

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

DANIEL AUGUSTO KESTERING

**SIMULAÇÃO FLUIDODINÂMICA DE UM LEITO FLUIDIZADO EMPREGANDO
CORRELAÇÕES DE ARRASTO GÁS-SÓLIDO AJUSTADAS POR VALORES
EXPERIMENTAIS**

São Leopoldo

2016

Daniel Augusto Kesting
Engenheiro Químico

SIMULAÇÃO FLUIDODINÂMICA DE UM LEITO FLUIDIZADO EMPREGANDO
CORRELAÇÕES DE ARRASTO GÁS-SÓLIDO AJUSTADAS POR VALORES
EXPERIMENTAIS

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica, pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade do Vale do Rio dos Sinos - UNISINOS

Orientadora: Prof.^a Dra. Flávia Schwarz Franceschini Zinani

Coorientador: PhD. John Gary VanOsdol

São Leopoldo

2016

K42s

Kesting, Daniel Augusto.

Simulação fluidodinâmica de um leito fluidizado empregando correlações de arrasto gás-sólido ajustadas por valores experimentais / Daniel Augusto Kesting. – 2016.

124 f. : il. ; 30 cm.

Dissertação (mestrado) – Universidade do Vale do Rio dos Sinos, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, 2016.

“Orientadora: Prof.a Dra. Flávia Schwarz Franceschini Zinani ; coorientador: PhD. John Gary VanOsdoly.”

1. CFD. 2. Dinâmica de fluidos computacional. 3. EMMS/bubbling. 4. Ajuste de modelo de arrasto gás-sólido. I. Título.

CDU 621

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
(Bibliotecário: Flávio Nunes – CRB 10/1298)

Daniel Augusto Kesting

SIMULAÇÃO FLUIDODINÂMICA DE UM LEITO FLUIDIZADO EMPREGANDO
CORRELAÇÕES DE ARRASTO GÁS-SÓLIDO AJUSTADAS POR VALORES
EXPERIMENTAIS

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica, pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade do Vale do Rio dos Sinos - UNISINOS

Aprovado em 31 de outubro de 2016

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. André Rodrigues Muniz, PPGEQ/UFRGS

Profa. Dra. Maria Luiza Sperb Indrusiak, PPGEM/UNISINOS

Prof. Dr. Paulo Roberto Wander, PPGEM/UNISINOS

Dedico este trabalho à minha família – pai Vilson; mãe Gui; e irmão Marcio – os quais amo muito e que me ensinaram valores preciosos; à minha amada esposa que amo muito e com quem divido minha vida e as decisões mais difíceis; a todos que me ajudaram a ser quem sou hoje, todos os amigos, colegas e professores que me ensinaram coisas da vida, ciência, arte, esporte, entre outros; e em especial à Deus, de cuja verdade tenho conhecido nos últimos 9 anos e que mudou minha vida desde de então.

AGRADECIMENTOS

Pelo desenvolvimento deste trabalho agradeço:

À CAPES pela bolsa de estudo que me possibilitou este estudo;

À Prof.^a D.ra Flávia Schwarz Franceschini Zinani pela orientação e apoio durante o desenvolvimento do trabalho;

Ao meu irmão e à minha cunhada, Marcio e Manolla, que me hospedaram na casa deles;

Aos colegas do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Unisinos, não somente pela amizade, mas pelo apoio nos estudos;

À SATC que me concedeu um dia e meio da semana para que eu pudesse estudar e aos meus colegas, em especial George Clarcke Bleyer, que me auxiliaram no desenvolvimento deste trabalho;

Ao Prof. Dr. John VanOsdol que me coorientou;

E aos demais professores do Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica.

RESUMO

A investigação dos modelos de arrasto gás-sólido é fundamental para se obter bons resultados de fluidização utilizando dinâmica dos fluidos computacional. A tecnologia de fluidização é muito utilizada para conversão térmica de combustíveis sólidos e tem como principal vantagem a boa mistura entre gás e sólido. O presente trabalho utiliza dois softwares para simulação de leitos fluidizados, MFIX e Ansys Fluent, para comparar os modelos de arrasto de Syamlal e O'Brien (1987) e Di Felice (1994). A abordagem utilizada para modelagem do problema é o modelo de dois fluidos (*Two Fluid Model*, TFM), juntamente com a teoria cinética para escoamento laminar (*Kinetic Theory for Granular Flow*, KTGF). Um método para ajuste do modelo de DF (DI FELICE, 1994), baseado no trabalho de Esmaili e Mahinpey (2011), é sugerido, assim como o modelo de SO (SYAMLAL; O'BRIEN,1987) é ajustado utilizando dados em condição de mínima fluidização. Foram conduzidos experimentos para obtenção de velocidade e fração de vazios em condição de mínima fluidização a fim de ajustar ambos os modelos. As partículas utilizadas nos experimentos foram esferas de vidro de 1,21 mm, 0,8 mm e areia de fundição de 0,29 mm. O método proposto representa de forma adequada os dados obtidos em mínima fluidização das três partículas. Com os modelos de arrasto ajustados, simulações numéricas em regime de fluidização foram conduzidas em domínio bidimensional e tridimensional. Os resultados obtidos nestas simulações apresentam boa concordância com resultados experimentais em queda de pressão do leito e borbulhamento. Concomitantemente, um código para obtenção de modelo de arrasto utilizando o algoritmo EMMS/Bubbling foi desenvolvido e simulações numéricas bidimensionais foram conduzidas, para teste e validação. Os resultados do código mostram que o modelo segue a mesma tendência de Shi, Wang e Li (2011), que desenvolveram o modelo EMMS/Bubbling.

Palavras-chave:CFD.Dinâmica de Fluidos Computacional. EMMS/bubbling. Ajuste de modelo de arrasto gás-sólido.

ABSTRACT

The investigation of gas-solid drag models is a key to obtain good results of fluidization by using computational fluid dynamic tools. The fluidization technology is used for solid fuel thermal conversion and its main advantage is the high gas-solid mixture. The present effort uses two software for fluidized beds simulation, MFIX and Ansys Fluent, in order to compare the drag models of Syamlal and O'Brien (1987) and Di Felice (1994). Two Fluid Model is the approach used to model together with Kinetic Theory for Granular flow. A method to adjust DF drag model (DI FELICE, 1994), based on Esmaili and Mahinpey (2011), is suggested, as well as SO drag model (SYAMLAL; O'BRIEN, 1987) is adjusted using data obtained from minimum fluidization condition. Experiments were realized to obtain velocity and void fraction at minimum fluidization condition in order to adjust both models. Glass beads with diameter of 1,21 *mm* and 0,8 *mm* and sand with diameter of 0,29 *mm* were used on experiments. The proposed method fits the data obtained on minimum fluidization condition of the three particles, in accordance with experimental data. With the models adjusted, numerical simulation were conducted using drag models for two- and three-dimensional domain. The results of this simulations agrees with experimental data of pressure drop and bubble formation. Simultaneously, a code to obtain a drag model using EMM/Bubbling algorithm was developed and numerical simulation were conducted. Results of EMMS show that the model have the same tendency of results of Shi, Wand and Li (2011), who developed EMMS/Bubbling model.

Key-words: CFD. Computational Fluid Dynamic. EMMS/bubbling. Gas-solid drag model adjustment.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Regimes de escoamentos em leitos fluidizados.....	23
Figura 2.2 - Perda de carga em função da velocidade superficial do gás.....	26
Figura 2.3 – Diagrama de Geldart para classificação de partículas	30
Figura 2.4 – Exemplo de curvas de ajuste de Hd	41
Figura 2.5 - Resolução do sistema EMMS/bubbling.....	43
Figura 2.6 - Resolução da energia no modelo EMMS/bubbling.	43
Figura 3.1 – Bancada utilizada para ensaio de mínima fluidização.....	50
Figura 3.2 – Distribuidor tipo <i>Tuyère</i>	51
Figura 3.3 – Microscopia Eletrônica de Varredura aproximado 50 vezes das amostras de: (a) Areia de Fundação (AF1), (b) Esfera de vidro (EV2), (c) Esfera de vidro (EV3).	52
Figura 3.4 – Grupo de Geldart.....	53
Figura 3.5 – Exemplo de resultado de ensaio de fluidização	56
Figura 3.6 – Geometria do sistema e condições de operação. Os valores de d e h_{leito} encontram-se na Tabela 3.4.....	64
Figura 3.7 – Geometria das simulações.....	68
Figura 4.1 – Diferença de pressão na placa de orifício e no leito (entre base e topo) em função do tempo.....	71
Figura 4.2 - Gráficos de diferença de pressão normalizada no leito por velocidade; para altura de leito de: (a) 0,1 m, (b) 0,2 m e (c) 0,3 m. Partícula tipo AF1.	73
Figura 4.3 - Gráficos de diferença de pressão normalizada no leito por velocidade; para altura de leito de: (a) 0,1 m, (b) 0,2 m e (c) 0,3 m. Partícula tipo EV2	74
Figura 4.4 – Gráficos de diferença de pressão normalizada no leito por velocidade para altura de leito de: (a) 0,1 m, (b) 0,2 m e (c) 0,3 m. Partícula tipo EV3.	75
Figura 4.5 – Mapa de regime de Grace e valores de mínima fluidização obtidos	76
Figura 4.6 – Fotos do equipamento em fluidização, em dois instantes diferentes, utilizando a partícula EV3, distribuidor tipo placa perfurada e velocidade aproximada de $2U_{mf}$	77
Figura 4.7 – Ajuste linear dos valores experimentais utilizando o modelo de DF.....	78
Figura 4.8 – Valor de χ em função do Re para os modelos original e ajustado e para os valores calculados dos resultados experimentais.....	79

Figura 4.9 – Razão entre a força de arrasto de DF ajustado e original para AF1.	80
Figura 4.10 – Razão entre a força de arrasto de DF ajustado e original para partícula EV2.	81
Figura 4.11 - Razão entre a força de arrasto de DF ajustado e original para partícula EV3.	81
Figura 4.12 – Resultado de fração volumétrica de sólidos média ao longo da altura para partícula AF1, $10U_{mf}$, e três composições de malhas, conforme legenda do gráfico.	82
Figura 4. 13 – Fração de vazios do modelo de arrasto de DF (a) ajustado e (b) original; a velocidade varia a cada 1 s de 0 para 0,4 m/s, para 0,5 m/s, para 0,67 m/s, 0,7 m/s, 0,837 m/s, 0,9 m/s, 1,1 m/s e 1,225 m/s.....	83
Figura 4.14 – Comparação entre os modelos ajustados e originais de DF para fração de sólidos da partícula AF1 (a), EV2 (b) e EV3 (c) com velocidade de $1,5 U_{mf}$	84
Figura 4.15 - Concentração de sólidos no tempo de 7,5 s nas simulações da esquerda para direita: DF (a) original para AF1, EV2 e EV3 e (b) DF ajustado para AF1, EV2 e EV3.	85
Figura 4.16 – Diferença de pressão entre altura zero e 0,9 m para simulação da partícula AF1 com velocidade de $1,5 U_{mf}$. utilizando modelo (a) original e (b) ajustado.	86
Figura 4.17 - Diferença de pressão entre altura zero e 0,9 m para simulação da partícula EV2 com velocidade de $1,5 U_{mf}$ utilizando modelo (a) original e (b) ajustado.	87
Figura 4.18 - Diferença de pressão entre altura zero e 0,9 m para simulação da partícula EV3 com velocidade de $1,5 U_{mf}$ utilizando modelo (a) original e (b) ajustado.	88
Figura 4.19 - Comparação entre os modelos ajustados e originais tridimensional de DF para fração de sólidos da partícula AF1 (a), EV2 (b) e EV3 (c) com velocidade de $1,5 U_{mf}$	89
Figura 4.20 – Transição do modelo de SO (a) ajustado e (b) original de 0 a 1,225 m/s. A cada 1 segundo a velocidade superficial aumenta de 0 para 0,4 m/s, 0,5 m/s, 0,67 m/s, 0.7 m/s, 0,837 m/s, 0,9 m/s, 1,1 m/s 1,225 m/s.....	90
Figura 4.21 - Comparação entre os modelos ajustados e originais de SO para fração de sólidos da partícula AF1 (a), EV2 (b) e EV3 (c) com velocidade de $1,5 U_{mf}$	91

Figura 4.22 – Comparativo entre o modelo (a) original e (b) ajustado de SO para velocidade de fluidização de $1,5 U_{mf}$ das partículas AF1, EV2 e EV3.....	92
Figura 4.23 - Comparação entre os modelos ajustados e originais tridimensional de SO para fração de sólidos da partícula AF1 (a), EV2 (b) e EV3 (c) com velocidade de $1,5 U_{mf}$	93
Figura 4.24 – Diferença de pressão entre altura zero e $0,9 m$ para simulação da partícula AF1 com velocidade de $1,5 U_{mf}$ utilizando modelo (a) original e (b) ajustado de SO.....	94
Figura 4.25 – Diferença de pressão entre altura zero e $0,9 m$ para simulação da partícula EV2 com velocidade de $1,5 U_{mf}$ utilizando modelo (a) original e (b) ajustado de SO.....	94
Figura 4.26 – Diferença de pressão entre altura zero e $0,9 m$ para simulação da partícula EV3 com velocidade de $1,5 U_{mf}$ utilizando modelo(a) original e (b) ajustado.....	95
Figura 4.27 – Média temporal da fração de sólidos ao longo da altura e simulação com modelo de (a) DF original e (b) ajustado, (c) SO original e (d) ajustado, (e) Ergun e (f) Wen-Yu para partícula EV3 e velocidade $1,5 U_{mf}$	97
Figura 4.28 – Transformada rápida de Fourier para partícula AF1, resultado tridimensional, modelos de (a) DF original, (b) DF ajustado, (c) SO e (d) SO ajustado.....	98
Figura 4.29 – Transformada rápida de Fourier para partícula EV2, resultado tridimensional, modelos de (a) DF original, (b) DF ajustado, (c) SO e (d) SO ajustado.....	100
Figura 4.30 - Transformada rápida de Fourier para partícula EV3, resultado tridimensional, modelos de (a) DF original, (b) DF ajustado, (c) SO e (d) SO ajustado.....	101
Figura 4.31 – Variação de N_s e db com a variável δb , fração da fase bolha do (a) presente trabalho e (b) de Shi; Wang e Li (2011).....	103
Figura 4.32 – Gráfico de fração volumétrica de sólidos pela altura para os modelos de Gidaspow (G) e EMMS (B) obtidos pelo (a) presente trabalho e (b) por Shi, Wang e Li (2011).....	104
Figura 4.33 – Valores de H_d em função de εg obtidos para partícula EV3.....	104

Figura 4.34 - Gráfico de fração volumétrica de sólidos pela altura para os modelos de Gidaspow e EMMS (a) mais SO original e ajustado (b), utilizando partícula EV3 e velocidade $1,5 U_{mf}$	105
Figura 4.35 – Imagem do leito da partícula AF1 à velocidade de $0,55 m/s$ com tempo entre $8,5$ e $10 s$ (intervalo de $0,2 s$) para o modelo (a) EMMS e (b) Gidaspow.	106

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Padrão Tyler de peneiras	28
Tabela 2.2- Esfericidade de partículas não esféricas de ocorrência comum	30
Tabela 3.1 – Propriedade das partículas utilizadas.....	53
Tabela 3.2 – Variáveis dos experimentos de mínima fluidização.....	54
Tabela 3.3 – Modelos de arrasto gás-sólido	61
Tabela 3.4 – Propriedades das partículas e dos leitos utilizados nas simulações	64
Tabela 3.5 – Geometria e dados de simulação tridimensional.....	67
Tabela 3.6 – Condições das simulações.....	68
Tabela 4.1 – Altura de leito na mínima fluidização, massa do leito e porosidade do leito na mínima fluidização, para altura de leito inicial de 0,3 m.	71
Tabela 4.2 – Queda de pressão média durante a fluidização.	72
Tabela 4.3 – Velocidade mínima de fluidização obtida para alturas diferentes.....	75
Tabela 4.4 – Parâmetros ajustados do modelo de arrasto de SO para as partículas AF1, EV2 e EV3.	78
Tabela 4.5 – Velocidade predita através de diferentes modelos (valores em m/s)...	95
Tabela 4.6 – Queda de pressão entre os pontos 0 m e 0,9 m acima da base do leito	96
Tabela 4.7 – Ordem crescente das frequências de maior amplitude para os resultados de flutuação de pressão da areia AF1 em modelo tridimensional.....	98
Tabela 4.8 – Ordem crescente das frequências de maior amplitude para os resultados de flutuação de pressão da areia EV2 em modelo tridimensional.....	100
Tabela 4.9 – Ordem crescente das frequências de maior amplitude para os resultados de flutuação de pressão da areia EV3 em modelo tridimensional.....	102

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CFD	Fluidodinâmica Computacional, do inglês, <i>Computational Fluid Dynamics</i>
DF	Modelo de arrasto de Di Felice (1994)
DFT	Transformada Discreta de Fourier (<i>Discrete Fourier Transform</i>)
DNS	Simulação Numérica Direta (<i>Direct Numerical Simulation</i>)
EMMS	Modelo estrutural de minimização de energia multiescala. Do inglês, <i>Energy Minimization Multi-Scale</i>
FFT	Transformada rápida de Fourier, do inglês <i>Fast Fourier Transform</i>
KTGF	Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares (<i>Kinetic Theory of Granular Flows</i>)
KTGF	Teoria Cinética para Escoamento Granular, do inglês <i>Kinetic Theory for Granular flow</i>
LF	Leito Fixo
LFB	Leito Fluidizado Borbulhante
LFC	Leito Fluidizado Circulante
MFIX	<i>Multiphase Flow with Interphase Exchange</i>
SATC	Associação Beneficente da Indústria Carbonífera de Santa Catarina
SO	Modelo de arrasto de Syamlal-O'Brien(1987)
TFM	Modelo de dois fluidos, do inglês <i>Two Fluid Model</i>
WY	Modelo de arrasto de Wen-Yu (1966)

LISTA DE SÍMBOLOS

A	Área
a	Termo inercial de massa adicionada, ou massa virtual
C	Componente flutuante da velocidade
c	Velocidade instantânea da partícula
C_b	Coeficiente da força de massa adicionada
C_d	Coeficiente de arrasto gás-sólido para partícula única
e	Coeficiente de restituição
g	Gravidade, 9,81 m/s ²
h	Posição ou altura em relação a base
H	Altura
I	Componente de intercâmbio entre fases
M	Massa
P	Pressão
q	Fluxo difusivo de energia (KTGF)
S	Tensor tensão
U	Velocidade superficial, magnitude
u	Velocidade superficial, vetorial
U_b	Velocidade superficial da bolha
U_{ge}	Velocidade superficial do gás na emulsão
U_{pe}	Velocidade superficial da partícula na emulsão
U_{sb}	Velocidade de escorregamento entre bolha e suspensão
U_{se}	Velocidade de escorregamento entre partícula e gás na suspensão
V	Volume
W	Força Peso; massa vezes gravidade

Letras Gregas

β	Coeficiente de arrasto gás-sólido para nuvem de partículas
γ	Dissipação de energia por colisão inelástica (KTGF)
Δ	Varição ou diferença de valores de uma variável no espaço ou tempo

δ	Fração de gás na bolha em relação ao volume total de gás
ε	Fração volumétrica
σ	Variância da flutuação da pressão
θ	Temperatura granular (KTGF)
μ	Viscosidade
ρ	Massa específica
τ	Tensor tensão viscosa
χ	Fator exponencial do modelo de Di Felice

Subscritos

0	Padrão ou inicial
<i>e</i>	Emulsão
<i>f</i>	Relativo ao fluido
<i>g</i>	Relativo ao gás
<i>mf</i>	Em condição de mínima fluidização
<i>p</i>	Relativo a partículas sólidas
<i>s</i>	Relativo ao sólido, relativo à suspensão das partículas (EMMS)
<i>t</i>	Transversal
θ	Devido à temperatura granular ou colisão (KTGF)

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	19
1.1 Tema	20
1.2 Delimitações do TEMA.....	21
1.3 Objetivo	21
1.3.1 Objetivo Geral	21
1.3.2 Objetivos Específicos	21
1.4 Justificativa.....	22
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	23
2.1 Fluidização	23
2.2 Perda de carga no leito	25
2.3 Caracterização e Classificação de particulados.....	26
2.3.1 Massa específica	26
2.3.2 Definição de Tamanho de partícula.....	27
2.3.3 Classificação de Geldart	29
2.3.4 Definição de Formato de Partícula.....	30
2.4 Velocidades características.....	32
2.4.1 Velocidade Superficial.....	32
2.4.2 Velocidade intersticial.....	32
2.5 Números adimensionais	32
2.5.1 Reynolds	32
2.5.2 Arquimedes.....	33
2.5.3 Velocidade Superficial Adimensionalizada.....	33
2.6 Dinâmica de Fluidos Computacional aplicada a leitos fluidizados.....	33
2.6.1 Simulação Numérica de Leitos Fluidizados.....	34
2.6.2 Modelos de arrasto gás-sólido	38
2.6.3 Modelos de Arrasto Multiescala	40
2.7 Análise de séries temporais	47
3 METODOLOGIA	49
3.1 Ensaio de velocidade mínima de fluidização	49
3.1.1 Equipamento experimental.....	50
3.1.2 Partículas utilizadas	52

3.1.3	Ensaio experimental	54
3.2	Obtenção da Velocidade mínima de fluidização	55
3.3	Modelo Matemático TFM-KTGF	56
3.3.1	Equação do Balanço de Massa	56
3.3.2	Equação do Balanço de Quantidade de Movimento	57
3.3.3	Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares	58
3.4	Modelos de arrasto	61
3.5	Obtenção do modelo de arrasto utilizando o modelo EMMS/Bubbling	63
3.6	Geometria, condições de contorno e parâmetros da simulação de leito fluidizado utilizando modelo de arrasto EMMS/Bubbling	63
3.7	ajuste da correlação de arrasto de Syamlal-O`Brien	65
3.8	ajuste da correlação de arrasto de Di Felice	66
3.9	Simulação Numérica	67
4	RESULTADOS	70
4.1	Resultados Experimentais	70
4.1.1	Obtenção da Fração de Vazios	70
4.1.2	Ensaio de Mínima Fluidização	71
4.2	Ajuste dos modelos de arrasto	77
4.2.1	Ajuste de Syamlal-O`Brien	78
4.2.2	Ajuste do modelo Di Felice	78
4.3	Simulação numérica de leito fluidizado borbulhante	82
4.3.1	Simulação numérica utilizando modelo de Di Felice original e ajustado	82
4.3.2	Simulação numérica do modelo de Syamlal-O`Brien original e ajustado	89
4.3.3	Comparação entre predição dos modelos de arrasto e dados experimentais	95
4.4	Resultados Utilizando o Modelo EMMS/Bubbling	102
4.4.1	Verificação do código EMMS/Bubbling implementado	102
4.4.2	Índice de heterogeneidade, <i>Hd</i>	104
4.4.3	Resultados com modelo EMMS/bubbling	105
5	CONCLUSÃO	107
5.1	Sugestão para trabalhos futuros	108
	REFERÊNCIAS	110
	APÊNDICE A - CALIBRAÇÕES	114
	APÊNDICE B – MATRIZ EXPERIMENTAL	117

APÊNDICE C – CÓDIGO DO MODELO DE DI FELICE	118
APÊNCIDE D – MODELO EMMS/BUBBLING	121

1 INTRODUÇÃO

Um leito fluidizado é um leito de partículas através do qual escoam um fluido, mantendo-as em suspensão, i.e, no estado de fluidização. O escoamento gás-sólido em leito fluidizado pode ocorrer em várias operações industriais como secagem, craqueamento catalítico, combustão, gaseificação e outros. Uma das principais aplicações desta tecnologia é gaseificação ou combustão de combustíveis, tais como biomassa, carvão e coque verde de petróleo. As características que conferem aos leitos fluidizados vantagens sobre outras tecnologias, neste tipo de aplicação, são as altas taxas de transferência de calor e de massa, uniformidade de temperatura durante a operação e a flexibilidade quanto ao tipo de combustível empregado. (HARTGE; WERTHER, 1986; COLLOT, 2006).

Existem várias técnicas para o cálculo de propriedades de leitos fluidizados, entre elas, correlações que permitem o cálculo de tamanho de bolha, quantidade e taxas de transferência de calor e de massa entre fases bolha e emulsão, por exemplo. Outra abordagem é a modelagem física do problema, deixando a formação de bolha e tamanho dela como resultado do sistema, ao invés de utilizar como meio de resolução de cálculo, como acontece em modelos conhecidos como dinâmica dos fluidos computacional (CFD, do inglês *Computational Fluid Dynamics*). (SOUZA-SANTOS, 2010; SYAMLAL; PANNALA, 2011).

Os métodos numéricos, tais como CFD para sistemas multifásicos, têm sido usados para simular escoamentos gás-sólido em leitos fluidizados. A CFD tem sido reconhecido como uma ferramenta com grande potencial para prever o movimento complexo de sistemas gás-sólido e suas reações químicas. Por este motivo, modelos CFD oferecem um método para entendimento e melhoria de sistemas fluidizados, fornecendo informações detalhadas sobre o escoamento e processos químicos e preenchendo a falta de informação dos modelos de teste de pequena escala e plantas comerciais de grande escala. (BENYAHIA et al., 2000; KNOWLTON; KARRI; ISSANGA, 2005)

Em modelos gás-sólido, os principais modelos são baseados em dois tipos de abordagem. A primeira considera as partículas como uma fase discreta e traça a trajetória individual de cada partícula através das leis de movimento de Newton. O gás é considerado como uma fase contínua. Este modelo, no entanto, requer um esforço computacional muito alto a fim de calcular o movimento de cada partícula e suas

colisões. A segunda abordagem, chamada de TFM (método de dois fluidos, do inglês *Two Fluid Method*) considera tanto a fase fluida quanto a fase sólida como contínuas interpenetrantes. Desta maneira, como pode ser visto com mais detalhe na revisão bibliográfica, é necessário modelar a viscosidade da fase sólida (granular) e a troca de quantidade de movimento entre as fases.

A força de arrasto é a principal atuante na troca de quantidade de movimento entre a fase sólida e a fase gás. Usualmente são utilizados modelos de arrasto gás-sólido empíricos e semi-empíricos, os quais podem levar a resultados bastante diferentes entre si. (SYAMLAL; PANNALA, 2011).

O modelo EMMS engloba oito parâmetros que descrevem a estrutura de mesoescala e é capaz de capturar os chamados fenômenos de *choking* e de redução de arrasto em sistemas de fluidização gás-sólido. (LI et al., 2013).

Na prática, este modelo é utilizado para prever a transferência de quantidade de movimento entre as fases gás e sólido em um sistema de fluidização em códigos de CFD. Uma modificação do modelo original de EMMS é o modelo EMMS/bubbling, que foi desenvolvido para leitos fluidizados borbulhantes por Shi, Wang e Li (2011). Neste modelo são definidas três fases: fase emulsão, interfase e fase bolha. Para a resolução deste sistema são necessários seis parâmetros: velocidade superficial do gás na emulsão, velocidade superficial da partícula na emulsão, a fração volumétrica da emulsão, a velocidade das bolhas, o diâmetro da bolha e a porosidade da emulsão.

Este estudo pretende utilizar dados experimentais de ensaios de velocidade de mínima fluidização para ajustar modelos empíricos de arrasto. Após obtidos os valores de ajuste, o aparato utilizado para obtenção dos valores experimentais foi simulado numericamente para confrontar os resultados experimentais e numéricos. Além disto, um modelo de minimização de energia multiescala será utilizado como modelo de arrasto.

1.1 TEMA

Estudar modelos de arrasto, comparando-os e ajustando-os com dados experimentais, além da utilização do conceito de minimização de energia multiescala para ajuste de modelo de arrasto.

1.2 DELIMITAÇÕES DO TEMA

Serão obtidas as velocidades de mínima de fluidização e a fração de vazios de três tipos de partículas: 2 tipos de esferas de vidro, sendo uma de diâmetro médio de 1,216 milímetros e outra de 0,800 milímetros, e areia de fundição classificada com diâmetro médio de 0,293 milímetros.

Para tanto, uma bancada de estudo de leito fluidizado circulante foi adaptada para uso em regime borbulhante. As velocidades serão obtidas através da queda de pressão em placa de orifício, adquirida por um transdutor de pressão e lida em um sistema supervisorio.

Dados experimentais serão utilizados para ajustar o modelo de arrasto de SO (SYAMLAL;O'BRIEN,1987) e de DF (DI FELICE,1994). Além disto o conceito de minimização de energia em multiescala será utilizado para obtenção de uma função de ajuste do modelo de arrasto de Gidaspow

Serão utilizados modelos TFM, com utilização de KTGF para viscosidade do sólido e modelos de arrasto gás-sólido. Também será simulada computacionalmente a bancada real de fluidização a fim de comparar dados reais e simulados numericamente.

1.3 OBJETIVO

1.3.1 Objetivo Geral

Comparar o desempenho de 3 modelos de arrasto gás-sólido, utilizando dados experimentais de velocidade de mínima fluidização para ajuste, na simulação numérica de um leito fluidizado em regime borbulhante, empregando a modelagem de dois fluidos.

1.3.2 Objetivos Específicos

- Obter a velocidade mínima de fluidização de três partículas diferentes;

- Implementar o modelo EMMS/bubbling em código computacional para obtenção do modelo de arrasto;
- Ajustar os modelos de arrasto de Di Felice e de Syamlal e O'Brien utilizando dados de velocidade mínima de fluidização;
- Implementar em aplicativos, comerciais ou livres, de dinâmica dos fluidos computacional os modelos de arrasto de Di Felice e EMMS/bubbling;
- Comparar resultados experimentais com resultados de simulação numérica utilizando modelos ajustados e não ajustados.
- Comparar resultados experimentais com resultados de um modelo de arrasto EMMS.

1.4 JUSTIFICATIVA

A simulação CFD têm se mostrado uma ferramenta de grande utilidade para análise de leitos fluidizados. O modelo TFM (modelo de dois fluidos) necessita de correlações para forças interfaciais para que sejam possíveis os balanços de quantidade de movimento de ambas as fases. Estas correlações são empíricas e semi-empíricas e podem ter resultados com grandes diferenças, como mostra Esmaili e Mahinpey (2011).

Esmaili e Mahinpey (2011) ainda mostram como as correlações, empíricas e semi-empíricas, ajustadas a partir de resultados experimentais podem fornecer melhores resultados na simulação numérica de leitos fluidizados em comparação com as correlações originais dos autores.

Com uma ferramenta numérica mais precisa, pode-se melhorar a predição de leitos fluidizados reacionais em tecnologias de combustão, gaseificação, secagem, entre outras.

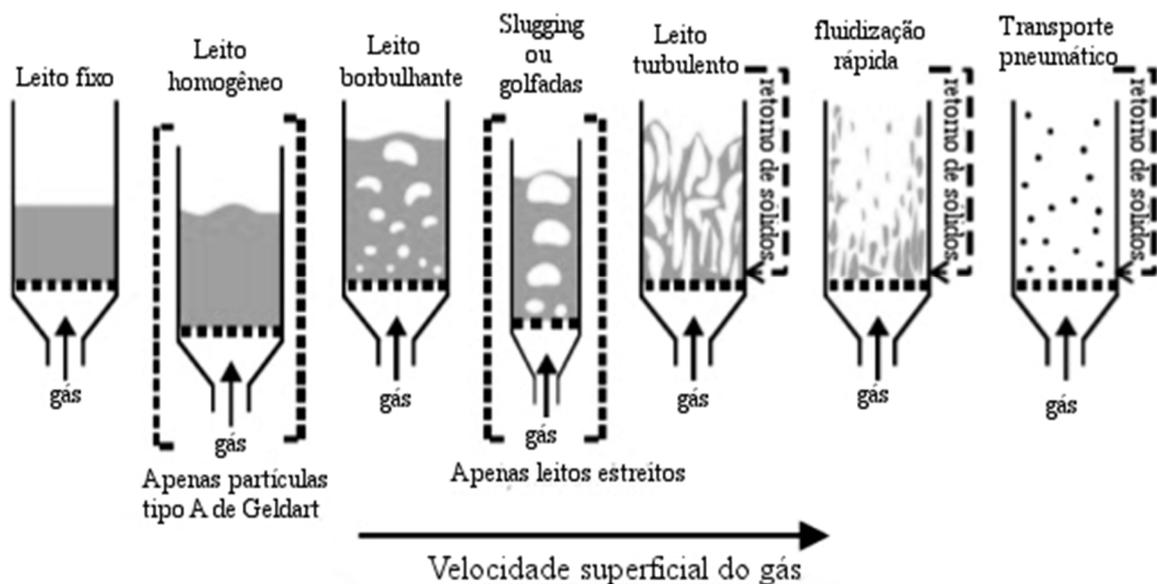
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 FLUIDIZAÇÃO

Fluidização é a operação na qual partículas sólidas são submetidas ao escoamento de gás ou líquido tal que fazem as partículas ficarem em suspensão. Um equipamento com este propósito leva o nome de leito fluidizado, pois as partículas do leito se comportam como fluido quando percoladas a uma velocidade suficiente para suspensão. (KUNII; LEVENSPIEL, 1991).

A Figura 2.1 ilustra os regimes de fluidização usuais observados em um leito fluidizado, em função da vazão de gás que escoar desde a base do leito

Figura 2.1 – Regimes de escoamentos em leitos fluidizados.



Fonte: adaptado de Kunii e Levenspiel (1991).

Se um fluido escoar em ascendência por um leito de partículas em baixa vazão, o fluido apenas percola através dos espaços vazios entre as partículas estacionárias. Para este cenário, o leito é chamado de fixo, pois as partículas estão estacionárias. Se a vazão é aumentada, as partículas começam a se mover – algumas vibram e se movem em regiões restritas. Este regime de escoamento é conhecido como leito expandido.

Em uma velocidade ainda maior, é alcançado o regime no qual todas as partículas estão suspensas pelo movimento ascendente do fluido. Neste momento, a força de arrasto do fluido sobre as partículas iguala a sua força peso; a componente vertical da força de compressão entre partículas adjacentes desaparece, e a perda de carga através de qualquer seção do leito é aproximadamente igual à força peso dos sólidos e do fluido por área da seção transversal. Este cenário é conhecido como o leito em mínima fluidização. (KUNII; LEVENSPIEL, 1991; YANG, 2003).

Em sistemas líquido-sólido, um aumento da vazão acima da velocidade mínima de fluidização usualmente resulta em uma expansão suave e progressiva do leito, instabilidade de vazões são amortecidas, heterogeneidade não é observada em escoamentos em condições normais. Em sistemas gás-sólido isto só pode ser observado sob condição especial de partículas finas e leves submetidos a escoamento de gás denso em pressões elevadas.

Geralmente, sistemas gás-sólido se comportam de maneira diferente. Com o aumento da vazão acima da mínima fluidização, grandes instabilidades com bolhas e canais preferenciais são observadas. Em vazões maiores, a agitação se torna mais violenta e o movimento dos sólidos se torna mais vigoroso. Além disto, o leito não expande muito além do seu volume sob mínima fluidização. Tal leito é chamado de leito fluidizado borbulhante. Em raros casos, este cenário pode ser observado em leitos líquido-sólido, mas apenas quando os sólidos apresentam uma massa específica alta em líquidos de massa específica baixa.

Em sistemas gás-sólido, as bolhas de gás coalescem e crescem à medida que sobem. Em leitos profundos de pequeno diâmetro, as bolhas podem, eventualmente, tornar-se tão largas que alcancem o tamanho de diâmetro do leito. A este cenário é dado o nome de *slug* (em inglês), conhecido também como golfada, ou pistonado. Quando as partículas são finas, estas descem através da parede; quando são partículas grossas, descem de forma dispersa, permeando a bolha.

