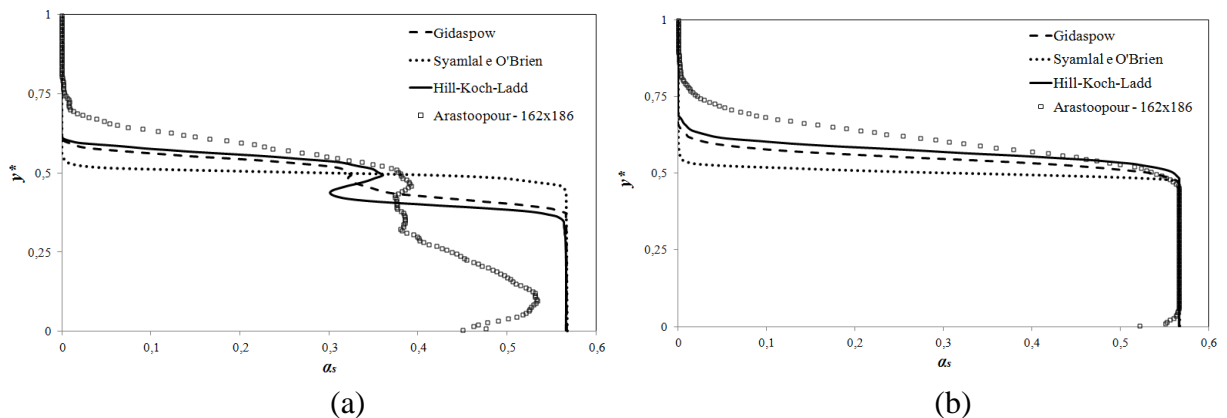


Figura 4.7 Média temporal (20 s a 40 s) da fração volumétrica de sólidos ( $\alpha_s$ ) ao longo do eixo  $y$  para as posições críticas (a)  $x^* = 0,5$  e (b)  $x^* = 0,99$ .

Na posição  $x^* = 0,5$  (Fig. 4.7a), verifica-se, para todos os modelos com exceção do modelo de Arastoopour, uma maior concentração de sólidos na região logo abaixo a  $y^* = 0,5$  devido à proximidade com a parede do reator. As previsões do modelo de Gidaspow são bastante similares às previsões do modelo de HKL. O modelo de Arastoopour prevê a maior expansão do leito e o modelo de Syamlal e O'Brien a menor. O modelo de Arastoopour é o que mais difere dos demais modelos nesta posição, no qual prevê a maior concentração de partículas próximas à base do reator, e a menor concentração na área central do leito, próximo a altura  $y^* = 0,25$  e acima.

Na posição  $x^* = 0,99$  (Fig. 4.7b) os quatro modelos apresentam resultados bastante similares na região do leito e diferem apenas na região acima da altura  $y^* = 0,5$ . Na área de bordo livre, o modelo de Arastoopour apresenta a maior concentração de partículas devido à expansão do leito maior entre os quatro modelos analisados. Assim, as previsões do modelo de Arastoopour podem significar que uma quantidade maior de partículas é transportada para fora do reator.

#### 4.2.3.2 Perfis de Velocidade

As Fig. (4.8) e (4.9) foram feitas no pós-processador de dados Paraview, e representam a distribuição média de  $v_g$  distribuída por toda a geometria do reator de leito fluidizado. Estas médias foram retiradas do intervalo de tempo de 20 s a 40 s.

A Fig. (4.8) ilustra a magnitude e a Fig. (4.9) ilustra os vetores da velocidade superficial do gás ( $v_g$ ) obtida utilizando os diferentes modelos de arrasto.

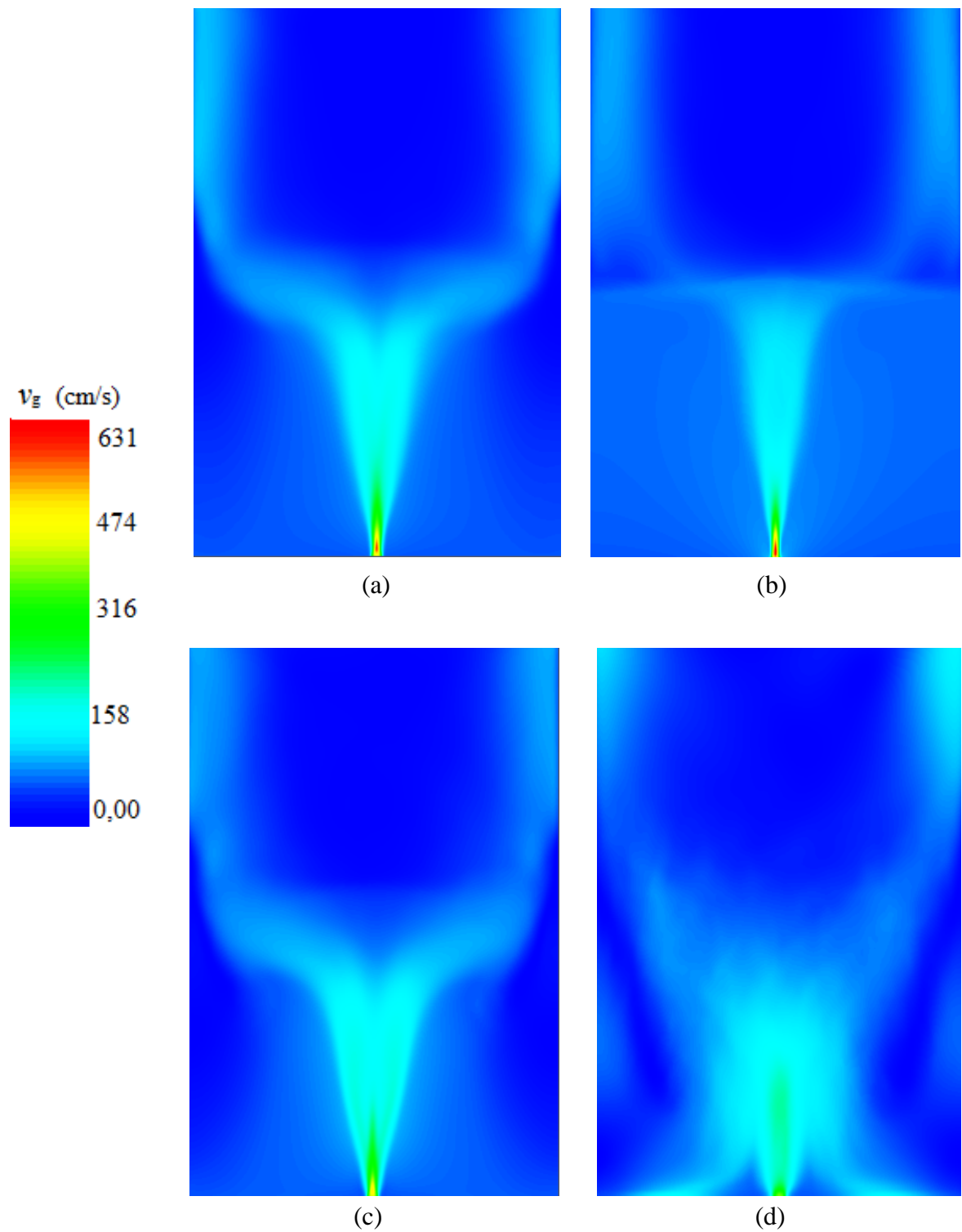


Figura 4.8 Distribuição média da magnitude da velocidade superficial do gás ( $v_g$ ) previsto pelos modelos de arrasto de (a) Gidaspow, (b) Syamlal e O'Brien, (c) HKL e (d) Arastoopour.

