

UNESP  **UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA**
“JÚLIO DE MESQUITA FILHO”
CAMPUS DE GUARATINGUETÁ

CARLOS MANUEL ROMERO LUNA

Guaratinguetá
2013

CARLOS MANUEL ROMERO LUNA

**ESTUDO NUMÉRICO DE MODELOS DE ARRASTO E DO COEFICIENTE DE
RESTITUIÇÃO NO ESCOAMENTO GÁS-SÓLIDO EM LEITO FLUIDIZADO**

Tese apresentada à Faculdade de Engenharia
do Campus de Guaratinguetá, Universidade
Estadual Paulista, para a obtenção do título
de Doutor em Engenharia Mecânica na área
de Transmissão e Conversão de Energia.

Orientador: Prof. Dr. Luiz Roberto Carrocci

Guaratinguetá
2013

R763e	Romero Luna, Carlos Manuel Estudo numérico de modelos de arrasto e do coeficiente de restituição no escoamento gás-sólido em leito fluidizado / Carlos Manuel Romero Luna – Guaratinguetá : [s.n], 2013. 156 f : il. Bibliografia: f. 147 Tese (doutorado) – Universidade Estadual Paulista, Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, 2013. Orientador: Prof. Dr. Luiz Roberto Carrocci 1. Escoamento bifásico 2. Leito fluidizado 3. Análise numérica I. Título CDU 532.546(043)
-------	---

CARLOS MANUEL ROMERO LUNA

ESTA TESE FOI JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
“DOUTOR EM ENGENHARIA MECÂNICA”

PROGRAMA: ENGENHARIA MECÂNICA
ÁREA: TRANSMISSÃO E CONVERSÃO DE ENERGIA

APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO


Prof. Dr. Edson Cocchiari Botelho
Coordenador

BANCA EXAMINADORA:


Prof. Dr. LUIZ ROBERTO CARROCCI
Orientador / UNESP/Feg


Prof.ª Dr.ª IVONETE ÁVILA
UNESP/Feg


Prof. Dr. MAURICIO ZANANRDI ARAUJO
UNESP/Feg


Prof. Dr. VALESKA ALVES CORREA
UNITAU


Prof. Dr. MARCO ANTONIO ROSA DO NASCIMENTO
UNIFEI

Novembro de 2013

DADOS CURRICULARES

CARLOS MANUEL ROMERO LUNA

NASCIMENTO	31.10.1983 – HUACHO / LIMA / PERÚ
FILIAÇÃO	Victor Manuel Romero Rodriguez Dora Elena Luna Quiroz
2000/2004	Curso de Graduação em Engenharia Química, na Universidad Nacional Jose Faustino Sanchez Carrión.
2007/2009	Curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, nível de Mestrado, na Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá da Universidade Estadual Paulista.
2009/2013	Curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, nível de Doutorado, na Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá da Universidade Estadual Paulista.

A minha mãe Elena, meu pai Victor, meu irmão Sergio e de modo especial, a Gretta pelo amor, companhia e apoio, ao longo destes anos.

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar agradeço a Deus, fonte da vida e da graça. Agradeço pela minha vida, minha inteligência, minha família e meus amigos,

pela força, coragem e perseverança em tudo o tempo que levou a culminação do trabalho.

ao meu orientador, *Prof. Dr. Luiz Roberto Carrocci* pela amizade, paciência e apoio. Sem seu auxílio, motivação e sabedoria o estudo aqui apresentado seria praticamente impossível.

a *Gretta* por tudo o amor, apoio e compreensão no desenvolvimento deste trabalho.

aos meus pais *Victor e Elena*, por tudo o apoio ao meus estudos, apesar da distância o carinho sempre manteve-se presente na minha mente e no meu coração.

às funcionárias da Biblioteca do Campus de Guaratinguetá pela dedicação, presteza e principalmente pela vontade de ajudar,

ao pessoal da seção de pós-graduação pela disposição e alegria no atendimento,

aos meus amigos da pós-graduação *Edgar, Andrés, Christian, Justo e Juan* e pelo apoio e companheirismo.

a *Meire* pelo experiência compartilhada.

aos Professores *Ivonete, Perrella, e Mauricio*, assim como aos membros da banca, pelas oportunas observações feitas ao trabalho, as quais conseguiram melhorar a qualidade do material.

e a todas as pessoas que de alguma forma contribuíram com a realização deste trabalho (Gracias).

À CAPES pelo auxílio financeiro através da bolsa de doutorado.

“La imaginación es más importante que el conocimiento”

Albert Einstein

LUNA, C. M. R. **Estudo numérico de modelos de arrasto e do coeficiente de restituição no escoamento gás-sólido em leito fluidizado**. 2013. 156f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2013.

RESUMO

O leito fluidizado é uma importante operação unitária de grande interesse na indústria química, geração de energia, extração e refino do petróleo, entre outros. As muitas aplicações do leito fluidizado na indústria e a demanda constante de melhorias na eficiência do processo de fluidização, tem produzido um aumento no número de trabalhos envolvendo simulações numéricas do escoamento gás-sólido em leito fluidizado através de CFD. Na simulação numérica, ainda não existe consenso na seleção de um modelo de arrasto e na definição de um valor adequado para o coeficiente de restituição. Nesta tese investiga-se a influência de diferentes modelos de arrasto e do coeficiente de restituição; sobre a fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em leito fluidizado, através de simulações numéricas. Para isto é usado um modelo baseado na abordagem Euleriana-Euleriana considerando um leito fluidizado bidimensional, o qual será resolvido usando o código livre MFIX. Para avaliar os modelos de arrasto, os resultados numéricos são validados por meio da determinação dos dados experimentais de Taghipour et al. (2005), o qual apresenta parâmetros de projeto de leito fluidizado, tais como a queda de pressão, expansão do leito, velocidade mínima de fluidização e distribuição das fases. Estudou-se também o efeito do coeficiente de restituição sobre a fluidodinâmica do escoamento, através do desenvolvimento de uma correlação em função da fração de vazio. Os resultados demonstram que o modelo de arrasto têm uma influência muito grande na determinação das variáveis de projeto de leito fluidizado. No estudo, um grupo de modelos representam adequadamente a fluidodinâmica, sendo que o modelo de arrasto de Gidaspow (1994) foi o que mais se aproximou aos resultados experimentais. Foram desenvolvidas simulações considerando o coeficiente de restituição como uma função da fração de vazio usando o modelo de Gidaspow (1994). Os resultados demonstraram uma melhora na previsão do perfil de fração de vazio.

PALAVRAS-CHAVE: Modelos de arrasto, coeficiente de restituição, escoamento gás-sólido, leito fluidizado.

LUNA, C. M. R. **Numerical study of drag models and restitution coefficient in gas-solid flow in fluidized bed.** 2013. 156f. Thesis (Doctorate in Mechanical Engineering) - Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2013.