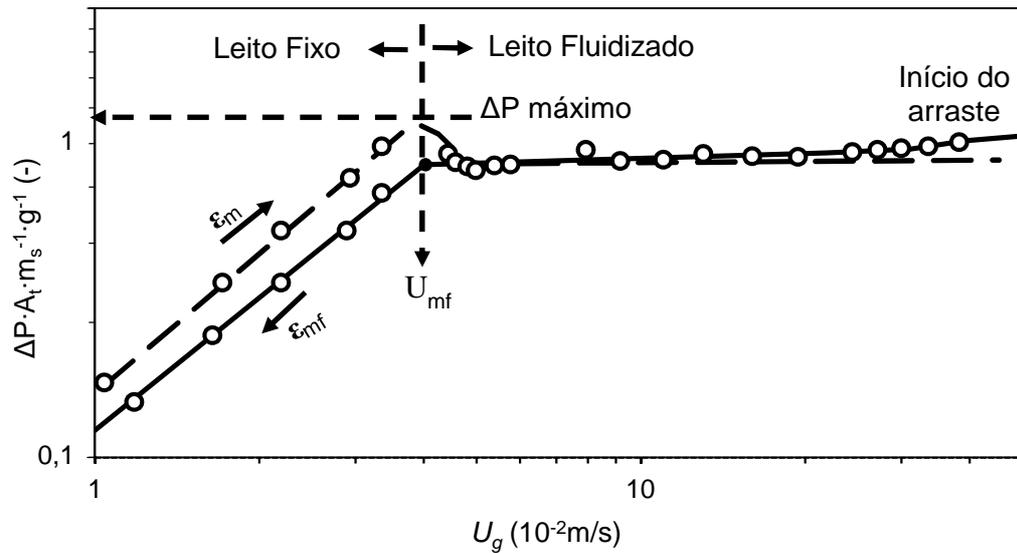
Quando partículas finas são fluidizadas em uma vazão suficientemente alta, a velocidade terminal das partículas é excedida, a superfície do leito torna-se difusa, elutriação é observada e, ao invés de bolhas, pode-se observar um movimento turbulento de agrupamentos de sólidos (*clusters*, inglês) e vazios de gás de vários tamanhos e formas. Este é o leito fluidizado turbulento. Com um aumento ainda maior na velocidade do gás, partículas sólidas são carregadas para fora do leito junto com o gás.

Leitos fluidizados borbulhantes são comparáveis a líquidos em ebulição e apresentam comportamento similar a líquidos. Da mesma forma que objetos afundam ou flutuam em líquidos por serem, respectivamente, mais densos ou menos densos que o líquido, isto também acontece em um leito fluidizado borbulhante. Se houver um furo no vaso onde ocorre a fluidização, os sólidos vão escoar, se o vaso for inclinado o leito manterá o nível horizontal e ainda se dois leitos fluidizados forem conectados os níveis serão equalizados. (GRACE; AVIDAN; KNOWLTON, 1997).

2.2 PERDA DE CARGA NO LEITO

Em leito fixo, a perda de carga no leito aumenta com a velocidade e atinge seu máximo na velocidade mínima de fluidização, conforme mostra a Figura 2.2. Após atingir a velocidade mínima de fluidização, o escoamento gera um arrasto suficiente para manter as partículas suspensas e a perda de carga se aproxima do peso do leito, $W (M_s \cdot g)$ dividido por sua área transversal (A_t). Um leito ideal teria a perda de carga normalizada igual a 1 durante a fluidização, porém, devido a efeito de parede, a perda de carga real é menor que 1. A Figura 2.2 mostra o comportamento da perda de carga (da esquerda para direita) para regimes de escoamento de leito fixo, leito fluidizado borbulhante e início de elutriação. A perda de carga em leito fixo é diferente dependendo do caminho tomado (fluidização ou defluidização), pois a fração de vazios é diferente se partindo de velocidade abaixo da mínima fluidização ou partindo de velocidade acima da mínima fluidização. Mesmo partindo de leito fluidizado, a fração de vazios pode ser diferente dependendo de quão rápido a velocidade diminui. Se a velocidade do gás é lentamente reduzida até chegar a leito fixo, a fração de vazios obtida pode ser considerada a fração de vazios na mínima fluidização. (KUNII; LEVENSPIEL, 1991).

Figura 2.2 - Perda de carga em função da velocidade superficial do gás.



Fonte: adaptado de Kunii e Levenspiel (1991).

2.3 CARACTERIZAÇÃO E CLASSIFICAÇÃO DE PARTICULADOS

2.3.1 Massa específica

Massa específica real, ρ , é a massa que certo material possui pelo volume que ocupa. A massa específica do material é a massa do material dividido pelo volume que ele ocupa. Como por exemplo para um sólido granular

$$\rho_s = \frac{M_s}{V_{\text{sólido}}} = \frac{M_s}{V_{\text{total}} - V_{\text{interstícios}}} = \frac{M_s}{V_{\text{total}}(1 - \epsilon_g)} \quad (2.1)$$

onde ρ_s é a massa específica do sólido, M_s é a massa de sólidos, $V_{\text{sólido}}$ é o volume de sólidos, V_{total} é o volume total, $V_{\text{interstícios}}$ é o volume do de interstícios no leito ou volume de poros no leito e ϵ_g é a fração volumétrica de gás no leito, ou seja, é o volume de poros no leito pelo volume total do leito.

No entanto, a massa específica de leito, ou massa específica aparente, ρ_a , é a massa do material particulado dividido pelo volume do leito – que considera o volume que o material ocupa mais porosidade do leito – Também pode ser calculado como

massa específica real multiplicada pela porosidade do leito, se considerada a massa do sólido muito maior que a massa de gás, como:

$$\rho_a = \frac{M_s + M_f}{V_{total}} = \frac{\rho_s V_s + 0}{V_{total}} = \rho_s (1 - \varepsilon_g) \quad (2.2)$$

2.3.2 Definição de Tamanho de partícula

Partículas irregulares, comumente de interesse, não podem ser definidas individualmente. Seus tamanhos são definidos de acordo com certas propriedades de referência. A escolha do método de caracterização depende da aplicação da partícula. Em muitos casos a escolha correta de um diâmetro representativo é incerta. Muitos diâmetros já foram definidos para caracterizar partículas irregulares. Os mais comuns, citados por Yang (2013), são:

- Diâmetro volumétrico: definido como diâmetro de uma esfera que tenha o mesmo volume da partícula irregular.
- Diâmetro superficial: definido como diâmetro de uma esfera que tenha a mesma superfície de uma partícula irregular.
- Diâmetro superfície/volume, também conhecido como diâmetro de Sauter: definido com o diâmetro de uma esfera que tenha a mesma relação superfície/volume de uma partícula.
- Diâmetro de peneira: definido como o tamanho da menor seção quadrada pela qual a partícula pode passar. É o método mais comum e utiliza uma sequência de peneiras padronizadas (Tabela 2.1). As partículas retidas nas peneiras têm seu diâmetro calculado como a média das aberturas das peneiras (a última pela qual passa e a na qual foi retida).

$$d_p = \frac{Abertura_{passante} + Abertura_{retido}}{2} \quad (2.3)$$

onde d_p é o diâmetro considerado da fração retida.

O diâmetro médio de peneira é determinado pela média ponderada

$$\bar{d}_p = \frac{1}{\sum (\chi d_p)_i} \quad (2.4)$$

onde \bar{d}_p é o diâmetro médio, χ é a fração retida e d_p é o diâmetro calculado de cada fração.

Tabela 2.1 – Padrão Tyler de peneiras

Número de Mesh	Abertura (10^{-6} m)	Número de Mesh	Abertura (10^{-6} m)
3	6680	35	417
4	4699	48	295
6	3327	65	208
8	2362	100	147
10	1651	150	104
14	1168	200	74
20	833	270	53
28	589	400	38

Fonte: Kunii e Levenspiel (1991)

- Diâmetro de queda livre: definido como o diâmetro de uma esfera com mesma massa específica da partícula e mesma velocidade terminal (ou velocidade de queda livre) em um mesmo fluido.
- Diâmetro de arrasto: definido como o diâmetro de uma esfera que tenha a mesma resistência ao movimento que uma partícula irregular em um fluido com mesma massa específica e se movendo em mesma velocidade.
- Diâmetro perimétrico: definido como diâmetro de um círculo que tenha o mesmo perímetro do contorno de uma partícula irregular;
- Diâmetro de área projetada: definido como o diâmetro de um círculo que tem a mesma área que a área projetada da partícula irregular;
- Diâmetro de Feret: diâmetro estatístico que representa o valor média das distâncias entre pares de tangentes paralelas a um contorno projetado das partículas.
- Diâmetro de Martin: diâmetro estatístico definido como comprimento médio do contorno projetado da partícula que bissecciona a área projetada.

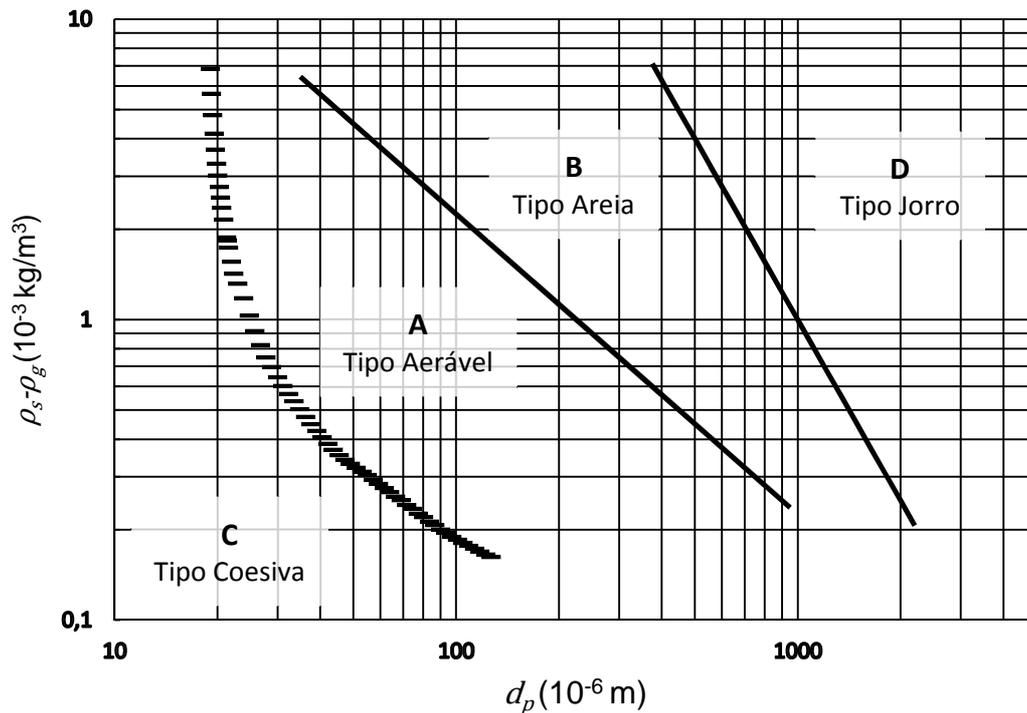
2.3.3 Classificação de Geldart

A partir da observação de vários tipos e tamanhos de partículas sólidas, Geldart (1973) classificou quatro tipos de comportamentos de partículas. Das mais finas às mais grossas, elas são classificadas como segue:

- Grupo C: Coesas, partículas muito finas. Fluidização normal extremamente difícil devido às forças interpartículas serem maiores que do que a força de arrasto. Polvilho, farinha, cimento, entre outros, são típicos exemplos destes sólidos
- Grupo A: Aerável, materiais que tenham tamanho de partícula médio pequeno e/ou massa específica baixa. São sólidos que fluidizam fácil, com fluidização suave a baixas velocidades. São exemplos deste sólido os catalizadores de craqueamento catalítico do petróleo.
- Grupo B: Maioria dos materiais com tamanho de partícula entre 40 μm e 500 μm e massa específica entre 1400 e 4000 kg/m^3 . As partículas com esta característica fluidizam bem com aborbulhamento vigoroso e bolhas que aumentam.
- Grupo D: Partículas grandes e/ou densas. Leitos altos (ou profundos) deste material são difíceis de fluidizar. Tem comportamento irregular, com grandes bolhas que explodem ou formação acentuada de canal, ou ainda comportamento de jorro se a distribuição do gás for não uniforme. São exemplos destes materiais grãos para secagem, café para torrefação e minério de ferro em calcinação. Os processos comuns são feitos em leitos rasos ou leito de jorro.

A classificação das partículas é feita de acordo com o diagrama de Geldart (1973) e é dependente da massa específica e diâmetro das partículas e da massa específica do fluido. A Figura 2.3 mostra o diagrama de Geldart para classificação de partículas.

Figura 2.3 – Diagrama de Geldart para classificação de partículas



Fonte: Geldart (1973)

2.3.4 Definição de Formato de Partícula

O “grau de esfericidade” (ou esfericidade) é definido, de acordo com Wadell (1933), como:

$$\phi = \frac{\text{Área superficial de esfera com volume equivalente}}{\text{Área superficial da partícula}} \quad (2.5)$$

Para esferas ideais, a esfericidade é igual a 1; para partículas não esféricas (casos reais), a esfericidade é sempre menor que 1.

A inconveniência do uso da esfericidade é a dificuldade de se obter a área superficial de uma partícula irregular. A Tabela 2.2 mostra a esfericidade usualmente considerada para alguns materiais conhecidos.

Tabela 2.2- Esfericidade de partículas não esféricas de ocorrência comum

Material	Esfericidade (-)
Areia arredondada	0,86

Areia irregular	0,66
Arenito moído	0,8-0,9
Carvão pulverizado	0,73
Carvão moído	0,63-0,75
Carvão ativo	0,70-0,90
Lascas de Mica	0,28
Catalisador Fischer-Tropsch	0,58
Sal de cozinha	0,84
Vidro moído	0,65
Sílica gel	0,70-0,90
Pó de Tungstênio	0,89
Trigo	0,85

Fonte: Adaptado de Geldart (1986)

Kunii e Levenspiel (1991) sugerem ainda um método para o cálculo da esfericidade efetiva seguindo os seguintes passos:

- Determinar a fração de vazios do leito a mais exata possível;
- Medir a perda de carga em leito fixo utilizando várias velocidades diferentes;
- Inserir os valores de diâmetro de partícula, porosidade do leito e perda de carga, juntamente com as propriedades do sistema, na Equação de Ergun (Equação (2.6)) para queda de pressão por altura de leito e obter o valor de esfericidade que melhor se ajusta aos dados.

$$\frac{\Delta P}{H_{leito}} = \frac{150 u_g \mu_g (1 - \varepsilon_g)^2}{d_{eff}^2 \varepsilon_g^3} + \frac{1,75 \rho_g u_g^2 (1 - \varepsilon_g)}{d_{eff} \varepsilon_g^3} \quad (2.6)$$

onde d_{eff} é o diâmetro efetivo, dado por

$$d_{eff} = \phi d_p, \quad (2.7)$$

sendo ΔP a queda de pressão no leito, H_{leito} a altura do leito fixo, u_g a velocidade superficial do fluido, μ_g a viscosidade do fluido, ε_g a porosidade do leito e ϕ a esfericidade.

2.4 VELOCIDADES CARACTERÍSTICAS

2.4.1 Velocidade Superficial

Velocidade superficial, u_g , é definida como a vazão volumétrica do gás dividido pela área transversal do leito.

2.4.2 Velocidade intersticial

Velocidade intersticial é a velocidade média que o gás percola o leito de partículas. Diferentemente da velocidade superficial, que desconsidera o leito de partículas, a velocidade intersticial é calculada como a vazão do gás dividido pela área efetiva por onde escoar, ou seja, considera que o gás escoar pelos vazios (interstícios). Esta aproximação considera que a área de vazios dividido pela área transversal é igual ao volume dos vazios dividido pelo volume total do leito (fração de vazios).

2.5 NÚMEROS ADMENSIONAIS

No estudo da fluidização são utilizados, entre outros, dois números adimensionais importantes, o número de Reynolds e o número de Arquimedes.

2.5.1 Reynolds

O número de Reynolds, Re , descreve a razão entre forças inerciais e forças viscosas no escoamento do gás através da nuvem de partículas. Da mesma maneira que a velocidade, existem valores de números de Reynolds médio e locais. Neste trabalho o número de Reynolds é dado pela Equação (2.8).

$$Re = \frac{\rho_g d_p |u_g - u_s|}{\mu_g} \quad (2.8)$$

2.5.2 Arquimedes

O número de Arquimedes, Ar , relaciona forças gravitacionais e forças viscosas que agem no escoamento através do leito de partículas; A Equação (2.9) descreve o número de Arquimedes utilizado. Juntamente com o número de Reynolds, é utilizado para prever a velocidades de transição como, por exemplo a velocidade mínima de fluidização e as velocidades de transição entre os regimes de fluidização.

$$Ar = \frac{d_p^3 \rho_g (\rho_s - \rho_g) g}{\mu_g^2} \quad (2.9)$$

O Ar pode ser utilizado também para definir um diâmetro adimensional, quando estiver na potência de 1/3, ou seja, $Ar^{\frac{1}{3}}$

2.5.3 Velocidade Superficial Adimensionalizada

A velocidade superficial adimensionalizada, U^* , é utilizada, principalmente, em diagrama de mapa de regimes, idealizado por Grace et al. (1997) e é definida como:

$$U^* = \frac{Re}{Ar^{\frac{1}{3}}} \quad (2.10)$$

2.6 DINÂMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL APLICADA A LEITOS FLUIDIZADOS

As interações entre gás e sólido são as responsáveis pela complexidade do escoamento em sistemas gás-sólido. Força de arrasto é comumente o componente dominante na interação entre as fases e sua quantificação é crítica para predição de escoamento gás sólido, conforme, Syamlal e Pannala (2011). Como o modelo TFM trata o sólido como fluido, é necessário modelar a força de arrasto para uma nuvem

de partículas. Os modelos de arrasto mais comuns são dependentes do diâmetro de partícula, da viscosidade do fluido, da fração de vazios, da massa específica do fluido e do sólido. No entanto, correlações para força de arrasto na célula computacional podem levar a predições com diferenças em ordens de magnitude, o que influencia fortemente os resultados das simulações. (ESMAILI; MAHINPEY, 2011).

2.6.1 Simulação Numérica de Leitos Fluidizados

No início da utilização da simulação numérica para descrição de leitos fluidizados, dois modelos foram propostos. Um é baseado na abordagem pseudo-homogênea e o outro em modelo de duas fases (diferente do modelo de dois fluidos). No modelo homogêneo, onde a existência de mais de uma fase não é considerada, propõe-se o uso do modelo de mistura para resolução de problemas multifásicos. Nestes modelos de mistura poderiam ser incluídos modelos de escoamento ideal, de dispersão, de distribuição de tempo de residência e de distribuição de tempo de contato. O modelo de dois fluidos, no entanto, considera que o leito fluidizado possui pelo menos duas fases, fase bolha e fase emulsão, e propõe equações governantes separadas para cada fase e um termo de troca de massa entre elas. (SYAMLAL; PANNALA, 2011).

Como o modelo pseudo-homogêneo não teve sucesso em obter bons resultados, apostou-se no desenvolvimento do modelo multifásico. Vários modelos baseados no modelo de dois fluidos surgiram.

Dois abordagens são tipicamente utilizadas na modelagem CFD para escoamento gás-sólido. Uma delas é a abordagem Lagrangiana-Euleriana que traça o movimento das partículas utilizando as Leis de Newton do Movimento enquanto que o fluido é tratado como um contínuo. Modelos Lagrangiano-Euleriano comumente requerem esforço computacional muito alto, especialmente quando o número de partículas é alto.

A outra abordagem é chamada Euleriana-Euleriana e resolve tanto o gás como o sólido como fases contínuas interpenetrantes. Também é conhecido como modelo de dois fluidos. Neste modelo, os balanços de massa e de quantidade de movimento de cada fase fornecem as equações governantes do sistema, e a presença de cada fase no volume de controle é mapeada pela fração volumétrica de cada fase. Assim como no modelo Lagrangeano-Euleriano, é necessário modelar a transferência de

quantidade de movimento entre as fases, cuja principal força atuante é o arrasto gás-sólido, foco deste estudo. Quando se utiliza o TFM, é necessário modelar o tensor tensão da fase sólida (viscosidade do sólido). Uma das principais abordagens para o cálculo do tensor tensão é a Teoria Cinética para Escoamento Granulares (KTGF, do inglês *Kinetic Theory of Granular Flow*), que é uma extrapolação para partículas muito maiores da teoria cinética do gás denso (CHAPMAN; COWLING, 1970).

Aplicações computacionais de modelo TFM têm sido desenvolvidas por vários pesquisadores tanto em 2D quanto em 3D. Estes trabalhos têm concluído que TFM é adequado para aplicação em leitos fluidizados industriais. Pesquisadores tem demonstrado a superioridade dos resultados de simulações em 3D comparadas às 2D, que devem ser usadas com cautela e são recomendadas para análise de sensibilidade. No entanto, simulações tridimensionais são capazes de reproduzir expansão do leito, distribuição de partícula e flutuação da pressão. O conjunto de equações de balanço de massa, quantidade de movimento e energia, derivadas através da abordagem do contínuo são incompletas e precisam de fechamento. Para este fim, equações para troca de quantidade de movimento entre as fases, equação de arrasto, e para o tensor tensão precisam ser fornecidas. (GOLDSCHMIDT; KUIPERS; VAN SWAAIJ, 2001; XIE BATAGLIA; PANNALA, 2008; BEHJAT; SHAHHOSSEINI; HASHEMABADI, 2008; LI et al., 2008).

A fim de se modelar o efeito de arrasto em nuvens de partículas, correlações empíricas foram desenvolvidas, tais como as de SO (Syamlal; O'BRIEN, 1987), WY (WEN; YU, 1966), DF (DI FELICE, 1994) e outras correlações de arrasto. Esmaili e Mahinpey (2011), e Goldschmidt, Kuipers e van Swaaij (2001) mostram que diferentes modelos de arrasto utilizados em simulação podem levar a grandes diferenças na predição da expansão do leito, formato das bolhas, empacotamento dos sólidos, entre outros efeitos menores. Este problema deriva do fato que arrasto é um fenômeno multiescala, porém é tratado como modelo de mesoescala, conforme Syamlal e Pannala (2011). Outro fator importante que os autores citam é que muitas correlações de arrasto empíricas são originárias de experimentos em sistemas líquido-sólido, mais homogêneos que sistemas gás-sólido,

Syamlal e O'Brien (1987) apresentaram um método prático para o ajuste dos modelos de arrasto. Dados experimentais foram utilizados para ajuste do modelo, mais especificamente a velocidade de mínima fluidização, quando ocorre balanço de forças na nuvem de partículas, como peso, empuxo e arrasto.

Esmaili e Mahinpey (2011) usaram o modelo de arrasto de DF (DI FELICE, 1994) e, tal como em Syamlal e O'Brien (1987), ajustaram dois parâmetros através da velocidade mínima de fluidização. Eles compararam nove modelos de arrasto diferentes e encontraram que modelos ajustados de SO e DF predisseram melhor a altura de leito. O modelo ajustado de DF mostrou resultados mais próximos do experimental para formato de bolha e comportamento flutuante. Resultados de desvio da expansão do leito variam de 25% abaixo, como pior resultado, e 1,2% acima, como melhor resultado. Em velocidades mais altas, a maioria dos modelos de arrasto subestimou a força de arrasto e altura de leito, com exceção do modelo de Syamlal-O'Brien. Resultados de Esmaili e Mahinpey (2011) mostraram que este modelo obtém melhores resultados para velocidades de gás

Uma característica importante do leito fluidizado borbulhante é a formação da bolha de gás. Ela é responsável pela mistura entre gás e sólidos, circulação de sólidos e estabilização da temperatura. Por isto é necessário entender suas características e comportamento transiente. Vários pesquisadores têm avaliado o comportamento do leito resultante de diferentes modelos de arrasto gás-sólido. (ZINANI; PHILIPPSEN; INDRUSIAK, 2012; ESMAILI; MAHINPEY, 2011; TAGHIPOUR; ELLIS; WONG, 2005; WU, 2003).

Vários autores têm estudado o desempenho e o papel dos modelos de arrasto nos resultados numéricos (CFD) em regime de borbulhamento gás-sólido. Taghipour, Ellis e Wong (2005) encontraram resultados similares para os modelos de arrasto de SO (SYAMLAL; O'BRIEN, 1987), Gidaspow (1986) e Wen-Yu (WEN; YU, 1966), com relação à média temporal da queda de pressão no leito, expansão do leito e padrões qualitativos de escoamento gás-sólido. McKeen e Pugsley (2003) compararam os modelos de SO, Gidaspow, Ergun (1952) e Gibilaro et al. (1985) para simulação numérica de um leito fluidizado para craqueamento catalítico e verificaram que os resultados numéricos diferem bastante dos resultados experimentais, especialmente na expansão do leito. Lundberg e Halvorsen (2008) utilizaram cinco modelos de arrasto – Richardson e Zaki (1954); Gidaspow; SO; Hill, Koch, e Ladd (2001) (HKL) e RUC (Representative Unit Cell Model) – e verificaram que os resultados dos modelos de Gidaspow, HKL e RUC apresentaram resultados de frequência próximos aos resultados experimentais. Behjat, Shahhosseini e Hashemabadi (2008) encontraram que o modelo de SO apresenta uma predição de expansão do leito melhor que o modelo de Gidaspow, enquanto que para o formato de bolhas, ambos apresentam

resultados similares. Por outro lado, Hosseini et al. (2010) constatou que apenas o modelo de Arastoopour mostrou resultados similares aos experimentais, entre os modelos de SO, Gidaspow e Arastoopour. Esmaili e Mahinpey apresentaram resultado comparativo de onze modelos de arrasto e concluíram que os modelos ajustados utilizando dados de mínima fluidização, SO e DF (1994), apresentaram expansão do leito compatível com resultados experimentais. Zinani, Philippsen e Indrusiak (2012) comparam os modelos de Gidaspow, SO, e HKL em leito fluidizado de jato central e verificaram que os modelos de Gidaspow e HKL mostraram tamanho de bolha similar ao experimental, enquanto que o modelo de SO resultou em formação de pequenas bolhas.

Como demonstrado por Goldschmidt (2001), outro parâmetro importante em modelagem numérica é o coeficiente de restituição para colisão entre partículas, e , cujo valor corresponde à razão entre as velocidades de colisão e pós colisão. Colisões puramente elásticas ($e = 1,0$) geram resultados com tamanho de leito baixo, bolhas pequenas e baixa flutuação na queda de pressão quando comparados a dados reais. (BEHJAT et al., 2008).

Resultados de simulação de Goldschmidt, Kuipers e van Swaaij (2001), para velocidades superficiais idênticas mostraram distribuição homogênea do leito para colisões perfeitamente elásticas e começam a prever zonas compactas e maior formação de bolha quando desviam da idealidade. Uma vez que colisões elásticas predizem leito homogêneo, a altura de leito é menor que a altura experimental. Nos casos apresentados, a altura de leito começa a aumentar à medida que se afasta da idealidade e se aproxima de resultados experimentais. Este aumento faz com que a frequência de flutuação da queda de pressão no leito aumente. Por outro lado, o coeficiente de restituição entre partícula e parede mostrou influência mínima no comportamento do leito. Os resultados também mostram que, para coeficientes de restituição menores que 0,9, a diferença dos resultados é pequena.

Como apresentado, modelos de arrasto e coeficiente de restituição têm grande influência no comportamento do leito em parâmetros tais como altura de leito, geração e formato de bolhas.

2.6.2 Modelos de arrasto gás-sólido

A fim de modelar leito fixo, a equação de Ergun (Equação (2.6)) pode ser estendida para encontrar o valor do coeficiente de arrasto para nuvem de partículas, β , conforme Gidaspow (1993)

$$\beta_{Ergun} = 150 \frac{\mu_g (1 - \varepsilon_g)^2}{\varepsilon_g d_s^2} + 1,75 \frac{(1 - \varepsilon_g) \rho_g}{d_s} |u_s - u_g| \quad (2.11)$$

A equação de Wen e Yu (1966) é modelada como:

$$\beta_{WY} = \frac{3\rho_g \varepsilon_g (1 - \varepsilon_g)}{4d_s} C_D |u_s - u_g| \varepsilon_g^{-2,65} \quad (2.12)$$

onde C_D é relacionado da seguinte forma:

$$C_{D,WY} = \begin{cases} 0,44 & , \quad Re \varepsilon_g > 1000 \\ \frac{24 [1 + 0,15 (Re \varepsilon_g)^{0,687}]}{Re \varepsilon_g} & , \quad Re \varepsilon_g \leq 1000 \end{cases} \quad (2.13)$$

Juntas, os modelos de Wen-Yu e Ergun formam a correlação gás sólido de Gidaspow (1993), desde que obedeçam a seguinte limitação:

$$\beta_{Gidaspow} = \begin{cases} \beta_{WY} & , \varepsilon_g > 0,8 \\ \beta_{Ergun} & , \varepsilon_g \leq 0,8 \end{cases} \quad (2.14)$$

Syamlal e O'Brien (1987) propuseram o seguinte modelo de arrasto gás sólido:

$$\beta_{SO} = \frac{3\rho_g \varepsilon_g (1 - \varepsilon_g)}{4d_s v_r^2} C_{D,SO} |u_s - u_g| \quad (2.15)$$

o qual relaciona a força de arrasto para nuvem com o coeficiente de arrasto de partícula única, C_D , apresentado por Dalla Valle (1948) como

$$C_{D,SO} = \left[0,63 + \frac{4,8}{\sqrt{\frac{Re}{v_r}}} \right]^2 \quad (2.16)$$

No entanto, Syamlal e O'Brien (1987) corrigem a equação de Dalla Valle (1948) com v_r , que é a razão entre a velocidade terminal da nuvem de partículas e a velocidade terminal de partícula única. Syamlal e O'Brien (1987) utilizam a correlação de Garside e Aldibouni (1977, apud SYAMLAL; O'BRIEN, 1987)

$$v_r = 0,5 \left(A - 0,006Re + \sqrt{(0,006Re)^2 + 0,12Re(2B - A) + A^2} \right) \quad (2.17)$$

onde

$$A = \varepsilon_g^{4,14} \quad (2.18)$$

e

$$B = \begin{cases} C_2 \varepsilon_g^{1,28} & ; \varepsilon_g < 0,85 \\ \varepsilon_g^{C_1} & ; \varepsilon_g \geq 0,85 \\ C_1 = 2,65 ; C_2 = 0,8 \end{cases} \quad (2.19)$$

nos quais os valores de C_1 e C_2 são ajustáveis, utilizando a velocidade mínima de fluidização.

Di Felice (1994) faz uma análise empírica do modelo de arrasto e sugere que, para Reynolds intermediários, o expoente para a função de fração de sólidos varie, diferentemente do modelo de Wen e Yu (1966). Di Felice sugere o seguinte modelo:

$$\beta_{DF} = \frac{3\rho_g(1 - \varepsilon_g)}{4d_s} C_D |u_s - u_g| f(\varepsilon_s) \quad (2.20)$$

onde C_D é baseado em Dalla Valle (1948) segundo a equação

$$C_D = \left[0,63 + \frac{4,8}{\sqrt{Re}} \right]^2 \quad (2.21)$$

A função de fração de sólidos, $f(\varepsilon_s)$, principal discussão do seu trabalho, é modelada como:

$$f(\varepsilon_s) = (1 - \varepsilon_s)^{-\chi} \quad (2.22)$$

onde

$$\chi = P - Q \cdot \exp \left[\frac{-(1,5 - \log(Re\varepsilon_g))^2}{2} \right] \quad (2.23)$$

cujos valores P e Q obtidos por Di Felice (1994) são 3,7 e 0,65, respectivamente.

2.6.3 Modelos de Arrasto Multiescala

O modelo *Energy Minimization Multi-Scale (EMMS)* é um modelo multiescala desenvolvido para cálculo de comportamento global médio sob balanço de forças. Li e Kwauk (1994; apud BENYAHIA, 2011) propôs o modelo de minimização de energia em multiescala que considera os efeitos de estruturas heterogêneas. Este modelo foi desenvolvido para leitos fluidizados rápidos, nos quais as estruturas são caracterizadas como agrupamento de sólidos e fase diluída.

Segundo Shi, Wang e Li (2011), estrutura de mesoescala é a chave para a modelagem do arrasto gás sólido. Esta estrutura se caracteriza como a bolha, no caso de leito fluidizado borbulhante, ou agrupamento de partículas, no caso de leitos fluidizados circulantes.

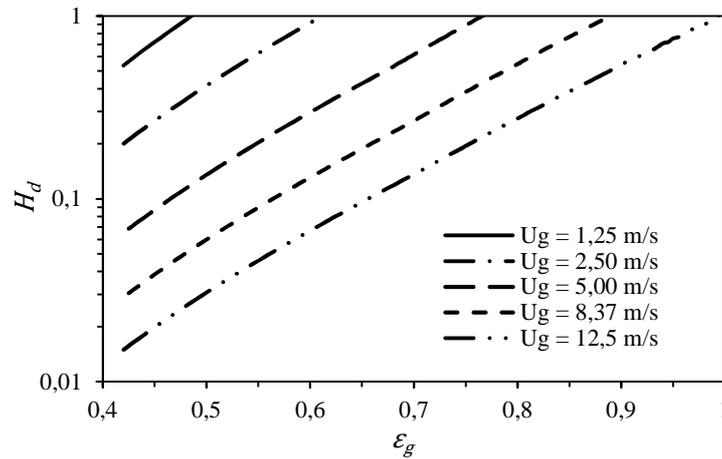
No modelo EMMS, três diferentes escalas são observadas, ou seja, a microescala das partículas, a mesoescala dos agrupamentos (das bolhas no modelo EMMS/Bubbling) e a macroescala do leito inteiro. (SHI; WANG; LI, 2010).

Os parâmetros dos agrupamentos são determinados em função do diâmetro do agrupamento e da fração de vazios por meio da condição global de estabilidade, que é a minimização de N_{st} , energia consumida por massa para suspender e transportar partículas.

Assim como no modelo estendido de EMMS para expressar a força de arrasto, o método EMMS para leito borbulhante (EMMS/Bubbling), desenvolvido por Shi, Wang e Li (2011), também é calculado em duas etapas a fim de se obter a força de arrasto. Primeiro, obtém-se a força de arrasto para diversos valores de fração de vazios, ε_g , e velocidade superficial do gás, U_g , gerando um gráfico similar à Figura 2.4, onde índice de heterogeneidade, H_d , é definido como:

$$H_d \equiv \frac{\beta_{EMMS/Bubbling}}{\beta_{Gidaspow}} \quad (2.24)$$

Figura 2.4 – Exemplo de curvas de ajuste de H_d



Posteriormente, obtém-se as equações que ajustam a curva obtida na Figura 2.4, para as diversas velocidades e $H_d(\varepsilon_g)$ menores ou iguais a um. A função H_d compõe, então, a correlação

$$\beta_1 = \begin{cases} \beta_{Ergun}, & \varepsilon_g \leq \varepsilon_{mf} \\ \beta_{wy} H_d(\varepsilon_g), & \varepsilon_g > \varepsilon_{mf} \text{ e } H_d \leq 1 \\ \beta_{wy}, & H_d > 1 \end{cases} \quad (2.25)$$

2.6.3.1 Modelo EMMS/Bubbling Estado Estacionário

Uma modificação do modelo original de EMMS é o modelo EMMS/bubbling, que foi desenvolvido para leitos fluidizados borbulhantes. Neste modelo são definidas três fases: fase emulsão, *interfase* e fase bolha; como mostra a Figura 2.5. Para a resolução deste sistema são necessárias 6 variáveis: velocidade superficial do gás na emulsão, velocidade superficial da partícula na emulsão, a fração volumétrica da emulsão, a velocidade das bolhas, o diâmetro da bolha e a fração de vazios da emulsão.

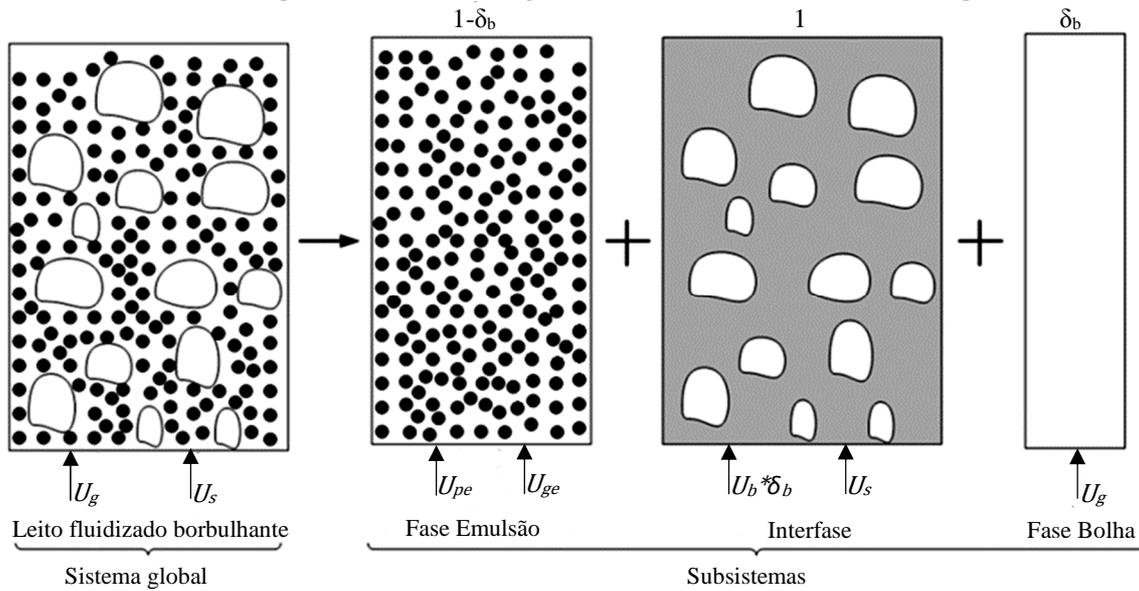
O sistema global de energia, como mostra a Figura 2.6, é dividido em 2 subsistemas: o subsistema da energia necessária para suspensão das partículas, N_s , e o sistema de dissipação de energia N_d .