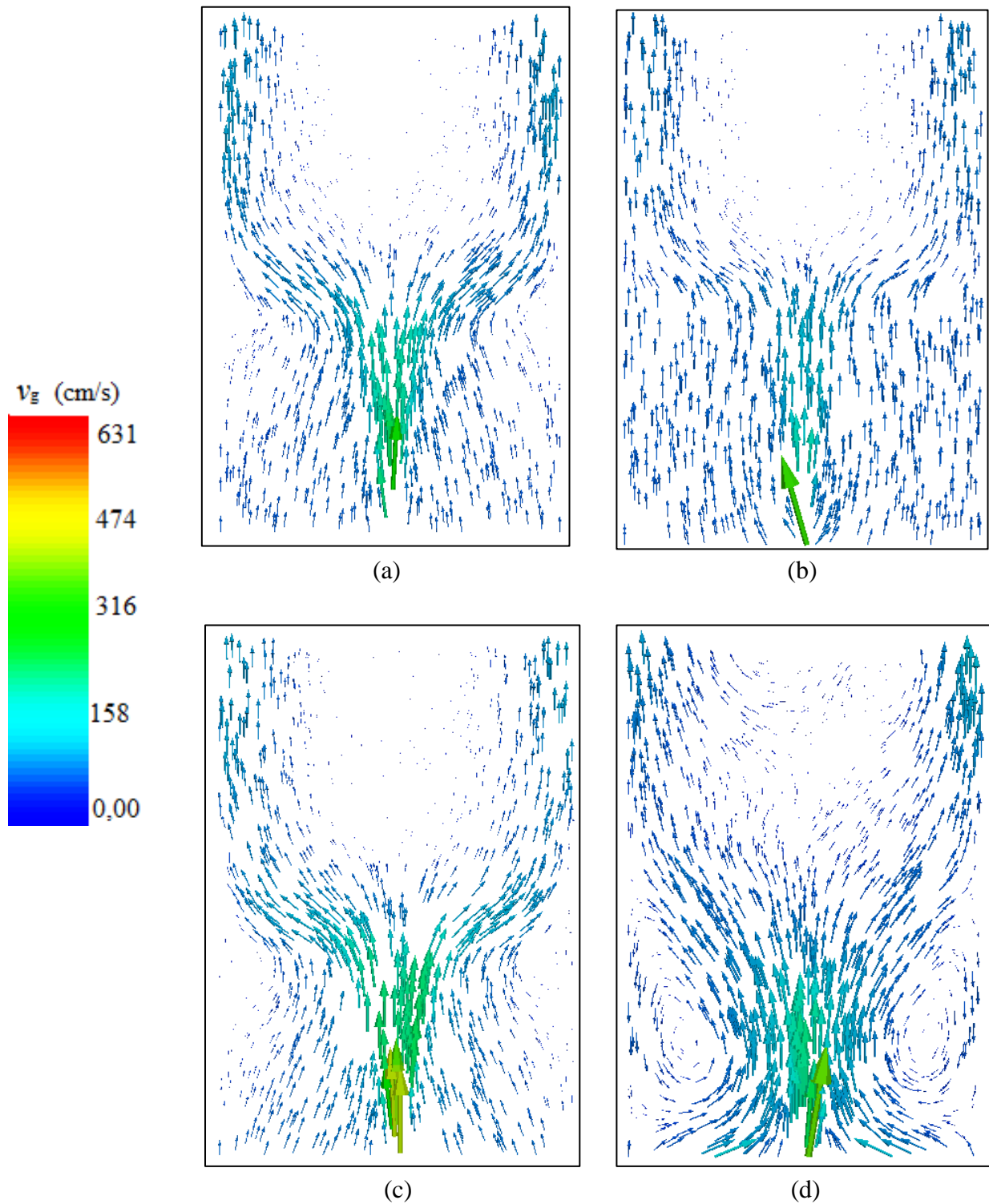


Figura 4.9 Vetores da velocidade superficial do gás, média temporal (20 a 40 s) previstos pelos modelos de arrasto de (a) Gidaspow, (b) Syamlal e O'Brien, (c) HKL e (d) Arastoopour.

Nas Fig. (4.8) e (4.9), os quatro modelos de arrasto apresentam previsões de concentração da velocidade do gás nas paredes do reator na região acima do leito, área de bordo livre, região em que há predominância de gás. O modelo de Syamlal e O'Brien apresenta uma previsão de distribuição da velocidade do gás bastante uniforme em toda a região do leito, principalmente ao redor do jato central. Os modelos de Gidaspow e HKL apresentam previsões similares, nos quais a velocidade se concentra no jato, na região do leito. O modelo de Arastoopour prevê a distribuição de velocidade mais dispersa entre os quatro modelos, onde há valores altos para a velocidade concentrados na região central do leito e próximo ao jato central, na base do reator. A Fig. (4.9) mostra a previsão do modelo de Arastoopour de recirculação na região central do leito próximo as paredes.

Também foram comparadas as distribuições da magnitude da velocidade do gás ( $v_g$ ) ao longo do eixo  $x$  a diferentes distâncias da base do reator. A Fig. (4.10) ilustra estas distribuições de velocidades nas posições  $y^* = 0,25$  e  $y^* = 0,5$ .

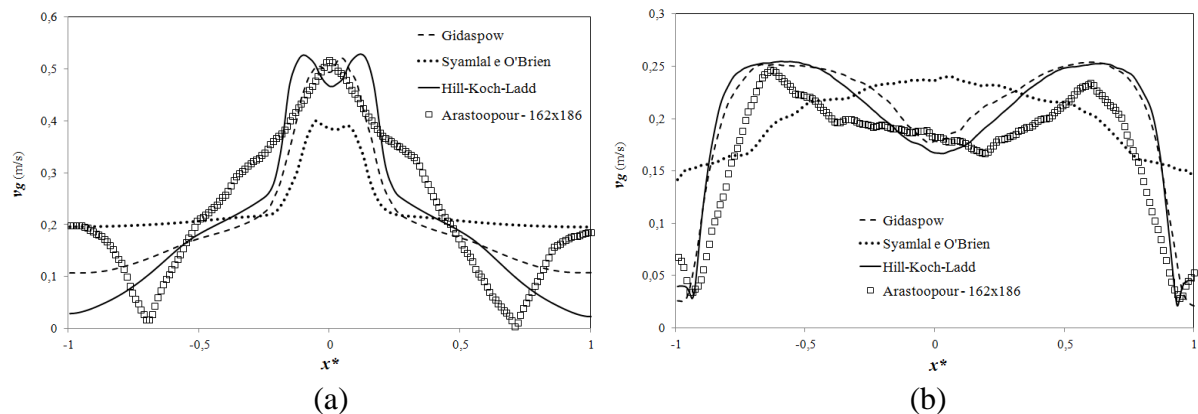


Figura 4.10 Distribuição média da magnitude da velocidade superficial do gás ( $v_g$ ) ao longo do eixo  $x$  para as posições (a)  $y^* = 0,25$  e (b)  $y^* = 0,5$ .

De acordo com a Fig. (4.10) verifica-se que na altura  $y^* = 0,25$ , os modelos de Arastoopour, Gidaspow e HKL apresentam os maiores valores para a máxima velocidade do gás. O modelo de Syamlal e O'Brien, além de apresentar o menor valor, também prevê uma distribuição constante na região ao redor do jato central, o que corrobora a Fig.(4.8b). Na região entre as paredes do reator e o jato central, apenas o modelo de Arastoopour prevê que a velocidade do gás é mínima, enquanto que nas paredes do reator a velocidade é maior. Os modelos de Arastoopour e Syamlal e O'Brien apresentam os mesmos valores para a velocidade do gás nas paredes. Já o modelo de HKL é o que apresenta uma previsão de



valores para a velocidade do gás nas paredes mais próxima a zero, e o modelo de Gidaspow prevê um valor intermediário (0,1 m/s).