ABSTRACT

Fluidized bed is an important unit operation of great interest in petroleum, chemical, metallurgical and energy industries. The large number of applications of fluidized bed in the industry and constant demand for improvements in the efficiency of the fluidization process, has produced an increase in the number of studies involving numerical simulations of gas-solid flow in fluidized bed through CFD. In numerical simulation, there is not yet an agreement on the selection of a drag model and in defining a suitable value for the coefficient of restitution. The purpose of this work was to study the influence of different drag models and restitution coefficient on the hydrodynamics of gas-solid flow in fluidized-bed, through numerical simulations. It is used a model based on the Eulerian-Eulerian approach considering a two-dimensional fluidized bed, which will be resolved using the open source MFIX code. To evaluate drag models, numerical results will be validated through the determination of the experimental data of Taghipour et al. (2005), which presents fluidized bed design parameters, such as fluidization curve, bed expansion, minimum fluidization velocity and void fraction profiles. It was also studied the effect of restitution coefficient on the hydrodynamics, through the development of a correlation in function of void fraction. The results demonstrated that drag model have an great influence in fluidized bed design parameters determination. In this study, a group of models were able to represent adequately the hydrodynamics, however Gidaspow (1994) drag model was the most accurate to represent the experimental data. Simulations were carried out considering restitution coefficient as a function of void fraction and using Gidaspow (1994) drag model. The simulation results obtained was able to improve the prediction of void fraction profile.

KEYWORDS: Drag models, restitution coefficient, gas-solid flow, fluidized bed.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Esquema de um leito fluidizado gás-sólido.....	25
Figura 2.2 – Diferentes padrões do escoamento gás-sólido na fluidização.....	26
Figura 2.3 – Classificação de partículas de Geldart.....	27
Figura 2.4 – Forças atuantes sobre a partícula sólida segundo Geldart.....	28
Figura 2.5 – Curva de fluidização de um leito fluidizado gás-sólido	29
Figura 3.1 – Representação da abordagem Euleriana-Lagrangeana.....	40
Figura 3.2 – Formação de uma bolha num leito fluidizado baseado na abordagem E-L....	41
Figura 3.3 – Representação da abordagem Euleriana-Euleriana	41
Figura 3.4 – Simulação do escoamento gás-sólido em leito fluidizado baseada na abordagem E-E	43
Figura 3.5 – Fatores de correção do modelo de arrasto de Nieuwland et al. (1994).	53
Figura 3.6 – Regime plástico e viscoso no escoamento gás-sólido	62
Figura 3.7 – Representação do ângulo de atrito interno	67
Figura 3.8 – Representação de uma colisão entre partículas no escoamento gás-sólido	71
Figura 3.9 – Comparação de funções de distribuição radial	72
Figura 4.1 – Interface entre o usuário e o código MFIX.....	75
Figura 4.2 – Volume de controle	77
Figura 4.3 – Volume de controle unidimensional para a discretização na direção.....	78
Figura 4.4 – Localização dos nodos para o esquema TVD	81
Figura 4.5 – Volume de controle unidimensional deslocado para a componente "x"	87
Figura 4.6 – Condição de deslizamento livre e de não deslizamento	89
Figura 4.7 – Condição de contorno de velocidade e pressão especificada	97
Figura 5.1 – Representação do leito fluidizado e o domínio computacional com malha de 0,005 x 0,005 m.....	106
Figura 5.2 – Comparação dos modelos de arrasto na determinação da curva de fluidização (A)	111
Figura 5.3 – Comparação dos modelos de arrasto na determinação da curva de fluidização (B)	111

Figura 5.4 – Avaliação dos modelos de arrasto na determinação da velocidade mínima de fluidização (A)	114
Figura 5.5 – Avaliação dos modelos de arrasto na determinação da velocidade mínima de fluidização (B)	115
Figura 5.6 – Comparação dos modelos de arrasto na determinação da expansão do leito (A)	117
Figura 5.7 – Comparação dos modelos de arrasto na determinação da expansão do leito (B)	117
Figura 5.8 – Perfil médio temporal da fração de vazio com $U_g = 0,38$ m/s (A)	120
Figura 5.9 – Perfil médio temporal da fração de vazio com $U_g = 0,38$ m/s (B)	121
Figura 5.10 – Perfil médio temporal da fração de vazio com $U_g = 0,46$ m/s (A)	122
Figura 5.11 – Perfil médio temporal da fração de vazio com $U_g = 0,46$ m/s (B)	122
Figura 5.12 – Fração de vazio usando os modelos de Nieuwland et al. (1994) e RUC (1994) com $U_g = 1$ m/s	124
Figura 5.13 – Perfil médio temporal da velocidade das partículas com $U_g = 0,38$ m/s (A)	126
Figura 5.14 – Perfil médio temporal da velocidade das partículas com $U_g = 0,38$ m/s (B)	126
Figura 5.15 – Perfil médio temporal da velocidade das partículas com $U_g = 0,46$ m/s (A)	128
Figura 5.16 – Perfil médio temporal da velocidade das partículas com $U_g = 0,46$ m/s (B)	128
Figura 5.17 – Simulação do perfil médio temporal da velocidade das partículas sólidas em leito fluidizado em diversas alturas de Loha et al. (2012)	130
Figura 5.18 – Comportamento fluidodinâmico do leito utilizando os modelos de arrasto $U_g = 0,10$ m/s	132
Figura 5.19 – Comportamento fluidodinâmico do leito utilizando os modelos de arrasto $U_g = 0,20$ m/s	132
Figura 5.20 – Comportamento fluidodinâmico do leito utilizando os modelos de arrasto $U_g = 0,38$ m/s	133
Figura 5.21 – Comportamento fluidodinâmico do leito utilizando os modelos de arrasto $U_g = 0,46$ m/s	133
Figura 5.22 – Fluidodinâmica do leito utilizando o modelo de Gidaspow (1994) na faixa de velocidades de fluidização (tempo 6 segundos).....	134

Figura 5.23 – Efeito do coeficiente de restituição sobre o perfil médio temporal da fração de vazio, $U_g = 0,38$ m/s.....	137
Figura 5.24 – Efeito do coeficiente de restituição sobre o perfil médio temporal da fração de vazio, $U_g = 0,46$ m/s.....	137
Figura 5.25 – Coeficiente de restituição em função da fração de vazio média local.....	140
Figura 5.26 – Relação entre o coeficiente de restituição e a velocidade de fluidização	140
Figura 5.27 – Comparação dos perfis médios temporais da fração de vazio considerando o coeficiente de restituição como valor constante e uma correlação, $U_g = 0,38$ m/s.....	141
Figura 5.28 – Comparação dos perfis médios temporais da fração de vazio considerando o coeficiente de restituição como valor constante e uma correlação, $U_g = 0,46$ m/s.....	142

LISTA DE TABELAS

Tabela 5.1 – Parâmetros do modelo para a simulação	108
Tabela 5.2 – RMSD dos perfis de queda de pressão.....	113
Tabela 5.3 – RMSD do perfil de queda de pressão na determinação da velocidade de mínima fluidização.....	116
Tabela 5.4 – RMSD da expansão do leito	118
Tabela 5.5 – RMSD dos perfis médio temporais de fração volumétrica	123
Tabela 5.6 – RMSD do perfil médio temporal da velocidade das partículas	129
Tabela 5.7 – RMSD dos perfis médios temporais da fração de vazio em função do coeficiente de restituição a diferentes velocidades de fluidização.	138
Tabela 5.8 – Fração de vazio média local e o coeficiente de restituição	139
Tabela 5.9 – RMSD do perfil médio temporal da fração de vazio utilizando o coeficiente de restituição constante e em função da fração de vazio	143