O subsistema N_s pode ser dividido ainda em energia para suspensão na fase emulsão, N_{se} , e energia de suspensão entre fase emulsão e fase bolha, N_{be} . A N_{be} consiste da taxa de consumo de energia devida a velocidade relativa entre a emulsão e as bolhas rígidas, N_{inter} , e a taxa de consumo de energia devido à deformação da bolha, N_{surf} .

2.6.3.2 Modelo EMMS/Bubbling Transiente

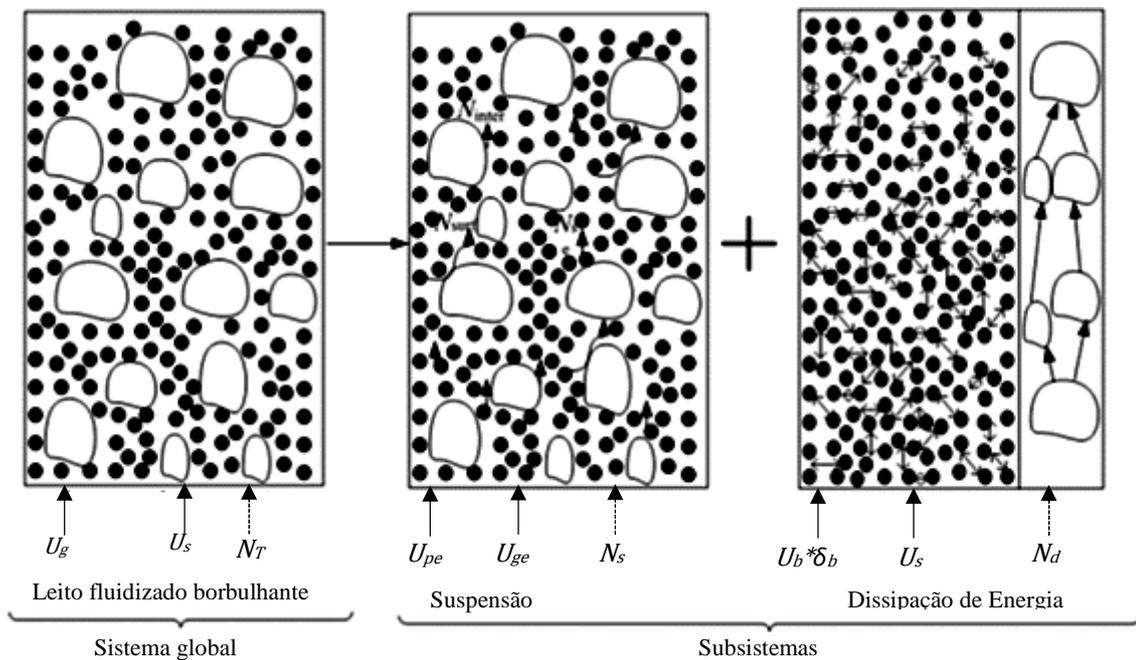
Antes de alcançarem o diâmetro máximo estável, bolhas coalescem ou se rompem com a aceleração por isto os efeitos da aceleração para uma descrição local do movimento das bolhas devem ser considerados. Por simplicidade, dois termos iniciais são adicionados às seis variáveis descritas para o método de estado estacionário, a_e e a_b . Os três subsistemas ou fases, emulsão, interfase e bolha, podem ser representados por oito variáveis: velocidade superficial do gás na emulsão, velocidade superficial da partícula na emulsão, a fração volumétrica da emulsão, a velocidade das bolhas, o diâmetro da bolha e a fração de vazios da emulsão, aceleração da fase bolha e aceleração da fase emulsão.

Figura 2.5 - Resolução do sistema EMMS/bubbling.



FONTE: Shi, Wang, Li (2011).

Figura 2.6 - Resolução da energia no modelo EMMS/bubbling.



FONTE: Shi, Wang, Li (2011).

O modelo EMMS/Bubbling para modelo de arrasto consiste em determinar uma função de ε_g , chamada de função de heterogeneidade, H_d , a fim de alterar o modelo de Gidaspow, como pode ser observado na sequência.

O sistema composto pelas Equações (2.26) a (2.47) permite encontrar o valor de H_d para diversos valores de fração de vazio, ε_g . Desta forma é possível obter uma curva de ajuste de H_d em função de ε_g para valores de H_d menores que 1, como mostra a Figura 2.4. A Equação (2.26), de Thomas (1965, apud SHI et al., 2011), fornece a viscosidade da fase emulsão. (THOMAS, 1965)

$$\mu_e = \mu_g [1 + 2,5\varepsilon_{es} + 10,05\varepsilon_{es}^2 + 0,00273 \exp(16,6\varepsilon_{es})] \quad (2.26)$$

sendo ε_{es} a fração volumétrica de sólidos na emulsão e ε_e a fração de gás na emulsão, relacionados pela Equação (2.27).

$$\varepsilon_{es} = 1 - \varepsilon_e \quad (2.27)$$

A velocidade do gás da fase emulsão, U_e , é dada pela Equação (2.28), sendo U_{ge} e U_{pe} as velocidades do gás e das partículas na fase emulsão, respectivamente.

$$U_e = \frac{\rho_g U_{ge} + \rho_p U_{pe}}{\rho_p (1 - \varepsilon_e) + \rho_g \varepsilon_e} \quad (2.28)$$

A velocidade dos sólidos na fase bolha, U_{sb} , é dada pela Equação (2.29), sendo δ_b a fração volumétrica da fase bolha, calculada pela Equação (2.30).

$$U_{sb} = (U_b - U_e)(1 - \delta_b) \quad (2.29)$$

$$\delta_b = \frac{\varepsilon_g - \varepsilon_e}{1 - \varepsilon_e} \quad (2.30)$$

Utilizando a lei de Ergun, tem-se a Equação (2.31), de onde foi obtido o valor da velocidade de escorregamento na emulsão, U_{se} , obtido pela resolução da equação:

$$\left[\frac{150(1 - \varepsilon_e)^2 \mu_g}{\varepsilon_e d_p^2} + \frac{7(1 - \varepsilon_e) \rho_g U_{se}}{\varepsilon_e d_p} \right] \frac{U_{se}}{\varepsilon_e^2} = (1 - \varepsilon_e)(\rho_p - \rho_g)g \quad (2.31)$$

A massa específica da fase emulsão é obtida utilizando a equação da mistura, como mostra a Equação (2.32)

$$\rho_e = \rho_p(1 - \varepsilon_e) + \rho_g \varepsilon_e \quad (2.32)$$

A diferença inercial entre as fases bolha e emulsão resulta na força de massa adicionada, que é pequena comparada à força de arrasto. Para calculá-la são utilizadas as Equações (2.33) (ZUBER, 1964), (2.34) (ZENIT; HUNT, 200) e (2.35) (ZHANG; VANDERHEYDEN, 2002; DE WILD, 2007).

$$C_b = 0,5 \frac{1 + 2\delta_b}{1 - \delta_b} \quad (2.33)$$

$$\sigma^2 = \frac{(1 - \varepsilon_g)^2 (\varepsilon_g)^4}{1 + 4(1 - \varepsilon_g) + 4(1 - \varepsilon_g)^2 - 4(1 - \varepsilon_g)^3 + (1 - \varepsilon_g)^4} \quad (2.34)$$

$$a_b - a_e = \frac{\sigma^2 (\rho_p - \rho_g) g}{C_b (1 - \varepsilon_e) \delta_b \rho_e}; \quad (2.35)$$

onde C_b é o coeficiente da força de massa adicionada, σ^2 é a variância da flutuação da fração de sólidos local,

A conservação de massa na fase bolha fornece as Equações (2.36) e (2.37) para as partículas e para o gás, respectivamente:

$$U_{pe} = \frac{U_s}{1 - \delta_b} \quad (2.36)$$

$$U_g - U_{ge}(1 - \delta_b) - U_b \delta_b = 0 \quad (2.37)$$

A velocidade superficial na emulsão é definida pela Equação (2.37) e o respectivo número de Reynolds é definido pela Equação (2.38).

$$U_{se} = U_{ge} - \frac{U_{pe} \varepsilon_e}{1 - \varepsilon_e} \quad (2.38)$$

$$Re_e = \frac{\rho_g d_p U_{se}}{\mu_g} \quad (2.39)$$

A Equação (2.40) mostra a correlação para cálculo de coeficiente de arrasto de uma bolha única, enquanto a Equação (2.41) faz a correção deste valor para múltiplas bolhas. Deste modo é possível calcular o diâmetro médio de bolha, d_b , fornecido pela Equação (2.42) e a razão de gás na bolha em relação ao total de gás, f_b , fornecida pela Equação (2.43):

$$C_{db0} = \begin{cases} 38Re_i^{-1,5} & 0 < Re_i < 1,8 \\ 2,7 + \frac{24}{Re_i} & Re_i > 1,8 \end{cases} \quad (2.40)$$

$$C_{db} = C_{db0}(1 - \delta_b)^{\frac{1}{2}} \quad (2.41)$$

$$d_b = \frac{3}{4} \frac{C_{db} \rho_e U_{sb}^2}{(\rho_e - \rho_g)(g + a_b)} \quad (2.42)$$

$$f_b = \frac{\delta_b \varepsilon_b}{\delta_b \varepsilon_b + (1 - \delta_b) \varepsilon_e} \quad (2.43)$$

Da mesma forma, faz-se o cálculo do coeficiente efetivo de arrasto da fase emulsão, utilizando o balanço de forças das partículas na emulsão e a lei de Ergun, que geram a Equação (2.44):

$$C_{de} = 200 \frac{(1 - \varepsilon_e) \mu_g}{\varepsilon_e^3 d_p \rho_g U_{se}} + \frac{7}{3 \varepsilon_e^3} \quad (2.44)$$

O trabalho de Shi et al. (2011) mostra que, para minimização da energia no sistema, basta minimizar a energia de suspensão, N_s , que é a soma da energia de suspensão na fase emulsão com a energia de distorção da bolha, e o consumo de energia entre bolha rígida e a fase emulsão. O valor de N_s , é dado pela Equação (2.45):

$$N_s = \frac{3}{4} C_{de} \frac{\rho_g U_{se}^2}{\rho_p d_p} U_{ge} + f_b U_g (g + a_b) \quad (2.45)$$

Por fim, o cálculo do coeficiente efetivo de arrasto, β_1 , é feito utilizando a Equação (2.46).

$$\beta_{EMMS/Bubbling} = \frac{\varepsilon_g^2}{U_{slip}} \left[(1 - \delta_b)(1 - \varepsilon_e)(\rho_p - \rho_g)(g + a_e) + \delta_b(\rho_e - \rho_p)(g + a_b) \right] \quad (2.46)$$

O coeficiente de heterogeneidade, H_d , é definido como o valor do coeficiente efetivo de arrasto, β_1 , dividido pelo coeficiente efetivo de arrasto padrão, que neste caso é o coeficiente de Wen-Yu (Equações (2.12) e (2.13)). Uma curva de ajuste para o coeficiente de heterogeneidade, H_d , é obtida em função da fração de vazios, ε_g , e aplicada na Equação (2.48).

$$H_d \equiv \frac{\beta_{EMMS/Bubbling}}{\beta_{wy}} \quad (2.47)$$

$$\beta_1 = \begin{cases} \beta_{Ergun}, & \varepsilon_g \leq \varepsilon_{mf} \\ \beta_{wy} H_d, & \varepsilon_g > \varepsilon_{mf} \text{ e } H_d \leq 1 \\ \beta_{wy}, & H_d > 1 \end{cases} \quad (2.48)$$

2.7 ANÁLISE DE SÉRIES TEMPORAIS

Uma descrição quantitativa do regime de fluidização pode ser obtida da análise de séries temporais dos sinais de flutuação da pressão no leito e, segundo Alberto, Felipe e Rocha (2004), esta quantificação é uma medida apropriada para avaliar a formação de bolhas. De acordo com Johnsson et al. (2000 apud ALBERTO; FELIPE; ROCHA, 2004), é possível fazer esta análise no domínio do tempo, no domínio da frequência (análise espectral) e em espaço de estado (análise de sistemas não lineares). A análise da pressão pode ser feita tanto com medição absoluta de pressão, na base do leito, quanto diferencial, entre base e topo do leito. (WERTHER, 199 apud ALBERTO; FELIPE; ROCHA, 2004).

A transformada de Fourier é uma ferramenta matemática que permite a transição entre o domínio tempo e frequência. A transformada de Fourier de uma função $x(t)$ é definida como:

$$X(f, T) = \int_0^T x(t) e^{-j2\pi f t} dt \quad (2.49)$$

Assumindo sinal discreto igualmente espaçado, têm-se:

$$x_n = x(n\Delta t) \quad N = 0; 1; 2; 3; \dots; N - 1 \quad (2.50)$$

Similarmente, para uma função f arbitrária, a versão discreta da transformada de Fourier se torna:

$$X_k = \frac{X(f_k)}{\Delta t} = \sum_{n=0}^{N-1} x_n \exp\left(-j \frac{2\pi kn}{N}\right) \quad k = 0; 1; 2; 3; \dots; N - 1 \quad (2.51)$$

Os resultados só são disponíveis até " $k = N/2$ " em virtude da frequência de Nyquist que ocorre neste ponto. O método de transformada rápida de Fourier (FFT, do inglês *Fast Fourier Transform*) é capaz de computar a quantidade de X_k que irá aparecer para amplitudes grandes e pequenas, em concordância com a característica do processo analisado.

3 METODOLOGIA

3.1 ENSAIO DE VELOCIDADE MÍNIMA DE FLUIDIZAÇÃO

Para a realização dos ensaios de velocidade mínima de fluidização são utilizados equipamentos de uma bancada de leito fluidizado circulante adaptada para o ensaio. Três tipos de partícula são utilizados, sendo duas esferas de vidro de diferentes granulometrias e uma areia de fundição classificada.

Os ensaios foram realizados definindo-se certas alturas iniciais de leito e variando a velocidade, gradativamente, partindo de velocidades abaixo da mínima fluidização até velocidades que garantissem a permanência das partículas no leito e o bom funcionamento do sistema. Alguns limitantes importantes para a velocidade são: pressão diferencial no transdutor de pressão não superiores a 100 *mbar* e as partículas não podem atingir o tubo de menor diâmetro durante operação, pois o gás possui maior velocidade nesta zona.

Os pontos de tomada de pressão, ponto 2 e 3 da Figura 3.1, são: um à jusante do distribuidor de gás, ponto 2, e outro a montante do topo do leito, ponto 3. Para se obter a perda de carga no leito, é lida a diferença de pressão entre os pontos 2 e 3. No entanto, é necessário descontar a perda de carga devido a influência do distribuidor. A perda de carga do distribuidor é dependente da velocidade e foi calibrada conforme Apêndice A. Os valores de perda de carga do leito obtidos no experimento são subtraídos pela perda de carga em cada velocidade para formar os gráficos de perda de carga.

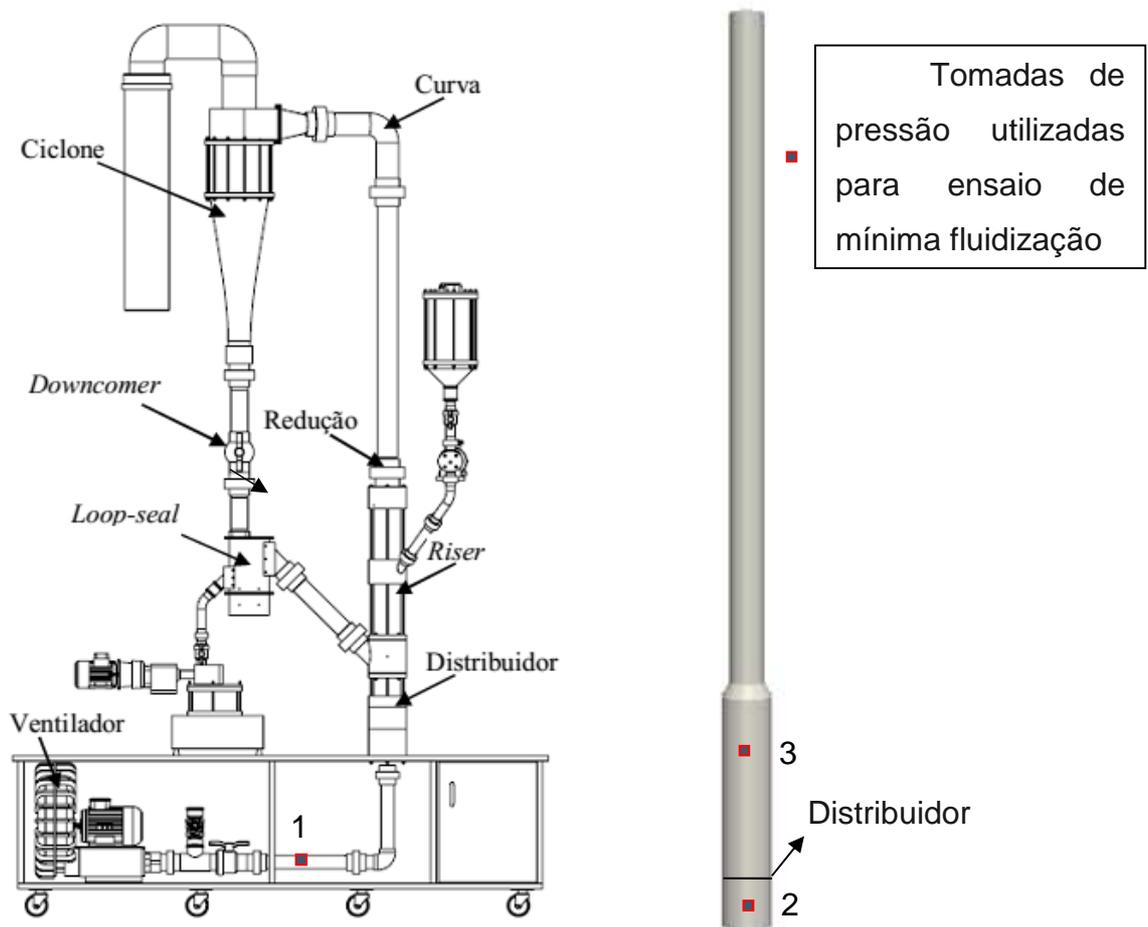
A velocidade superficial do gás é aumentada utilizando a frequência do ventilador como balizador. Partindo da frequência 0 (velocidade zero) a frequência é aumentada gradativamente a cada 30 *s*. Após atingir a fluidização, a frequência é ainda aumentada, para se obter os valores de queda de pressão para uma maior faixa de velocidade superficial.

A redução da velocidade é feita da mesma forma, reduzindo a frequência gradativamente a cada 30 *s*. Após entrar em regime de leito fixo, é feita a leitura da altura de leito (possível apenas para altura de leito superior a 0,286 m).

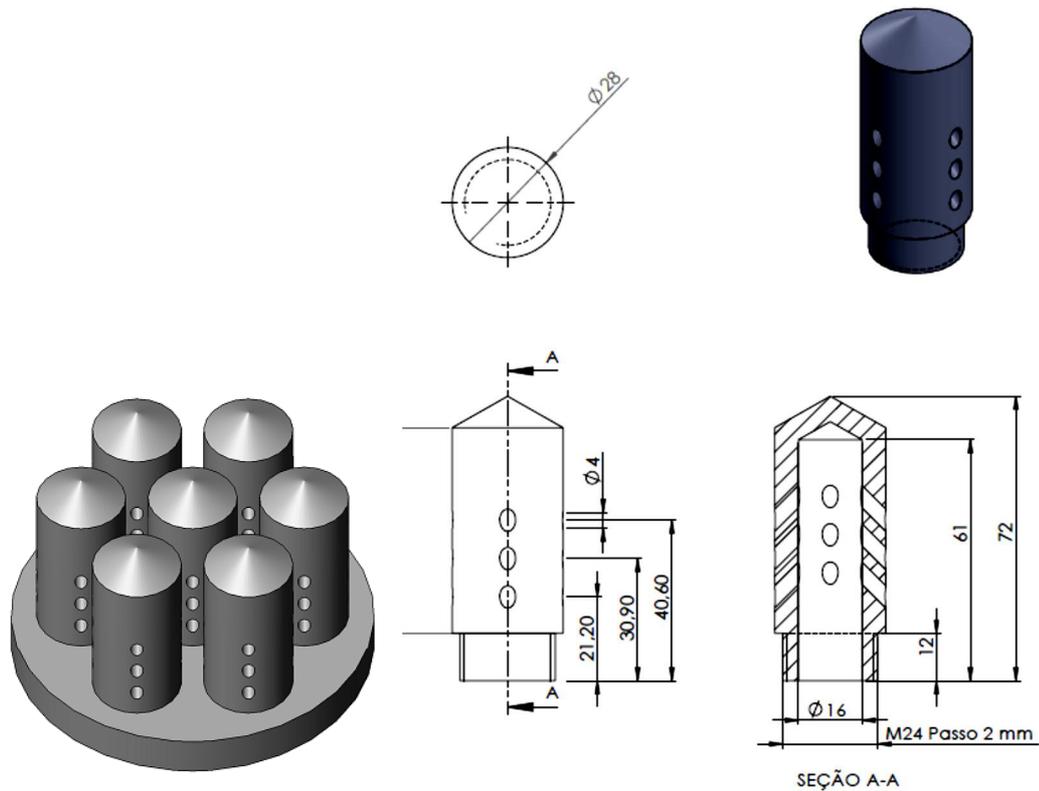
3.1.1 Equipamento experimental

O equipamento experimental é uma bancada de leito fluidizado circulante, localizada na SATC, Criciúma – SC. O circuito é composto por um soprador, seguido por *plenum*, distribuidor tipo *tuyère*, *riser* (tubo de ascensão), saída tipo curva 90°, ciclone, *downcomer* (tubo descendente) e três tipos de válvulas comutáveis, que são: Válvula “L”, Válvula *loop seal*, e *loop seal* de 3 estágios. A Figura 3.1 e a Figura 3.2 mostram o equipamento e o distribuidor tipo *tuyère*, respectivamente.

Figura 3.1 – Bancada utilizada para ensaio de mínima fluidização



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 3.2 – Distribuidor tipo *Tuyère*

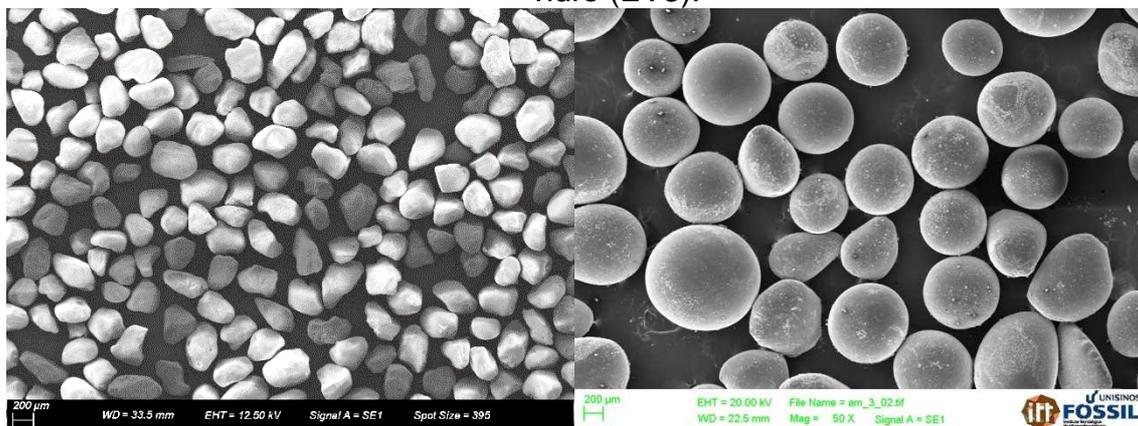
Fonte: Elaborada pelo autor

A Figura 3.1 ainda mostra os pontos de tomada de pressão; a vazão de ar é medida por meio da queda de pressão do ar que escoar por uma placa de orifício, posicionada no “ponto 1”; e a queda de pressão no leito é medida tomando os pontos “2” e “3” e descontada a perda de carga devido ao distribuidor (A equação da perda de carga no distribuidor em função da vazão pode ser encontrada no Apêndice A). Para medição da pressão, são utilizados dois transdutores de pressão diferencial idênticos para faixa de pressão entre 0 e 10 kPa , um para a perda de carga no leito e outro para perda de carga na placa de orifício, a fim de se obter a vazão de gás. A diferença de pressão é lida pelo supervisor e gravada a cada segundo. Por limitação de memória, o supervisor exporta uma quantidade de informação, por isto a frequência salva pode variar de acordo com o tempo de experimento, sendo a maior frequência de 1 Hz .

3.1.2 Partículas utilizadas

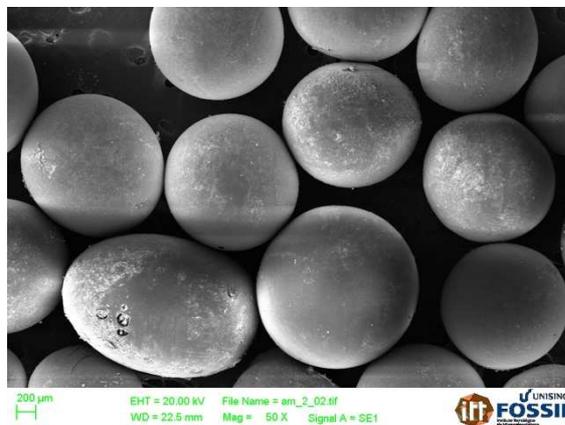
O material utilizado são esferas de vidros de 2 tamanhos diferentes e areia de fundição. A Figura 3.3 mostra uma fotografia, com zoom de cinquenta vezes, obtida por Microscopia Eletrônica de Varredura das três partículas utilizadas.

Figura 3.3 – Microscopia Eletrônica de Varredura aproximado 50 vezes das amostras de: (a) Areia de Fundição (AF1), (b) Esfera de vidro (EV2), (c) Esfera de vidro (EV3).



(a)

(b)



(c)

Fonte: Elaborado pelo autor.

As características das amostras de partículas, como diâmetro médio, massa específica real, massa específica de leito e esfericidade, são mostradas na Tabela 3..

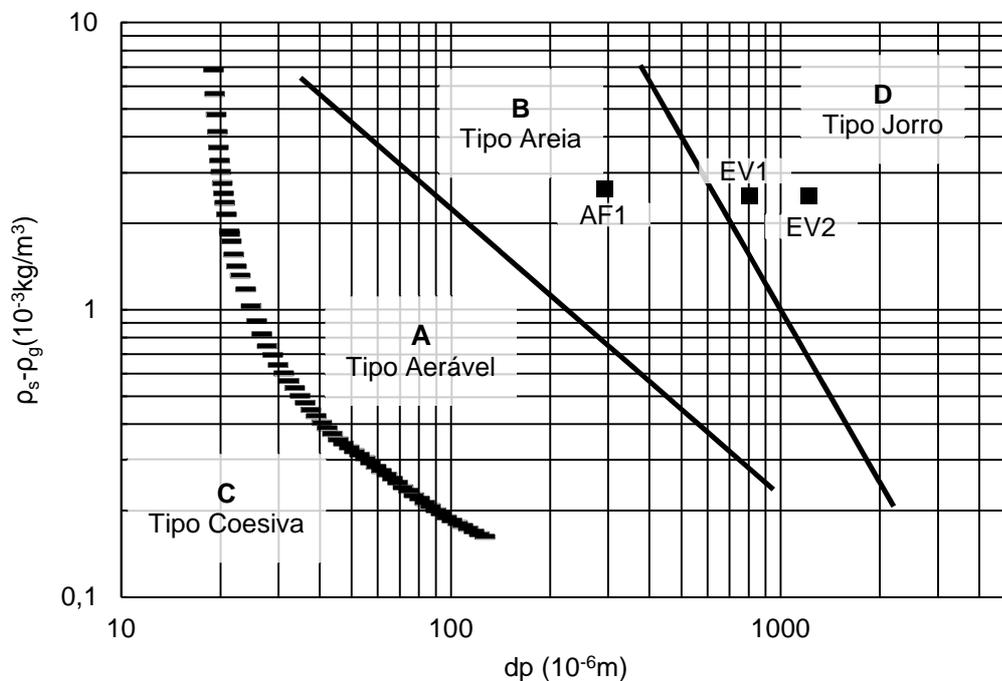
Tabela 3.1 – Propriedade das partículas utilizadas

Material	Diâmetro médio de peneira (kg/m^3)	Massa Específica do Leito (kg/m^3)	Massa Específica da partícula (kg/m^3)	Esfericidade (-)
AF1	0,293	1560	2640	-
EV2	0,800	1580	2490	0,872
EV3	1,216	1540	2490	0,865

Fonte: Bianchi (2014) e Silva (2015)

Utilizando os dados da Tabela 3., as partículas foram classificadas segundo as definições de Geldart (1973) e são apresentadas na Figura 3.. As esferas de vidro EV1 e EV2 são classificadas como tipo D, de jorro, enquanto que a areia AF1 é classificada como B.

Figura 3.4 – Grupo de Geldart



Fonte: Elaborado pelo autor

3.1.3 Ensaios experimentais

Para os ensaios de mínima fluidização o leito é preenchido até a altura desejada. Para cada novo ensaio o leito é totalmente esvaziado para novo preenchimento e a massa de partículas adicionada é obtida por diferença. Dados de temperatura e umidade do ar são obtidos (a fim de utilizar as propriedades do ar) e o ensaio é iniciado, partindo de velocidade do ar igual a zero até a ocorrência da fluidização borbulhante, e retornando à velocidade zero. Portanto, tem-se dados da corrida completa para os experimentos conduzidos sob condições indicadas na Tabela 3.2.

Tabela 3.2 – Variáveis dos experimentos de mínima fluidização

Variável	Valores
Velocidade , u_g	0 – 1,55 m/s
Partículas	AF1, EV2, EV3
Altura do leito, H_{leito}	100, 200 e 300 mm

A fração de vazios é obtida através da Equação (3.1). O Volume do leito, V_{leito} é calculado utilizando a área transversal do leito, que multiplica a altura do leito e desconta-se o volume ocupado pelas tuyères, como descrito na Equação (3.2).

$$\varepsilon_s = \frac{M_p}{V_{leito} \rho_s} \quad (3.1)$$

$$V_{leito} = \pi \frac{d_{leito}^2}{4} H_{leito} - 7V_{tuyère} \quad (3.2)$$

A altura de leito estático é medida em quatro posições, das quais é tirada a média para utilizar de medida. A altura de leito em fluidização é feita por visualização, utilizando uma medida fixa ao *riser*, e para tanto, o reator permite visibilidade apenas para leitos acima de 286 mm de altura. Portanto, a fração de vazio em mínima fluidização é calculada apenas quando utilizada uma altura de leito de 300 mm.

3.2 OBTENÇÃO DA VELOCIDADE MÍNIMA DE FLUIDIZAÇÃO

A partir de dados experimentais de ensaio de mínima fluidização é traçado o gráfico de velocidade superficial por perda de carga normalizada. O dado de saída obtidos é a diferença de pressão entre os pontos “2” e “3” da Figura 3.1.

A perda de carga normalizada para o leito é obtida dividindo a perda de pressão do gás ao atravessar o leito pelo peso do leito por área, ou seja

$$\frac{\Delta P}{\left(\frac{W}{A_t}\right)} = \frac{\Delta P A_t}{W} \quad (3.3)$$

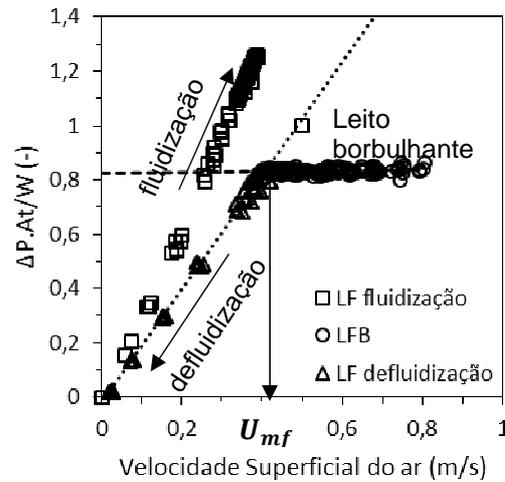
onde ΔP é a queda de pressão do gás que atravessa o leito, A_t é a área transversal do leito e W é a força peso do leito.

Para obtenção do gráfico, é necessário utilizar as curvas de calibração fornecidas pelo fabricante da bancada para obtenção da vazão por perda de carga em cada placa de orifício. Dos dados de vazão e diâmetro do leito é obtida a velocidade superficial conforme Apêndice A. As medições de diferença de pressão cujos valores ficam fora do intervalo da curva são descartadas. Também são descartados valores nos quais o erro percentual ultrapassa 20%, conforme Apêndice A

A calibração da perda de carga do distribuidor de ar para diferentes vazões é necessária para descontar do valor obtido de perda de carga no leito, pois os pontos para medida de pressão diferencial são a montante do distribuidor e a jusante do nível do leito. A equação da perda de carga no distribuidor em função da vazão se encontra no Apêndice A.

A Figura 3.5 mostra o comportamento esperado do ensaio para obtenção da velocidade mínima de fluidização. O método utilizado para obtenção da velocidade mínima de fluidização é traçar as retas de leito fixo a partir da defluidização (caminho da direita para esquerda na Figura 3.5) e de leito fluidizado borbulhante e encontrar a interseção entre estas. Os gráficos são plotados em triplicata, com resultados sobrepostos para cada altura de leito.

Figura 3.5 – Exemplo de resultado de ensaio de fluidização



Fonte: Elaborado pelo autor

3.3 MODELO MATEMÁTICO TFM-KTGF

Este item descreve o modelo matemático utilizado para as simulações computacionais do presente trabalho. O modelo utilizado é um modelo de 2 fluidos (TFM) no qual as fases gás e sólido são consideradas meios contínuos interpenetrantes. A tensão na fase sólida é modelada segundo a Teoria Cinética de escoamentos granulares (KTGF, do inglês *Kinetic Theory of Granular Flows*) (LUN et al., 1984; AGRAWAL et al., 2001).

A presença de cada fase na célula é descrita por suas frações volumétricas. Este trabalho irá considerar apenas uma fase sólida e a fase gasosa para as quais balanços de massa e de quantidade de movimento são aplicados separadamente.

3.3.1 Equação do Balanço de Massa

O princípio da conservação de massa aplicado a um volume de controle resulta na equação da continuidade, que pode ser escrita para cada fase, como

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g u_g) = 0 \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s u_s) = 0 \quad (3.5)$$

onde t é o tempo, ε_g é a fração volumétrica de gás, ε_s é a fração volumétrica de sólidos, ρ_g é a massa específica do gás, ρ_s é a massa específica do sólido, $\nabla \cdot$ é o operador divergente, u_g é o vetor velocidade do gás e u_s o vetor velocidade dos sólidos.

3.3.2 Equação do Balanço de Quantidade de Movimento

O balanço de quantidade de movimento para as fases sólido e gás é dado por

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g u_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g u_g u_g) = \nabla \cdot \tau_g - \varepsilon_g \nabla P + \varepsilon_g \rho_g g - I \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s u_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s u_s u_s) = \nabla \cdot \tau_s - \varepsilon_s \nabla P + \varepsilon_s \rho_s g + I \quad (3.7)$$

No lado esquerdo da igualdade, as derivadas representam a taxa de variação da quantidade de movimento, enquanto que no lado direito da igualdade, as forças que causam estas variações são as forças superficiais: pressão, P , e tensões, τ , as forças de corpo, representada pela gravidade, e a taxa de intercâmbio de quantidade de movimento entre as fases, I .

$$I = \beta(u_g - u_s) \quad (3.8)$$

onde o coeficiente de arrasto β é usualmente calculado por uma correlação, que é o principal foco deste trabalho. Modelos empíricos serão empregados neste trabalho, como os de SO e de DF.