Na altura  $y^* = 0,5$ , superfície do leito, os modelos de Gidaspow, HKL e Arastoopour apresentam perfis semelhantes, no qual a máxima velocidade do gás está na região entre o jato central e as paredes do reator. Estes modelos ainda prevêem valores muito similares próximos à zero nas paredes. O modelo de Syamlal e O'Brien é o que mais difere, no qual a máxima velocidade do gás está na região central, e nas paredes do reator os valores previstos são próximos a zero, mas maiores que as previsões dos demais modelos.

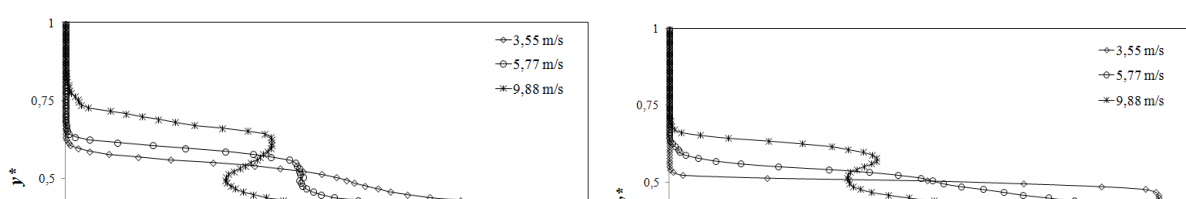
#### 4.2.4 Estudo da Variação da Velocidade do Jato

A velocidade do gás inserido no reator pelo jato central inicialmente é de 3,55 m/s. Posteriormente foram realizadas simulações onde a velocidade do jato central foi de 5,77 m/s e 9,88 m/s. Este estudo da variação da velocidade foi realizado para a malha mais grosseira (108 x 124), devido ao tempo demandado para todas as simulações, o qual seria impraticável.

##### 4.2.4.1 Fração Volumétrica

A Fig. (4.11) mostra a comparação entre os resultados médios no tempo, de 20 s a 40 s, para as frações de sólidos na posição  $x^* = 0,5$  previsto pelos modelos de Gidaspow, Syamlal e O'Brien e HKL para as três velocidades do jato.

Os três modelos prevêem um aumento na expansão do leito e a concentração desse aumento em sua região central, com o aumento da velocidade do gás que é inserido no reator pelo jato central. O modelo de Syamlal e O'Brien prevê a menor expansão e o modelo de HKL prevê a maior. A concentração de sólidos diminui na região próxima a altura  $y^* = 0,5$  e há um aumento na concentração de sólidos acima desta altura devido ao aumento na expansão do leito, no qual o transporte de partículas para a área de bordo livre aumenta. Abaixo da posição  $y^* = 0,25$  não há alterações na fração volumétrica de sólidos com o aumento da velocidade no jato.



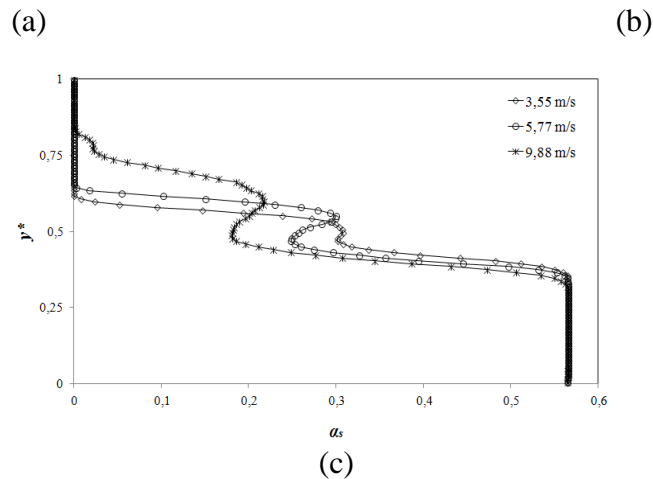


Figura 4.11 Comparação da concentração média de sólidos ( $\alpha_s$ ) ao longo do eixo  $y^*$  para as três velocidades na posição  $x^* = 0,5$  previsto pelos modelos de (a) Gidaspow, (b) Syamlal e O'Brien e (c) HKL.

#### 4.2.5 Estudo da Formação das Bolhas

A formação das bolhas em LFB é muito importante no controle da mistura entre as fases, expansão do leito e elutriação, processo no qual ocorre a separação das partículas mais finas e leves das mais grossas e pesadas da mistura, onde as partículas mais leves são carregadas para cima. Por isso, ter uma correta previsão de sua formação é fundamental. O movimento de subida das bolhas favorece a mistura entre as fases e, como consequência, a transferência de calor e massa. A expansão do leito é influenciada pelo volume das bolhas, e a elutriação é influenciada pelo colapso das bolhas na superfície do leito, devido ao lançamento de partículas na área de bordo livre (FUEYO E DOPAZO, 1995 *apud* WU, 2003).

No presente trabalho foram analisadas as previsões para o formato e frequência de desprendimento das bolhas previstas pelos quatro modelos de arrasto.

##### 4.2.5.1 Frequência de Desprendimento das Bolhas

Analisou-se a frequência de desprendimento das bolhas (Fig. 4.12) no intervalo de tempo de 30 s a 32 s para os quatro modelos de arrasto nas quatro malhas simuladas: malha 1 (108 x 124), malha 2 (162 x 186), malha 3 (216 x 248) e malha 4 (270 x 310). O modelo de Arastoopour foi analisado apenas na malha 2.

Para esta análise foram coletados os dados visualmente utilizando o pós-processador de dados Paraview.

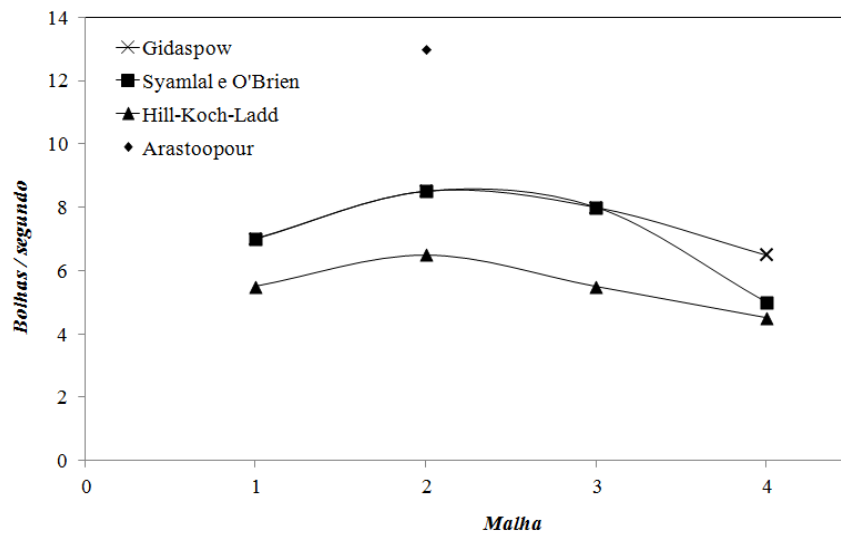


Figura 4.12 Frequência de desprendimento das bolhas em relação às malhas utilizadas previsto pelos quatro modelos de arrasto no intervalo de 30 s a 32 s.