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CFD	Computational Fluid Dynamics
EDP	Equação Diferencial Parcial
LBM	Lattice Boltzmann Method
LFC	Leito Fluidizado Circulante
MFIX	Multiphase Flow with Interphase eXchanges
NETL	National Energy Technology Laboratory
RSMD	Root Square Mean Deviation
SIMPLE	Semi Implicit Method for Pressure Linked Equation
TCGE	Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares

LISTA DE SÍMBOLOS

Simbologia Principal

A	Área da seção transversal do leito	m^2
A_{RUC}	Fator no modelo de RUC (1994)	[1]
B_{RUC}	Fator no modelo de RUC (1994)	[1]
C_D	Coeficiente de arrasto	[1]
C_{D0}	Coeficiente de arrasto de uma simples partícula	[1]
$\overline{\overline{D}}_g$	Tensor taxa de deformação	s^{-1}
d_s	Diâmetro da partícula sólida	M
e	Coeficiente de restituição	[1]
E	Energia granular	m^2/s^2
F_D	Força de arrasto	N/m^3
$\vec{F}$	Forças atuando sobre uma simples partícula	N
$f(\alpha_s)$	Função de correção do modelo de arrasto	[1]
g	Aceleração da gravidade	m/s^2
g_0	Função de distribuição radial	[1]
h_{leito}	Altura do leito	m
$\overline{\overline{I}}$	Tensor	[1]
I_{2D}	Segundo invariante do tensor taxa de deformação	[1]
K_1	Constante do coeficiente de arrasto para todos os regimes	[1]
K_2	Constante do coeficiente de arrasto para todos os regimes	[1]
k_s	Coeficiente de difusão para a energia granular	$kg/m.s$
$n_{DiFelice}$	Expoente do modelo de arrasto de Di Felice (1994)	[1]
n	Expoente do modelo de Richardson e Zaki (1954)	[1]
p_g	Pressão da fase gás	N/m^2
p_s	Pressão da fase sólida	N/m^2
$p_{s,kin}$	Pressão do sólido por efeito cinético	N/m^2
$p_{s,col}$	Pressão do sólido por efeito de colisão	N/m^2
$p_{s,fr}$	Pressão do sólido por efeito de atrito	N/m^2
Q	Vazão de gás	m^3/s
R_p	Raio da partícula sólida	m
R_ϕ	Termo fonte da equação de conservação	
Re_s	Reynolds da partícula sólida	[1]
Re_t	Reynolds da partícula na velocidade terminal	[1]

$\overline{\overline{S}}_g$	tensor da tensão da fase gás	N/m^2
$\overline{\overline{S}}_s$	tensor da tensão da fase sólida	N/m^2
u_g	Velocidade da fase gás	m/s
U_g	Velocidade superficial do gás	m/s
u_s	Velocidade da fase sólida	m/s
u_t	Velocidade terminal da partícula sólida	m/s
V_g	Volume ocupado do gás	m^3
V_p	Volume da partícula sólida	m^3
$\vec{V}_p$	Vetor velocidade de uma única partícula	m/s
$V_{r,s}$	Relação da velocidade terminal (Syamlal e O'Brien)	m/s
V_T	Volume total do leito	m^3
w	Fator no modelo de arrasto de Hill-Koch-Ladd (2001)	[1]
X	Largura do leito fluidizado	m

Símbolos Gregos

α_g	Fração volumétrica do gás	[1]
α_s	Fração volumétrica de partículas sólidas	[1]
α_g^*	Fração volumétrica no leito fixo	[1]
$\alpha_{s,max}$	Fração volumétrica no ponto de máximo empacotamento.	[1]
β_{gs}	Modelo de arrasto	kg/m^3s
Γ_s	Dissipação da energia por efeito das colisões inelásticas	kg/m^3s
Γ	Coeficiente de difusão	
Φ_s	Esfericidade das partículas	[1]
$\mathcal{Q}$	Propriedade escalar transportada	[1]
Φ_{gs}	Função chave de Gidaspow (1994)	[1]
θ_s	Temperatura granular	m^2/s^2
μ_g	Viscosidade dinâmica do gás	$N.s/m^2$
μ_s	Viscosidade dinâmica do sólido	$N.s/m^2$
$\mu_{s,kin}$	Viscosidade do sólido por efeito cinético	$N.s/m^2$
$\mu_{s,col}$	Viscosidade do sólido por efeito de colisão	$N.s/m^2$
$\mu_{s,fr}$	Viscosidade do sólido por efeito de atrito	$N.s/m^2$
ρ_g	Massa específica da fase gás	kg/m^3
ρ_s	Massa específica da fase sólida	kg/m^3
$\overline{\tau}_g$	tensor das tensões viscosas da fase gás	N/m^2
$\overline{\tau}_s$	tensor das tensões viscosas da fase sólida	N/m^2
λ_g	viscosidade volumétrica	N/m^2
$\omega(\alpha_g)$	Função de correção no modelo de Yang et al. (2003)	[1]

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
1.1	MOTIVAÇÃO	21
1.2	JUSTIFICATIVA.....	22
1.3	OBJETIVOS	22
1.3.1	Objetivo geral	22
1.3.2	Objetivos específicos.....	22
1.4	DELIMITAÇÃO	23
1.5	ESTRUTURA DA TESE	23
2	REVISÃO BIBLIOGRAFICA.....	24
2.1	FLUIDIZAÇÃO	24
2.2	LEITO FLUIDIZADO GÁS-SÓLIDO	24
2.3	REGIMES DE FLUIDIZAÇÃO	25
2.4	CLASSIFICAÇÃO DAS PARTÍCULAS	26
2.5	PARAMETROS DO PROJETO DE LEITO FLUIDIZADO	29
2.5.1	Queda de pressão.....	29
2.5.2	Velocidade mínima de fluidização	30
2.5.3	Expansão do leito.....	31
2.6	SIMULAÇÃO DE LEITOS FLUIDIZADOS	32
2.6.1	Trabalhos envolvendo modelos de arrasto	36
2.6.2	Trabalhos envolvendo o coeficiente de restituição	37
3	MODELAGEM DO ESCOAMENTO GÁS-SÓLIDO.....	39
3.1	ABORDAGEM EULERIANA-LAGRANGEANA	39
3.2	ABORDAGEM EULERIANA-EULERIANA.....	41
3.3	MODELO FLUIDODINÂMICO.....	43
3.3.1	Força de arrasto	45
3.3.1.1	Modelo de arrasto.....	46
3.3.1.2	Coeficiente de arraste	58
3.3.2	Tensor das tensões.....	60
3.3.2.1	Tensor da tensão da fase gás.....	60
3.3.2.2	Tensor da tensão da fase sólida.....	61
3.3.2.2.1	Pressão na fase sólida	63
3.3.2.2.2	Viscosidade da fase sólida	65
3.3.3	Teoria cinética dos escoamentos granulares.....	68
3.3.3.1	Temperatura granular	68
3.3.3.2	Coeficiente de restituição	71
3.3.3.3	Função de distribuição radial	71
4	MODELAGEM NUMÉRICA.....	74
4.1	DISCRETIZAÇÃO.....	76
4.2	SOLUÇÃO NUMÉRICA.....	84
4.2.1	Equação da conservação da quantidade de movimento discretizada....	86
4.2.2	Condições de contorno	89
4.2.3	Eliminação parcial do acoplamento na interface.....	90