O tensor tensão da fase gasosa obedece ao comportamento de fluido newtoniano segundo a Equação (3.9).

$$\tau_g = 2\mu S_g \quad (3.9)$$

onde S_g é dado pela Equação (3.10).

$$S_g = \frac{1}{2} [\nabla u_g + (\nabla u_g)^r] - \frac{1}{3} \nabla u_g \cdot \delta \quad (3.10)$$

na qual δ é o tensor unitário. Assume-se comportamento de gás ideal para a relação entre pressão e massa específica do gás.

3.3.3 Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares

A fim de se completar a equação da quantidade de movimento para o sólido, é necessário modelar o tensor tensão da fase sólida. A fase sólida é modelada segunda a KTGF, que faz uma analogia do comportamento de fase sólida granular com a teoria cinética dos gases densos. (HRENYA, 2011).

Isto fornece a base para descrever o tensor tensão da fase sólida em modelos Euler-granulares que se baseiam no conceito de temperatura granular, Θ , como, por exemplo, em GOLDRISCH (2008), definido como

$$\Theta = \frac{1}{nsd} \langle C^2 \rangle \quad (3.11)$$

onde nsd é o número de dimensões espaciais, C é a velocidade do movimento caótico das partículas (grãos) e " $\langle \rangle$ " significa que é considerada uma média conjunta da flutuação da velocidade ao quadrado. A temperatura granular pode ser vista como uma medida da flutuação da velocidade, ou a energia cinética específica do componente flutuante aleatória da velocidade da partícula. Na Equação (3.12), tem-se C como componente flutuante da velocidade instantânea, c , e u_s é a velocidade média macroscópica dos sólidos.

$$c = u_s + C \quad (3.12)$$

A temperatura granular é calculada no domínio do problema utilizando a seguinte equação de transporte (LUN et al., 1984 apud HRENYA, 2011):

$$\frac{nsd}{2} \rho_s \left[\frac{\partial \varepsilon_s \Theta}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_s u_s \Theta) \right] = \tau_s : \nabla u_s - \nabla \cdot q_\Theta - \gamma_\Theta + \phi_{gs} \quad (3.13)$$

na qual o primeiro termo do lado direito da igualdade é o termo geração de energia, associado à viscosidade do sólido. A taxa de dissipação de energia granular devido a colisões inelásticas, γ_Θ , é dada pela Equação (3.14) e o fluxo difusivo de energia granular, q_Θ , é definido pela Equação (3.15):

$$\gamma_\Theta = k_4 \varepsilon_s^2 \Theta^{1,5} \quad (3.14)$$

$$q_\Theta = -k_\Theta \nabla \Theta \quad (3.15)$$

A contribuição cinética ao fluxo difusivo de energia granular pode ser negligenciada. Desta forma, o coeficiente de difusão de energia granular, k_Θ , é definido pela Equação (3.16):

$$k_\Theta = \frac{15 d_p \rho_s \varepsilon_s \sqrt{\pi \Theta}}{4(41 - 33\eta)} \left[1 + \frac{12}{5} \eta^2 (4\eta - 3) \varepsilon_s g_0 + \frac{16}{15\pi} (41 - 33\eta) \eta \varepsilon_s g_0 \right] \quad (3.16)$$

onde

$$\eta = \frac{1 - e}{2} \quad (3.17)$$

onde e é o coeficiente de restituição para colisões entre partículas e g_0 é a função da distribuição radial de Carnahan-Starling (1969 apud Hrenya, 2011) dada pela Equação (3.18).

$$g_0 = \frac{1 - 0,5\varepsilon_s}{(1 - \varepsilon_s)^3} \quad (3.18)$$

O coeficiente k_4 , da Equação (3.14), é dado pela Equação (3.19):

$$k_4 = \frac{12(1 - e^2)\rho_s g_0}{d_p \sqrt{\pi}} \quad (3.19)$$

A Equação (3.20) fornece ϕ_{gs} , que representa a transferência de energia granular da fase gasosa para a fase sólida:

$$\phi_{gs} = -3F_{gs}\Theta \quad (3.20)$$

onde F_{gs} é o coeficiente da força de interação entre as fases gasosa e sólida. O tensor tensão da fase sólida, τ_s , é dado por

$$\tau_s = (-P + \eta\mu_b \nabla u_s)\delta + 2\mu_s D_s \quad (3.21)$$

onde D_s é definido como:

$$D_s = \frac{1}{2}[\nabla u_s + (\nabla u_s)^r] - \frac{1}{3}\nabla \cdot \delta \quad (3.22)$$

A pressão da fase sólida, P_s , é dada pela Equação (3.23).

$$P_s = \varepsilon_s \rho_s \Theta (1 + 4\eta \varepsilon_s g_0) \quad (3.23)$$

A viscosidade dos sólidos, μ_s , é definida segundo Agrawal et al. (2008), conforme as Equações (3.24), (3.25), (3.26) e (3.27).

$$\mu_s = \left(\frac{2+a}{3}\right) \left\{ \frac{\mu_s^*}{g_0 \eta (2-\eta)} \left(1 + \frac{8}{5}\eta g_0 \varepsilon_s\right) \left[1 + \frac{8}{5}\eta (3\eta - 2)g_0 \varepsilon_s\right] + \frac{3}{5}\eta \mu_b \right\} \quad (3.24)$$

$$\mu_s^* = \frac{\varepsilon_s \rho_s \Theta g_0 \mu}{\varepsilon_s \rho_s \Theta g_0 + \frac{2\beta \mu}{\varepsilon_s \rho_s}} \quad (3.25)$$

$$\mu = \frac{5}{96} \rho_s d_p \sqrt{\pi \Theta} \quad (3.26)$$

$$\mu_b = \frac{256}{5\pi} \mu \varepsilon_s^2 g_0 \quad (3.27)$$

Este modelo é usado no regime viscoso. Se ocorrer regime plástico, o modelo de Schaeffer é aplicado. Neste caso, a viscosidade da fase sólida é determinada pela Equação (3.28), modificada de acordo com Syamlal et al. (2003, apud SYAMLAL; PANNALA, 2011) , e a pressão dos sólidos pela Equação (3.29). (SYAMLAL; PANNALA; 2011).

$$\mu_f = \begin{cases} \min\left(\frac{P_c \text{sen}\phi}{2\sqrt{I_{2D}}}, \mu_s^{\text{máx}}\right), & \varepsilon_g < \varepsilon^* \\ 0, & \varepsilon_g \geq \varepsilon^* \end{cases} \quad (3.28)$$

$$P_c = \begin{cases} 10^{24}(\varepsilon^* - \varepsilon_g)^{10}, & \varepsilon_g < \varepsilon^* \\ 0, & \varepsilon_g \geq \varepsilon^* \end{cases} \quad (3.29)$$

onde ε^* é a fração de vazios para leito empacotado, ϕ é o ângulo de fricção interna, P_c é a pressão dos sólidos, ε_s é a fração de sólidos e $\mu_s^{\text{máx}}$ é um valor de viscosidade dos sólidos máxima, que deve ser fornecido.

3.4 MODELOS DE ARRASTO

Os modelos de coeficiente de arrasto utilizados nas simulações numéricas, apresentados anteriormente no item 2.6.2, estão sumarizados na Tabela 3.3. O número de Reynolds, Re , inerente a todos os modelos, é definido como

$$Re = \frac{d_p \rho_g |u_s - u_g|}{\mu_g} \quad (3.30)$$

Tabela 3.3 – Modelos de arrasto gás-sólido

Syamlal-O'Brien

$$\beta_{SO} = \frac{3\rho_g \varepsilon_g (1 - \varepsilon_g)}{4d_s v_r^2} C_{D,SO} |u_s - u_g|$$

$$C_{D,SO} = \left[0,63 + \frac{4,8}{\sqrt{\frac{Re}{v_r}}} \right]^2$$

$$v_r = 0,5 \left(A - 0,006Re + \sqrt{(0,006Re)^2 + 0,12Re(2B - A) + A^2} \right)$$

$$A = \varepsilon_g^{4,14}$$

$$B = \begin{cases} C_2 \varepsilon_g^{1,28} & ; \varepsilon_g < 0,85 \\ \varepsilon_g^{C_1} & ; \varepsilon_g \geq 0,85 \end{cases}$$

$$C_1 = 2,65 ; C_2 = 0,8$$

C_1 e C_2 são parâmetros ajustáveis.

Di Felice

$$\beta_{DF} = \frac{3\rho_g (1 - \varepsilon_g)}{4d_s} C_D |u_s - u_g| f(\varepsilon_s)$$

$$C_D = \left[0,63 + \frac{4,8}{\sqrt{Re\varepsilon_g}} \right]^2$$

$$f(\varepsilon_s) = (1 - \varepsilon_s)^{-x}$$

$$x = P - Q \cdot \exp \left[\frac{-(1,5 - \log(Re\varepsilon_g))^2}{2} \right]$$

$$P = 3,7 ; Q = 0,65$$

P e Q são parâmetros ajustáveis.

Wen-Yu

$$\beta_{WY} = \frac{3\rho_g \varepsilon_g (1 - \varepsilon_g)}{4d_s} C_D |u_s - u_g| \varepsilon_g^{-2,65}$$

$$C_{D,WY} = \begin{cases} 0,44 & , Re > 1000 \\ \frac{24[1 + 0,15(Re)^{0,687}]}{Re} & , Re \leq 1000 \end{cases}$$

Ergun

$$\beta_{Ergun} = 150 \frac{\mu_g (1 - \varepsilon_g)^2}{\varepsilon_g d_s^2} + 1,75 \frac{(1 - \varepsilon_g) \rho_g}{d_s} |u_s - u_g|$$

Gidaspow

$$\beta_{Gidaspow} = \begin{cases} \beta_{WY} & , \varepsilon_g > 0,8 \\ \beta_{Ergun} & , \varepsilon_g \leq 0,8 \end{cases}$$

3.5 OBTENÇÃO DO MODELO DE ARRASTO UTILIZANDO O MODELO EMMS/BUBBLING

Para se obter o índice de heterogeneidade, H_d , e o modelo de arrasto utilizando EMMS/bubbling, é conduzida a seguinte sequência de cálculo:

- a) Começar com um valor alto de N_s , " $\alpha_e = 0$ ", " $U_s = 0$ ";
- b) Variar ε_g entre [ε_{mf} ; 1];
- c) Variar ε_e entre [ε_{mf} ; ε_g];
- d) Calcular δ_b pela Equação (2.30);
- e) Calcular U_{se} pela Equação (2.31);
- f) Calcular α_b pela Equações (2.32), (2.33), (2.34) e (2.35);
- g) Calcular U_{pe} e U_{ge} pelas Equações (2.36) e (2.38);
- h) Calcular U_b e d_b , utilizando as Equações (2.37), (2.39), (2.40), (2.41) e (2.42);
- i) Calcular N_s (Equação (2.45)) e armazene os valores dos parâmetros se N_s mínimo;
- j) Calcular β_1 e H_d pelas Equações (2.46) e (2.47);
- k) Traçar gráfico H_d por ε_g ;
- l) Encontrar curva de ajuste de H_d em função de ε_g , para H_d menor que 1;
- m) Inserir $\beta_{EMMS/bubbling}$ no código segundo a Equação (2.48), utilizando a curva de ajuste de H_d obtida na etapa "l" da sequência de cálculo.

Para as etapas "a" a "j", um algoritmo foi escrito em linguagem de programação C++ para o cálculo do coeficiente de arrasto de nuvem, $\beta_{EMMS/Bubbling}$, e pode ser encontrado no Apêndice D.

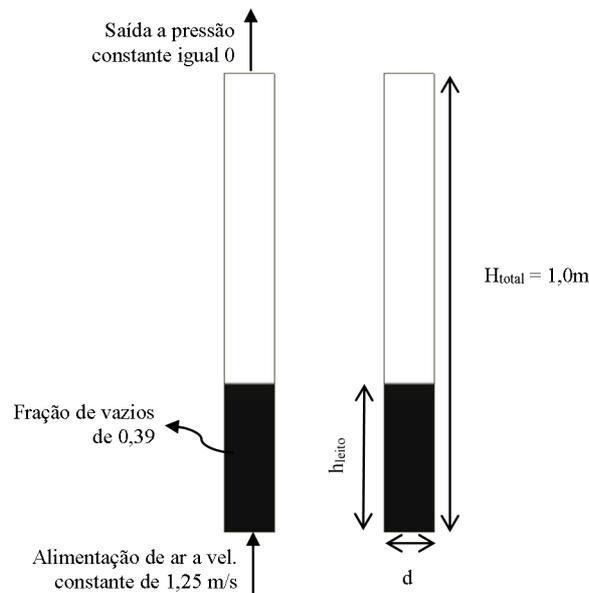
3.6 GEOMETRIA, CONDIÇÕES DE CONTORNO E PARÂMETROS DA SIMULAÇÃO DE LEITO FLUIDIZADO UTILIZANDO MODELO DE ARRASTO EMMS/BUBBLING

Para as simulações numéricas foi utilizado o código MFIX (versão 2015-2), o qual resolve as equações de balanço de massa e quantidade de movimento segundo

o modelo TFM-KTGF. Foram comparados resultados obtidos com o modelo EMMS/bubbling e com o modelo de Gidaspow (1994), o qual é um modelo clássico da literatura.

A geometria segue o que foi utilizado no trabalho de Shi, Wang e Li (2011) cujo domínio da simulação bidimensional é de $0,28\text{ m}$ de base por 1 m de altura, com altura de leito de $0,4\text{ m}$ e sua porosidade, ε_g , de $0,39$. A condição de topo é de saída à pressão constante, a da base é de entrada à velocidade constante com as propriedades do ar, e as condições de parede (laterais) são definidas como sem escorregamento. A geometria do problema, seus parâmetros e as condições de contorno são resumidas na Figura 3.6 e Tabela 3.4.

Figura 3.6 – Geometria do sistema e condições de operação. Os valores de d e h_{leito} encontram-se na Tabela 3.4.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela 3.4 – Propriedades das partículas e dos leitos utilizados nas simulações

Parâmetro	Unidade	Autor	Shi et al. (2011)
Diâmetro da partícula	m	$1,216 \cdot 10^{-3}$	$0,65 \cdot 10^{-3}$
Massa específica	kg/m^3	2490	2600

Velocidade superficial do gás	m/s	1,25	0,38
Altura do leito, h_{leito}	m	0,3	0,4
Largura do domínio, d	m	0,11	0,28
Altura do domínio, H_{total}	m	1,0	1,0
Porosidade do leito fixo	-	0,39	0,39

3.7 AJUSTE DA CORRELAÇÃO DE ARRASTO DE SYAMLAL-O`BRIEN

Nas correlações de arrasto, a força depende da velocidade relativa local entre a fase sólida e a fase gás. No entanto, ao derivar correlações de arrasto empíricas, outros fatores, como distribuição granulométrica e formato da partícula, não têm sido considerados. Além disto, a dependência da fração de vazios é muito difícil de se determinar para quaisquer condições diferentes de leito empacotado ou diluição infinita (partícula única). Por outro lado, informações de velocidade mínima de fluidização são comuns para materiais específicos. O parâmetro C_2 da equação de Syamlal-O`Brien (1987), Equação (2.19), está relacionado com a velocidade mínima de fluidização através da correlação de velocidade intersticial e o número de Reynolds para velocidade terminal e é alterado até o critério, dado pela Equação (3.31), ser alcançado.

$$U_{mf,exp} - Re_{ts} \frac{\varepsilon_g \mu_g}{\rho_g d_s} = 0 \quad (3.31)$$

O cálculo é feito por meio de uma planilha de cálculo na qual um código interno (conhecido como *macro*) força a Equação (3.31) a ser satisfeita, alterando os valores de C_2 . O valor de C_2 é obtido para cada partícula em estudo. Para evitar descontinuidade da função B (Equação (2.19)), que tornaria o cálculo numérico de difícil solução, a constante C_1 é obtida como função de C_2 . A continuidade precisa ser garantida para “ $\varepsilon_g = 0,85$ ” e é dada segundo a Equação (3.32).

$$C_2 0,85^{1,28} = 0,85^{C_1} \quad \therefore C_1 = 1,28 + \frac{\log C_2}{\log 0,85} \quad (3.32)$$

Obtidos os coeficientes para a correlação de SO, os valores são alterados no código.

3.8 AJUSTE DA CORRELAÇÃO DE ARRASTO DE DI FELICE

Assim como o método de ajuste de SO, o método para o ajuste da correlação de arrasto gás-sólido de DF também se utiliza das condições de mínima fluidização: velocidade mínima de fluidização e fração de vazios na condição de mínima fluidização.

O método proposto é baseado no método de Esmaili e Mahinpey (2011) no qual se altera os valores de P e Q da Equação (2.23) através da Equação (3.33), que é encontrada por meio do balanço de forças na mínima fluidização, e das Equações (3.34) e (3.35). No entanto, diferentemente de Esmaili e Mahinpey (2001) e Syamlal e O'Brien (1987), são utilizados três pontos para obtenção de uma linha reta através da linearização da Equação (2.23).

$$\beta_{mf,exp} = \frac{\varepsilon_{g,mf} (1 - \varepsilon_{g,mf})(\rho_s - \rho_g)g}{U_{mf,exp}} \quad (3.33)$$

$$f(\varepsilon_s) = \frac{4d_s\beta_{mf,exp}}{3C_{D,DF} \rho_g(1 - \varepsilon_{g,mf})U_{mf,exp}} \quad (3.34)$$

$$\chi_{exp} = \frac{-\log[f(\varepsilon_{s,mf})]}{\log(1 - \varepsilon_{s,mf})} \quad (3.35)$$

A regressão linear da Equação (2.23) é feita considerando as Equações (3.36) e (3.37). Os valores da abcissa são obtidos pela Equação (3.37), da ordenada pela Equação (3.35) e a regressão fornecerá os valores de P e Q segundo.

$$\chi_{exp} = P - QX_1 \quad (3.36)$$

$$X_1 = \exp \left[-\frac{(1.5 - \log(Re_{s,mf}))^2}{2} \right] \quad (3.37)$$

3.9 SIMULAÇÃO NUMÉRICA

Para as simulações numéricas de leito fluidizado foram utilizados dois códigos computacionais (MFX e Ansys Fluent), os quais se baseiam no método de volumes finitos.

Introduzem-se os valores obtidos para o ajuste da correlação de arrasto e são definidos os parâmetros de simulação tais como geometria, velocidade do gás, altura do leito, porosidade do leito, entre outras, tais como mostram a Figura 3.7 e a Tabela 3.5.

Tabela 3.5 – Geometria e dados de simulação tridimensional

Parâmetro	Unidade	Valor
Altura total	<i>m</i>	2
Diâmetro tubo inferior	<i>m</i>	0,11
Altura tubo inferior	<i>m</i>	0,95
Diâmetro tubo superior	<i>m</i>	0,07
Altura tubo superior	<i>m</i>	1
Altura do leito	<i>m</i>	0,3
U_g/U_{mf}	-	0,9 ; 1 ; 1,5
Diâmetro partícula	$10^{-6} m$	1216 ; 800 ; 293

Fonte: Elaborado pelo autor.

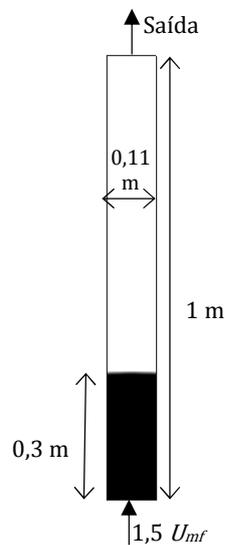
Os modelos de arrasto de SO, DF, Wen-YU, Ergun e EMMS, juntamente com os modelos ajustados de SO e DF, são utilizados para simulação em CFD TFM em domínio computacional em 2D. O software MFX traz, implementado ao código, os modelos de arrasto de SO, SO ajustável e Wen-Yu. O modelo de Ergun pode ser utilizado a partir do modelo de Gidaspow, já implementado. A inserção dos modelos de arrasto é feita através de alteração na sub-rotina “DRAG_USR” presente no arquivo “usr_drag.f” e podem ser encontradas no Apêndice C.

As simulações foram realizadas considerando regime transiente, com funções de interpolação de segundo grau, tipo *Superbee*. Uma análise de malha foi feita para partícula de menor tamanho, AF1, e com velocidade de $10 U_{mf}$, a fim de se garantir um refinamento adequado e encontrou-se que uma malha de 40 por 320 é adequada para a simulação.

A geometria é de $0,11\text{ m}$ de base por 1 m de altura e leito com altura de $0,3\text{ m}$ e fração de vazios na condição de mínima fluidização, $\varepsilon_{g,mf}$. A massa específica e a viscosidade do gás são mantidas constantes com valores de $1,18\text{ kg/m}^3$ e $1,85 \cdot 10^{-3}\text{ Pa} \cdot \text{s}$, respectivamente. A velocidade superficial do gás é de $1,5 U_{mf}$ (que depende da partícula utilizada) e a pressão de saída é mantida constante no topo do domínio, enquanto que as paredes são definidas como sem escorregamento. Durante as simulações, o valor de perda de carga é obtido pela diferença de pressão entre “ $h = 0\text{ m}$ ” e “ $h = 0,9\text{ m}$ ”

A Figura 3.7 e a Tabela 3.6 resumem os parâmetros de simulação.

Figura 3.7 – Geometria das simulações



Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela 3.6 – Condições das simulações

	Unidade	Valores
Massa específica do gás, ρ_g	kg/m^3	1,18

Viscosidade do gás, μ_g	$Pa \cdot s$	$1,85 \cdot 10^{-5}$
Largura	m	0,114
Altura	m	1,0
Número de células na largura	-	40
Número de células na altura	-	320
Condição de contorno de parede	-	Sem escorregamento
Velocidade superficial do gás	m/s	$1.5 U_{mf}^*$
Altura do leito	m	0.3
Fração de vazios no leito	-	$\varepsilon_{g,mf}$
Método de discretização	-	<i>Superbee</i>
Condição de saída	-	Pressão constante

U_{mf}^* é definida na Tabela 4.3

Fonte: Elaborado pelo autor.

4 RESULTADOS

Este capítulo divide-se na apresentação de resultados experimentais, resultados do ajuste dos modelos de arrasto e resultados numéricos para escoamento em leito fluidizado. Por sua vez, os resultados numéricos são apresentados em duas etapas; a primeira com as comparações de modelos originais e ajustados, a segunda com os resultados utilizando o modelo EMMS/Bubbling implementado. As velocidades mínimas de fluidização e fração de vazios no leito na condição de mínima fluidização são obtidas pelos dados experimentais e utilizadas para ajuste dos modelos de SO e DF. Estes modelos são implementados nos códigos computacionais juntamente com as propriedades do ar e das partículas para obtenção dos resultados numéricos.

O modelo EMMS/bubbling é discutido separadamente, pois ele altera o modelo de Gidaspow em função da velocidade superficial do gás. Cada velocidade leva ao uso de uma equação diferente, como pode ser visto na Equação (2.48).

4.1 RESULTADOS EXPERIMENTAIS

4.1.1 Obtenção da Fração de Vazios

Durante os experimentos, os dados de altura de leito e massa de partículas inseridas no leito foram anotados. Estes dados são utilizados para obtenção de fração de vazios no leito, adimensionalização da pressão, cálculo dos coeficientes ajustados nos modelos de SO e DF, entre outros.

A Tabela 4.1 mostra a massa de partículas no leito, a altura de do leito na mínima fluidização e a fração de vazios calculada na mínima fluidização, $\varepsilon_{g,mf}$. Todos os dados da Tabela 4.1 se referem a ensaios com altura inicial de leito de 0,3 metros. É possível notar que, tanto as esferas de vidro EV3 quanto a areia AF1 têm a porosidade do leito na mínima fluidização próximas, enquanto que a esfera de vidro EV2 tem a menor porosidade de leito entre elas.

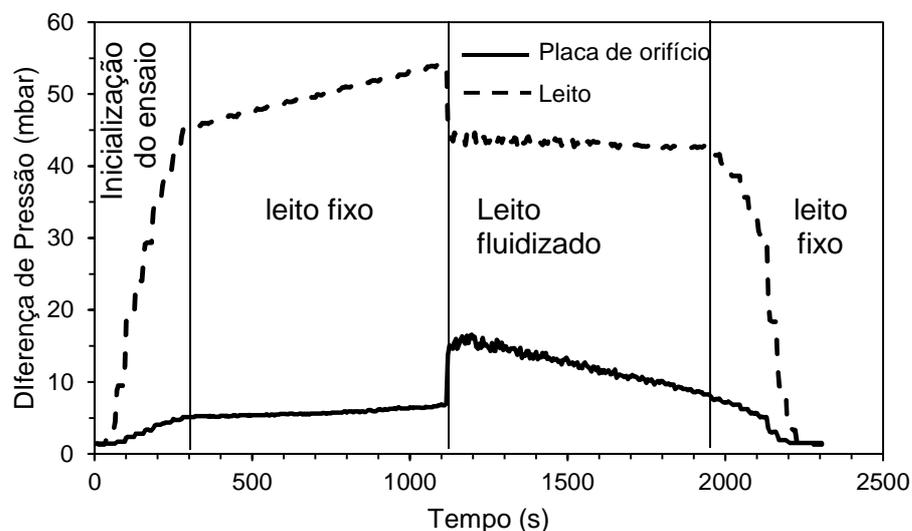
Tabela 4.1 – Altura de leito na mínima fluidização, massa do leito e porosidade do leito na mínima fluidização, para altura de leito inicial de 0,3 m.

	Unidade	Repetição 1	Repetição 2	Repetição 3	Média
AF1					
Altura do leito	<i>m</i>	0,321	0,306	0,320	0,315 ± 0,008
Massa do leito	<i>kg</i>	4,876	4,595	4,911	4,794 ± 0,17
ε_{mf}	-	0,430	0,436	0,424	0,430 ± 0,008
EV2					
Altura do leito	<i>m</i>	0,309	0,309	0,313	0,310 ± 0,008
Massa do leito	<i>kg</i>	4,546	4,678	4,672	4,577 ± 0,075
ε_{mf}	-	0,414	0,398	0,406	0,406 ± 0,008
EV3					
Altura do leito	<i>m</i>	0,327	0,318	0,313	0,319 ± 0,007
Massa do leito	<i>kg</i>	4,608	4,547	4,466	4,540 ± 0,071
ε_{mf}	-	0,440	0,431	0,433	0,434 ± 0,004

4.1.2 Ensaios de Mínima Fluidização

A pressão diferencial entre os pontos “2” e “3” da Figura 3.1 (base e topo do leito), reduzida da perda de carga no distribuidor, fornece a perda de carga no leito. A Figura 4.1 ilustra a diferença de pressão entre os pontos “2” e “3” e a diferença de pressão na placa de orifício (ponto “1”) em função do tempo, na forma como os dados são fornecidos pelo sistema.

Figura 4.1 – Diferença de pressão na placa de orifício e no leito (entre base e topo) em função do tempo



As descontinuidades na Figura 4.1, um pouco após 1100 s, é quando a perda de carga na placa de orifício aumenta, indicando aumento da velocidade, e a perda de carga no leito diminui, indicando que ocorreu a fluidização do leito. Isto se deve ao fato de a resistência de passagem do ar diminuir em leito fluidizado, conseqüentemente diminuindo também a queda de pressão no fluido. Como a frequência de rotação do soprador é mantida e a resistência para passagem do ar diminui, a vazão de ar e, conseqüentemente, sua velocidade aumentam.

Os valores médios da queda de pressão do leito durante a fluidização flutuam em torno de uma média. As quedas de pressão no leito são apresentadas na Tabela 4.2 para as 3 partículas utilizadas, AF1, EV2 e EV3. Como o leito é sustentado pelo arrasto provocado pela passagem de ar, a queda de pressão teórica, para fluido com massa específica muito inferior ao do sólido, é o peso do leito por área de seção transversal ao escoamento. Os dados de pressão serão comparados com os dados obtidos por meio de simulação numérica na sequência do trabalho. Para os gráficos utilizados para obtenção da velocidade de mínima fluidização – Figuras 4.2 a 4.4 – a queda de pressão é normalizada pelo peso do leito por área transversal ao escoamento. Deste modo, é possível ver (Figuras 4.2 a 4.4) que na maioria dos casos a queda de pressão no leito é 80% da teórica. Kunii e Levenspiel (1994) explicam isto pelo efeito que as paredes exercem na sustentação do leito.

Tabela 4.2 – Queda de pressão média durante a fluidização.

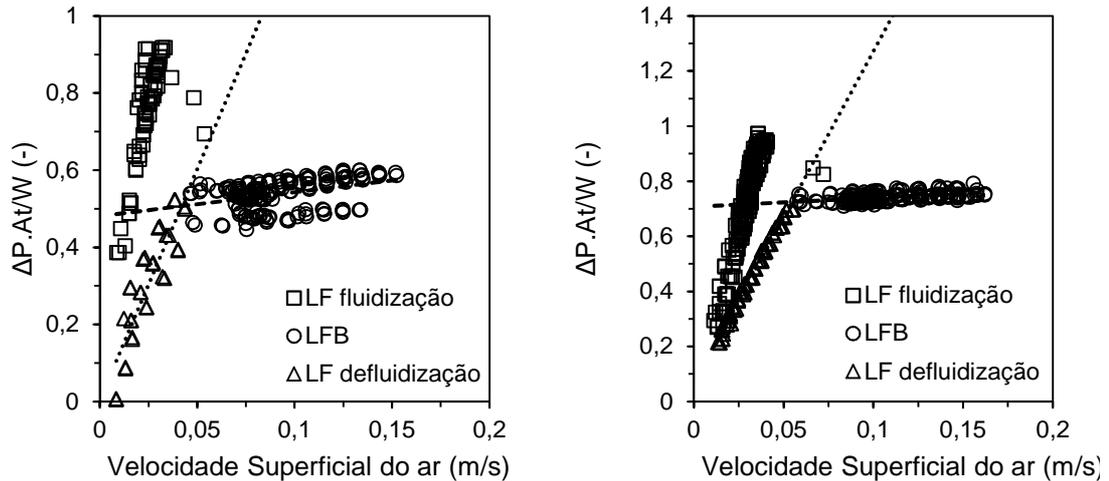
Altura do leito	AF1 Queda de pressão (kPa)	EV2 Queda de pressão (kPa)	EV3 Queda de pressão (kPa)
0,3 m	4,17 ± 0,17	4,22 ± 0,07	4,42 ± 0,07
0,2 m	2,78 ± 0,10	2,81 ± 0,05	2,85 ± 0,04
0,1 m	1,03 ± 0,02	1,21 ± 0,06	1,37 ± 0,03

As curvas de fluidização e defluidização, quando se parte de leito borbulhante para leito fixo, se mostraram diferentes, como era esperado. O leito antes e após fluidização tem alturas diferentes logo, a porosidade de cada leito é diferente, gerando perda de pressão diferentes.

Os pontos do gráfico, para os regimes de fluidização e leito fixo após defluidização, são ajustadas por retas e a interseção destas dá o resultado de

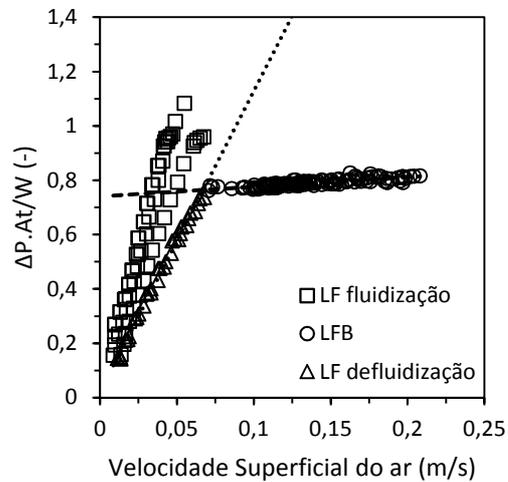
velocidade mínima de fluidização. A Figura 4.2 mostra os gráficos de perda de carga no leito versus velocidade superficial e traça as retas de leito fixo e leito borbulhante para leitos de altura de 100 mm, 200 mm e 300 mm da amostra AF1.

Figura 4.2 - Gráficos de diferença de pressão normalizada no leito por velocidade; para altura de leito de: (a) 0,1 m, (b) 0,2 m e (c) 0,3 m. Partícula tipo AF1.



(a)

(b)

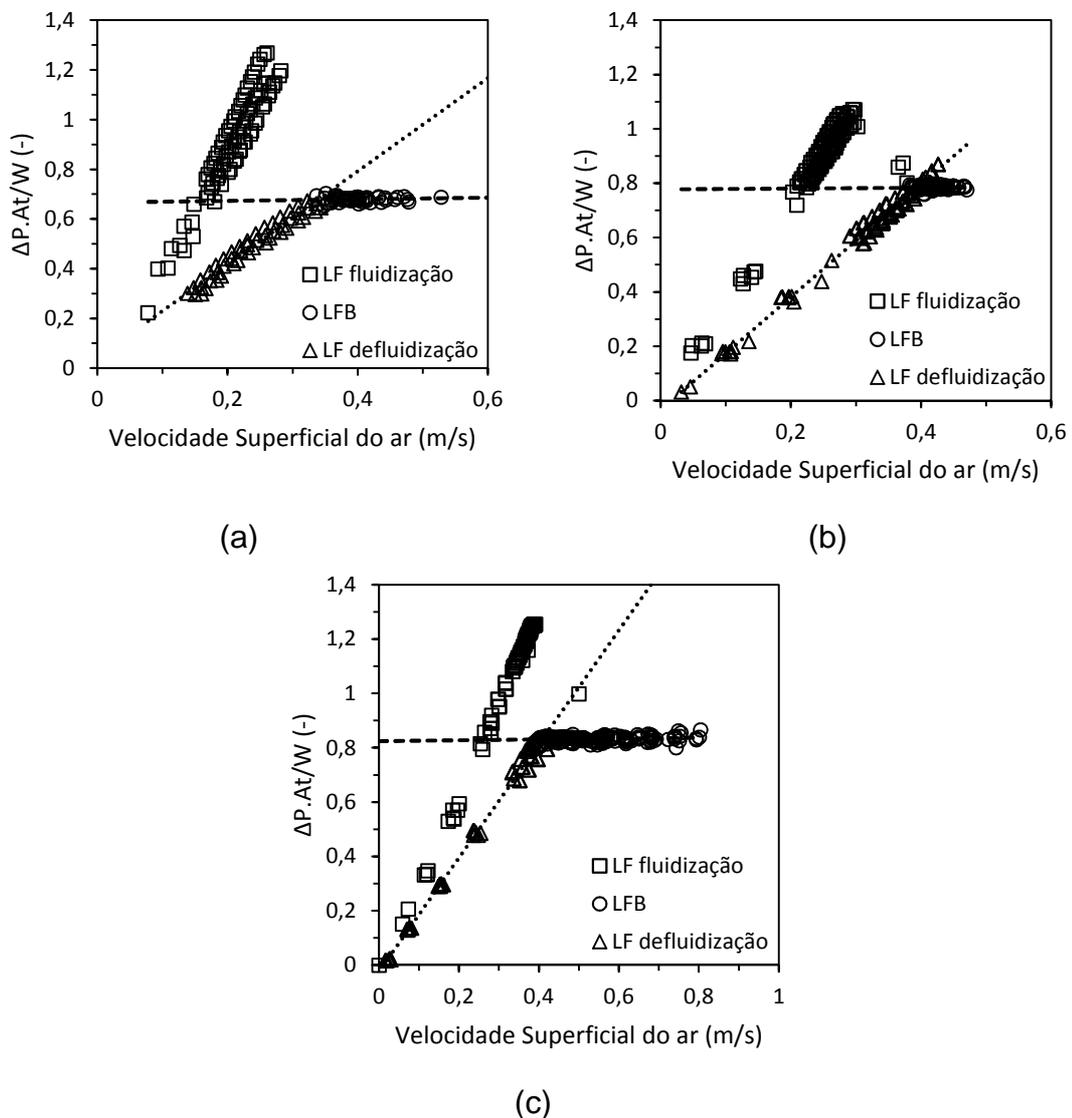


(c)

Os dados gerados para altura de leito de 0,1 m se mostraram menos constantes. As repetições não estão consistentes entre si. Se comparado com os resultados das outras alturas, supõe-se que os dados para 0,1 m são mais suscetíveis a pequenas variações, tais como altura de leito e fração de vazios.