Os modelos de Gidaspow e Syamlal e O'Brien apresentam previsões exatamente iguais para a frequência de desprendimento das bolhas até a terceira malha, apenas na última malha apresentam resultados diferentes. O modelo de HKL prevê uma frequência de desprendimento das bolhas menor, que significa que o modelo prevê a menor quantidade de bolhas, e conseqüentemente, menor mistura entre as fases. O modelo de Arastoopour, o qual foi analisado apenas na malha 2, prevê uma frequência de desprendimento das bolhas aproximadamente duas vezes maior que os outros modelos. Com o refinamento de malha nota-se que os modelos (Gidaspow, Syamlal e O'Brien e HKL) apresentam uma queda na frequência de desprendimento das bolhas.

#### 4.2.5.2 Diâmetro Médio das Bolhas

O diâmetro médio das bolhas foi analisado comparando a média da fração volumétrica da fase gasosa em relação à largura do leito simulado, Fig. 4.13, no intervalo de tempo de 20 s a 40 s.

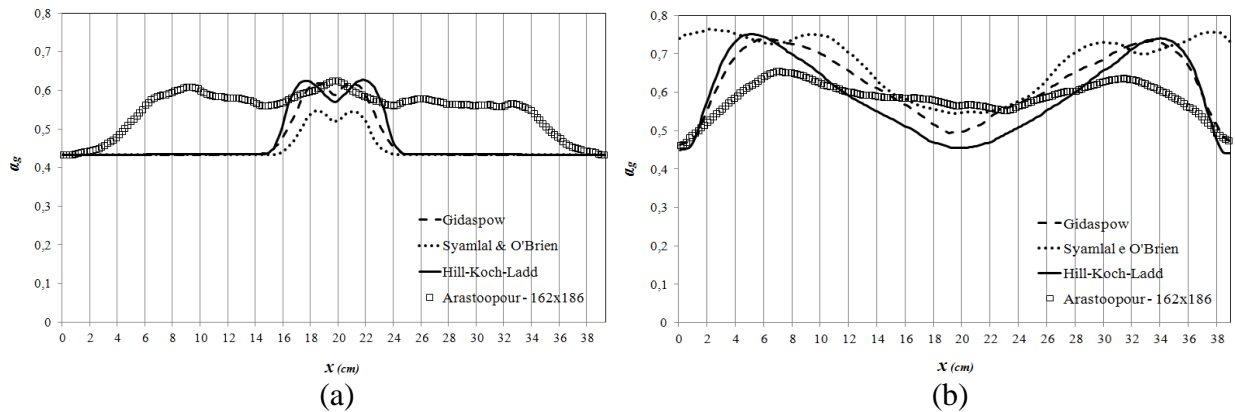
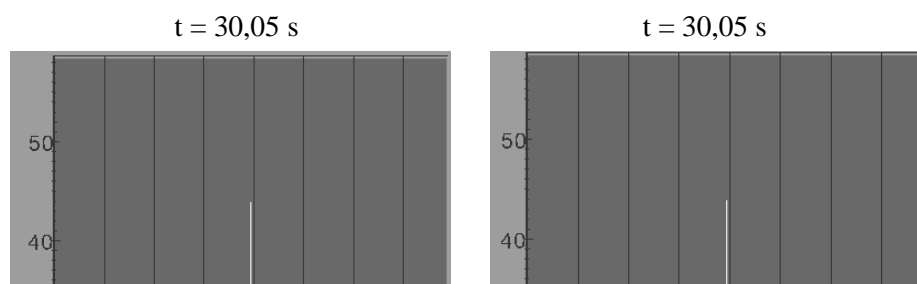


Figura 4.13 Média da fração de vazio ( $\alpha_g$ ) ao longo da largura do leito. Análise do diâmetro médio das bolhas previsto pelos quatro modelos de arrasto nas posições: (a)  $y^* = 0,25$  e (b)  $y^* = 0,5$ .

Na altura  $y^* = 0,25$ , o modelo de Syamlal e O'Brien prevê bolhas com diâmetro médio menor que os modelos de Gidaspow e HKL, os quais apresentam uma previsão semelhante. O modelo de Arastoopour apresenta um perfil bastante diferente dos demais modelos, pois prevê a formação de várias bolhas pequenas nesta altura do leito ilustradas na Fig. (4.14).

Na altura  $y^* = 0,5$ , os modelos de Arastoopour, Gidaspow e HKL apresentam previsões similares nas paredes do reator, onde a fração volumétrica de gás é menor. Ainda próximo às paredes, na região do leito, a concentração de gás é maior. O modelo de Syamlal e O'Brien prevê valores mais altos para a fração volumétrica de gás nas paredes, e na parte central do leito os resultados são similares aos outros modelos de arrasto. As previsões dos quatro modelos analisados podem significar que as bolhas estouram mais frequentemente próximo às paredes do reator, o que representa maior elutriação nesta região acima do leito.

A Fig. (4.14) ilustra o formato e diâmetro das bolhas previstas pelos quatro modelos de arrasto na altura  $y^* = 0,25$  para  $v_{g,Jet} = 3,55$  m/s e malhas 216 x 248 (Gidaspow, Syamlal e O'Brien e HKL) e 162 x 186 (Arastoopour).



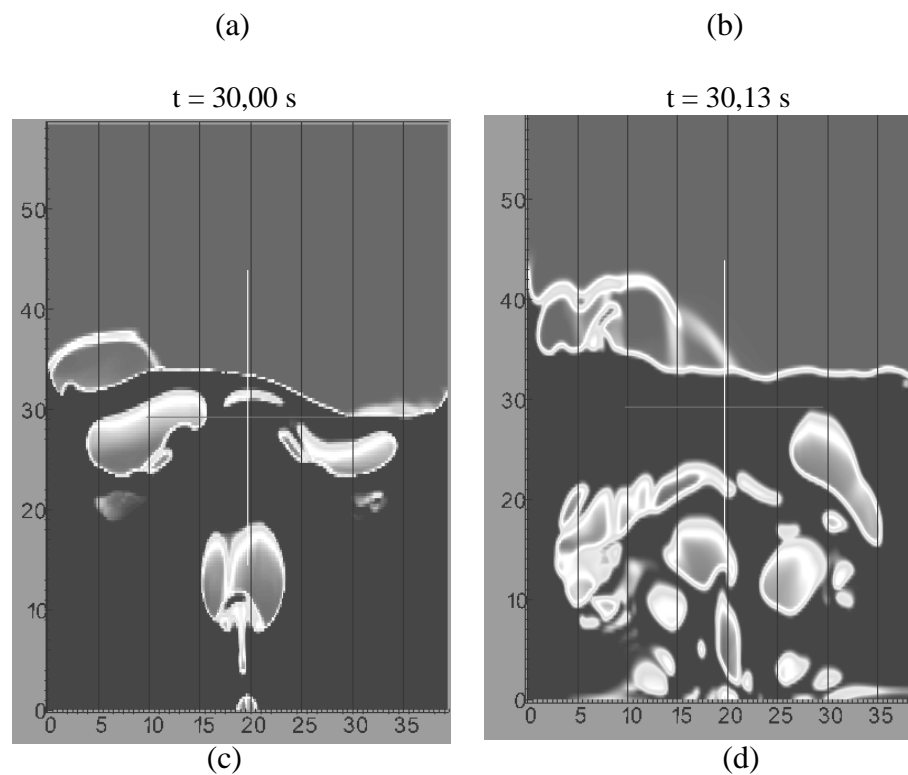


Figura 4.14 Ilustração do diâmetro e formato das bolhas previstas pelos quatro modelos de arrasto: (a) Gidaspow, (b) Syamlal e O'Brien, (c) HKL e (d) Arastoopour.