4.2.4	Equação para correção da pressão do fluido	92
4.2.4.1	Condições de contorno	97
4.2.5	Equação para a correção da fração de volumétrica da fase sólida.....	98
4.2.6	Condições iniciais.....	104
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	105
5.1	DEFINIÇÃO DOS PARÂMETROS DA SIMULAÇÃO	105
5.2	PROCESSAMENTO DE DADOS	108
5.3	ANÁLISE DOS MODELOS DE ARRASTO	109
5.3.1	Determinação da curva de fluidização.....	110
5.3.2	Determinação da velocidade mínima de fluidização	113
5.3.3	Determinação da expansão do leito	116
5.3.4	Determinação do perfil médio temporal da fração de vazio	119
5.3.5	Determinação do perfil médio temporal da velocidade das partículas.....	125
5.3.6	Comparação qualitativa dos modelos de arrasto	130
5.4	DESENVOLVIMENTO DE UMA CORRELAÇÃO PARA O COEFICIENTE DE RESTITUIÇÃO	135
6	CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS	144
6.1	CONCLUSÕES	144
6.2	TRABALHOS FUTUROS	146
	REFERÊNCIAS.....	147

1 INTRODUÇÃO

O leito fluidizado é uma importante operação unitária de grande interesse na indústria petroleira, química, metalúrgica e na produção de energia. Esta operação tem sido amplamente usada devido às suas excelentes características, tais como elevadas taxas de transferência de calor e massa, alto grau de mistura, excelente meio para interação partícula-partícula e uma grande área superficial de contato entre as fases gás e sólida. Algumas aplicações importantes são: craqueamento catalítico, combustão e/ou gaseificação, pirólise, processos de polimerização, produção de fármacos, combustíveis sintéticos, revestimento, entre outras. A efetividade dessas aplicações depende principalmente do controle do processo de fluidização, o qual precisa de um adequado conhecimento e entendimento da fluidodinâmica do escoamento gás-sólido (KUNII e LEVENSPIEL, 1991; GUPTA e SATHIYAMOORTHY, 1999; OKA, 2003).

Como a fluidodinâmica domina os processos de transferência de calor e massa, contribuições ao seu entendimento podem significativamente melhorar o projeto, o dimensionamento e a operação do leito fluidizado, e por sua vez, a produtividade de tais aplicações, desta maneira ressalta-se a importância de seu estudo e compreensão.

A CFD (Computational Fluid Dynamics) tem sido utilizada para realizar simulações de sistemas de escoamento multifásico, com a finalidade de estudar processos físicos e químicos em diferentes aplicações de engenharia. Atualmente a CFD é uma poderosa ferramenta no estudo de complexos fenômenos, tais como a fluidodinâmica, transferência de calor e massa e reações químicas no escoamento gás-sólido em leito fluidizado (ARMSTRONG et al. 2010).

A CFD tem a vantagem de prover um detalhamento da física fundamental de vários fenômenos, os quais às vezes são difíceis de medir, assim como também reduzir o tempo e o custo do projeto de reatores de leito fluidizado em escala industrial (AHUJA e PATWARDHAN, 2008; LI et al. 2009; ARMSTRONG et al. 2010).

Há duas principais abordagens utilizadas em diversos trabalhos envolvendo simulações numéricas através de CFD do escoamento gás-sólido: a abordagem Euleriana-Lagrangeana (E-L) e a abordagem Euleriana-Euleriana (E-E) (RANADE, 2002; CROWE, 2006). No entanto, comparando as duas abordagens, existe uma preferência nos modelos baseados na abordagem E-E, devido ao baixo custo computacional envolvido (DEEN et al. 2007; YEOH e TU, 2010; ENGLAND, 2011; SUN et al. 2011).

Os modelos baseados na abordagem E-E se caracterizam por tratar a fase gás e a fase sólida como dois meios contínuos interagindo constantemente. Como a fase sólida é tratada como um meio contínuo, isso provoca algumas particularidades na equação de transferência da quantidade de movimento, tais como a descrição de alguns termos tais como a força de arrasto e o tensor das tensões (RANADE, 2002; CROWE, 2006).

Assim, para determinar a força de arrasto é preciso selecionar um modelo de arrasto, o qual quantifica a quantidade de energia transmitida da fase gás para a fase sólida. O modelo de arrasto tem uma forte influência na fluidodinâmica do escoamento gás-sólido, sendo muito importante na determinação de propriedades tais como as taxas de transferência de calor e massa. Devido às diversas aplicações do escoamento gás-sólido, vários modelos de arrasto foram propostos na literatura. Desde que o arrasto é a principal força de aceleração atuando sobre as partículas, a seleção do modelo de arrasto faz a diferença nos resultados da simulação. Muitos estudos foram realizados com a finalidade de identificar que modelos podem prever corretamente a fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em leito fluidizado ou em qualquer outro sistema que envolva esta classe de escoamento (DU et al. 2006, VEJAHATI et al. 2009; ESMAILI e MAHINPEY 2011).

No entanto, os resultados destes trabalhos divergem e não apontam qual modelo de arrasto é o mais adequado para representar a fluidodinâmica do escoamento gás-sólido.

No caso da descrição do tensor das tensões, a abordagem E-E se fundamenta na Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares (TCEG), que é análoga à Teoria Cinética dos Gases. A TCEG permite a representação matemática de termos tais como pressão, viscosidade dinâmica e volumétrica para a fase sólida, considerando-a como um meio contínuo (RANADE, 2002; CROWE, 2006). Deste modo, surgem novas variáveis que são utilizadas para caracterizar o comportamento das partículas sólidas, entre as principais tem-se a temperatura granular, o coeficiente de restituição e a função de distribuição radial (JAKOBSEN et al. 2010).

Um grande número de trabalhos foi dedicado ao estudo destas variáveis, destacando-se dentro delas o coeficiente de restituição. Esta variável representa uma medida da elasticidade das colisões partícula-partícula, sendo assumidas como elásticas se o coeficiente de restituição for estabelecido com um valor igual à unidade.

Esta variável se caracteriza por sua difícil determinação experimental, o que faz com que seu valor seja a maioria de vezes assumido de forma arbitrária no desenvolvimento de simulações numéricas do escoamento gás-sólido.