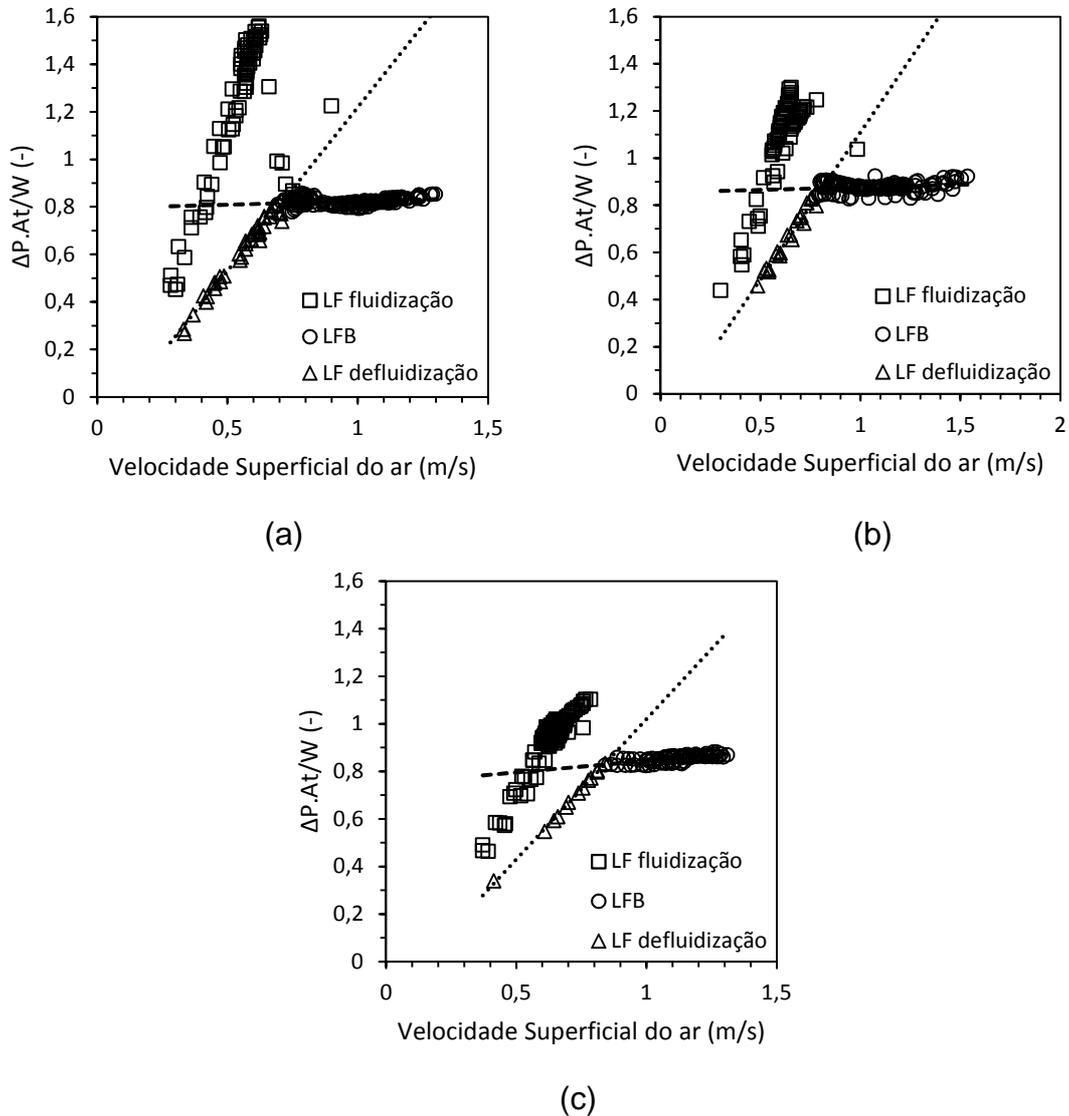
A Figura 4.3 mostra os gráficos de perda de carga no leito versus velocidade superficial e traça as retas de leito fixo e leito borbulhante para leitos de altura de 0,1 m, 0,2 m e 0,3 m da amostra EV2. Para a partícula EV2, os resultados para 0,1 m se mostram bem consistentes, tanto quanto para as demais alturas de leito iniciais. No entanto a velocidade mínima de fluidização obtida se mostra inferior às velocidades obtidas com alturas de leito iniciais superiores.

Figura 4.3 - Gráficos de diferença de pressão normalizada no leito por velocidade; para altura de leito de: (a) 0,1 m, (b) 0,2 m e (c) 0,3 m. Partícula tipo EV2



Os gráficos de perda de carga no leito versus velocidade superficial e as retas de leito fixo e leito borbulhante para leitos de altura de 100mm, 200mm e 3000mm da amostra EV3 são mostrados na Figura 4.4.

Figura 4.4 – Gráficos de diferença de pressão normalizada no leito por velocidade para altura de leito de: (a) 0,1 m, (b) 0,2 m e (c) 0,3 m. Partícula tipo EV3.



Dos resultados obtidos dos gráficos mostrados nas Figuras 4.2, 4.3 e 4.4, pode-se obter os valores de velocidade mínima de fluidização para cada altura de leito. Estes valores são mostrados na Tabela 4.3, juntamente com a média da velocidade mínima de fluidização.

Tabela 4.3 – Velocidade mínima de fluidização obtida para alturas diferentes

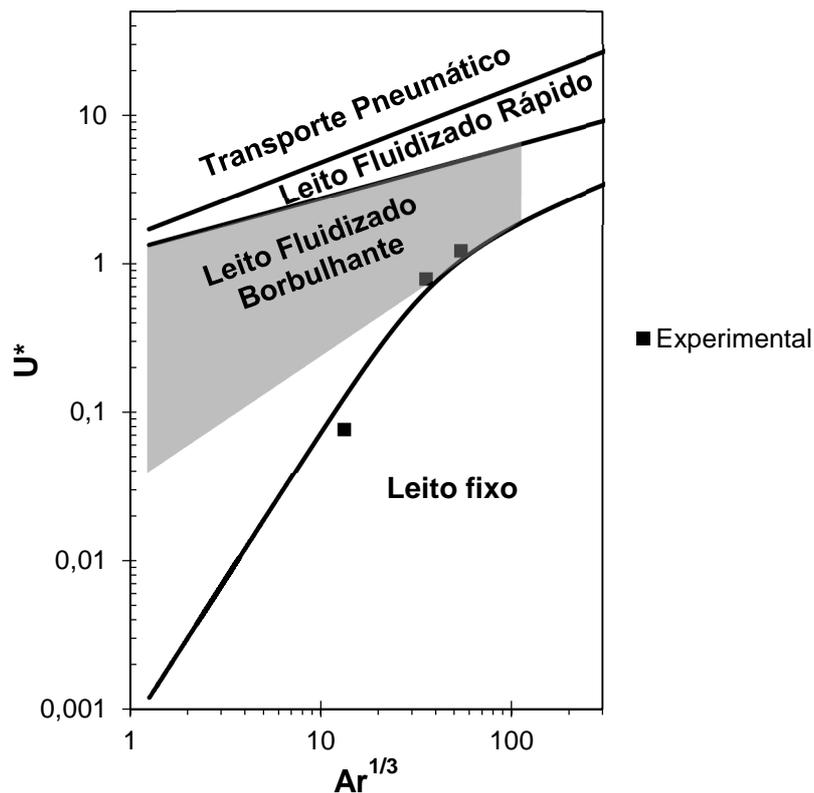
Caso	Unidade	AF1	EV2	EV3
$h_{leito} = 100$ mm	m/s	0,042	0,338	0,706
$h_{leito} = 200$ mm	m/s	0,054	0,394	0,809
$h_{leito} = 300$ mm	m/s	0,067*	0,408*	0,837*
média	m/s	$0,055 \pm 0,012$	$0,380 \pm 0,037$	$0,784 \pm 0,069$

*Velocidade utilizada como U_{mf} nas simulações

Valores de velocidade mínima de fluidização menores foram obtidos para altura de leito, h_{leito} , menores. Apesar de não ter sido feita investigação a respeito deste comportamento, acredita-se que pelo formato de distribuidor, tipo tuyère, que tem base irregular, a altura de leito pode não ser bem definida. Além disto, existe a não homogeneidade da distribuição de ar, podendo ocorrer formação de bolhas onde a velocidade é localmente maior que a velocidade mínima de fluidização.

A fim de comparação, as velocidades mínimas de fluidização são plotadas em cima do mapa de regimes de Grace (1997) e mostrados na Figura 4.5. Este gráfico mostra as linhas nas quais ocorre a mudança de regime de fluidização. Para um mesmo fluido, quanto maior o número Ar , maior o diâmetro da partícula. No eixo das ordenadas é representada a velocidade adimensionalizada, U^* ($U^* = Re/Ar^{1/3}$).

Figura 4.5 – Mapa de regime de Grace e valores de mínima fluidização obtidos



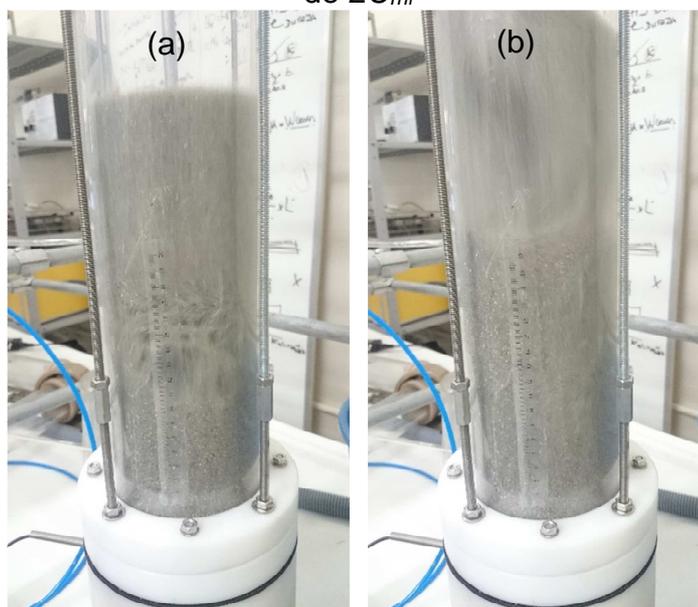
Fonte: Adaptado de Grace et al. (1997)

O número de Arquimedes (Ar) menor se refere à menor partícula e o maior à maior partícula. Vê-se que os dados obtidos mostram concordância com a linha de mínima fluidização traçado por Grace et al. (1997).

Durante a execução do trabalho, mas posterior à aquisição de dados experimentais, o equipamento sofreu algumas alterações que permitem a visualização do leito e utilização de placa perfurada, ao invés de *tuyères*.

A Figura 4.6 mostra fotos do equipamento operando em fluidização borbulhante em dois momentos distintos, com velocidade aproximada de $1,6 \text{ m/s}$. Na Figura 4.6 (a), é possível ver bolhas menores e disformes, na (b), observa-se o desprendimento de bolha de tamanho próximo ao diâmetro do equipamento. Apesar da pouca nitidez das fotos e de serem de momentos distintos, não sequenciais, a Figura 4.6 sugere que há o coalescimento das bolhas à medida que se deslocam no equipamento.

Figura 4.6 – Fotos do equipamento em fluidização, em dois instantes diferentes, utilizando a partícula EV3, distribuidor tipo placa perfurada e velocidade aproximada de $2U_{mf}$



4.2 AJUSTE DOS MODELOS DE ARRASTO

Com os valores de velocidade mínima de fluidização para cada sistema de partículas, é possível fazer alterações nas correlações de arrasto gás-sólido para coincidirem com resultados experimentais ou se aproximarem destes. Por meio dos dados da média de fração de vazios para cada partícula, mostrado na Tabela 4.1 e dados de velocidade mínima de fluidização (Tabela 4.3), é possível fazer o ajuste das equações de DF e SO.

4.2.1 Ajuste de Syamlal-O'Brien

Utilizando as Equações (3.31) e (3.32), é possível calcular os parâmetros ajustados da correlação de arrasto de SO. Os valores obtidos estão dispostos na Tabela 4.4.

Tabela 4.4 – Parâmetros ajustados do modelo de arrasto de SO para as partículas AF1, EV2 e EV3.

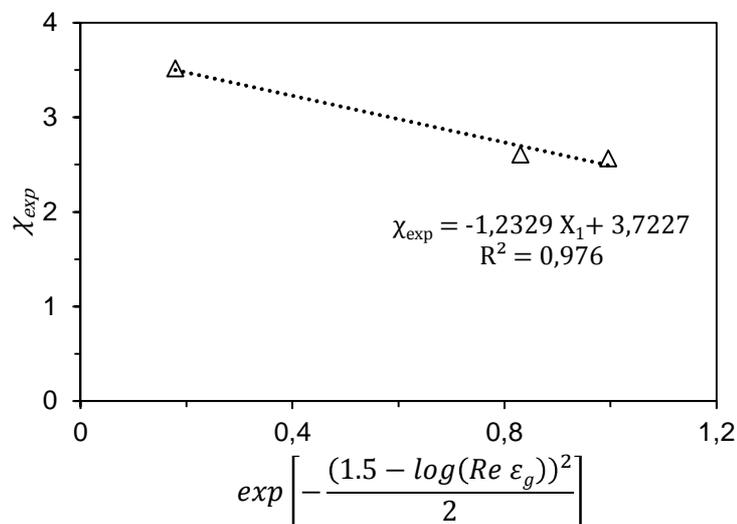
	AF1	EV2	EV3
C1	0,21	0,64	0,84
C2	10,9	4,0	2,3

Estes valores foram implementados nos códigos computacionais MFIX (versão 2015-2) e Ansys Fluent (versão 16.2) e seus resultados foram comparados com os resultados utilizando o modelo original.

4.2.2 Ajuste do modelo Di Felice

Utilizando as equações (3.33), (3.34) e (3.35) é possível plotar os valores experimentais obtidos na Tabela 4.1 e na Tabela 4.3 em função de χ e linearizá-los a fim de se obter a Figura 4.7. Dos valores linearizados, pode-se obter a reta de melhor ajuste através de ajuste de mínimos quadrados, conforme as Equações (3.33) a (3.37) (p 66).

Figura 4.7 – Ajuste linear dos valores experimentais utilizando o modelo de DF.

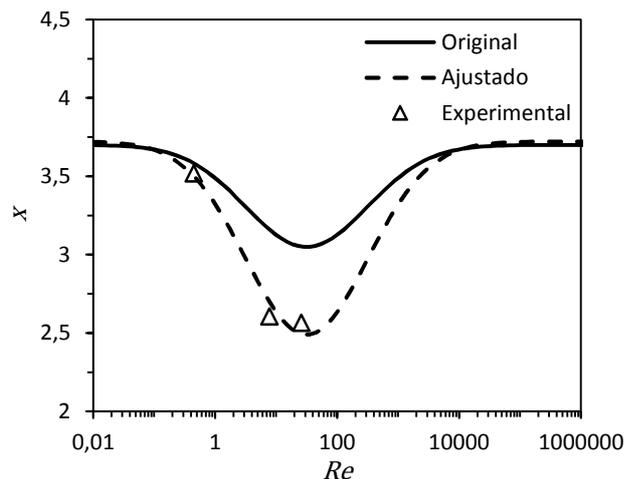


A partir da reta ajustada, obtém-se os valores de P e Q da correlação de DF. A equação de DF com os parâmetros estimados é mostrada na Equação (4.1).

$$\chi_{ajustado} = 3,72 - 1,23 \exp \left[-\frac{(1,5 - \log(Re \varepsilon_g))^2}{2} \right] \quad (4.1)$$

Sendo os valores obtidos de P e Q , respectivamente, 3,72 e 1,23. Com estes valores, é possível traçar a curva da função obtida. A Figura 4.8 mostra os valores de χ em função de Re_s da função obtida através de ajuste de dados experimentais e a função original de DF.

Figura 4.8 – Valor de χ em função do Re para os modelos original e ajustado e para os valores calculados dos resultados experimentais.

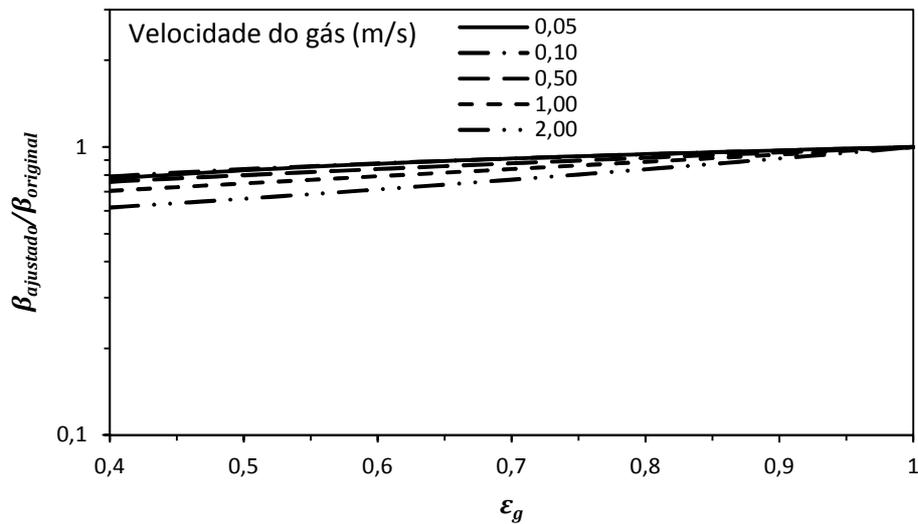


O ajuste se mostrou adequado na faixa onde os dados estão presentes. É possível observar também que para valores de Reynolds baixos e altos, os valores obtidos de χ são próximos aos valores originais do modelo ($\chi = 3,7$), concordando com o trabalho de Di Felice (1994). Ele ainda afirma que os resultados para baixo e alto valor de Reynolds são bem conhecidos e afirma ainda que isto levou vários autores (WEN; YU, 1966; WALLIS 1969; RICHARDSON E JERONIMO 1976; FOSCOLO et al., 1983 apud DI FELICE, 1994) a adotarem as mesmas expressões para regimes intermediários.

Utilizando a correlação de DF, Equações (2.20) a (2.23), e a Equação (4.1), que contém os valores ajustados, é possível obter os valores do coeficiente de arrasto, β , do modelo de DF.

A Figura 4.9 mostra que para o regime de interesse da partícula AF1, velocidade entre 0,05 m/s e 2 m/s, a razão entre os valores de β ajustados e o valor original é menor que 1.

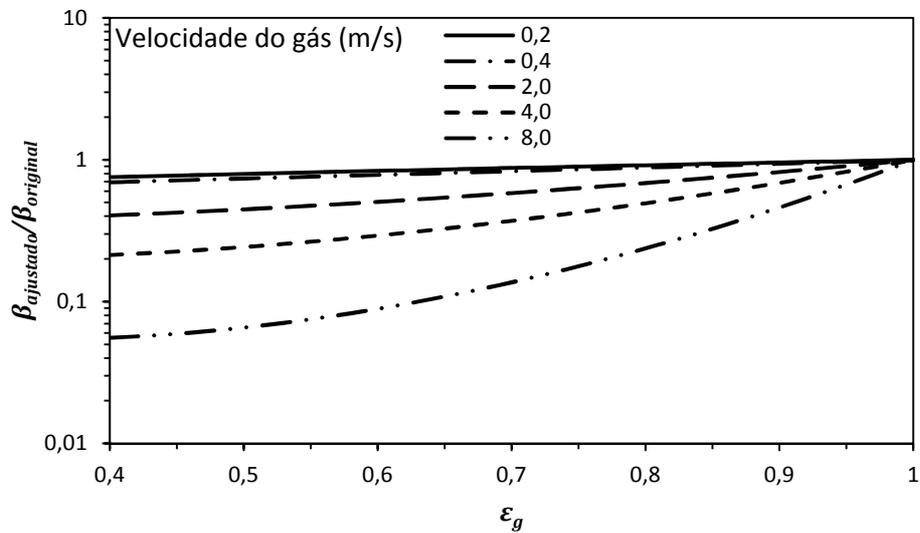
Figura 4.9 – Razão entre a força de arrasto de DF ajustado e original para AF1.



Seus valores se igualam, razão igual a 1, quando a fração de vazios, ϵ_g , tende a 1. No entanto, estes valores são bem próximos, e a diferença na simulação deve ser muito pequena, uma vez que as diferenças entre modelos podem resultar em força de arrasto com diferença em ordens de magnitude (ou seja, 10,100,1000 vezes de diferença de valor).

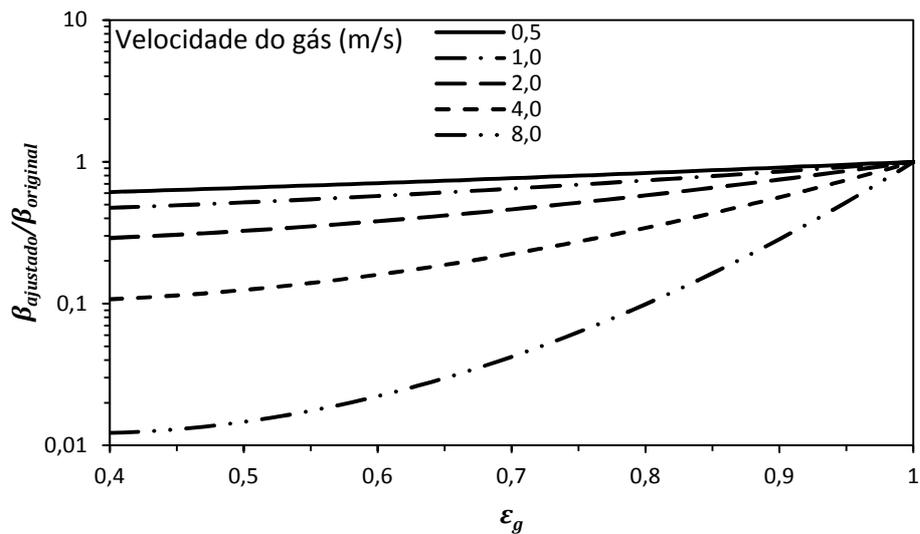
A Figura 4.10 mostra que, para o regime de interesse da partícula EV2, velocidade entre 0,2 m/s e 8 m/s, a razão entre os valores de β ajustados e o valor original é menor que 1, e que a razão entre o modelo original e ajustado é mais distante para esta partícula, especialmente para velocidades de gás mais altas.

Figura 4.10 – Razão entre a força de arrasto de DF ajustado e original para partícula EV2.



A Figura 4.11 mostra que esta diferença é ainda maior para a partícula EV3, com diferenças próximas a 100 vezes entre os valores ajustados e originais. A velocidade alta utilizada se deve ao fato de que a velocidade local instantânea pode ser 20 vezes maior que a velocidade superficial.

Figura 4.11 - Razão entre a força de arrasto de DF ajustado e original para partícula EV3.



4.3 SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE LEITO FLUIDIZADO BORBULHANTE

Foi utilizado o software MFIX (versão 2015-2) para as simulações bidimensionais e o Ansys Fluent (versão 16.2) para as simulações tridimensionais. Os resultados obtidos são apresentados na sequência

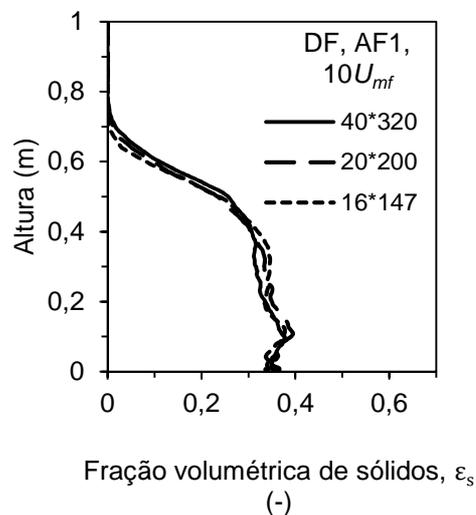
4.3.1 Simulação numérica utilizando modelo de Di Felice original e ajustado

Após o ajuste de DF, conforme apresentado no item anterior, foram realizadas as simulações numéricas dos modelos original e ajustado em leito fluidizado borbulhante. A sequência do texto apresenta os resultados obtidos utilizando ambos modelos de DF e seus comparativos.

4.3.1.1 Simulações bidimensionais

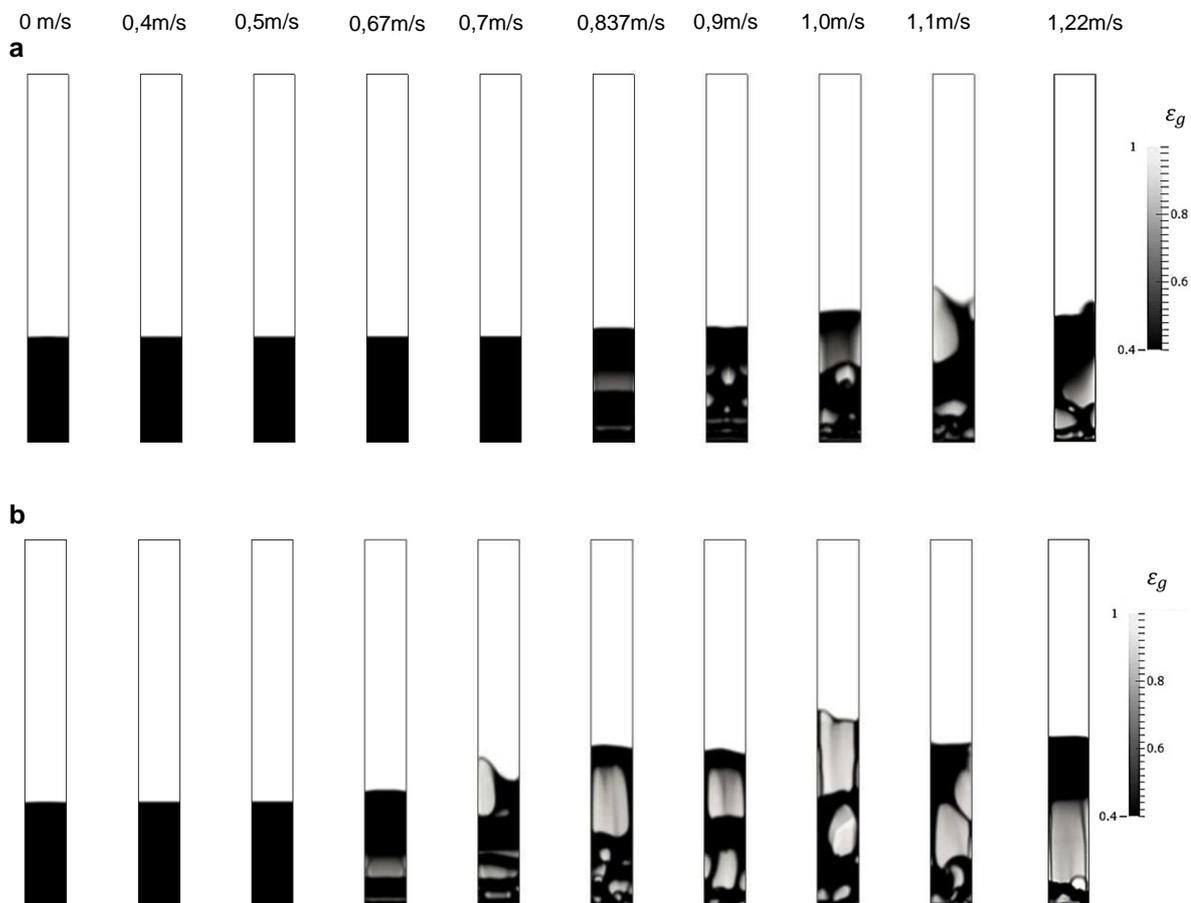
A fim de minimizar o efeito de malha no sistema, foram realizados testes com diferentes tamanhos de malha nas situações mais críticas exploradas neste trabalho, como por exemplo, menor tamanho de partícula e maior velocidade. A Figura 4.12 mostra resultados obtidos para ε_s em função da altura, com diferentes tamanhos de malha.

Figura 4.12 – Resultado de fração volumétrica de sólidos média ao longo da altura para partícula AF1, $10U_{mf}$, e três composições de malhas, conforme legenda do gráfico.



É possível ver na Figura 4.12 que as usadas geram resultados próximos entre si, o que mostra que o efeito de malha nestas condições é pequeno. Partindo desta constatação, foi empregada a malha de 40 por 320, pois, por ser uma malha bidimensional, fornece a precisão necessária com tempo e esforço computacional adequados.

Figura 4. 13 – Fração de vazios do modelo de arrasto de DF (a) ajustado e (b) original; a velocidade varia a cada 1 s de 0 para 0,4 m/s, para 0,5 m/s, para 0,67 m/s, 0,7 m/s, 0,837 m/s, 0,9 m/s, 1,1 m/s e 1,225 m/s.

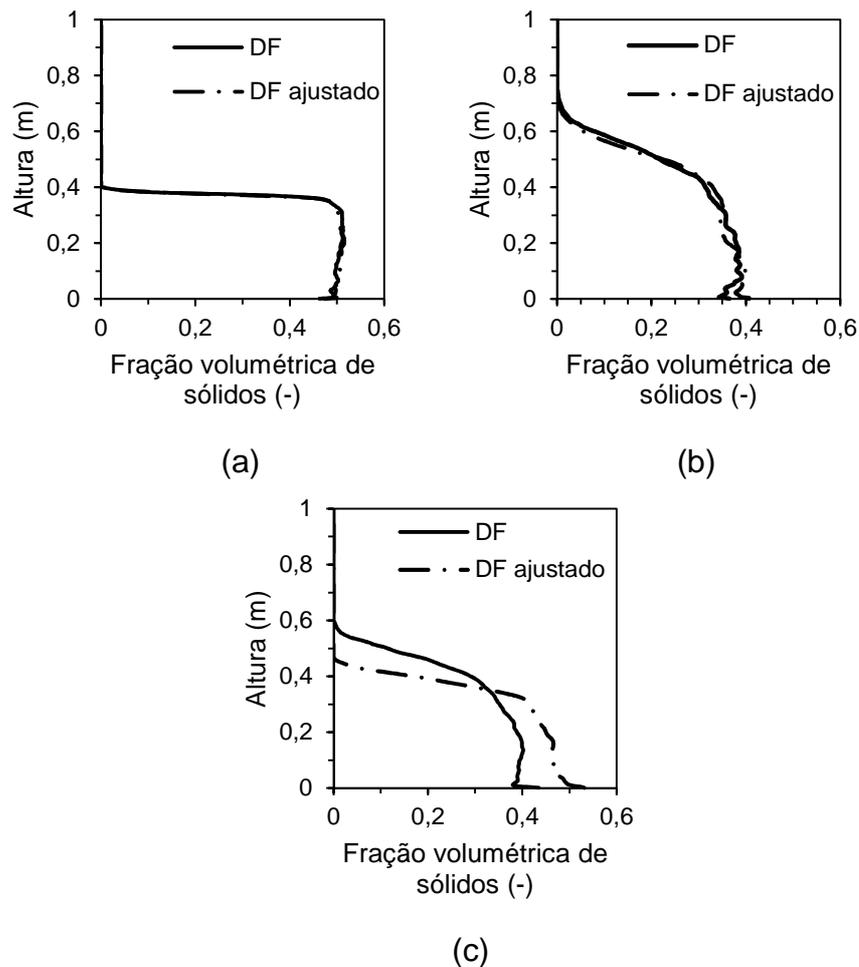


Na sequência, foram realizadas simulações com o modelo de arrasto de DF original e ajustado para verificar a transição de leito fixo e leito fluidizado. A condição de contorno de entrada é estabelecida como variável, alterando a magnitude da velocidade a cada segundo na ordem: 0 m/s; 0,4 m/s; 0,5 m/s; 0,67 m/s; 0,7 m/s; 0,837 m/s; 0,9 m/s; 1,0 m/s; 1,1 m/s; 1,22 m/s. A velocidade de 0,837 m/s é a

velocidade mínima de fluidização experimental obtida para a partícula EV3 com altura de leito de 0,3 m. A Figura 4. 13 mostra um instantâneo da fração de vazios a cada 1 s, começando de 0,5 s, para os modelos de arrasto de DF original e ajustado para a partícula EV3. Vê-se que o modelo ajustado (Figura 4. 13 (a)) tem sua transição próximo ao valor esperado, enquanto que o modelo original começa a borbulhar a 0,67 m/s.

Comparações entre os modelos de DF ajustado e original foram feitos para as três partículas que são mostradas na Figura 4.14, que mostra a fração volumétrica de sólidos média temporal ao longo da altura. Foi utilizado um intervalo entre 2 s e 10 s de simulação como valores a cada 0,01 s.

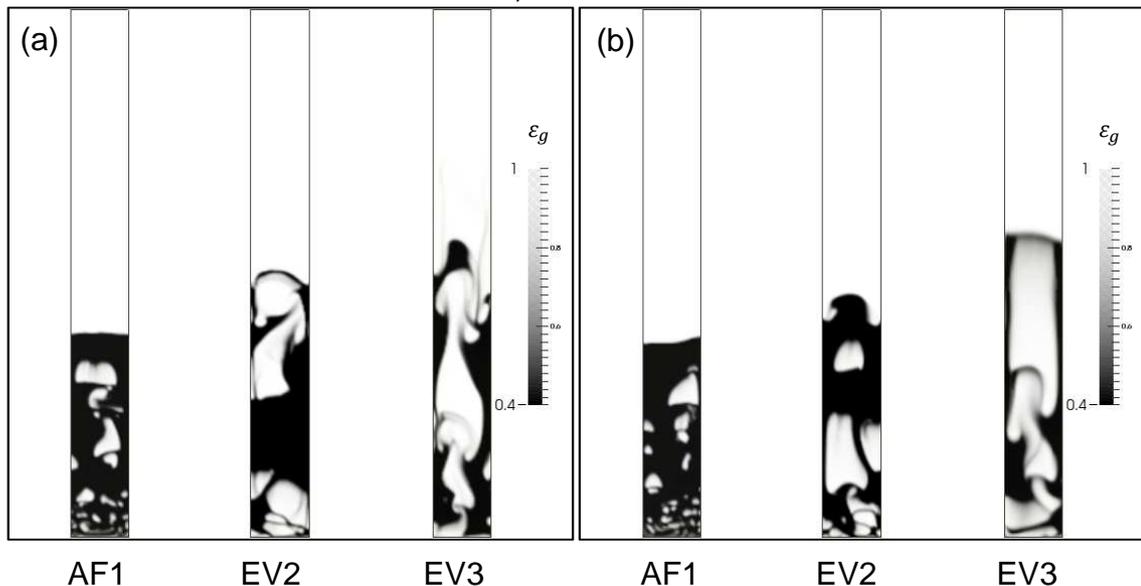
Figura 4.14 – Comparação entre os modelos ajustados e originais de DF para fração de sólidos da partícula AF1 (a), EV2 (b) e EV3 (c) com velocidade de $1,5 U_{mf}$



Nas condições simuladas para as partículas AF1 e EV2, os resultados obtidos para o modelo ajustado são bem semelhantes aos valores obtidos para o modelo

original, diferentemente do que acontece com a partícula EV3. Para esta partícula, o resultado de altura de leito é claramente menor que o resultado obtido com o original. Um instantâneo da fração de vazios para ambos os modelos está mostrado na Figura 4.15. No entanto, visualmente não é possível identificar diferenças no comportamento dos modelos.

Figura 4.15 - Concentração de sólidos no tempo de 7,5 s nas simulações da esquerda para direita: DF (a) original para AF1, EV2 e EV3 e (b) DF ajustado para AF1, EV2 e EV3.



4.3.1.2 Simulações tridimensionais

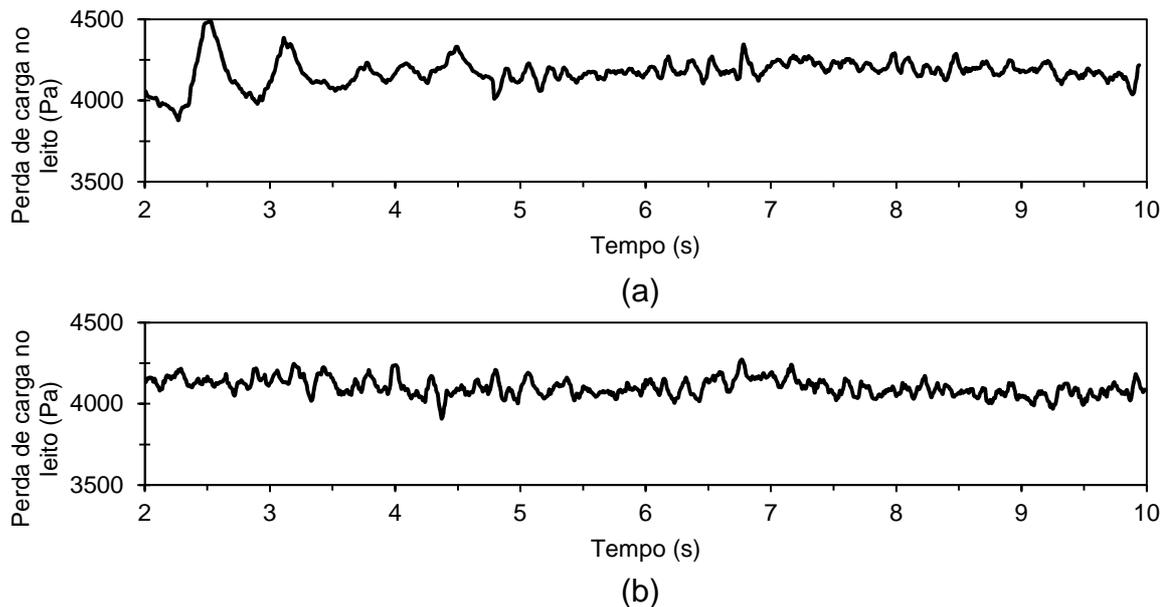
Concomitantemente às simulações bidimensionais, foram realizadas simulações tridimensionais com os modelos de DF original e ajustado. Os resultados de queda de pressão pelo tempo são mostrados a seguir e indicam formação de bolhas e sua frequência, conforme Fan et al. (1981 apud ALBERTO et al., 2004) e Breault, R. W e Guenther, C (2007).