Os modelos de Gidaspow e HKL apresentam uma previsão de bolhas com diâmetro e formato semelhantes. O modelo apresentado por Syamlal e O'Brien prevê bolhas com diâmetro bem menor que os demais. Para estes três modelos, a formação das bolhas é realizada pelo jato central. Acima da altura  $y^* = 0,25$  ocorre a separação das bolhas, ocupando assim quase toda a largura do leito, vindo a colapsar próximo às paredes.

Já o modelo de Arastoopour prevê a formação de bolhas não apenas pelo jato central, mas as bolhas também são formadas pelo gás que é injetado pelo distribuidor de ar ao redor do jato central. Assim ocorre a formação de pequenas bolhas que ocupam quase toda a região do leito, no qual se juntam formando bolhas maiores. Devido à grande quantidade de bolhas ocupando o leito, o modelo de Arastoopour prevê uma expansão do leito maior influenciado pelo volume ocupado pelas bolhas.

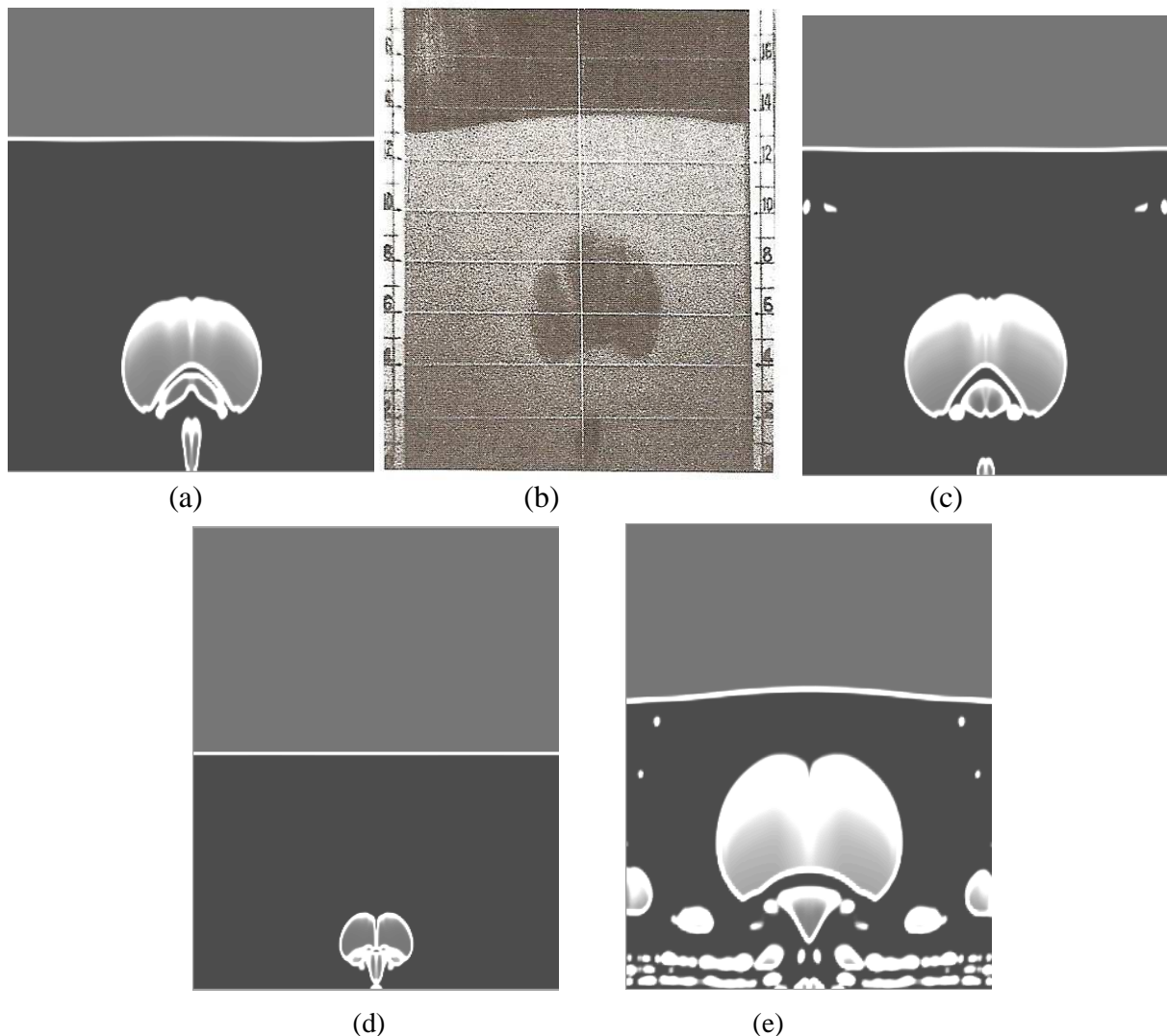


Figura 4.15 Comparação do formato de uma bolha formada em LFB aos 0,32 s. (a) Gidaspow, (b) Bolha experimental (Gidaspow *et al.*, 1986a *apud* Gidaspow, 1994), (c) HKL (d) Syamlal e O'Brien e (e) Arastoopour.

A Fig. (4.15) compara o formato das bolhas formadas em LFB no instante de tempo de 0,32 s com a bolha experimental retirada de Gidaspow (1994).

As previsões para o diâmetro e formato das bolhas apresentadas por Syamlal e O'Brien e Arastoopour estão em desacordo com a bolha experimental, onde Arastoopour prevê o

maior diâmetro e Syamal e O'Brien prevê o menor diâmetro naquele instante de tempo. Os modelos de Gidaspow e HKL apresentam previsões similares para o diâmetro e formato das bolhas, os quais também são similares a bolha experimental, para o mesmo instante de tempo.

Pode-se concluir que os modelos de Gidaspow e HKL apresentam a melhor previsão qualitativa quanto à formação de bolhas, em comparação com o experimento.

## CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS FUTURAS

A utilização da Dinâmica dos Fluidos Computacional no estudo da combustão em leitos fluidizados vem crescendo na comunidade científica. A simulação numérica permite a análise local envolvendo vários parâmetros importantes para o entendimento dos processos físicos. No presente trabalho foi realizada uma análise dos resultados numéricos para a hidrodinâmica de um leito fluidizado borbulhante com injeção central de gás, gerados utilizando o código de Dinâmica dos Fluidos Computacional MFIX. Foram utilizados os modelos de arrasto sólido-gás de Gidaspow (1986), Syamlal e O'Brien (1993), Hill-Koch-Ladd (2001) e Arastoopour *et al.* (1990). O modelo de Arastoopour foi implementado no código MFIX e alguns resultados preliminares são mostrados no presente trabalho. Os demais modelos fazem parte do código. Foram investigadas as características e diferenças entre os resultados gerados utilizando os diferentes modelos de arrasto. A seguir são apresentadas as conclusões obtidas destes resultados para cada modelo de arrasto:

Syamlal e O'Brien - No estudo de malha o modelo mostra que os resultados são independentes da malha a partir de malhas pouco refinadas. Na distribuição da fração volumétrica de sólidos, o modelo prevê perfis semelhantes aos dados experimentais, mas que não estão exatamente de acordo com os mesmos. Os perfis médios da fração volumétrica das fases e velocidade do gás diferem bastante dos outros modelos de arrasto analisados. Os resultados médios são simplificados mas possibilitam fazer uma boa análise e previsões médias quando comparados com a teoria. Por exemplo, na análise dos perfis de velocidade (Fig. 4.9a), o modelo de Syamlal e O'Brien apresenta uma previsão ao redor do jato central com pouca variação, quase constante, e na região de  $x^* = 0$  a velocidade é máxima. Comparando estes resultados com a teoria da mecânica do contínuo, sabe-se que a velocidade do gás nas paredes deve ser igual a zero e apresentar um perfil no qual a máxima velocidade é localizada na região central, o que o modelo de Syamlal e O'Brien faz, mas os valores máximos e mínimos previstos pelo modelo não podem ser aceitos como valores reais. Estas simplificações, onde o modelo prevê uma distribuição constante, resultam em um tempo computacional de aproximadamente metade do tempo dos outros modelos de arrasto. Na análise das bolhas formadas no leito, o modelo de Syamlal e O'Brien apresenta resultados muito semelhantes aos de Gidaspow na frequência de desprendimento das bolhas, o que pode significar que ambos os modelos apresentam uma previsão semelhante no grau de mistura



entre as fases. Já no diâmetro das bolhas o modelo de Syamlal e O'Brien difere muito da bolha experimental apresentada por Gidaspow (1994), podendo-se afirmar que não é o melhor modelo de arrasto para utilizar em uma análise do formato e tamanho das bolhas formadas em LFB.