De acordo com Reuge et al. (2008) muito autores tem relatado a sensibilidade da fluidodinâmica do leito fluidizado ao valor do coeficiente de restituição assumido na simulação. Segundo Jakobsen et al. (2010), a simples mudança no valor do coeficiente de restituição pode modificar totalmente o padrão de circulação das partículas sólidas no leito, o que levar se a projetar um leito com muitas incertezas e sujeito a problemas tais como baixo desempenho.

1.1 MOTIVAÇÃO

As muitas aplicações do leito fluidizado na indústria e a demanda constante de melhorias na eficiência do processo de fluidização, tem aumentado o número de trabalhos envolvendo simulações numéricas do escoamento gás-sólido em leito fluidizado através do uso de CFD.

Uma das etapas mais importantes e críticas no desenvolvimento de um modelo de escoamento gás-sólido é a seleção de um modelo de arrasto. O grande número de modelos de arrasto presentes na literatura provoca uma confusão na seleção de um modelo para uma aplicação específica envolvendo o escoamento gás-sólido. A definição de um valor adequado para o coeficiente de restituição é também importante na representação física da interação entre as partículas sólidas no escoamento gás-sólido.

Considerando os trabalhos referenciados, observa-se que ainda não há uma concordância um acordo na seleção de um modelo de arrasto e na definição de um valor adequado para o coeficiente de restituição na simulação numérica do escoamento gás-sólido. Em geral, os estudos disponíveis sobre modelos de arrasto têm incluído esforços em comparar dois ou três modelos, e as discrepâncias entre os resultados reportados são facilmente observados. No caso do coeficiente de restituição, são poucos os trabalhos que avaliam a sua influência sobre a fluidodinâmica do escoamento gás-sólido. A maioria de simulações definem o seu valor baseado na literatura ou simplesmente adotam um valor arbitrário.

Assim, a motivação desta tese foi o estudo compreensivo dos parâmetros tais como o modelo de arrasto e o coeficiente de restituição na simulação numérica do escoamento gás-sólido em leito fluidizado através de CFD.

1.2 JUSTIFICATIVA

O estudo dos modelos de arrasto permite selecionar o modelo mais adequado, e dessa forma reduz de maneira drástica o tempo exploratório que demanda as simulações numérica através de CFD.

Existe uma carência de trabalhos que avaliem o desempenho dos modelos de arrasto através da determinação dos parâmetros de projeto de leito fluidizado, tais como a queda de pressão, expansão do leito, velocidade mínima de fluidização, distribuição das fases, utilizando simulação numérica.

O desenvolvimento de uma correlação entre o coeficiente de restituição e a fração de vazio, permitirá uma representação mais aproximada da influência das colisões interpartículas no escoamento gás-sólido, além disso, evitando a dificuldade em relação à escolha de um valor específico desta variável.

Assim há a necessidade do desenvolvimento de um estudo numérico para uma apropriada seleção do modelo de arrasto e a avaliação do coeficiente de restituição. Com isto espera-se representar de uma forma mais aproximada a fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em leito fluidizado.

1.3 OBJETIVOS

1.3.1 Objetivo geral

Estudar a influência de diferentes modelos de arrasto e do coeficiente de restituição sobre a fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em leito fluidizado.

1.3.2 Objetivos específicos

- Implementar diferentes modelos de arrasto no código MFIX.
- Avaliar o desempenho de cada modelo validando o resultado com os dados experimentais (curva de fluidização, velocidade mínima de fluidização, expansão do leito e perfis de velocidade e fração volumétrica das partículas sólidas).

- Desenvolver uma correlação do coeficiente de restituição em função da fração de vazio.
- Avaliar o desempenho da correlação do coeficiente de restituição sobre a fluidodinâmica.

1.4 DELIMITAÇÃO

O estudo visa o desenvolvimento de simulações numéricas de um escoamento gás-sólido não reativo num leito fluidizado bidimensional utilizando o código MFIX do NETL (*National Energy Technology Laboratory*). Os resultados obtidos são validados com os dados experimentais de Taghipour et al. (2005).

1.5 ESTRUTURA DA TESE

Capítulo 2: Expõe-se uma revisão bibliográfica apresentando os conceitos básicos de fluidização, assim como também uma revisão dos trabalhos envolvendo o estudo dos modelos de arrasto e do coeficiente de restituição.

Capítulo 3: Descreve-se as abordagens mais utilizadas em simulações numéricas do escoamento gás-sólido. Apresenta-se a formulação do modelo utilizado nas simulações, assim como também dos modelos de arrasto avaliados neste estudo.

Capítulo 4: Exibe a fundamentação numérica do código MFIX.

Capítulo 5: Mostra-se os resultados e a discussão da simulação numérica.

Capítulo 6: Apresentam-se as conclusões e finalmente as recomendações para trabalhos futuros.

2 REVISÃO BIBLIOGRAFICA

2.1 FLUIDIZAÇÃO

A fluidização é o fenômeno no qual um leito de partículas sólidas, inicialmente formando uma aparente estrutura rígida pela ação de forças tais como a gravidade e o atrito, chega a exibir uma movimentação similar a um fluido devido à passagem de uma corrente ascendente de líquido ou gás. Tal corrente circula através dos interstícios das partículas sólidas gerando uma força de arrasto suficiente para contrabalançar seu peso, provocando assim a movimentação das partículas sólidas (FAN, 2005; BASU, 2006; RHODES, 2008).

O comportamento da fluidização é dependente do fluido utilizado; assim, a fluidização num sistema líquido-sólido exibe um comportamento progressivo e homogêneo apresentando uma uniforme distribuição espacial das partículas sólidas sem formação de bolhas. Já o caso de um sistema gás-sólido se caracteriza basicamente por ser altamente heterogêneo, diversamente ao sistema líquido-sólido. Assim, o leito de partículas sólidas exibe um comportamento bastante segregativo, dando origem à formação de bolhas (CROWE, 2006).

2.2 LEITO FLUIDIZADO GÁS-SÓLIDO

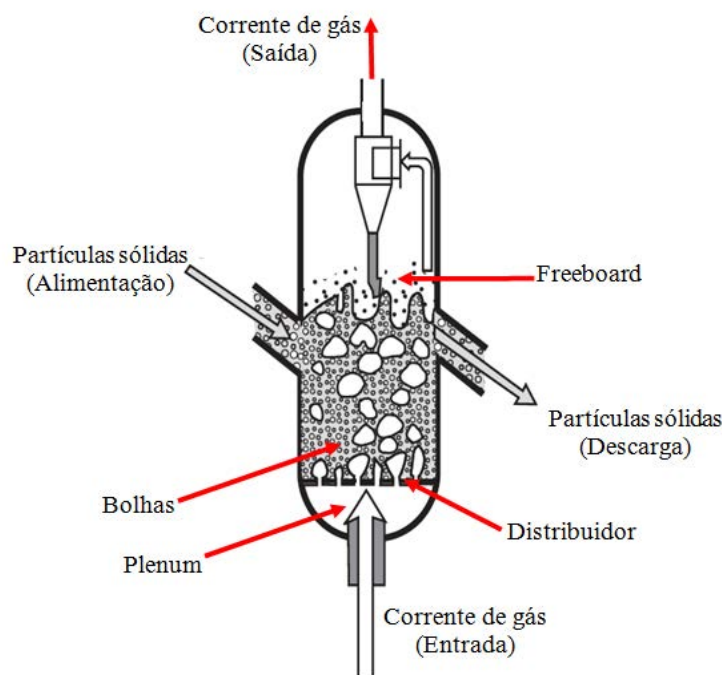
O leito fluidizado gás-sólido é uma operação muito usada na manipulação de partículas sólidas, provavelmente constitui-se na operação industrial mais importante em sistemas que envolvem um escoamento gás-sólido, os quais estão presentes em muitos processos físicos e químicos que envolvem reação química, transporte, secagem, aquecimento e resfriamento.