A Figura 4.16 mostra a diferença de pressão entre os pontos altura zero e 0.9 m ao longo do tempo para a partícula AF1. As flutuações de pressão que ocorrem nas Figura 4.16 (a) e (b) são semelhantes, no entanto, no início da simulação (a) (até 4,7 s), formam-se bolhas maiores com intervalos maiores entre elas, indicando que ainda não havia se estabelecido o regime quase-estático. A Figura 4.16 mostra que há formação de bolhas pequenas, isto é visível principalmente ao se comparar com a

Figura 4.17, cuja flutuação é maior e aponta para formação de bolhas maiores (ALBERTO et al., 2004)

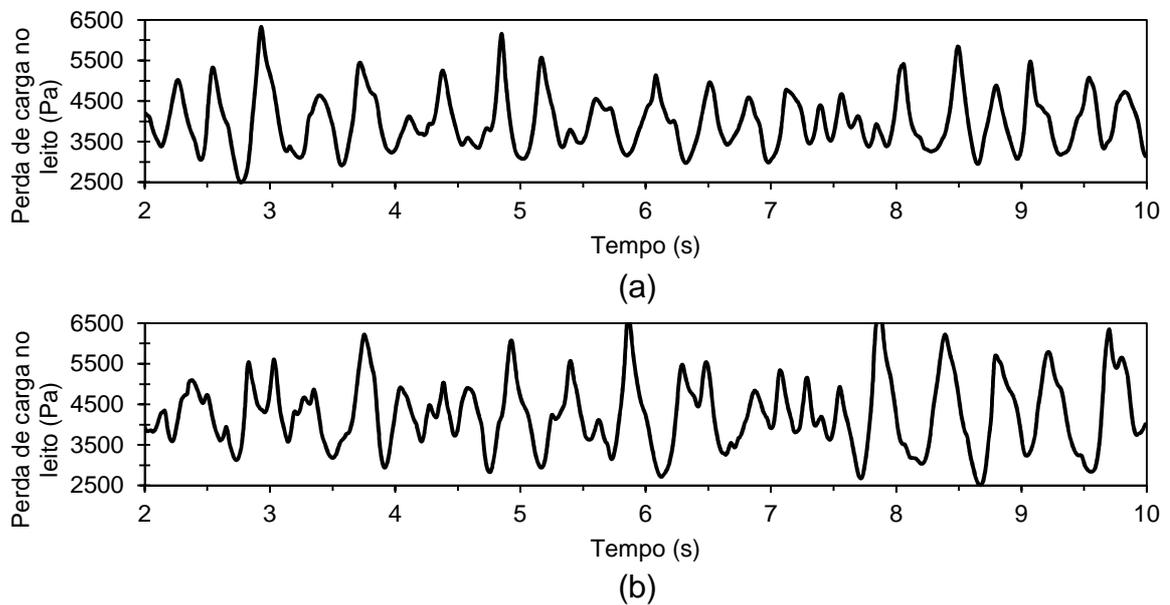
Não é possível comparar estes resultados com os resultados experimentais, pois o supervisor do equipamento utilizado não é capaz de fornecer valores de flutuação apropriadas, uma vez que mostra os dados a cada 1 s.

Figura 4.16 – Diferença de pressão entre altura zero e 0,9 m para simulação da partícula AF1 com velocidade de $1,5 U_{mf}$. utilizando modelo (a) original e (b) ajustado.



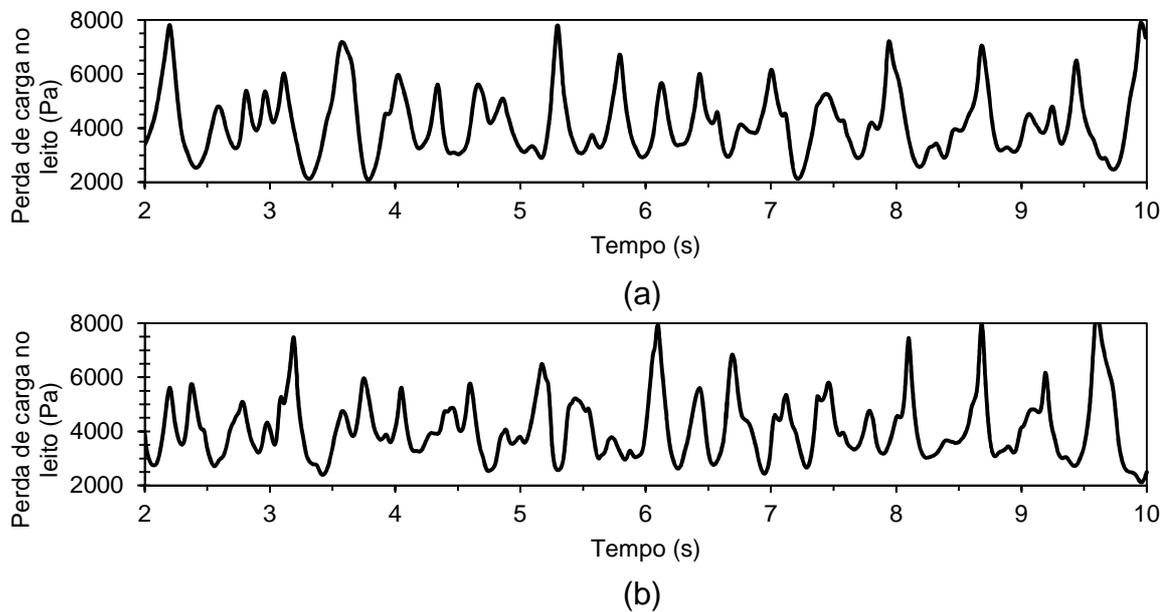
A Figura 4.17 mostra a diferença de pressão entre as alturas 0 e 0,9 m na simulação feita com partícula EV2 e velocidade de 1,5 vezes a velocidade de mínima fluidização. Diferentemente dos resultados obtidos para a partícula AF1, a oscilação da pressão mostra que há formação de bolhas maiores, indicando que está mais distante da velocidade mínima de fluidização. A simulação com o modelo ajustado (b) mostra uma fluidização mais branda que a simulação com o modelo original (a).

Figura 4.17 - Diferença de pressão entre altura zero e 0,9 m para simulação da partícula EV2 com velocidade de $1,5 U_{mf}$ utilizando modelo (a) original e (b) ajustado.



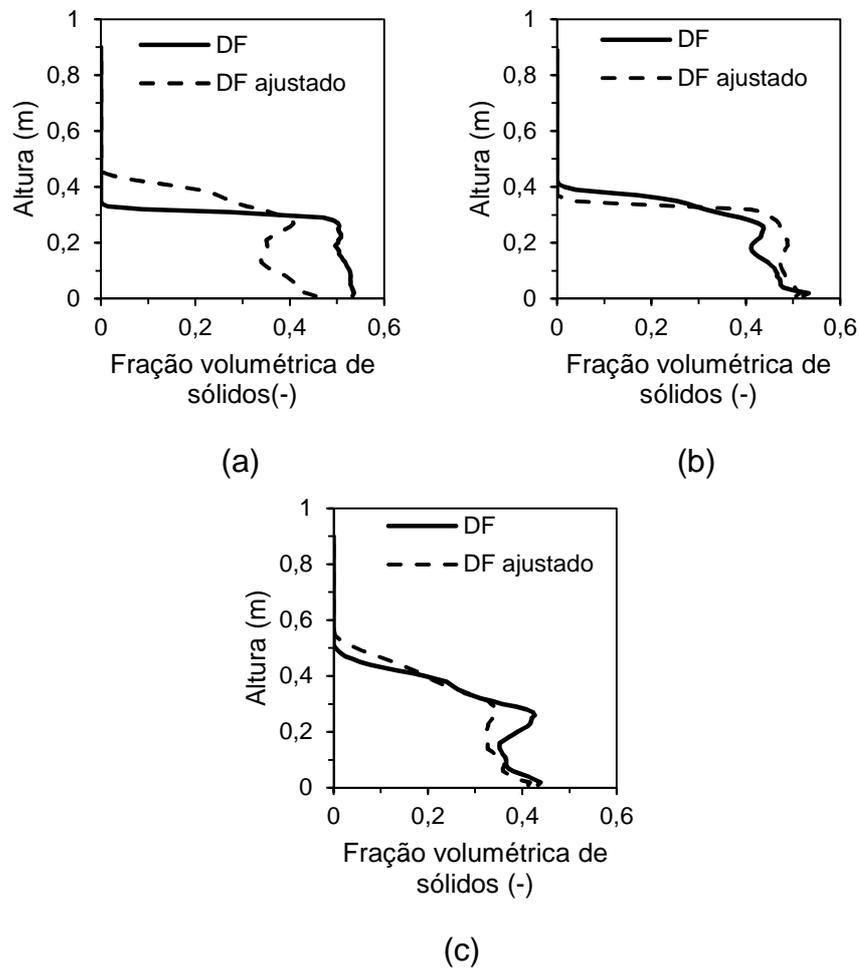
As simulações dos modelos ajustado e original para a partícula EV3 mostraram resultados muito próximos entre si quanto à flutuação da pressão, indicando uma formação de bolhas semelhante quanto a tamanho e frequência, como mostra a Figura 4.18. Observando o resultado para ambos os modelos, vê-se também que a amplitude da flutuação da pressão é bastante alta, demonstrando formação de grandes bolhas.

Figura 4.18 - Diferença de pressão entre altura zero e 0,9 m para simulação da partícula EV3 com velocidade de $1,5 U_{mf}$ utilizando modelo (a) original e (b) ajustado.



Outro resultado importante é a fração de vazios ao longo do leito e é mostrada na Figura 4.19 para as três partículas e modelos original e ajustado de DF. Diferentemente do resultado obtido por simulação bidimensional, que mostrava resultados praticamente idênticos, o resultado da simulação tridimensional mostra uma leve diferença entre os resultados obtidos para a partícula AF1 (Figura 4.19 (a)). O modelo ajustado apresenta altura de leito um pouco superior, porém com fração de sólidos no leito inferior. Para os resultados da partícula EV2 (Figura 4.19 (b)) as diferenças minimizaram, apresentando uma altura de leito apenas levemente maior para o modelo original. O formato em “Z” se deve, provavelmente, devido à formação de bolhas com diâmetro próximos ao diâmetro do leito (conhecido como escoamento *slug* ou *golfada*). A mesma característica ocorre na Figura 4.19 (c), mas somente é acentuada para o modelo original. Ambas alturas de leito são bem semelhantes, mas o resultado do modelo original difere do resultado bidimensional que fornece uma altura de leito maior e fração de sólidos no leito maior.

Figura 4.19 - Comparação entre os modelos ajustados e originais tridimensional de DF para fração de sólidos da partícula AF1 (a), EV2 (b) e EV3 (c) com velocidade de $1,5 U_{mf}$



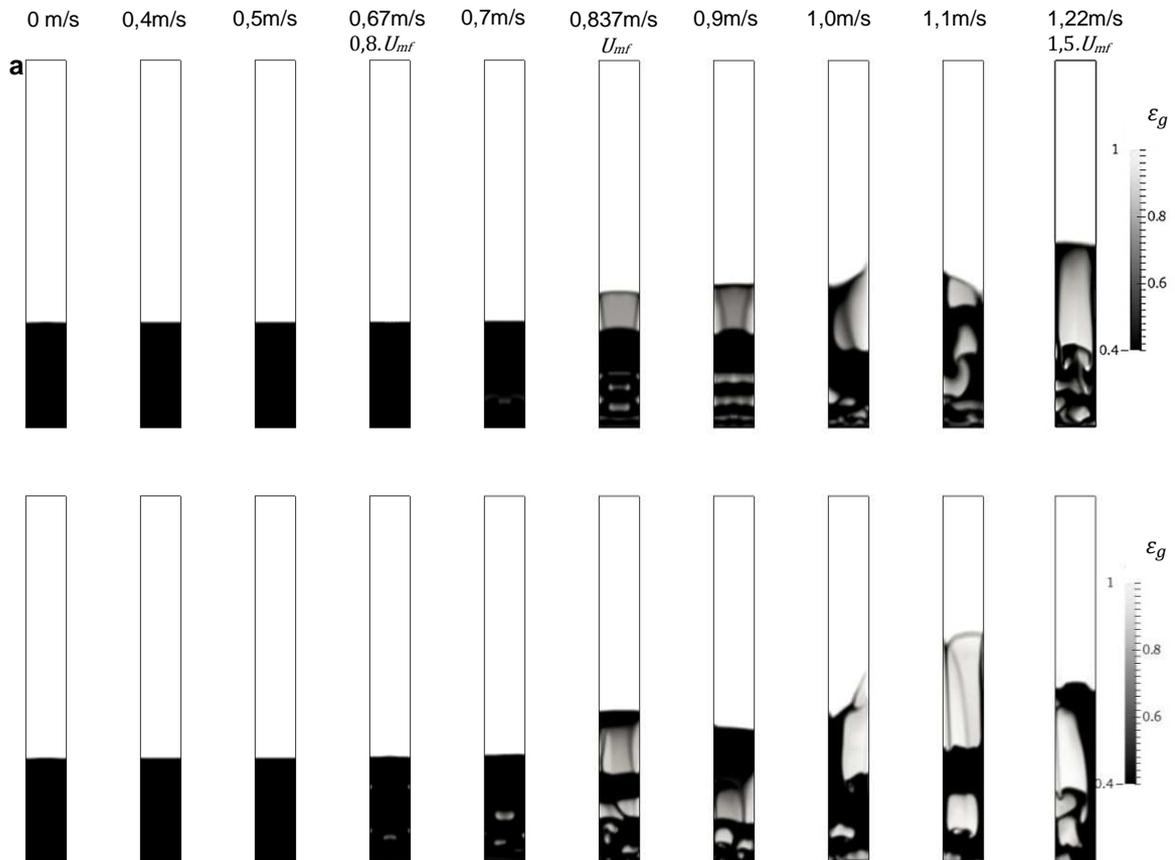
4.3.2 Simulação numérica do modelo de Syamlal-O'Brien original e ajustado

4.3.2.1 Simulação bidimensional

Assim como foi realizado para o modelo de DF, também foi realizado um comparativo entre os modelos ajustado e original para análise da transição do regime. A condição de contorno de entrada é estabelecida como variável, alterando a magnitude da velocidade a cada segundo na ordem: 0 m/s ; $0,4 \text{ m/s}$; $0,5 \text{ m/s}$; $0,67 \text{ m/s}$; $0,7 \text{ m/s}$; $0,837 \text{ m/s}$; $0,9 \text{ m/s}$; $1,0 \text{ m/s}$; $1,1 \text{ m/s}$; $1,22 \text{ m/s}$. Na qual a velocidade de $0,837 \text{ m/s}$ é a velocidade experimental obtida para a partícula EV3 com altura de leito de $0,3 \text{ m}$. A Figura 4.20 mostra um instantâneo da fração de vazios em intervalos de 1 s , começando em $0,5 \text{ s}$, para os modelos de arrasto de SO original e ajustado

para a partícula EV3. Vê-se que o modelo ajustado (Figura 4.20 (a)) tem sua transição próximo ao valor esperado, enquanto que o modelo original começa a borbulhar a 0,7 m/s.

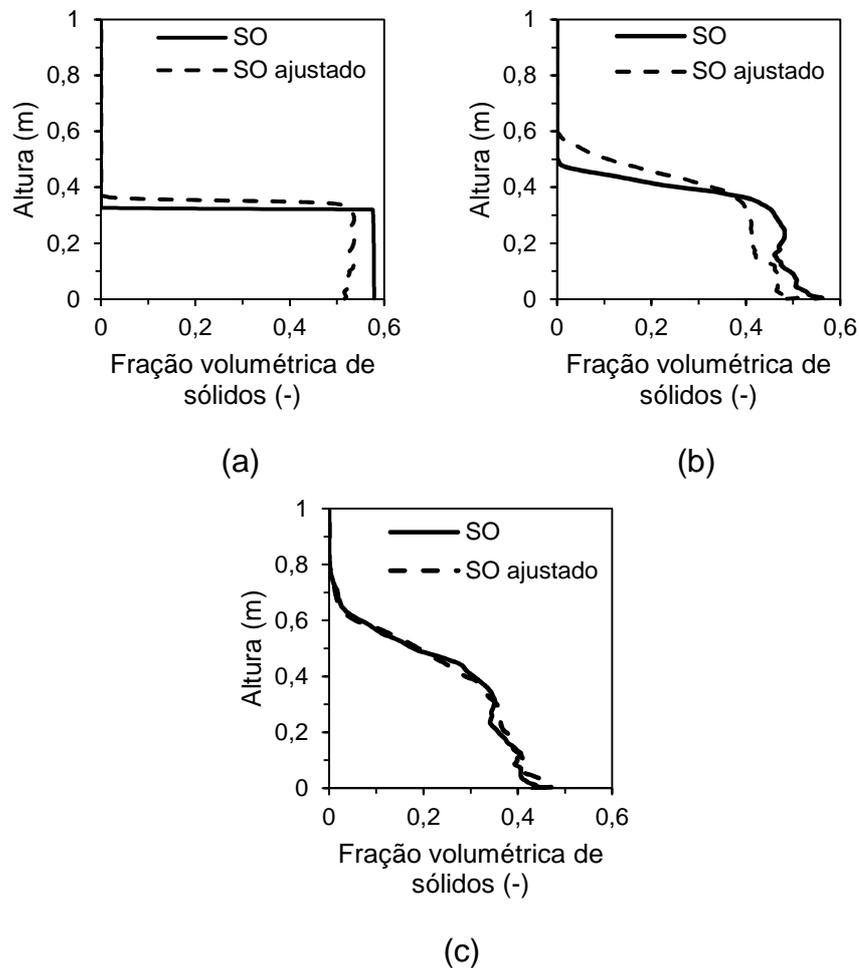
Figura 4.20 – Transição do modelo de SO (a) ajustado e (b) original de 0 a 1,225 m/s. A cada 1 segundo a velocidade superficial aumenta de 0 para 0,4 m/s, 0,5 m/s, 0,67 m/s, 0,7 m/s, 0,837 m/s, 0,9 m/s, 1,1 m/s 1,225 m/s.



Análise comparativa entre os modelos de SO ajustado e original foram feitos para as três partículas, e são mostradas na Figura 4.21, que mostra a fração volumétrica de sólidos média ao longo da altura. Na Figura 4.21 (a) é possível ver que na velocidade da simulação (0,10 m/s) o leito não fluidizou quando utilizado o modelo de SO original. Seguindo as mesmas condições, o modelo ajustado teve fluidização branda, o que era esperado ao analisar o mapa de regimes mostrado na Figura 4.5.

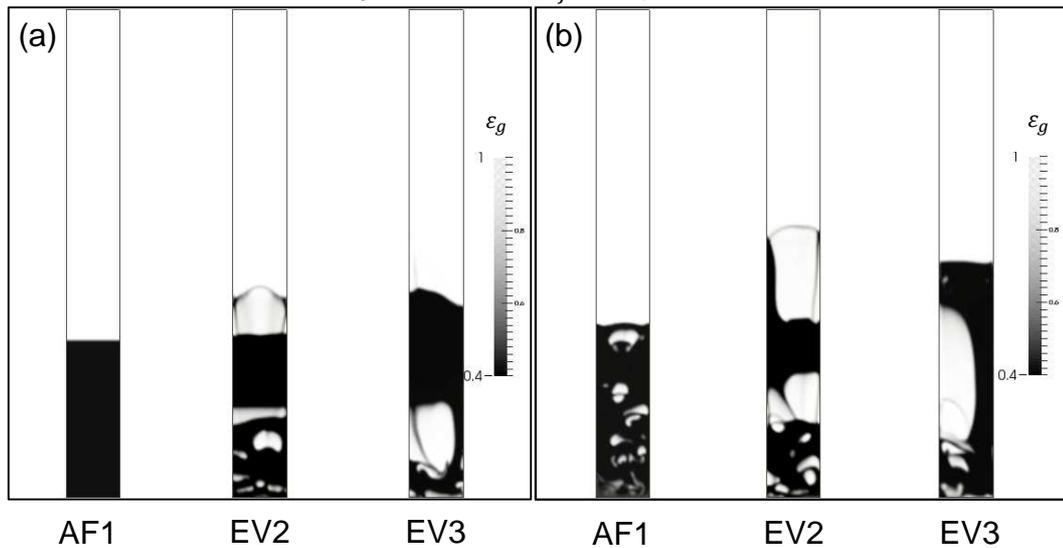
Para a partícula EV2 (b), o resultado do modelo ajustado mostrou uma fração de sólidos no leito mais baixa e, conseqüentemente, altura de leito maior. Para a partícula EV3, o resultado é praticamente idêntico, devido ao fato de que os valores ajustados de C_1 e C_2 , para a partícula EV3, mudam muito pouco em comparação com o modelo original.

Figura 4.21 - Comparação entre os modelos ajustados e originais de SO para fração de sólidos da partícula AF1 (a), EV2 (b) e EV3 (c) com velocidade de $1,5 U_{mf}$



A Figura 4.22 mostra a fração de vazios como resultado da simulação utilizando o modelo de arrasto de SO original (a) e ajustado (b). Como mostrado anteriormente, para a partícula AF1, a velocidade utilizada de $1,5 U_{mf}$ ($0,10 \text{ m/s}$) é insuficiente para fluidizar. Para o modelo ajustado, a fluidização é branda com bolhas pequenas. Também indica que, para a partícula EV2, o modelo ajustado (b) apresenta resultado com formação de bolhas maiores, até mesmo do tamanho do diâmetro do *riser*. No entanto, para a partícula EV3, é possível apenas ver que há formação de bolhas do tamanho do diâmetro do *riser*, conhecido como escoamento *slug*. Devido à altura do leito elevada ($0,3 \text{ m}$) as bolhas coalescem até alcançarem o diâmetro do *riser*, o que condiz com as observações visuais do experimento.

Figura 4.22 – Comparativo entre o modelo (a) original e (b) ajustado de SO para velocidade de fluidização de $1,5 U_{mf}$ das partículas AF1, EV2 e EV3.



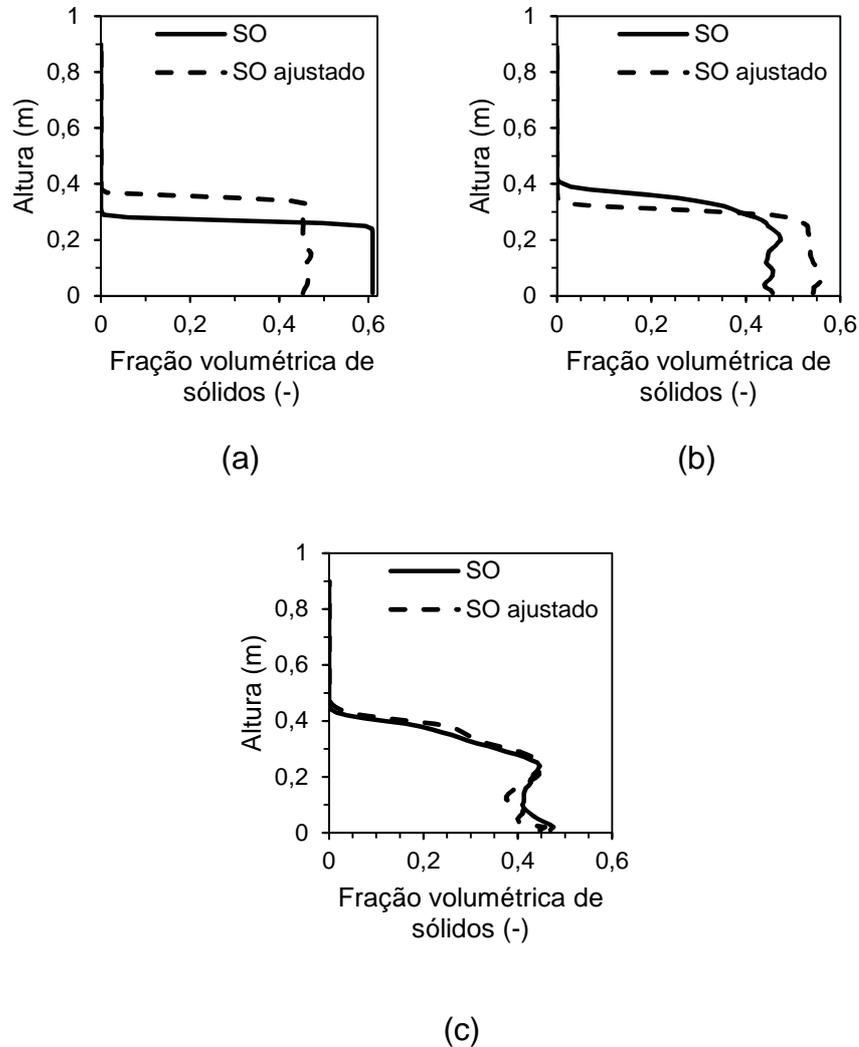
4.3.2.2 Simulação tridimensional

Do mesmo modo que a simulação bidimensional, a simulação tridimensional, utilizando o modelo original de SO para a partícula AF1, não gerou fluidização do leito quando utilizada velocidade de $1,5 U_{mf}$, como mostra a Figura 4.23 (a). A principal diferença para o modelo bidimensional é que a fração de sólidos no leito é maior e, conseqüentemente, altura de leito menor. Isto se deve ao fato de os modelos considerarem frações de leito fixo diferentes. A fração de sólidos no leito é levemente menor que na simulação bidimensional e a fluidização também é branda. O resultado para a partícula EV2 (Figura 4.23 (b)) do modelo tridimensional difere bastante do modelo bidimensional, inclusive invertendo o resultado cuja altura de leito é maior. Vê-se que no modelo original a fração de sólidos no leito é menor que no modelo ajustado.

Para a partícula EV3 tanto nas simulações bidimensionais quanto nas simulações tridimensionais ambos os modelos original e ajustado têm resultados bastante semelhantes. No entanto os resultados do modelo tridimensional têm altura de leito menor. A Figura 4.23 (c) mostra um formato tipo “Z” que sugere formação de bolhas com o mesmo diâmetro do leito.

Como resultado de velocidade insuficiente para fluidização e da fluidização branda dos modelos original e ajustado de SO, respectivamente, da partícula AF1, a perda de pressão no fluido devido ao leito tem flutuação mínima, como mostra a Figura 4.24 para ambos os modelos.

Figura 4.23 - Comparação entre os modelos ajustados e originais tridimensional de SO para fração de sólidos da partícula AF1 (a), EV2 (b) e EV3 (c) com velocidade de $1,5 U_{mf}$.



Para a partícula EV2, a flutuação de pressão é muito semelhante entre os modelos, no entanto, verifica-se que sua amplitude se altera com o tempo. A intensidade da flutuação é entre aproximadamente $3500 Pa$ e $4700 Pa$, e tem pico máximo nos primeiros segundos da simulação do modelo original, enquanto que no modelo ajustado isto ocorre entre 8 e 10 s. Isto pode ser visto na Figura 4.25.

Ainda quanto à perda de carga no leito, a partícula EV3 também tem resultados (Figura 4.26) semelhantes entre os modelos, ocorrendo apenas dois picos levemente superiores para resultado do modelo ajustado, com variação de pressão entre $3000 Pa$ e $7000 Pa$. Comparando a flutuação da pressão dos resultados das diferentes partículas (Figura 4.24, Figura 4.25 e Figura 4.26), é evidente que a flutuação cresce

com o aumento do diâmetro da partícula. Isto se deve ao fato de que a faixa de velocidade a qual ocorre o aborbulhamento é mais estreita para partículas maiores, como pode ser visto na Figura 4.5, sendo que todas as simulações ocorrem com velocidade superficial do gás 1,5 maior que a velocidade mínima de fluidização.

Figura 4.24 – Diferença de pressão entre altura zero e 0,9 m para simulação da partícula AF1 com velocidade de $1,5 U_{mf}$ utilizando modelo (a) original e (b) ajustado de SO.

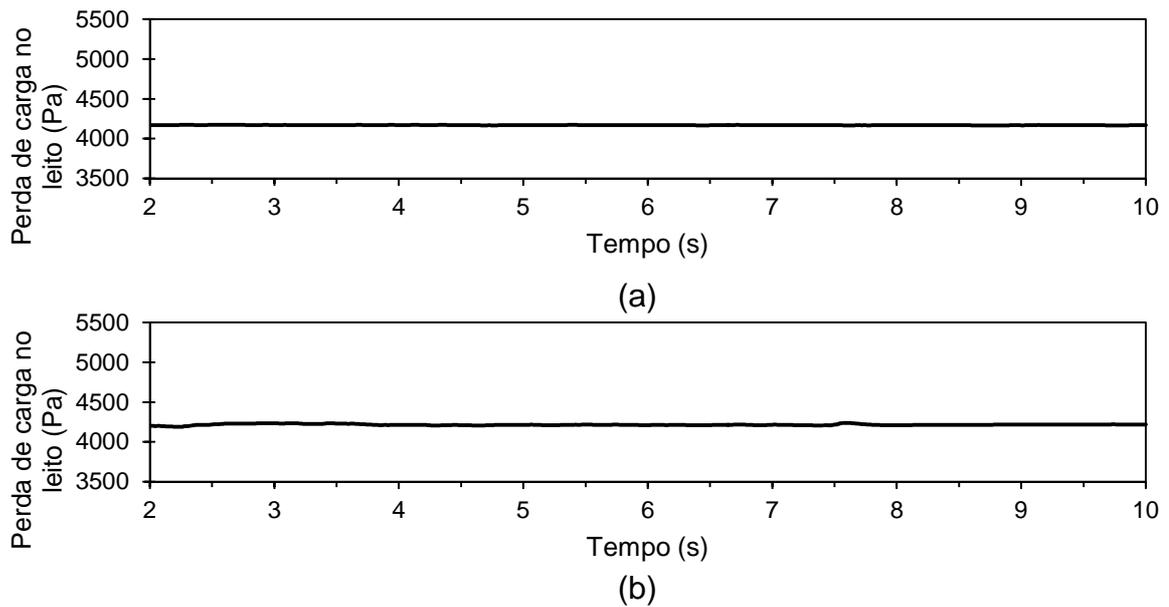


Figura 4.25 – Diferença de pressão entre altura zero e 0,9 m para simulação da partícula EV2 com velocidade de $1,5 U_{mf}$ utilizando modelo (a) original e (b) ajustado de SO.

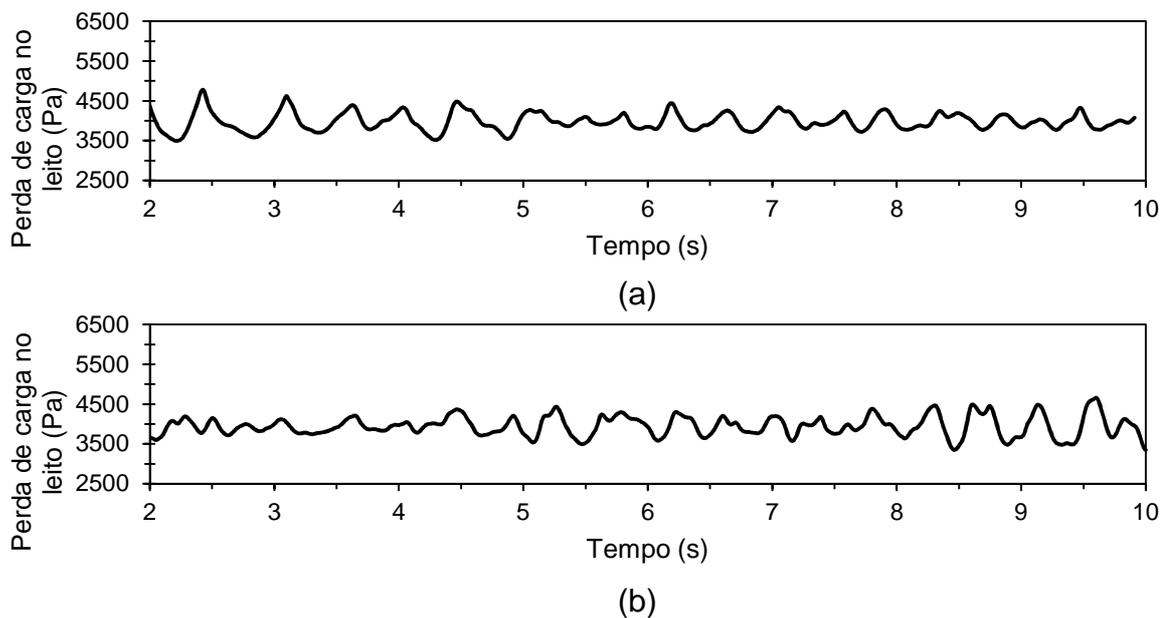
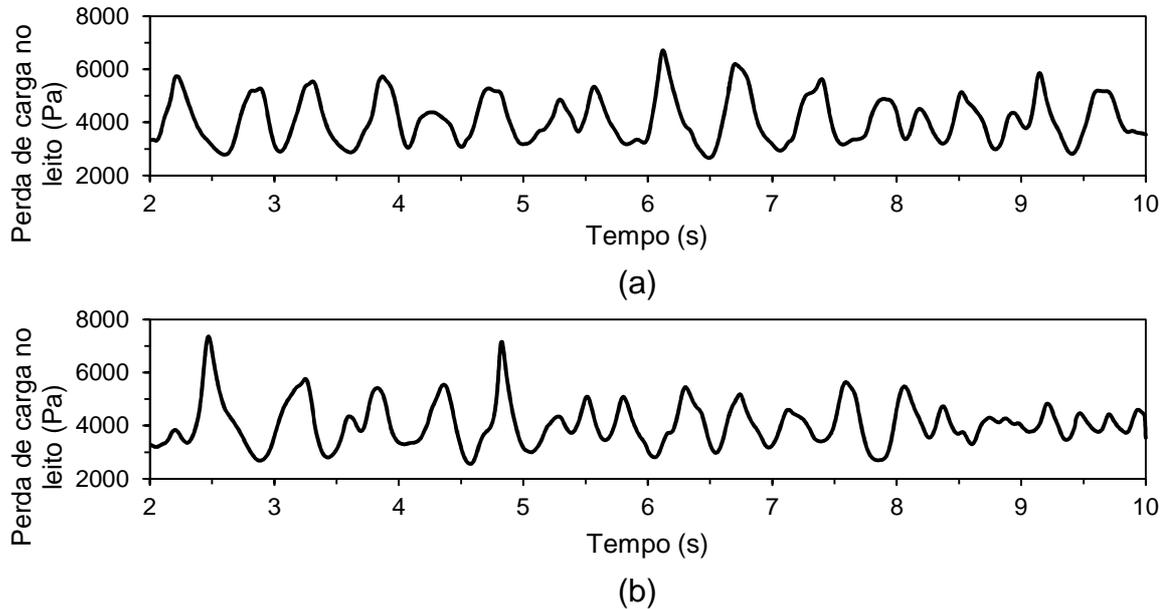


Figura 4.26 – Diferença de pressão entre altura zero e 0,9 m para simulação da partícula EV3 com velocidade de $1,5 U_{mf}$ utilizando modelo(a) original e (b) ajustado



4.3.3 Comparação entre predição dos modelos de arrasto e dados experimentais

Utilizando a massa específica dos sólidos (Tabela 3.1), ρ_s , fração de vazios na mínima fluidização (Tabela 4.1), $\varepsilon_{g,mf}$, massa específica e viscosidade do gás (Tabela 3.6), ρ_g e μ_g , e o conjunto de equações que compõem cada modelo (Equações (2.15) a (2.23)), é possível obter a estimativa de velocidade mínima de fluidização, U_{mf} , que cada modelo prevê.