Gidaspow e HKL – Na maior parte dos resultados analisados no presente trabalho, os modelos de Gidaspow e HKL apresentaram previsões muito semelhantes, inclusive no tempo computacional. No estudo de malha os dois modelos apresentam resultados diferentes para diferentes malhas, apresentando melhores resultados nas malhas mais refinadas. Estes resultados (Fig. 4.4) estão em concordância com dados experimentais na altura central do leito ( $y^* = 0,25$ ), mas diferem bastante na superfície do leito, no qual prevêm uma alta concentração de sólidos. Nos perfis de velocidade analisados, os modelos também apresentam previsões muito semelhantes, sendo que o modelo de HKL prevê pontos máximos e mínimos um pouco mais acentuados. Na análise do diâmetro e formato das bolhas, os modelos apresentam previsões muito semelhantes e em concordância com a bolha experimental de Gidaspow (1994), o que resulta uma previsão de expansão do leito muito semelhante. Mas, os modelos diferem nas previsões da frequência de desprendimento das bolhas, sendo que o modelo de HKL prevê a menor frequência, e conseqüentemente, a menor mistura entre as fases.

Arastoopour – O modelo de Arastoopour utiliza um tempo computacional semelhante aos modelos de Gidaspow e HKL. Os perfis médios diferem bastante dos outros modelos, prevendo maior campo de fração de vazio e a menor concentração de fração volumétrica de sólidos no leito. No estudo das bolhas, o modelo apresenta uma previsão de maior frequência de desprendimento de bolhas, ou seja, prevê a maior mistura entre as fases. O modelo ainda prevê a maior expansão do leito devido à maior quantidade de bolhas que ocupam quase toda a região do leito, e conseqüentemente, prevê a maior concentração de partículas na área de bordo livre, o que pode significar uma quantidade maior de partículas sendo transportadas para fora do reator. São necessários testes utilizando malhas mais refinadas para que se possa ter resultados mais conclusivos sobre este modelo.

Entre os modelos analisados, baseando-se nos resultados obtidos nesse estudo, conclui-se que o modelo de arrasto sólido-gás escolhido para simular um LFB depende do foco da análise a ser realizada. Para uma análise da fração volumétrica das fases e velocidade do gás, o modelo de Syamlal e O'Brien é uma boa opção, por apresentar resultados que possibilitam realizar uma boa análise hidrodinâmica, ter a melhor convergência de malha e

principalmente, utilizar o menor tempo computacional, aproximadamente a metade do tempo utilizado pelos outros modelos. Já para um estudo das bolhas formadas em LFB, os modelos de Gidaspow e HKL são os mais indicados por apresentarem resultados com maior concordância com dados experimentais.

As principais dificuldades encontradas durante a realização do trabalho foram o tempo computacional exigido para as simulações e a falta de resultados experimentais disponíveis para comparação. Quanto à demanda computacional, o grupo recentemente adquiriu uma máquina de maior capacidade de processamento. A mesma deverá ser utilizada para que se obtenha novos resultados numéricos, os quais possam trazer informações mais conclusivas sobre o desempenho dos diferentes modelos de arrasto. Dentro desta perspectiva, são sugeridos estudos nos temas:

- Avaliação do desempenho dos modelos em leitos com diferentes dimensões físicas;
- Avaliação do desempenho dos modelos frente à variação de outros parâmetros da modelagem matemática, como modelagem do tensor tensão da fase sólida e modelagem da temperatura granular;
- Geração de resultados tridimensionais.

Quanto à necessidade de comparação com resultados experimentais, é um projeto futuro que o grupo invista na montagem de uma bancada de testes, a qual propiciará a obtenção de dados para análise e comparação.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AHUJA, G. N., PATWARDHAN, A. W. CFD and experimental studies of solids hold-up distribution and circulation patterns in gas–solid fluidized beds. **Chemical Engineering Journal**, v. 143, p. 147–160, 2008.
- ANSYS, Inc., ANSYS Europe, Ltd. **ANSYS CFX-Solver, Release 10.0: Modelling**. 2005.
- ARASTOOPOUR, H., LIN, D., E GIDASPOW, D. Hydrodynamic Analysis of Pneumatic Transport of a Mixture of Two Particle Sizes. **Multiphase Transport**, Ed. Veziroglu, T.N., Hemisphere Publishing Corporation, v. 4, p. 1853-1871, 1980.
- ARASTOOPOUR, H., PAKDEL, P. e ADEWUMI, M. Hydrodynamic Analysis of Dilute Gas-Solid Flow in a Vertical Pipe. **Powder Technology**, v. 62, p. 163-170, 1990.
- BAGNOLD, R.A. Experiments on a Gravity-Free Dispersion of Large Solid Spheres in a Newtonian Fluid Under Shear. **Proc. R. Soc.**, London, A225, p. 49-63, 1954.
- BEHJAT, Y., SHAHHOSSEINI, S., HASHEMABADI, S.H. CFD modeling of hydrodynamic and heat transfer in fluidized bed reactors. **Int. Commun. Heat Mass** v. 35, p. 357–368, 2008.
- BEJAN, Adrian. **Convection heat transfer**. Second edition, Wiley, New York, [s.n] 1990.
- BENYAHIA S. **Gas/Solid Turbulence Models Implemented in MFIX**. 2005. Disponível em: <<https://mfix.org>>. Acesso em: 10 mar. 2011.
- BENYAHIA, S., SYAMLAL, M, O.BRIEN, T.J. Extension of Hill Koch Ladd drag correlation over all ranges of Reynolds number and solids volume fractions. **Powder Technology**, v. 162, p. 166-174, 2006.
- BENYAHIA, S., SYAMLAL, M., O’BRIEN, T.J. **Summary of MFIX Equations 2005-4**. 2009. Disponível em: <<https://mfix.netl.doe.gov/documentation/MFIXEquations2005-4-4.pdf>>. Acesso em 20 mar. 2010.
- BOEMER, A., QI, H., RENZ, U., VASQUEZ, S. AND BOYSAN, F. Eulerian computation of fluidized bed hydrodynamics--a comparison of physical models. **Proceedings of the 13th Int. Con. on FBC**, Orlando, p. 775-786, 1995.
- BOEMER, A., QI, H. e RENZ, U. Eulerian Simulation of Bubble Formation at a Jet in a Two-Dimensional Fluidized Bed. **Int. J. Multiphase Flow**, v. 23, n. 5, p. 927-944, 1997.
- BOYLE, E.J., MASSOUDI, M. **Kinetic Theories of Granular Materials with Applications to Fluidized Beds**. Technical Note, DOE/METC-89/4088, NTIS/DE89000977, Springfield, VA, 1989.