As partículas sólidas são fluidizadas com uma corrente de gás com a finalidade de provocar um intenso contato e um alto grau de mistura e intensa circulação das espécies no leito, resultando em elevadas taxas de reação, transferência de calor e massa e uma distribuição uniforme de temperatura, o que permite o processamento contínuo da operação (KUNII e LEVENSPIEL, 1991; GUPTA e SATHIYAMOORTHY, 1999; OKA, 2003, MANDICH 2010; HORIO 2010).

O leito fluidizado se apresenta em diversos tipos e geometrias podendo ser uma coluna de seção transversal circular, quadrada ou retangular, porém muitos deles apresentam os mesmos componentes básicos.

A Figura 2.1 apresenta a representação de um leito fluidizado gás-sólido com seus principais componentes: a câmara plena ou *plenum*, a placa distribuidora ou distribuidor, a região do leito e a zona de bordo livre. A câmara plena é a seção onde uma corrente de fluido ingressa ao leito, em seguida este fluido atravessa uma placa distribuidora, a qual tem como funções distribuir uniformemente o fluido e servir de suporte ao leito de partículas sólidas. Finalmente, encontra-se o *freeboard* a qual contém uma quantidade mínima de partículas sólidas que conseguiram ser arrastadas para fora do leito.

Figura 2.1 - Esquema de um leito fluidizado gás-sólido.



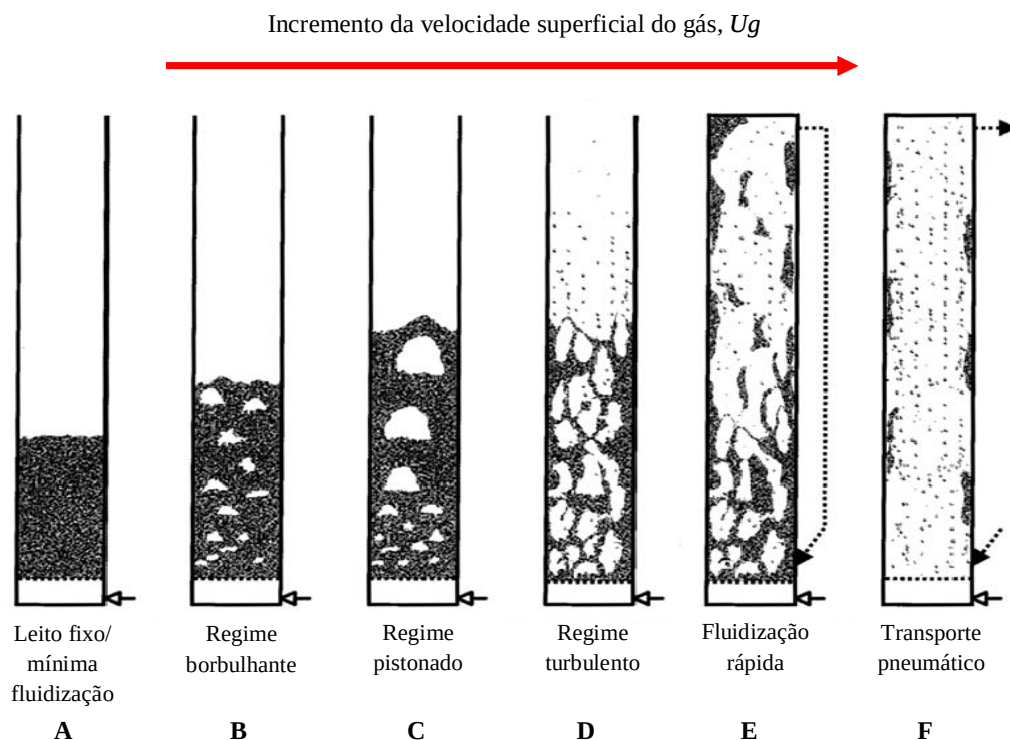
Fonte: (RANADE, 2002).

2.3 REGIMES DE FLUIDIZAÇÃO

Basicamente existem 6 diferentes regimes para os leitos fluidizados gás-sólido: leito fixo, borbulhante, pistonado, turbulento, rápido e transporte pneumático. A Figura 2.2 apresenta esses regimes de fluidização nas quais as partículas sólidas que compõem o material do leito estão confinadas em um tubo cilíndrico e a superfície inferior chamada de prato distribuidor. Com a introdução de um gás pressurizado através do prato distribuidor consegue-se desenvolver vários regimes de escoamento à medida que velocidade média do gás é incrementada.

O entendimento do regime de fluidização é um aspecto fundamental na pesquisa relacionada à fluidização, assim, se apresenta uma descrição ressaltando as principais características dos regimes de fluidização (CROWE, 2006).

Figura 2.2 - Diferentes padrões do escoamento na fluidização.



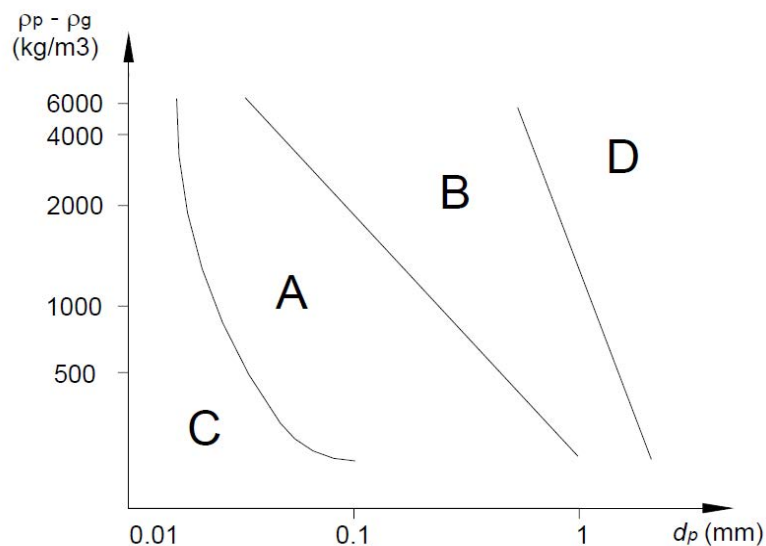
Fonte: (CROWE, 2006).