A Tabela 4.5 mostra os resultados de velocidade mínima de fluidização que cada modelo prevê, inclusive o modelo ajustado de DF, pois é ajustado por três pontos.

Tabela 4.5 – Velocidade predita através de diferentes modelos (valores em m/s)

Partícula	Exp.	DF Original	DF Ajustado	SO Original	Wen-Yu	Ergun
AF1	0,055	0,052	0,056	0,18	0,072	0,11
EV2	0,380	0,24	0,35	0,47	0,39	0,42
EV3	0,784	0,57	0,82	0,74	0,67	0,76

O modelo ajustado de SO fornece exatamente o valor experimental, pois este é utilizado para ajustar os modelos, gerando três diferentes ajustes (um para cada

partícula) enquanto que o ajuste de DF obtido é uma única equação para as três partículas. Por este motivo os valores de SO ajustado não se encontram na Tabela 4.5.

A Tabela 4.6 mostra a queda de pressão no leito obtida por simulação numérica utilizando os modelos de arrasto originais e ajustados de DF e SO. Ao comparar estes valores com os valores de queda de pressão da Tabela 4.2 para altura de leito de 0,3 m, vê-se que todos os modelos foram capazes de prever a queda de pressão no leito

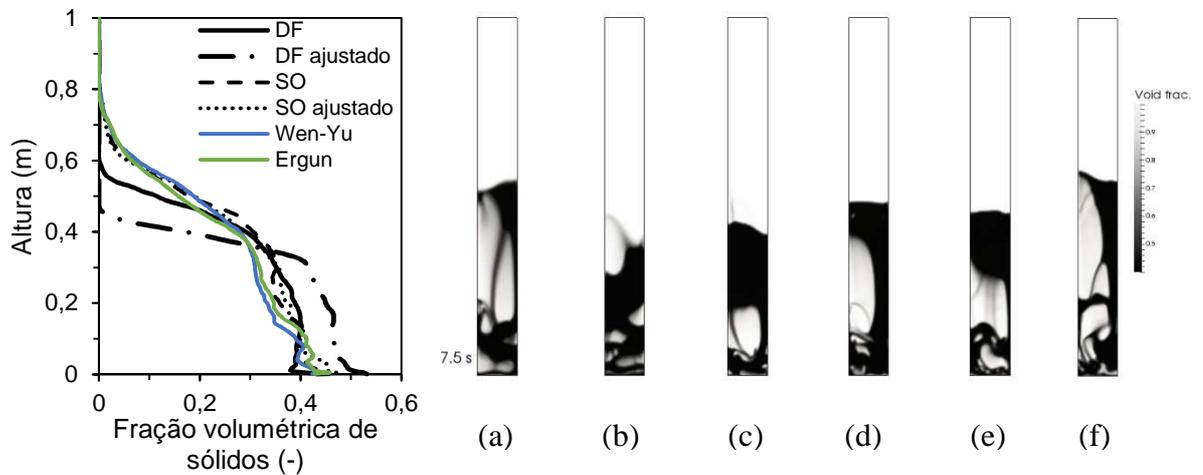
Tabela 4.6 – Queda de pressão entre os pontos 0 m e 0,9 m acima da base do leito

	Queda de pressão (<i>kPa</i>)			
	DF	DF Ajustado	SO	SO ajustado
AF1	4,201 ± 0,13	4,110 ± 0,05	4,173 ± 0,11	4,218 ± 0,01
EV2	4,020 ± 0,75	4,229 ± 0,06	3,991 ± 0,27	3,974 ± 0,31
EV3	4,207 ± 1,23	4,187 ± 1,22	4,080 ± 0,81	4,129 ± 0,97

Se compararmos a Figura 4.14 (c) com a Figura 4.19 (c) e a Figura 4.23 (c), vê-se que, para a partícula EV3, o modelo ajustado de DF se comporta de maneira semelhante, com altura de leito levemente superior no caso bidimensional (Figura 4.14 (a)), o que é uma boa característica, pois resultados bidimensionais tendem a prever em altura de leito maior. No entanto, o mesmo comportamento não é observado para a partícula EV2, para a qual o modelo bidimensional de DF (Figura 4.14 (b)) tem altura de leito bem superior aos modelos tridimensionais de DF e SO (Figura 4.19 (c) e Figura 4.23 (c), respectivamente).

Um comparativo entre os modelos de SO, DF, Wen-Yu e Ergun para a partícula EV3 é mostrado na Figura 4.27. Este comparativo mostra os resultados dos modelos bidimensionais e mostra que os modelos de DF fornecem menor altura de leito. Os resultados entre os modelos de SO, Wen-Yu e Ergun concordam bem entre si. Resultados de altura de leito menor para modelo de DF, tanto original quanto ajustado, eram esperados devido ao comportamento da função χ , cujos valores são menores que os originais para Reynolds intermediários, como no caso da simulação com as partículas EV2 e EV3, conforme mostra a Figura 4.8. (p. 23)

Figura 4.27 – Média temporal da fração de sólidos ao longo da altura e simulação com modelo de (a) DF original e (b) ajustado, (c) SO original e (d) ajustado, (e) Ergun e (f) Wen-Yu para partícula EV3 e velocidade $1,5 U_{mf}$.



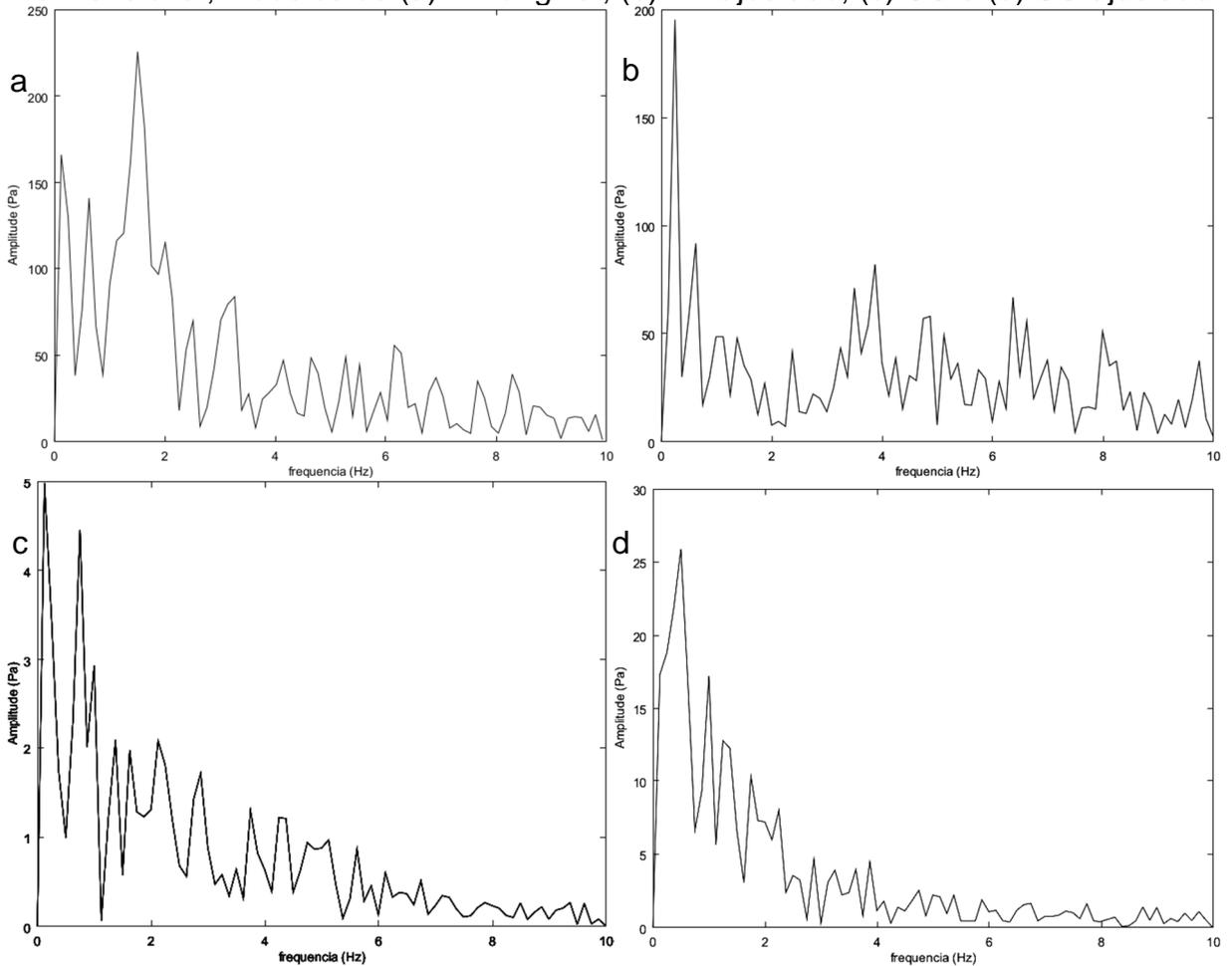
4.3.3.1 Análise espectral das simulações tridimensionais

Análise da flutuação da pressão dos resultados obtidos de modelos tridimensionais (utilizando Ansys Fluent) foi feita e seu resultados são mostrados a seguir

4.3.3.1.1 Análise espectral do resultado numérico referente à fluidização da Areia AF1

O resultado da transformada rápida de Fourier para partículas AF1 e os modelos de DF original e ajustado e SO original e ajustado são mostrados na Figura 4.28.

Figura 4.28 – Transformada rápida de Fourier para partícula AF1, resultado tridimensional, modelos de (a) DF original, (b) DF ajustado, (c) SO e (d) SO ajustado.



Analisando os espectros da Figura 4.28, as cinco frequências cujas as amplitudes são maiores estão identificadas e resumidas na Tabela 4.1. Os resultados do modelo de DF original e ajustado, Figura 4.28 (a) e (b), respectivamente, mostram uma amplitude máxima próxima de 250 Pa, porém a frequência na qual ocorrem é diferente; 1,5 Hz no modelo DF original e 0,25 Hz no ajustado.

Tabela 4.7 – Ordem crescente das frequências de maior amplitude para os resultados de flutuação de pressão da areia AF1 em modelo tridimensional.

	DF	DF Ajustado	SO	SO Ajustado
Frequência de maior sinal (Hz)	1,50	0,25	0,12	0,50
Frequência com segundo maior sinal (Hz)	0,12	0,62	0,75	1,00
Frequência com terceiro maior sinal (Hz)	0,62	3,87	1,00	1,25
Frequência com quarto maior sinal (Hz)	2,00	1,12	1,37	1,75
Frequência com quinto maior sinal (Hz)	3,25	3,50	2,12	2,25

As amplitudes dos resultados de DF mostram que o tamanho das bolhas obtida tanto para o modelo original quanto para o ajustado é semelhante, no entanto, a frequência de desprendimento de bolha do leito muda, como pode ser visto com o auxílio da Tabela 4.7.

Em comparação, a amplitude obtida por transformada rápida de Fourier dos resultados de pressão obtidos utilizando o modelo de arrasto de SO é muito baixa. De fato, a visualização da fluidização por meio da análise de pressão dos resultados de SO para a areia AF1 é muito difícil, sendo possível reconhecer que houve fluidização apenas do modelo ajustado somente por visualização transiente do leito; meio pelo qual era possível ver um borbulhamento esporádico e uma expansão do leito. Não houve fluidização utilizando o modelo original, como esperado ao analisar a Tabela 4.3, pois a velocidade utilizada para simulação ($1,5 U_{mf} = 0,10 \text{ m/s}$) é menor que a velocidade que o modelo de arrasto de SO prevê.

4.3.3.1.2 Análise espectral do resultado numérico referente à fluidização da esfera de vidro EV2

A transformada rápida de Fourier foi aplicada aos resultados de flutuação de pressão dos modelos tridimensionais para esfera de vidro EV2 para os modelos de SO e DF, tanto os originais quanto os ajustados. O gráfico dos resultados é apresentado na Figura 4.29.

Os resultados de flutuação de pressão utilizando os modelos de arrasto de DF (a) original e (b) ajustado têm amplitudes semelhantes, sendo o resultado da amplitude utilizando o modelo ajustado um pouco superior a 2500 Pa , enquanto que para o modelo original (a), próximo a 2000 Pa . A frequência de desprendimento de bolha com maior amplitude é de $2,62 \text{ Hz}$ e 2 Hz , para os modelos de DF original e ajustado, e $1,87 \text{ Hz}$ e $2,37 \text{ Hz}$, para SO original e ajustado, respectivamente. As cinco frequências com maior amplitude para os resultados de flutuação de pressão de cada modelo são apresentadas na Tabela 4.8.

Figura 4.29 – Transformada rápida de Fourier para partícula EV2, resultado tridimensional, modelos de (a) DF original, (b) DF ajustado, (c) SO e (d) SO ajustado.

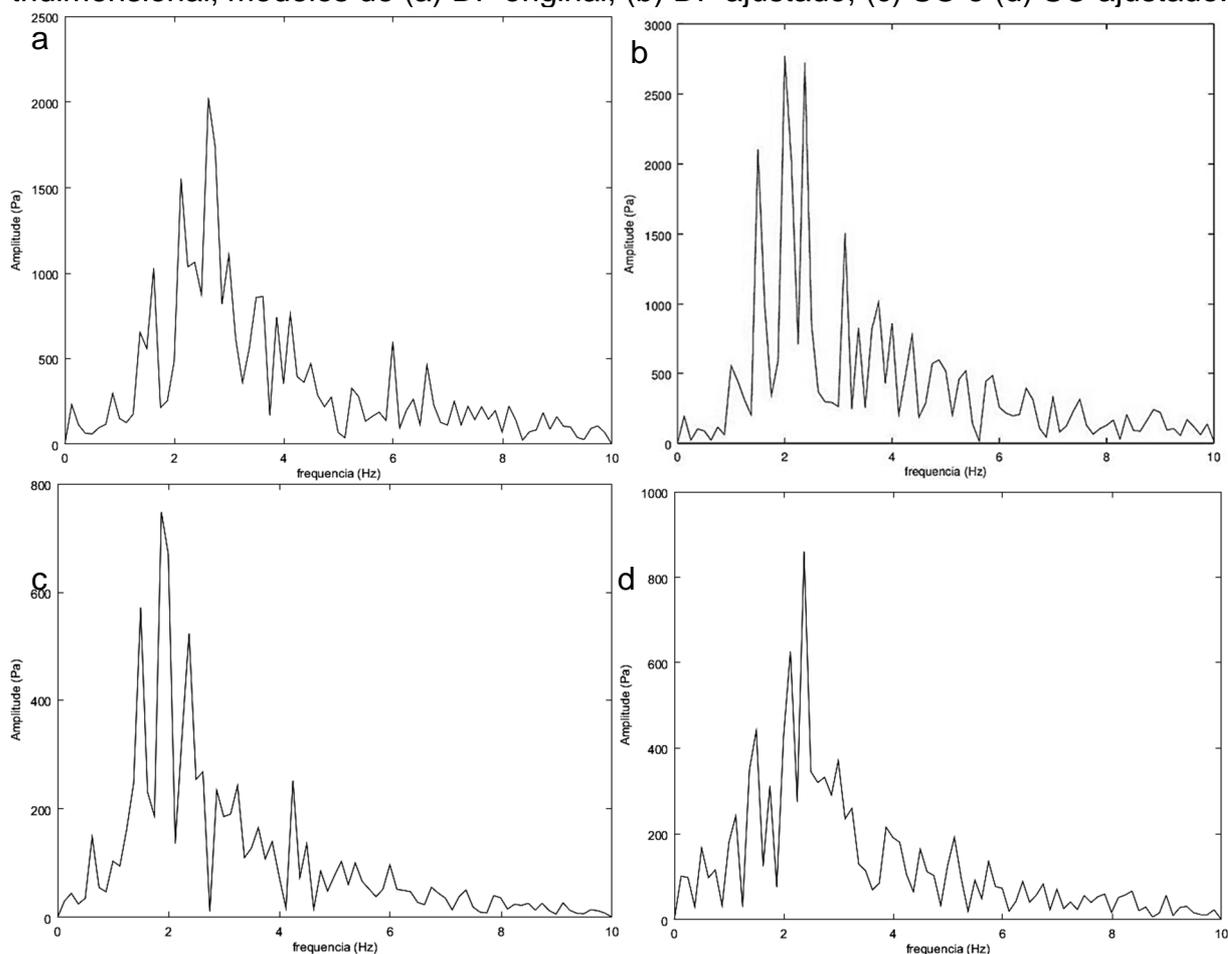


Tabela 4.8 – Ordem crescente das frequências de maior amplitude para os resultados de flutuação de pressão da areia EV2 em modelo tridimensional.

	DF	DF Ajustado	SO	SO Ajustado
Frequência de maior sinal (Hz)	2,62	2,00	1,87	2,37
Frequência com segundo maior sinal (Hz)	2,12	2,37	1,5	2,12
Frequência com terceiro maior sinal (Hz)	3,00	1,5	2,37	1,50
Frequência com quarto maior sinal (Hz)	1,62	3,12	2,62	3,00
Frequência com quinto maior sinal (Hz)	3,55	3,75	4,24	1,75

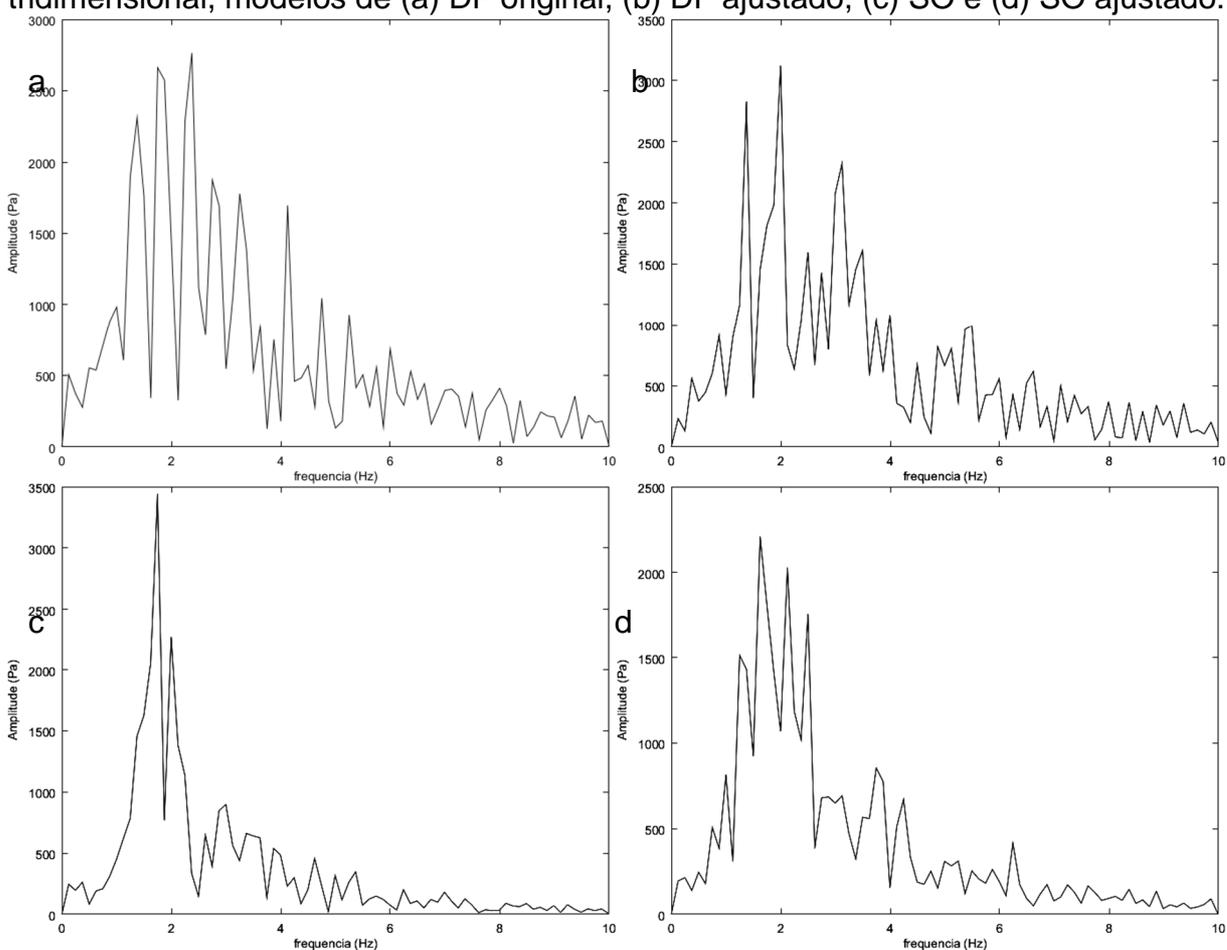
Em comparação com os resultados obtidos ao se utilizar o modelo de DF, os resultados utilizando o modelo de SO original e ajustado apresentam valores menores de amplitude de das flutuações de pressão, com resultados próximos a 950 Pa e levemente inferiores a 800 Pa quando utilizados os modelos original e ajustado, respectivamente.

Em comparação com os resultados da areia AF1, pode-se ver que tanto a frequência de desprendimento de bolha, quanto o tamanho das bolhas, inferido pela amplitude da flutuação, aumentam, ou seja, tem-se um borbulhamento maior e com bolhas maiores.

4.3.3.1.3 Análise espectral do resultado numérico referente à fluidização da esfera de vidro EV3

As transformadas rápidas de Fourier foram feitas para os resultados de flutuação de pressão dos modelos tridimensionais para esfera de vidro EV3 e os resultados são ilustrados na Figura 4.30.

Figura 4.30 - Transformada rápida de Fourier para partícula EV3, resultado tridimensional, modelos de (a) DF original, (b) DF ajustado, (c) SO e (d) SO ajustado.



Os resultados de flutuação de pressão têm os maiores valores de amplitudes entre aproximadamente 2200 Pa e 3500 Pa. A frequência de desprendimento de bolha

com maior amplitude é de 2,37 Hz e 2 Hz, para os modelos de DF original e ajustado, e 1,75 Hz, e 1,62 Hz para SO original e ajustado, respectivamente. As cinco frequências com maior amplitude para os resultados de flutuação de pressão de cada modelo são apresentadas na Tabela 4.9.

Tabela 4.9 – Ordem crescente das frequências de maior amplitude para os resultados de flutuação de pressão da areia EV3 em modelo tridimensional.

	DF	DF Ajustado	SO	SO Ajustado
Frequência de maior sinal (Hz)	2,37	2,00	1,75	1,62
Frequência com segundo maior sinal (Hz)	1,75	1,37	2,00	2,12
Frequência com terceiro maior sinal (Hz)	1,37	3,10	3,00	2,50
Frequência com quarto maior sinal (Hz)	2,75	3,50	3,37	1,25
Frequência com quinto maior sinal (Hz)	3,25	2,50	2,62	1,00

Em comparação com os resultados da esfera de vidro EV2, pode-se ver que a frequência de desprendimento de bolha, quanto o tamanho das bolhas, inferido pela amplitude da flutuação, são semelhantes, o que sugere que o regime de operação de ambos é similar. No entanto, vê-se que, com exceção dos resultados de flutuação do modelo original de SO (Figura 4.30 (a)), existe uma influência maior no sinal de maior frequência, sugerindo que há formação de maior quantidade de bolhas.

Ao comparar os resultados obtidos com todas as partículas, vê-se que os resultados dos modelos original e ajustado de DF comumente apresentam maior flutuação de pressão, em comparação com os modelos de SO, sugerindo formação de maior quantidade de bolhas.

4.4 RESULTADOS UTILIZANDO O MODELO EMMS/BUBBLING

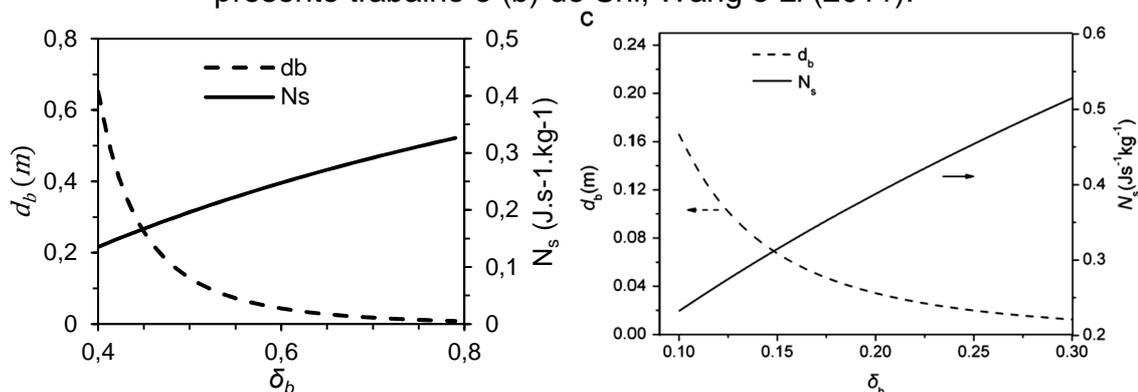
Este subtópico divide-se em verificação do código implementado, obtenção do índice de heterogeneidade, H_d , seguido pelos resultados numéricos utilizando modelo CFD TFM bidimensional com modelo de arrasto alterado por EMMS/bubbling.

4.4.1 Verificação do código EMMS/Bubbling implementado

Assim como no trabalho de Shi et al. (2011), o modelo prevê comportamento inverso do diâmetro de bolha, d_b , e da energia de suspensão das partículas, N_s ,

correspondendo ao maior diâmetro de bolha quando a energia de suspensão tem seu valor mínimo, conforme mostra comparativo Figura 4.31.

Figura 4.31 – Variação de N_s e d_b com a variável δ_b , fração da fase bolha do (a) presente trabalho e (b) de Shi; Wang e Li (2011).

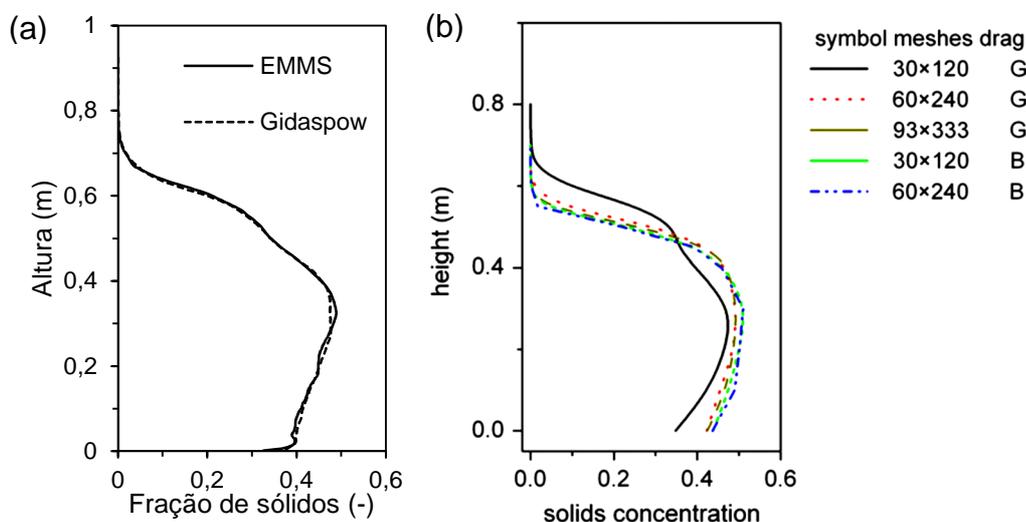


Foram realizadas simulações computacionais utilizando a curva obtida por Shi, Wang e Li (2011), conforme Equação (4.2). Observa-se que o limite de aplicação da Equação (4.2) é de ε_g variando entre ε_{mf} e 0.59, acima da qual o modelo de Gidaspow é utilizado.

$$H_d = 0,0066 \exp\left(\frac{\varepsilon_g}{0,112}\right) + 0,057 \quad (4.2)$$

Devido ao regime de operação simulado, os resultados referentes aos modelos EMMS/bubbling e Gidaspow tem resultados muito similares. No entanto, o gráfico de fração de sólidos em função da altura obtido por Shi, Wang e Li (2011) difere do gráfico obtido pelo presente trabalho, como ilustra a Figura 4.32.

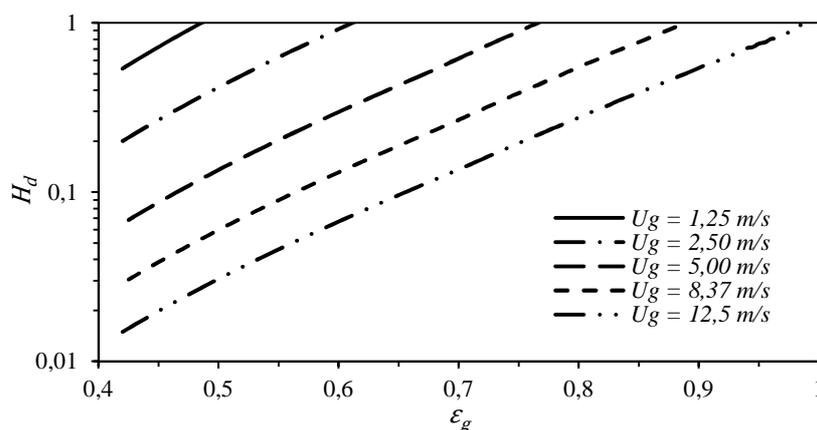
Figura 4.32 – Gráfico de fração volumétrica de sólidos pela altura para os modelos de Gidaspow (G) e EMMS (B) obtidos pelo (a) presente trabalho e (b) por Shi, Wang e Li (2011).



4.4.2 Índice de heterogeneidade, H_d

Utilizando a sequência de cálculo apresentada, pode-se traçar o gráfico de índice de heterogeneidade em função da porosidade. Observando a Figura 4.33, vê-se que o valor de H_d diminui com o aumento da velocidade, o que significa que os valores obtidos pelo modelo de arrasto EMMS/bubbling são menores que os valores obtidos pelo modelo de Wen-Yu. Valores acima de 1 são descartados e considerados iguais a 1, o que significa que sempre é utilizado o menor valor entre EMMS e Wen-Yu. Para valores de mínima fluidização o valor obtido também é de 1, segundo Shi, Wang e Li (2011).

Figura 4.33 – Valores de H_d em função de ε_g obtidos para partícula EV3



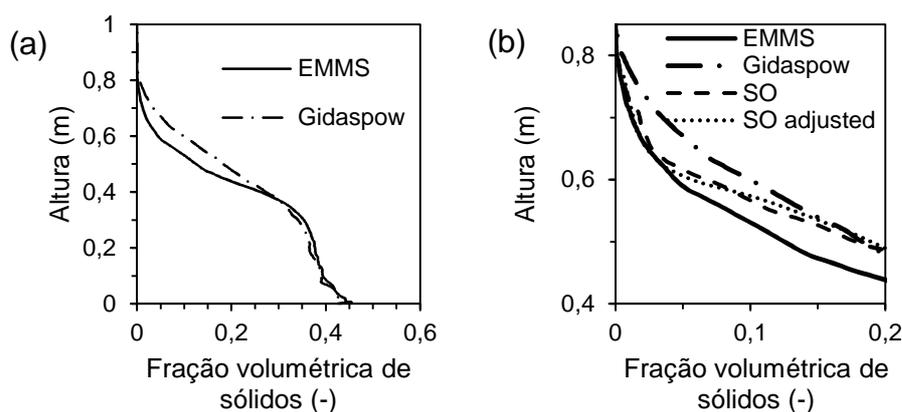
4.4.3 Resultados com modelo EMMS/bubbling

Dos valores da Figura 4.33, é obtida uma função de ajuste da velocidade 1,25 m/s , ou $1,5 U_{mf}$, que é apresentada pela Equação (4.3):

$$H_d = 0,004695 \exp\left(\frac{\varepsilon_g}{0,921855}\right) + 0,0921855 \quad (4.3)$$

Mesmo com valor de H_d , que corrige a equação de Gidaspow, próximo a 1 (i.e. nesta condição os modelos são muito próximos), para a partícula EV3 vê-se, na Figura 4.34, uma diferença mais nítida na região de desprendimento da bolha.

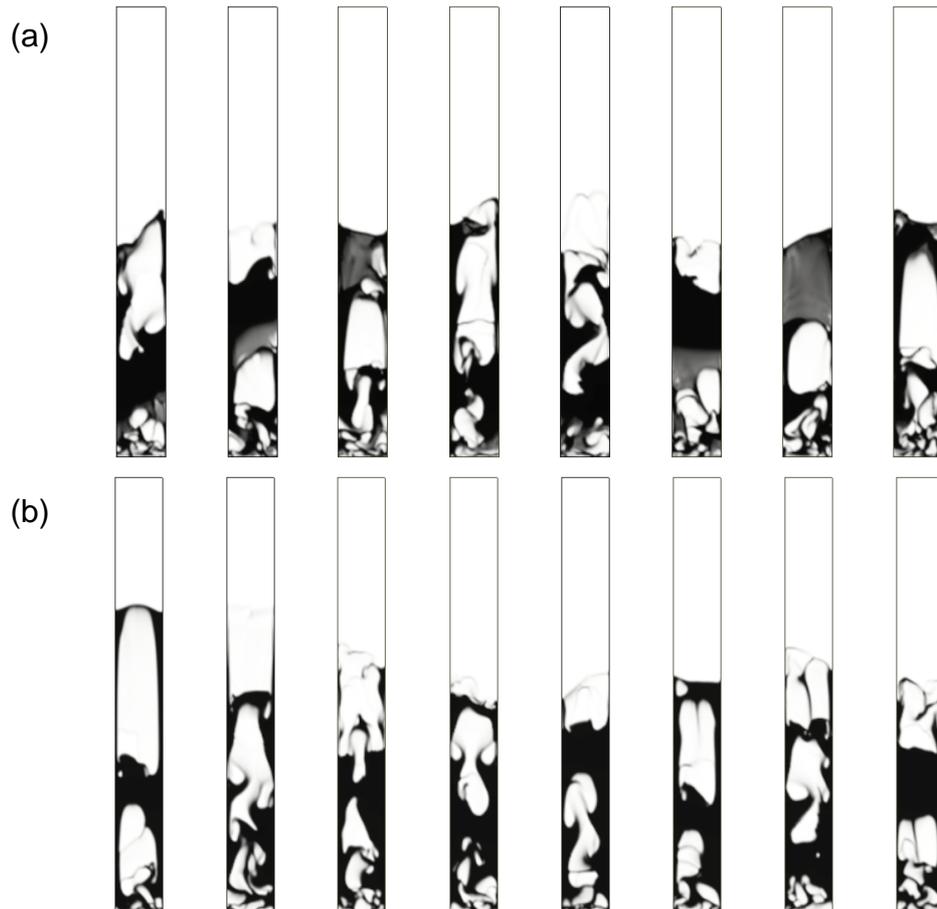
Figura 4.34 - Gráfico de fração volumétrica de sólidos pela altura para os modelos de Gidaspow e EMMS (a) mais SO original e ajustado (b), utilizando partícula EV3 e velocidade $1,5 U_{mf}$.



Ainda assim, os valores podem ser considerados bem próximos, mas é possível visualizar as diferenças entre os modelos por imagens instantâneas. Como uma única imagem é insuficiente para qualquer observação, uma sequência de imagens com intervalo de $0,2 s$ entre elas é mostrada na Figura 4.35, entre o intervalo de $8,6 s$ e $10 s$ de simulação. É possível verificar a existência de estruturas menores no modelo EMMS/bubbling em comparação com o modelo Gidaspow (que serve de base para o modelo EMMS/bubbling). Além disso, há a formação de uma região com fração de vazios intermediária entre as bolhas (fração de vazio igual a 1) e a emulsão (fração de vazios próxima a $\varepsilon_{g,mf}$). Esta região inexistente tanto nos resultados obtidos através do modelo de Gidaspow, quanto nos resultados de DF, SO, Wen-Yu e Ergun. Isto se explica pelo fato de que $H_d(\varepsilon_g)$ se aplica justamente nesta região intermediária e

diminui a força de arrasto do modelo de arrasto de Wen-Yu (aplicado dentro do modelo de Gidaspow), permitindo que haja a formação desta zona.

Figura 4.35 – Imagem do leito da partícula AF1 à velocidade de $0,55 \text{ m/s}$ com tempo entre $8,5$ e 10 s (intervalo de $0,2 \text{ s}$) para o modelo (a) EMMS e (b) Gidaspow.