BRAUN M.P.S., MINETO, A. T., NAVARRO, H. A., CABEZAS-GÓMEZ, L., SILVA, R. C. 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, p. 1390-1402, 2010.

DALLA VALLE, J.M. **Micromeritics**. Pitman, London, 1948.

DEEN, N. G., VAN SINT ANNALAND, M., KUIPERS, J. A. M. Detailed computational and experimental fluid dynamics of fluidized beds. **Applied Mathematical Modelling**, v. 30, p. 1459–1471, 2006.

DI FELICE, R. The voidage function for fluid-particle interaction systems. **Int. Journal Multiphase Flow**, v. 20, p. 153-159, 1994.

DING, J., E GIDASPOW, D. A Bubbling Fluidization Model Using Kinetic Theory of Granular Flow. **AIChE Journal**, v. 36, p. 523-538, 1990.

DU, W., BAO, X., XU, J., WEI, W. Computational fluid dynamics (CFD) modeling of spoutedbed: Assessment of drag coefficient correlations. **Chemical Engineering, Science**, v. 61, p. 1401–1420, 2006.

ELETRONBRAS CENTRAIS ELÉTRICAS BRASILEIRAS. **Caldeira Multicombustível entra em Ação**. 2009. Disponível em: <<http://www.cgtee.gov.br/sitenovo/index.php?secao=103&periodico=166&lang=>>. Acesso em: 4 mar. 2011.

ERGUN, S. Fluid flow through packed columns. **Chem. Eng. Prog.** v. 48, p. 89–94, 1952.

ESMAILI, E., MAHINPEY, N. Adjustment of drag coefficient correlations in three dimensional CFD simulation of gas–solid bubbling fluidized bed. **Advances in Engineering Software**, v. 42, p. 375–386, 2011.

GARSDALE, J. e AL-DIBOUNI, M.R. Velocity-Voidage Relationships for Fluidization and Sedimentation. **I & EC Process Des. Dev.**, v. 16, p. 206-214, 1977.

GIBILARO, L.G., DI FELICE, R., WALDRON, S.P, FOSCOLO, P.U. Generalized friction factor and drag coefficient correlations for fluid–particle interactions. **Chemical Engineering Science**, v. 40, p. 1817–1823, 1985.

GIDASPOW, D., LIN, C. E SEO, Y.C. Fluidization in Two-Dimensional Beds with a Jet. 1. Experimental Porosity Distributions. **Ind. Eng. Chem. Fundam.**, v. 22, p. 187-193, 1983a.

GIDASPOW, D. E ETTEHADLEH, B. Fluidization in Two-Dimensional Beds with a Jet. 2. Hydrodynamic Modeling. **Ind. Eng. Chem. Fundam.**, v. 22, p. 193-201, 1983.

GIDASPOW, D. Hydrodynamics of Fluidization and Heat Transfer: Supercomputer Modeling. **Appl. Mech. Rev.**, v. 39, p. 1-23, 1986.

GIDASPOW, D. **Multiphase Flow and Fluidization – Continuum and Kinetic Theory Descriptions**. Ed. Academic Press, London, 467 p., 1994.

GRAY, D.D., STILES, J.M. **On the Constitutive Relation for Frictional Flow of Granular Materials**. Topical Report, DOE/MC/21353-2584, NTIS/DE88001089, Springfield, VA, 1988.

HAFF, P.K. Grain Flow as a Fluid Mechanical Phenomenon. **Journal Fluid Mechanics**, v. 134, p. 401-430, 1983.

HILL, R.J., KOCH, D.L., LADD, J.C. The first effects of fluid inertia on flows in ordered and random arrays of spheres. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 448, p. 213–241, 2001a.

HILL, R.J., KOCH, D.L., LADD, J.C. Moderate-Reynolds-number flows in ordered and random arrays of spheres. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 448, p. 243–278, 2001b.

HOSSEINI, S.H., AHMADI, G., RAHIMI, R., ZIVDAR, M., ESFAHANY, M.N. CFD studies of solids hold-up distribution and circulation patterns in gas–solid fluidized beds. **Powder Technology**, v. 200, p. 202–215, 2010.

INOUE, F. K. **Modelagem Matemática em Obras Hidráulicas**. 2005. 114 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambientais – Área de Mecânica dos Fluidos Computacional) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambientais. Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR, 2005.

JACKSON, R. **Some Mathematical and Physical Aspects of Continuum Models for the Motion of Granular Materials: Theory of Dispersed Multiphase Flow**. Ed. R.E. Meyer, Academic Press, New York, 1983.

JAEGER, H. M., NAGEL, S. R. Physics of the Granular State. **Science**, v. 255, p. 1523-1531, 1992. Disponível em: [www.sciencemag.org](http://www.sciencemag.org). Acesso em 31 ago. 2010.

JENIKE, A.W. A Theory of flow of particulate solids in converging and diverging channels based on a conical yield function. **Powder Technology**, v. 50, p. 229-236, 1987.

JENKINS, J.T., SAVAGE, S.B. A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 130, p. 187–202, 1983.

JENKINS, J.T. **Rapid Flows of Granular Materials: Non-Classical Continuum Mechanics**. Eds. Knops, R., e Lacey, A., Cambridge University Press, p. 213-225, 1987.

JOHNSON, G., MASSOUDI, M., AND RAJAGOPAL, K.R. **A Review of Interaction Mechanisms in Fluid-Solid Flows**. DOE/PETC/TR-90/9, NTIS/DE91000941, Springfield, VA, 1990.

JOHNSON, P.C.; JACKSON, R. Frictional-collisional constitutive relations for granular materials, with applications to plane shearing. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 176, p. 67-93, 1987.

KARPPANEN, E. **Advanced Control of an Industrial Circulating Fluidized Bed Boiler Using Fuzzy Logic**. Department of Process Engineering, Faculty of Technology, University of Oulu. 134 f. ISBN 951-42-5519-4, 2000.

KRISHNA, R., SINCLAIR, J.L., SCHOUTEN, J.C., VAN WACHEM, B.G.M., VAN DEN BLEEK, C.M. Comparative analysis of CFD models of dense gas–solid systems. **AIChE Journal**, v. 47, p. 1035–1051, 2001.

KUNII, D., LEVENSPIEL, O. **Fluidization Engineering**. 1. ed. Fukui ; Corvalis, 491 p. 1991.

LEBOWITZ, J.L. Exact Solution of Generalized Percus-Yevick Equation for a Mixture of Hard Spheres. **Phys. Rev.**, A133, p. 895-899, 1964.

LINDBORG, H., LYSBERGB, M., JAKOBSEN, H. A. Practical validation of the two-fluid model applied to dense gas–solid flows in fluidized beds. **Chemical Engineering Science**, v. 62, p. 5854 – 5869, 2007.

LÖFSTRAND, H., PEIRANO, E. AND ALMSTEDT, A. E. **Three-dimensional two-phase flow theory applied to fluidization**. Publication Nr 95/2 at the Department of Thermo e Fluid Dynamics, Chalmers University of Technology, Gfteborg, Sweden, 1995.

LOUGE, M.Y., MASTORAKOS, E., JENKINS, J.T. The Role of Particle Collisions in Pneumatic Transport. **Journal Fluid Mechanics**, v. 231, p. 345-359, 1991.

LUN, C.K.K., SAVAGE, S.B., JEFFREY, D.J. e CHEPURNIY, N. Kinetic Theories for Granular Flow: Inelastic Particles in Couette Flow and Slightly Inelastic Particles in a General Flow Field. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 140, p. 223-256, 1984.