2.4 CLASSIFICAÇÃO DAS PARTÍCULAS

No estudo fluidodinâmico de um leito fluidizado gás-sólido, é preciso conhecer as principais características das partículas sólidas que determinam o comportamento da fluidização. Geldart (1973), observou a fluidização de diversos tipos de materiais relacionando o tamanho médio da partícula, massas específicas das partículas e do ar, em condições ambientais e propôs uma classificação de 4 categorias para as partículas sólidas, as quais foram designadas com as letras A, B, C, D em função de seu comportamento na fluidização. A Figura 2.3 apresenta o diagrama e a classificação desenvolvida por Geldart (1973), que é clara e fácil de usar, permitindo uma estimativa do tipo de fluidização esperada. Assim, pesquisadores que estudam o fenômeno de fluidização invariavelmente recorrem ao diagrama de Geldart para classificar o sólido utilizado no trabalho.

Trata-se de uma referência clássica e até os dias de hoje não superada, a despeito da simplicidade em termos de suporte matemático e experimental para o desenvolvimento de referida classificação.

Figura 2.3 - Classificação de partículas segundo Geldart.



Fonte: (RHODES, 2008).

Grupo A - São partículas sólidas com diâmetros que variam entre 20-100 μm e apresentam uma baixa massa específica, inferior a 1400 kg/m^3 . Caracterizam-se por fluidizar com facilidade apresentando bolhas de pequeno diâmetro, o leito se expande consideravelmente antes mesmo de formar bolhas podendo apresentar um comportamento de fluidização homogênea com alta mistura entre o gás e as partículas sólidas. Muitos catalisadores encontram-se dentro deste grupo, por exemplo, as partículas de zeolitas utilizadas como catalisador no craqueamento catalítico do petróleo.

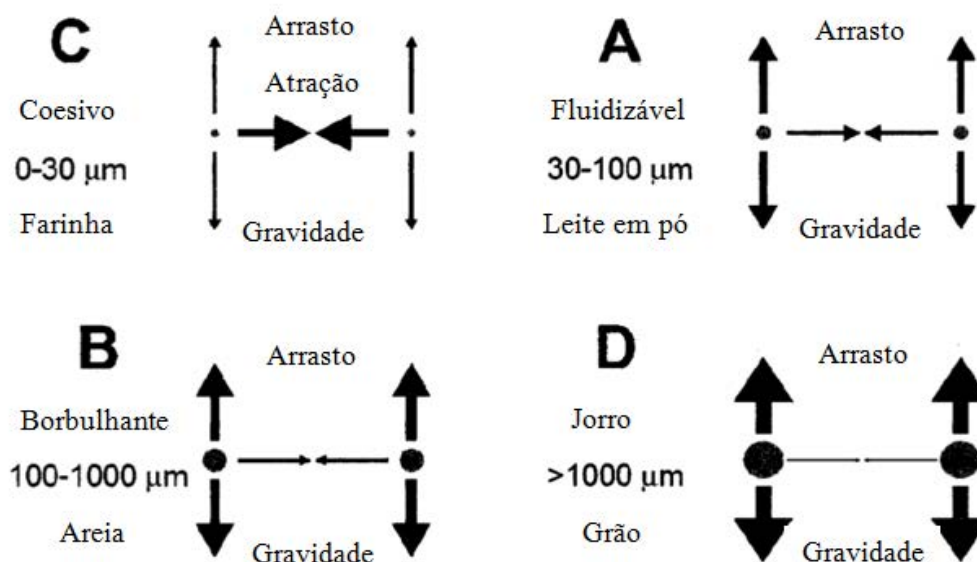
Grupo B - Este grupo de partículas sólidas apresentam um tamanho entre 40 e 500 μm e uma massa específica entre 1400 e 4000 kg/m^3 . Neste grupo as partículas sólidas fluidizam facilmente, principalmente porque as bolhas aparecem quando atinge a velocidade mínima de fluidização. Além disso, esta classe de partículas produz leitos borbulhantes de bolhas de grande tamanho e algumas vezes desenvolvem a formação de jorro de partículas quando a altura do leito é muito baixa.

Grupo C - A principal característica das partículas sólidas deste grupo é o seu comportamento coesivo e são extremamente finas apresentando um diâmetro inferior a 30 μm . Estas partículas fluidizam sobre condições muito difíceis e, ao fluidizar não apresentam bolhas. No leito são formados canais preferenciais pelos quais circula o gás dando origem a um grau de mistura muito baixo, sendo necessário aplicar uma força externa, tal como agitação mecânica, para melhorar a qualidade da fluidização.

Grupo D - Partículas sólidas maiores que 1000 μm , a fluidização deste grupo requer grandes quantias de energia e tipicamente é associado a elevados níveis de abrasão. Caracteriza-se pelo fato do leito se tornar errático, produzindo bolhas grandes, canais preferenciais e até mesmo jorros. As bolhas coalescem mais rapidamente, porém sobem mais lentamente que o gás que percola através do leito, apresentam uma expansão do leito mínima e um baixo grau de mistura. Este grupo está composto geralmente de partículas sólidas como os grãos, carvão e minerais.

A Figura 2.4 é uma representação das partículas de Geldart em função das principais forças presentes, entre elas destaca-se a força de arrasto, a força de gravidade e as forças interpartículas próprias de cada tipo. O grau de interação destas forças define o seu comportamento fluidodinâmico de qualquer processo ou operação que utilize a tecnologia de fluidização.

Figura 2.4 – Forças atuantes sobre a partícula sólida segundo Geldart.



Fonte: (RHODES, 2008).

2.5 PARÂMETROS DO PROJETO DE LEITO FLUIDIZADO

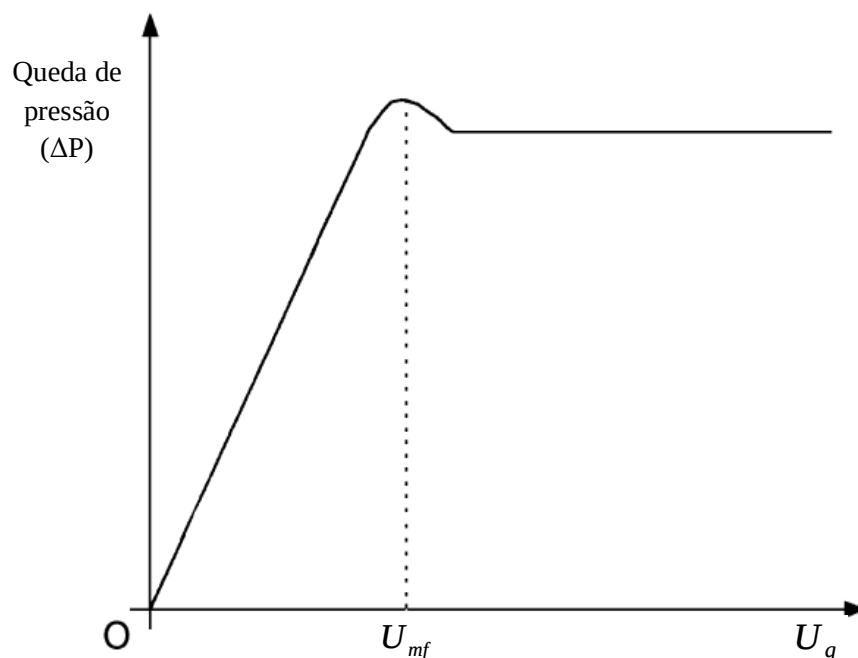
2.5.1 Queda de pressão

A determinação da queda de pressão em função da velocidade de fluidização, permite construir a curva de fluidização, a qual caracteriza o padrão do escoamento que desenvolve um leito fluidizado (CROWE, 2006).