5 CONCLUSÃO

Comparar o desempenho de 3 modelos de arrasto gás-sólido, utilizando dados experimentais de velocidade de mínima fluidização para ajuste, na simulação numérica de um leito fluidizado em regime borbulhante, empregando a modelagem de dois fluidos.

- Obter a velocidade mínima de fluidização de três partículas diferentes;
- Implementar o modelo EMMS/bubbling em código computacional para obtenção do modelo de arrasto;
- Ajustar os modelos de arrasto de Di Felice e de Syamlal e O'Brien utilizando dados de velocidade mínima de fluidização;
- Implementar em aplicativos, comerciais ou livres, de dinâmica dos fluidos computacional os modelos de arrasto de Di Felice e EMMS/bubbling;
- Comparar resultados experimentais com resultados de simulação numérica utilizando modelos ajustados e não ajustados.
- Comparar resultados experimentais com resultados de um modelo de arrasto EMMS.

Foram obtidos dados experimentais de velocidade de mínima fluidização e frações de vazios para três diferentes partículas, cujos resultados foram utilizados para ajuste dos modelos de SO e DF. Os modelos ajustados de SO e DF foram comparados aos originais quanto à perda de carga no leito, à fração de sólidos em função da altura, e à flutuação da pressão. Além disto, o modelo de arrasto de EMMS/bubbling, que altera o modelo de arrasto de Gidaspow para certas velocidades superficiais em função da fração de sólidos, foi utilizado e comparado ao modelo de Gidaspow.

Os dados obtidos nos ensaios de mínima fluidização se mostraram estáveis, porém, para alturas iniciais de leitos menores, os valores de velocidades de mínima fluidização obtidos foram menores, possivelmente, efeito do tipo de distribuidor e não homogeneidade da distribuição de ar. No entanto, as velocidades de mínima fluidização encontradas estão próximas às velocidades de mínima fluidização previstas pelos modelos e de dados de literatura, como Taghipour et al. (2005). O

método proposto de ajuste do modelo de DF representou bem os resultados experimentais obtidos em condição de mínima fluidização.

Nos modelos bidimensionais, as transições de leito fixo para leito borbulhante foram bem previstas pelos modelos ajustados de DF e SO. As três diferentes partículas foram essenciais para verificar a diferença entre os modelos uma vez que o modelo ajustado de SO para partícula EV3 é muito próximo do modelo original, enquanto que, para as propriedades da partícula AF1, os modelos original e ajustado de DF são muito próximos. Os resultados nos quais os parâmetros são ajustados, a expansão do leito foi menor e com menor quantidade de bolhas. Nos resultados bidimensionais para ambos os modelos de arrasto, em geral, apresentaram uma expansão de leito maior.

Os modelos bidimensionais e tridimensionais tiveram comportamentos diferentes tanto para o modelo de DF quanto para o modelo de SO.

Utilizando as mesmas condições descritas em Shi, Wang e Li. (2011), o modelo EMMS/bubbling apresentou pouca diferença se comparado ao modelo de Gidaspow que utiliza os modelos de Ergun e Wen-Yu, dependendo da fração de vazios, o que mostra que a influência do modelo EMMS/bubbling na faixa de operação do mesmo é pequena.

O trabalho utilizou baixas velocidade de fluidização, optando por utilizar $1.6 U_{mf}$ da partícula EV3, que é tipo D de Geldart. Também mostrou pouca diferença em comparação com o modelo de Gidaspow. No entanto, nota-se que na região de despreendimento da bolha a fração de vazios é alta e existe uma queda menos acentuada da fração volumétrica de sólidos com o modelo de Gidaspow, o que sugere que a força de arrasto nesta região é menor no modelo EMMS/bubbling.

Conclui-se, por fim, que o ajuste de modelos de arrasto gás-sólido existentes e o uso de modelagem multiescala podem afetar positivamente a qualidade das simulações numéricas de leitos fluidizados por CFD.

5.1 SUGESTÃO PARA TRABALHOS FUTUROS

- Analisar a previsão de outras velocidades características de transição de regime de fluidização para modelos ajustados.

- Comparar os resultados numéricos e experimentais quanto à frequência e tamanho de bolhas utilizando ferramentas para análise espectral,
- Analisar o desempenho dos modelos de arrasto gás-sólido ajustados em regime de fluidização com maiores velocidades superficiais do gás, como turbulento, pistonado e rápido.

REFERÊNCIAS

- AGRAWAL, K.; LOEZOS, P. N.; SYAMLAL, M.; SUNDARESAN, S. The role of meso-scale structures in rapid gas-solid flows. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 445, p. 151–185, 2001.
- ALBERTO, C; FELIPE, S; ROCHA, S. C. S.. Time series analysis of pressure fluctuation in gas-solid fluidized beds. **Brazilian journal of chemical engineering**. v. 21, n. 03, p. 497 - 507, 2004.
- BEHJAT, Y; SHAHHOSSEINI, S.; HASHEMABADI, S.H.. CFD modeling of hydrodynamic and heat transfer in fluidized bed reactors. **Int. Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 35, p. 357–368, 2008.
- 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; ARASTOOPOUR, H; KNOWLTON, T. M.; MASSAH, H.. Simulation of particles and gas flow behavior in the riser section of a circulating fluidized bed using the kinetic theory approach for the particulate phase. **Powder technology**, v.112, 2000.
- BIANCHI, Flávio. **Bancada De Leito Fluidizado Circulante A Frio: Experimentos E Análise De Dados**. Trabalho de Conclusão de Curso de Graduação em Engenharia Mecânica - Faculdade SATC, Criciúma, 2015.
- BREAULT, R. W.; GUENTHER, C. Wavelet analysis to characterize cluster dynamics in a circulating fluidized bed **Powder Technology**, v. 173, n. 3, p. 163-173, 2007.
- CHAPMAN, SYDNEY; COWLING, T.G. **The mathematical theory of non-uniform gases**: an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases. New York: Cambridge University Press, 3. ed, 1970.
- COLLOT, Anne-Gaëlle. Matching gasification technologies to coal properties. **International Journal of Coal Geology**, v. 65, p. 191-212, 2006.
- DALLA VALLE, J.M.. **Micromeritics**, London: Pitman, 1948.
- DI FELICE, R. The Voidage Function for Fluid-Particle Interaction Systems. **Intl. J. Multiphase Flow**, v. 20, p. 153-159, 1994.
- ERGUN, S. Fluid flow through packed columns. **Chemical Engineering Progress**, v. 48, p. 90–98, 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, n. 6, p. 375–386, 2011.
- GELDART, D., 1973. Types of gas fluidization. **Powder Technology**, v. 7, n. 5, p. 285–292, 1973.

GIDASPOW, Dimitri. **Multiphase Flow and Fluidization – Continuum and Kinetic Theory Descriptions**. London: Ed. Academic Press, 1994

GOLDRISCH, I. Introduction to granular temperature. **Powder Technology**, v. 182, n. 2, p. 130-136, 2008.

GOLDSCHMIDT, M. J. V.; KUIPERS, J. A. M., VAN SWAAIJ, W. P. M. Hydrodynamic modelling of dense gas-fluidised beds using the kinetic theory of granular flow: effect of coefficient of restitution on bed dynamics. **Chemical Engineering Science**, vol 56, p. 571-578, 2001.

GRACE, J. R., AVIDAN, A. A., KNOWLTON, T. M. **Circulating fluidized beds**. Londres: Blackie Academic & Professional, 1997

GRACE, J. R.; TAGHIPOUR, F., 2004. Verification and validation of CFD models and dynamic similarity for fluidized beds. *Powder Technology*, v. 139, n. 2, p. 99–110.

HARTGE, E; LI, Y; WERTHER, J. Flow Structure in Fast Fluidized Beds In: Ostergaard, K; Sorensen, A. **Fluidization V** New York: Ed. Eng. Foundation, p. 345-352, 1986.

HRENYA, C.M. Kinetic theory for granular material: Polydispersity. In : PANNALA, S; SYAMLAL, M; O'BRIEN, T. J.. **Computational Gas-Solid Flows and Reacting Systems: Theory, Methods and Practice**. Hershey: Engineering Science Reference, 2011.

KNOWLTON, T. M., S.B.R. KARRI, A. ISSANGA. Scale-up of fluidized bed hydrodynamics. **Powder Technology**, v.150, n. 2, p 72-77, 2005.

KUNII, Daizo; LEVENSPIEL, Octave. **Fluidization engineering**. 2. ed. Boston: Butterworth-Heinemann, 1991.

LI, J., TUNG, Y., & KWAIK, M., Energy transport and regime transition of particle–fluid two-phase flow. In P. Basu, & J. F. Large (Eds.), *Circulating fluidized bed technology II* (pp. 75–87). Oxford: Pergamon Press. 1988

LI, J.; KWAIK, M., Exploring complex systems in chemical engineering—The multi-scale methodology. **Chemical Engineering Science**, v. 58, p. 521–535, 2003.

LI, J; KWAIK, M. **Particle–fluid two-phase flow: The energy-minimization multi-scale method**. Beijing: Metallurgical Industry Press, 1994.

LI, Jinghai; GE, Wei; WANG, Wei; YANG, Ning; LIU, Xinhua; WANG, Limin; HE, Xianfeng; WANG, Xiaowei; WANG, Junwu; KWAIK, Mooson. *From Multiscale Modeling to Meso-Science*, Heidelberg: Springer-Verlag Berlin, 2013.

LI, T; POUATCH, K; SALCUDEAN, M; GRECOV, D. Numerical simulation of horizontal jet penetration in a three-dimensional fluidized bed. **Powder Technology**, v. 184, p. 89–99, 2008.

LUN C. K. K, SAVAGE S. B., JEFFREY D. J., CHEPURNIY N. Kinetic Theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield. **J. Fluid Mech**, v. 4, p. 223-256, 1984.

SHI, Z.; WANG, W.; LI, J.. Bubble-Based EMMS Model for Gas–Solid Bubbling Fluidization”, *Chemical Engineering Science*, vol. 66, no. 22, pp 5541-5555, 2011.

SILVA, Alonso Fabrício Oliveira. **Estudo da válvula Loop-Seal em um sistema operando com leito fluidizado circulante**. Trabalho de Conclusão de curso de Graduação em Engenharia Mecânica - Faculdade SATC, Criciúma, 2015.

SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T. J.. A Generalized drag correlation for multiparticle systems. **Morgantown Energy Technology Center DOE Report**, 1987.

SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T. J.. Simulation of granular layer inversion in liquid fluidized beds. **Int. J. Multiphase Flow**, v. 14, n. 4, p. 473-481, 1988.

SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T. J.. The derivation of a drag coefficient formula from velocity-voidage correlations. **Unpublished report**. April 1987.

SYAMLAL, M; PANNALA, S.. Multiphase continuum formulation for gas-solids reacting flows. In: PANNALA, S; SYAMLAL, M; O'BRIEN, T. J.. **Computational Gas-Solid Flows and Reacting Systems: Theory, Methods and Practice**. Hershey: Engineering Science Reference, 2011.

TAGHIPOUR, F.; ELLIS, N.; WONG, C.. Experimental and computational study of gas-solid fluidized bed hydrodynamics. **Chemical Engineering Science**, v. 60, n. 24, p. 6857–6867, 2005.

WEN, C. Y.; YU, Y. H.. A Generalized Method For Predict Minimum Fluidization Velocity. **AIChE Journal**, v. 12, n. 3, p. 610-612, 1966.

XIE, N.; BATAGLIA, F.; PANNALA, S.. Effects of using two- versus three-dimensional computational modeling of fluidized beds: part I, hydrodynamics. **Powder Technology**, p1-13, 2008.

YANG, Wen-Ching. Handbook of fluidization and fluid-particle systems. New York: CRC Press, 2003.

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

ZENIT, R.; HUNT, M.L.. Solid fraction fluctuations in solid–liquid flows. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 26, p. 763–781, 2000.

ZHANG, D. Z.; VANDERHEYDEN, W. B. The Effects Of Mesoscale Structures On The Macroscopic Momentum Equations For Two-Phase Flows. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 28, p. 805–822, 2002.

ZINANI, F.; PHILIPPSSEN, C. G.; INDRUSIAK, M. L. S. Numerical Study of Gas-Solid Drag Models in a Bubbling Fluidized Bed. **Particulate Science and Technology**,

2016. publicação on line disponível em:
<http://dx.doi.org/10.1080/02726351.2016.1192570>

APÊNDICE A - CALIBRAÇÕES

Calibração placa de orifício

A bancada foi entregue com as placas perfuradas calibradas. As equações de calibração para cada placa, juntamente com o coeficiente de correlação quadrático e a faixa de calibração seguem nas Tabelas A.1 e A.2.

Tabela A.1- Equações para as diferentes placas de orifício

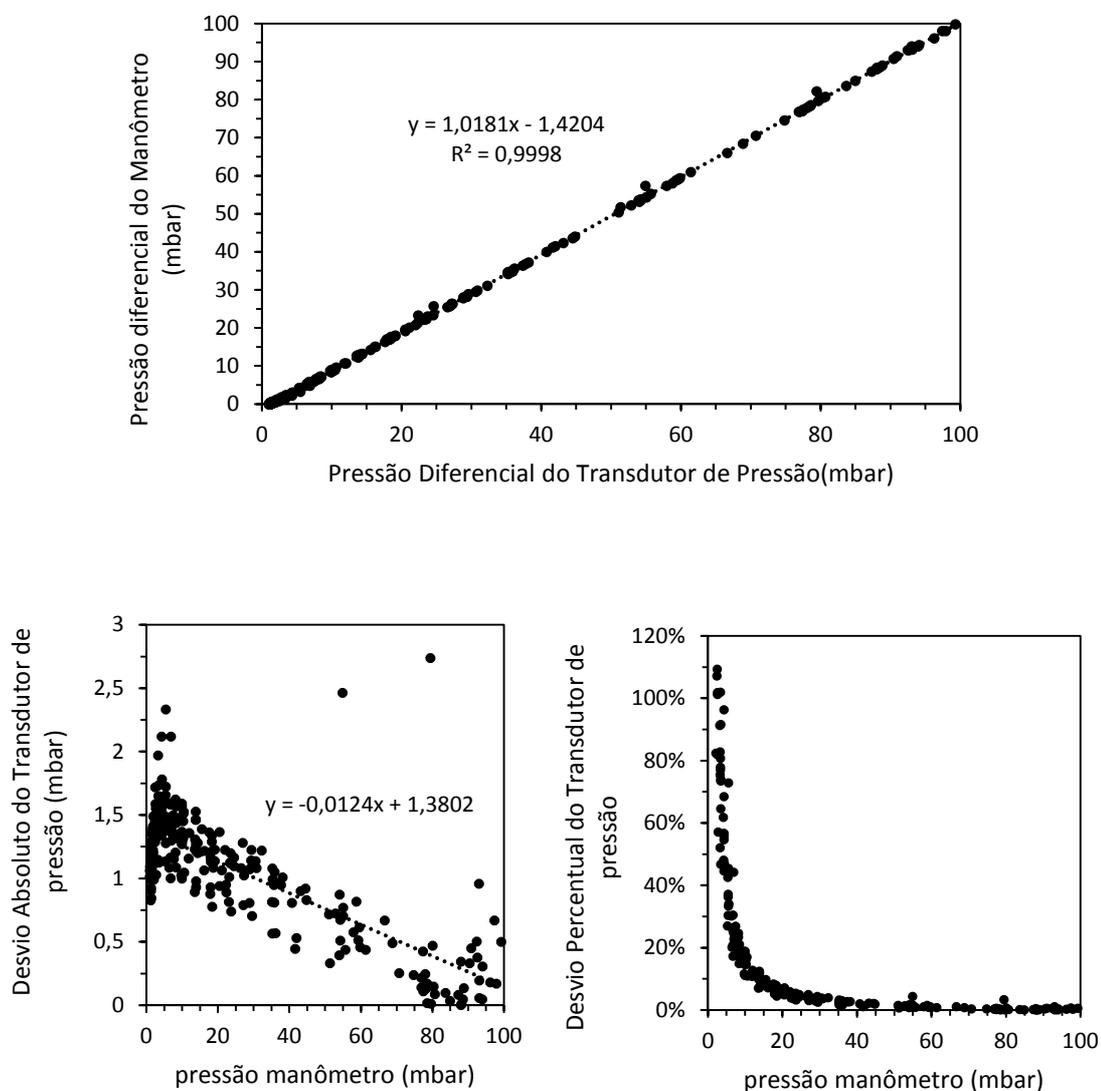
Placa	Equação
Placa de orifício de 5 <i>mm</i>	$Vazão = 17,22 \sqrt{\Delta P_{placa}} - 8,18$
Placa de orifício de 10 <i>mm</i>	$Vazão = 53,07 \sqrt{\Delta P_{placa}} + 7,135$
Placa de orifício de 20 <i>mm</i>	$Vazão = 211,9 \sqrt{\Delta P_{placa}} - 8,041$

Tabela A.2 – Parâmetros de aplicação das curvas de calibração

Tamanho do Orifício	Faixa de pressão	Unidade ΔP	Unidade da Vazão	R ²
5 mm	13,7 a 94,2	<i>mbar</i>	<i>l/min</i>	0,9935
10 mm	1,3 a 88,2	<i>mbar</i>	<i>l/min</i>	0,9996
20 mm	1,9 a 94	<i>mbar</i>	<i>l/min</i>	0,9978

Calibração Transdutor de Pressão 1

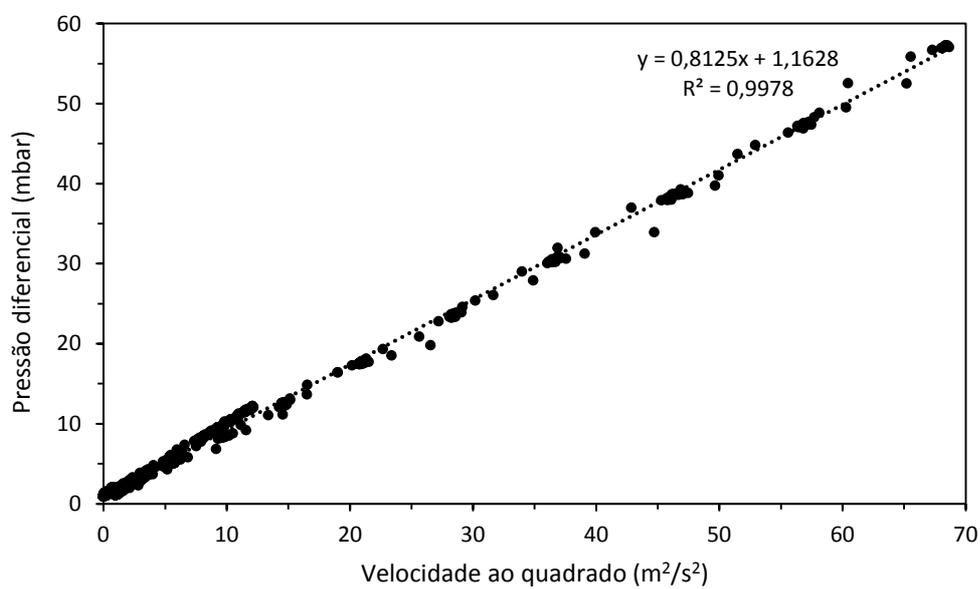
Figura A.1 - Gráfico de erro do transdutor comparado com o manômetro U: erro absoluto (esquerda) e erro percentual (direita)



Perda de carga no distribuidor

A perda de carga no distribuidor é dependente da velocidade, ou vazão, e para se obter a equação de calibração foram feitas três corridas de velocidade para cada placa de orifício (5, 10, 20 e 30 milímetros) para se obter a curva em função da velocidade ao quadrado.

Figura A.2 - Curva de calibração da perda de carga no distribuidor em função da velocidade ao quadrado.



APÊNDICE B – MATRIZ EXPERIMENTAL

TESTE	DIA	HORA INÍCIO	Material	Altura de leito (mm)	Placa (mm)	Massa (g)	Repetição
1	06/10/2015	14:48:00	EV3	300	20	4608	1
2	06/10/2015	15:56:00	EV3	300	20	4547	2
3	06/10/2015	16:51:00	EV3	299	20	4466	3
4	08/10/2015	14:40:00	EV3	200	20	2958	1
5	08/10/2015	15:36:00	EV3	200	20	2965	2
6	08/10/2015	16:55:00	EV3	200	20	2908	3
7	13/10/2015	14:11:00	EV3	201	20	2931	4
8	13/10/2015	15:26:00	EV3	100	20	1305	1
9	13/10/2015	16:21:00	EV3	105	20	1391	2
10	15/10/2015	14:06:00	EV3	101	20	1309	3
11	15/10/2015	15:04:00	EV3	105	10	1390	1
12	15/10/2015	15:50:00	EV3	100	10	1297	2
13	15/10/2015	16:52:00	EV3	101	10	1290	3
14	20/10/2015	15:48:30	EV2	300	10	4546	1
15	20/10/2015	16:47:00	EV2	300	10	4678	2
16	21/10/2015	14:43:30	EV2	300,5	10	4672	3
17	21/10/2015	16:21:30	EV2	201	10	3095	1
18	21/10/2015	17:05:00	EV2	205	10	3244	2
19	22/10/2015	13:59:30	EV2	205	10	3188	3
20	22/10/2015	14:53:00	EV2	202	10	3147	4
21	22/10/2015	15:53:00	EV2	99,5	10	1322	1
22	22/10/2015	16:47:30	EV2	106	10	1482	2
23	23/10/2015	08:35:00	EV2	100	10	1359	3
24	23/10/2015	09:34:00	EV2	300,5	10	4415	4
25	27/10/2015	15:23:00	AF1	304	5	4876	1
26	27/10/2015	16:49:00	AF1	298	5	4595	2
27	03/11/2015	15:35:00	AF1	299,75	5	4911	3
28	03/11/2015	16:48:30	AF1	209	5	3314	1
29	05/11/2015	09:32:00	AF1	211	5	3416	2
30	05/11/2015	10:34:30	AF1	210	5	3406	3
31	05/11/2015	14:00:00	AF1	199	5	3175	4
32	05/11/2015	15:04:00	AF1	99	5	1349	1
33	05/11/2015		AF1	101	5	1421	2
34	05/11/2015	16:43:00	AF1	99	5	1403	3

APÊNDICE C – CÓDIGO DO MODELO DE DI FELICE

MFIX

```

SUBROUTINE DRAG_USR(IJK, M_NP, lDgA, EPg, Mug, ROg, VREL, DPM,
&
    ROs, lUg, lVg, lWg)

    USE param
    USE param1

    use constant, only: PSI_s => C
    use constant, only: GRAVITY
! Fluid cell I, J, K, IJK containing particle and phase
    use discretelement, only: PIJK

    use error_manager

    IMPLICIT NONE

! Index of fluid cell:
    INTEGER, INTENT(IN) :: IJK
! TFM SOLIDS --> Index of phase (M)
! DES SOLIDS --> Index of particle (NP); M = PIJK(NP,5)
    INTEGER, INTENT(IN) :: M_NP

! drag coefficient
    DOUBLE PRECISION, INTENT(OUT) :: lDgA
! gas volume fraction
    DOUBLE PRECISION, INTENT(IN) :: EPg
! gas laminar viscosity
    DOUBLE PRECISION, INTENT(IN) :: Mug
! gas density
    DOUBLE PRECISION, INTENT(IN) :: ROg
! Magnitude of gas-solids relative velocity
    DOUBLE PRECISION, INTENT(IN) :: VREL
! particle diameter of solids phase M or
! average particle diameter if PCF
    DOUBLE PRECISION, INTENT(IN) :: DPM
! particle density of solids phase M
    DOUBLE PRECISION, INTENT(IN) :: ROs
! Reynolds Numbers Res
    DOUBLE PRECISION :: RE
! Expoente x
    DOUBLE PRECISION :: x
!Voidage function f(epg)
    DOUBLE PRECISION :: f
! fluid velocity components:
! o TFM: Averaged from faces to cell center
! o DES: Interpolated to the particle's position
    DOUBLE PRECISION, INTENT(IN) :: lUg, lVg, lWg

! Drag correlation.
    ! DOUBLE PRECISION :: C_d

```

```

DOUBLE PRECISION, EXTERNAL :: C_DSXRE_DV

! Phase index
INTEGER :: M

! Get the particle phase index.

IF(Mug > 0) THEN
    RE = DPM*VREL*ROg/Mug
ELSE
    RE = 1e32
ENDIF
M = PIJK(M_NP,5)

x = -3.72+1.23*exp(-0.5*(1.5-log10(Re*EPg)**2))
f = EPg**x

ldgA = 0.75 * C_DSXRE_DV(RE) *Mug *f / (EPg*DPM**2)

RETURN
END SUBROUTINE DRAG_USR

```

FLUENT

```

#include "udf.h"

DEFINE_EXCHANGE_PROPERTY(udf_DF_3D,cell,mix_thread,s_col,f_col){

Thread *thread_g, *thread_s;
double abs_v, slip_x, slip_y, x_vel_g,x_vel_s,y_vel_g, y_vel_s,
z_vel_g, z_vel_s, slip_z,
rho_g, rho_s, mu_g, mu_e, reyp, Res,Cd,X,vof_g, vof_s, k_g_s, diam2;

/* find the threads for the gas (primary) */
/* and solids (secondary phases) */

thread_g = THREAD_SUB_THREAD(mix_thread, s_col);/* gas phase */
thread_s = THREAD_SUB_THREAD(mix_thread, f_col);/* solid phase*/

/* find phase velocities and properties*/
x_vel_g = C_U(cell, thread_g);
y_vel_g = C_V(cell, thread_g);
z_vel_g = C_W(cell, thread_g);

x_vel_s = C_U(cell, thread_s);
y_vel_s = C_V(cell, thread_s);
z_vel_s = C_W(cell, thread_s);

```

```

slip_x = x_vel_g - x_vel_s;
slip_y = y_vel_g - y_vel_s;
slip_z = z_vel_g - z_vel_s;

rho_g = C_R(cell, thread_g);
rho_s = C_R(cell, thread_s);

mu_g = C_MU_L(cell, thread_g);

diam2 = C_PHASE_DIAMETER(cell, thread_s);

vof_g = C_VOF(cell, thread_g); /* gas vol frac*/
vof_s = C_VOF(cell, thread_s); /* particle vol frac*/

/*compute slip*/
abs_v = sqrt(slip_x*slip_x + slip_y*slip_y + slip_z*slip_z);

/*compute Reynold's number*/

reyp = rho_g*abs_v*diam2/mu_g;

/* compute particle relaxation time */

Res = vof_g * (reyp)+1e-64;
  if (mu_g <= 0){ Res = 1e64; }

Cd=pow((0.63+4.8*sqrt(1/Reyp)),2);

X = 3.72-1.23*exp(-0.5*pow(1.5-log10(Res),2));

/* Di Felice Model */
k_g_s = 0.75*Cd*vof_s*rho_g*abs_v/diam2*pow(vof_g,-X);

return k_g_s;
}

```

APÊNCIDE D – MODELO EMMS/BUBBLING

```

using namespace std;

int main()
{
    cout << "#####" << endl;
    cout << "# Program EMMS/bubbling Scheme 3          #" << endl;
    cout << "# Author : D. Kesting Year: 2016              #" << endl;
    cout << "# NCEL - CTCL - SATC - Criciuma - Brazil        #" << endl;
    cout << "# Ref: Shi, Wnag, Li (2011)                      #" << endl;
    cout << "# Chem. Eng. Sci. 66. pp 5541-5555              #" << endl;
    cout << "# A bubble-based model for gas-solid bubbling fluidization #" << endl;
    cout << "#####" << endl;

    double abs_v, slip_x, slip_y, Teste,x_vel_g,x_vel_s,y_vel_g, y_vel_s,
    rho_g, rho_s, mu_g, mu_e, reyp, Res,vof_g, vof_s, k_g_s, diam2,U_s, U_g, N_s1, N_s, delta_b,
    delta_b1,
    delta_bask, a_bask, b_bask, c_bask, U_se, rho_e, rho_e1, C_b, sig_2, a_b,a_b1, a_e, U_pe, U_ge,
    U_b, U_e, GRAVITY,
    U_sb, Cd_b0, Cd_b, f_b, U_ge1, U_pe1, U_b1, d_b2, Ep_e1, Ep_g, Ep_g1, Ep_mf, Ep_e, Ep_b,
    Cd_e, Cd_wy, H_d, beta_wy;

    GRAVITY = 9.8;
    /* find phase velocities and properties*/
    x_vel_g = 0; //C_U(cell, thread_g);
    y_vel_g = 10*0.837; //C_V(cell, thread_g);

    U_g = sqrt(x_vel_g*x_vel_g+y_vel_g*y_vel_g);

    x_vel_s = 0; // C_U(cell, thread_s);
    y_vel_s = 0.; // C_V(cell, thread_s);

    U_s = sqrt(x_vel_s*x_vel_s+y_vel_s*y_vel_s);

    slip_x = x_vel_g - x_vel_s;
    slip_y = y_vel_g - y_vel_s;

    rho_g = 1.18;
    rho_s = 2490;

    mu_g = 1.85e-5;

    diam2 = 1.216e-3;

    /*compute slip*/
    abs_v = sqrt(slip_x*slip_x + slip_y*slip_y);

    /*compute Reynold's number*/

    reyp = rho_g*abs_v*diam2/mu_g;

```

```

vof_g = 0.5;
vof_s = 0.5; // particle vol frac
Ep_g = vof_g;

Ep_b = 1; //gas frac of bubble
a_e = 0;

/*EMMS_Bubbling*/
Ep_mf = 0.42;
N_s1 = 1e300;
int i1, i2;
i1 = 0;

// Open file to print data and print header
FILE *fp;
fp = fopen ("EMMS_bubbling_S3.csv", "w");
fprintf (fp,"Ep_g ; H_d\n");
//File will be closed in the end of file and data will be printed on loop for Ep_g, after loop of Ep_e

// Print on Screen
cout << "EP_g " << "H_d" << endl;

//Do loop for Ep_g from E_mf to 1
for(Ep_g=Ep_mf;Ep_g<1;Ep_g=Ep_g+0.005) // 0.01
{

        // Do loop for Ep_e from E_mf to Ep_g

for(Ep_e=Ep_mf;Ep_e<Ep_g;Ep_e+=0.005) // 0.01
{

        // If it enters an endless loop this statement makes it goes to the end1
        i2= i2+1;
        if (i2<2)
        {
                cout << "Exceeded loop for Ep_e " << endl;
                cout << " Ep_e = " << Ep_e << endl;
                cout << "delta_b = " << delta_b << endl;
                cout << "N_s = " << N_s1 << endl;
                //return 10;
        } //limit of loop

rho_e=rho_s*(1-Ep_e)+rho_g*Ep_e; // eq. (1)
mu_e = mu_g*(1+2.5*(1-Ep_e)+10.05*pow(1-Ep_e,2)+0.00273*exp(16.6*(1-Ep_e)));
// U_e = (rho_g*U_ge+rho_s*U_pe)/(rho_s*(1-Ep_e)+rho_g*Ep_e);
// U_sb = (U_b-U_e)*(1-delta_b);

//Calculate U_se through Baskara eq. (19)
delta_b = (Ep_g-Ep_e)/(1-Ep_e); //eq. (21)

a_bask = 1.75*rho_g/(pow(Ep_e,3)*diam2);
b_bask = 150*(1-Ep_e)*mu_g/(pow(Ep_e,3)*pow(diam2,2));
c_bask = -(GRAVITY+a_e)*(rho_s-rho_g);
delta_bask = pow(b_bask,2)-4*a_bask*c_bask; /* because of the values of a b and c. delta is
never negative*/

```

```

U_se = (-b_bask+sqrt(delta_bask))/(2*a_bask); /*analysis of pos n neg discard other results*/

C_b = 0.5*(1+2*delta_b)/(1-delta_b); //eq (24)
sig_2 = pow(1-Ep_g,2)*pow(Ep_g,4)/(1+4*(1-Ep_g)+4*pow(1-Ep_g,2)-4*pow(1-Ep_g,3)+pow(1-
Ep_g,4)); //eq (25)
a_b = (sig_2*(rho_s-rho_g)*GRAVITY)/(C_b*(1-Ep_e)*delta_b*rho_e)+a_e; //eq (26)
U_pe=U_s/(1-delta_b); //eq (14)
U_ge = U_se+U_pe*Ep_e/(1-Ep_e); // From U_se definition at table 1
U_b = (U_g-U_ge*(1-delta_b))/delta_b; //eq. (13)
U_e = (rho_g*U_ge+rho_s*U_pe)/(rho_s*(1-Ep_e)+rho_g*Ep_e); //eq (3)
U_sb = (U_b-U_e)*(1-delta_b); //U_sb definition at table 1

f_b = delta_b*Ep_b/(delta_b*Ep_b+(1-delta_b)*Ep_e); //eq. (8)
Cd_e = 200*(1-Ep_e)*mu_g/(pow(Ep_e,3)*diam2*rho_g*U_se)+7/(3*pow(Ep_e,3)); // Table (1)
// Cd_e = 4/3*diam2*(rho_s-rho_g)*GRAVITY/(rho_g*pow(U_se,2)); //eq (10)
N_s = 0.75*Cd_e*rho_g*pow(U_se,2)*U_ge/(rho_s*diam2) +f_b*U_g*(GRAVITY+a_b); //Ns is
the objective function to be minimized

//store values if the N_s is less than previous N_s

        if (N_s > 0 && N_s < N_s1)
        {
            N_s1 = N_s;
            U_ge1 = U_ge;
            U_pe1 = U_pe;
            delta_b1 = delta_b;
            U_b1 = U_b;
            Ep_e1 = Ep_e;
            a_b1 = a_b;
            rho_e1= rho_e;
            Ep_g1 = Ep_g;
        }

/* Just looking for bugs

        cout << " " << abs_v << " " << slip_x << " " << slip_y << " " <<
x_vel_g << " " << x_vel_s << " " << y_vel_g << " " << y_vel_s << " " <<
rho_g << " " << rho_s << " mu_g " << mu_g << " mu_e " << mu_e << " " << reyp << " " << Res << "
" << vof_g << " " << vof_s << " " << k_g_s << " " << diam2 << " U_s " << U_s << " U_g " << U_g << " N_s1 " <<
N_s1 << " N_s " << N_s << " delta_b " << delta_b << " delta_b1 " << delta_b1 << " " <<
delta_bask << " a_bask " << a_bask << " b_bask " << b_bask << " c_baks " << c_bask << " U_se " <<
U_se << " rho_e " << rho_e << " 1 " << rho_e1 << " C_b " << C_b << " sig_2 " << sig_2 << " a_b " << a_b <<
" 1 " << a_b1 << " a_e " << a_e << " U_pe " << U_pe << " U_ge " << U_ge << " U_b " << U_b << " U_e " <<
U_e << " g " << GRAVITY << " U_sb " <<
U_sb << " Cd_b0 " << Cd_b0 << " Cd_b " << Cd_b << " f_b " << f_b << " U_ge1 " << U_ge1 << " U_pe1 " <<
U_pe1 << " U_b1 " << U_b1 << " Ep_e1 " << Ep_e1 << " EP_g " << Ep_g << " EP_mf " << Ep_mf << " Ep_e
" << Ep_e << " Ep_b " << Ep_b << " Cd_e " << Cd_e << endl;
        cout << endl;

*/

    } //end of "Do loop for Ep_e from E_mf to Ep_g "

Res = reyp*Ep_g;

```

```

k_g_s = (Ep_g*Ep_g/abs_v)*((1-delta_b1)*(1-Ep_e1)*(rho_s-rho_g)*(GRAVITY+a_e) +
delta_b1*(rho_e1-rho_g)*(GRAVITY+a_b1));

if (Res>=1000)
{
Cd_wy = 0.44;
}
else
{
Cd_wy = 24/Res*(1+0.15*pow(Res,0.687));
}
beta_wy = 0.75*Cd_wy*rho_g*Ep_g*(1-Ep_g)*abs_v*pow(Ep_g,-2.65)/diam2;

H_d= k_g_s/beta_wy;

//Salva Dados em arquivo/**
if (fp == NULL)
{
printf ("Houve um erro ao abrir o arquivo.\n");
return 10;
}
fprintf (fp,"%f %s %f\n", Ep_g, ";",H_d);
/**Fim de "Salvar Dados"

//Print data on screen

cout << Ep_g << " " << H_d << endl;
//recalculate Values of minimum N_s for new Ep_g value
N_s1 = 40000;
U_ge1 = 0;
U_pe1 = 0;
delta_b1 = 0;
U_b1 = 0;
Ep_e1 = 0;
a_b1 = 0;
rho_e1 = 0;
Ep_g1 = 0;
}
//end of "Do loop for Ep_g from E_mf to 1"

fclose (fp);
return k_g_s;
}

```