LUNDBERG, J., HALVORSEN, B.M. A Review of Some Existing Drag Models Describing the Interaction Between Phases in a Bubbling Fluidized Bed. **49th Scandinavian Conference on Simulation and Modeling**, 2008. Disponível em: <<http://www.scansims.org/sims2008/>>. Acesso em: 17 jun. 2011.

MFIX. **Multiphase Flow With Interphase Exchanges**. U.S. Department of Energy. Disponível em: <<https://mfix.netl.doe.gov/>>. Acesso em: 10 jan. 2011.

MILIOLI, C.C., MILIOLI, F.E. On the Accuracy of Two-Fluid Model Predictions for a Particular Gas–Solid Riser Flow. **Applied Mathematical Modelling**, v. 34, p. 684–696, 2010.

MINETO, A. T. **Simulação numérica de escoamentos gás-sólido em leito fluidizado borbulhante utilizando a teoria cinética dos escoamentos granulares**. 2009. 104 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Bauru, SP, 2009.

NAKAMURA, K., CAPES, C.E. **Vertical Pneumatic Conveying of Binary Particle Mixtures**. Fluidization Technology, Ed. Keairns, D.L., Hemisphere Publishing Corp., Washington, DC, p. 159-184, 1976.

O'BRIEN, T.J., E SYAMLAL, M. Fossil Fuel Circulating Fluidized Bed: Simulation and Experiment. *Advances in Fluidized Systems*, Eds. Gaden, E.L., Weimer, A.W., **AICHE Symposium Series**, v. 87, n. 281, p. 127-136, 1991.

O'BRIEN, T.J. E SYAMLAL, M. Particle Cluster Effects in the Numerical Simulation of a Circulating Fluidized Bed. **4th International CFB Conference**, Somerset, PA, August 1-5, 1993.

OGAWA, S., UMEMURA, A., OSHIMA, N. On the Equations of Fully Fluidized Granular Materials. **ZAMP**, v. 31, p. 483-493, 1980.

PASSALACQUA, A., MARMO, L. A critical comparison of frictional stress models applied to the simulation of bubbling fluidized beds. **Chemical Engineering Science**, v. 160, p. 2795 – 2806, 2009.

PATANKAR, S.V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Hemisphere, New York, 1980.

PITMAN, B., SCHAEFFER, D. Stability of Time Dependent Compressible Granular Flow in Two Dimensions. **Comm. Pure Appl. Math.**, v. 40, p. 421-447, 1987.

PRITCHETT, J.W., BLAKE, T.R., GARG, S.K. A Numerical Model of Gas Fluidized Beds. **AICHE Symp. Series**, v. 74, n. 176, p. 134-148, 1978.

PUGSLEY, T., MCKEEN, T. Simulation and experimental validation of a freely bubbling bed of FCC catalyst. **Powder Technology**, v. 129, p. 139–152, 2003.

RAMESH, P. L. N., RAAJENTHIREN M. A Review of Some Existing Drag Models Describing the Interaction Between the Solid-Gaseous Phases in a CFB. **International Journal of Engineering Science and Technology**, v. 2, n. 5, p. 1047-1051, 2010.

RICHARDSON, J.F. e ZAKI, W.N. Sedimentation and Fluidization: Part I. **Trans. Inst., Chem. Eng.**, v. 32, p. 35-53, 1954.

ROGERS, W. A. E BOYLE, E. J. **Prediction of Wear in a Fluidized Bed**. Technical Note, DOE/METC-92/4110, NTIS/DE92001265, National Technical Information Service, Springfield, VA, 1991.

SAVAGE, S.B. The Mechanics of Rapid Granular Flows. **Advances in Applied Mechanics**, v. 24, p. 289-366, 1984.

SAVAGE, S.B., JEFFREY, D.J. The Stress Tensor in a Granular Flow at High Shear Rates. **Journal Fluid Mechanics**, v. 110, p. 255-272, 1981.

SCHAEFFER, D.G. Instability in the evolution equations describing incompressible granular flow. **Journal of Differential Equations**, v. 66, p. 19–50, 1987.

SCHAEFFER, D.G., PITMAN, E.B. Ill-Posedness in Three-Dimensional Plastic Flow. **Comm. Pure Appl. Math.**, v. 41, p. 879-890, 1988

SHEN, H.H., ACKERMAN, N.L. Constitutive Relationships for Fluid-Solid Mixtures. **J. Eng. Mech. Div., Proc. of ASCE**, v. 108, p. 748-763, 1982.

SILVA, R. C., NAVARRO, H. A. CABEZAS-GÓMEZ, L. Analysis of the numerical discretization schemes influence on a gas-solid two-phase flow in a bubbling fluidized bed. **Far East Journal of Applied Mathematics**, v. 38, p. 83-100, 2010.

SINCLAIR, J.L., JACKSON, R. Gas–particle flow in a vertical pipe with particle–particle interactions. **A.I.Ch.E. Journal**, v. 35, p. 1473–1486, 1989.

SOO, S.L. **Fluid Dynamics of Multiphase Systems**. Blaisdell Publishing Corp., Waltham, MA, 1967.

SRINIVASAN, M.G., DOSS, E.D. Momentum Transfer Due to Particle-Particle Interaction in Dilute Gas-Solid Flows. **Chem. Eng. Sci.**, v. 40, p. 1791-1792, 1985.

SYAMLAL, M. **Multiphase Hydrodynamics of Gas-Solids Flow**. School of Advanced Studies of Illinois Institute of Technology. Chicago, Illinois. Tese defendida em dezembro, 1985.

SYAMLAL, M. **The Particle-Particle Drag Term in a Multiparticle Model of Fluidization**. Topical Report, DOE/MC/21353-2373, NTIS/DE87006500, Springfield, VA, 1987b.

SYAMLAL, M. **A Review of Granular Stress Constitutive Relations**. Topical Report, DOE/MC/21353-2372, NTIS/DE87006499, Springfield, VA, 1987c.

SYAMLAL, M. e. O'BRIEN, J. **The Derivation of a Drag Coefficient Formula from Velocity-Voidage Correlations**. Unpublished report, April 1987.

SYAMLAL, M., e O'BRIEN, T.J. Simulation of Granular Layer Inversion in Liquid Fluidized Beds. **Int. J. Multiphase Flow**, v. 14, p. 473-481, 1988.

SYAMLAL, M., E O'BRIEN, T.J. Computer Simulation of Bubbles in a Fluidized Bed. Fluidization and Fluid Particle Systems: Fundamentals and Applications, Ed. L.-S. Fan, **AIChE Symposium Series**, v. 85, n. 270, p. 22-31, 1989.

SYAMLAL, M., ROGERS, W., O'BRIEN, T. **MFIX documentation: theory guide**. Technical Note, DOE/METC-94/1004, U.S. Department of Energy, 1993.

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



TUZUN, U., HOULSBY, G.T., NEDDERMAN, R.M., SAVAGE, S.B. The Flow of Granular Materials-II, Velocity Distributions in Slow Flow. **Chem. Eng. Sci.**, v. 37, p. 1691-1789, 1982.

WEN, Y.C., YU, Y.H. Mechanics of fluidization. **Chem. Eng. Prog. Symp. Ser.** v. 62, p. 100 – 111, 1966.

WU, Zhangfa. **Understanding fluidised bed combustion.** IEA Clean Coal Centre, CCC/76, ISBN 92-9029-391-8, 42 p., London, 2003.

ZOHDI, Tarek I. An Introduction to Modeling and Simulation of Particulate Flows. **Society for Industrial and Applied Mathematics**, Philadelphia, 2007.