Conforme incrementa-se a velocidade de fluidização, U_g , a queda de pressão aumenta proporcionalmente, mantendo uma condição de leito fixo. Quando esta velocidade se incrementa até o ponto onde as forças de arrasto e gravidade se equilibram, atinge-se o estado mínima fluidização. Porém, se U_g aumenta ultrapassando este estado de mínima fluidização, o leito se expande consideravelmente dando origem à formação de bolhas, no entanto a queda de pressão do leito permanece constante (BASU, 2006; CROWE, 2006).

A Figura 2.5 apresenta o comportamento da queda de pressão, também conhecido como a curva de fluidização, parâmetro básico no projeto de leitos fluidizados. O ponto no qual se atinge o estado de mínima fluidização apresenta um leve incremento, seguido de uma normalização, isso é produto do atrito das paredes do leito.

Figura 2.5 – Curva de fluidização de um leito fluidizado gás-sólido.



Fonte: (PAUDEL, 2011).

A queda de pressão quando se tem uma velocidade mínima de fluidização é definida pela equação (2.1):

$$\Delta P_{leito} = L(1 - \alpha_g)(\rho_s - \rho_g)g \quad (2.1)$$

Com a finalidade de determinar a queda de pressão através de um leito fixo para qualquer condição de escoamento, a equação de Ergun (1952) representada pela equação (2.2) pode ser também usada para determinar a queda de pressão.

$$\frac{\Delta P_{leito}}{L} = 150 \frac{(1 - \alpha_g)^2}{\alpha_g^3 (\Phi_s d_s)^2} \frac{g U_g}{\alpha_g^3 \Phi_s d_s} + 1,75 \frac{(1 - \alpha_g) \rho_g U_g^2}{\alpha_g^3 \Phi_s d_s} \quad (2.2)$$

sendo, Φ_s é a esfericidade da partícula sólida, parâmetro adimensional com um valor na faixa de 0 a 1.

2.5.2 Velocidade mínima de fluidização

A velocidade mínima de fluidização, U_{mf} , é um parâmetro muito importante no projeto de um leito fluidizado quando é desenvolvida a sua caracterização fluidodinâmica. Esta variável marca o ponto de transição entre um regime de leito fixo e um regime borbulhante. Normalmente a velocidade mínima de fluidização é obtida experimentalmente, no entanto existem muitas alternativas reportadas na literatura para estimar o valor da velocidade mínima de fluidização (GUPTA e SATHIYAMOORTHY 1999; RAMOS et al. 2002).

A mínima fluidização inicia quando a altura do leito é balanceada pela queda de pressão através do leito. A queda de pressão através do leito de altura média, L_{mf} , assumindo um diâmetro de partículas sólidas, d_s , foi correlacionada por Ergun (1952) por meio da equação (2.3).

$$\frac{\Delta P_{leito}}{L_{mf}} = 150 \frac{(1 - \alpha_{mf})^2}{\alpha_{mf}^3 (\Phi_s d_s)^2} \frac{g U_{mf}}{\alpha_{mf}^3 \Phi_s d_s} + 1,75 \frac{(1 - \alpha_{mf}) \rho_g U_{mf}^2}{\alpha_{mf}^3 \Phi_s d_s} \quad (2.3)$$

Combinando a equação (2.1) e (2.3) tem-se:

$$\frac{d_s^3 \rho_g (\rho_s - \rho_g) g}{\mu_g^2} = 1,75 \frac{1}{\alpha_{mf}^3 \Phi^3} \text{Re}_{mf}^2 + 150 \frac{(1 - \alpha_{mf})}{\alpha_{mf}^3 \Phi^2} \text{Re}_{mf} \quad (2.4)$$

O número de Reynolds da partícula no estado de mínima fluidização é expresso pela equação (2.6).

$$\text{Re}_{mf} = \frac{d_s U_{mf} \rho_g}{\mu_g} \quad (2.5)$$

No caso de partículas muito pequenas, $\text{Re}_{mf} < 20$, a equação (2.4) pode ser ainda simplificada na forma da equação (2.6).

$$U_{mf} = \frac{d_s^2 (\rho_s - \rho_g) g}{150 \mu_g} \frac{\alpha_{mf}^2 \Phi^2}{1 - \alpha_{mf}} \quad (2.6)$$

Esta equação, estimada para partículas pequenas, é usada para verificar experimentalmente e determinar valores de U_{mf} já que cada tipo das partículas testadas cai dentro da faixa de numero de Reynolds, Re_{mf} . O método usado no desenvolvimento de correlações, no caso da velocidade mínima de fluidização de sistemas gás-sólido, envolve duas situações: a primeira parte de uma equação de queda de pressão em um leito fixo (conhecida como equação de Ergun (1952) para leitos porosos e que serve como ponto de partida) e o segundo método é puramente empírico.

2.5.3 Expansão do leito

A expansão do leito se dá quando no interior do leito começa a formação de bolhas de gás que aumentam em número e tamanho. Em função da velocidade superficial do gás; estas bolhas ocupam um espaço cada vez maior e os sólidos são deslocados geralmente para acima devido à força da corrente do gás. Quando o sistema atinge um estado relativamente estável, a altura do leito tende a manter um valor quase invariável e de forma similar o mesmo acontece com a queda de pressão conseguindo se atingir um valor quase constante.

A expansão do leito é um dos parâmetros mais importantes, assim como também a característica macroscópica mais reportada dos leitos fluidizados. O conhecimento do grau de expansão dos leitos fluidizados é essencial no projeto e operação por muitas razões tais como a definição da altura de alimentação e um adequado *freeboard* acima do leito (RHODES, 2008).

A expansão do leito depende do excesso de velocidade de fluidização, assim como também das propriedades das partículas e a geometria do leito. Conforme aumenta a vazão do gás, aumenta de forma proporcional a força de arrasto que exerce a corrente de gás sobre as partículas e logo após ultrapassar a velocidade mínima de fluidização é capaz de manter e aumentar a altura da superfície do leito.

A expansão do leito é um parâmetro fundamental na determinação de uma altura de um leito fluidizado requerido para um serviço particular, podendo ser definida como a proporção da altura média de um leito fluidizado e a altura do leito na mínima fluidização (H / H_{mf}), ou também expresso na taxa de expansão ($(H - H_{mf}) / H$).

Este parâmetro pode ser determinado de forma simples, por intermédio da observação visual da superfície do leito expandido em condições ambientais e baixa velocidade de fluidização (KUNII e LEVENSPIEL, 1991).

2.6 SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO GÁS-SÓLIDO EM LEITOS FLUIDIZADOS

Devido aos significantes progressos na tecnologia computacional de alta velocidade, o entendimento da fluidodinâmica de sistemas envolvendo o escoamento gás-sólido se incrementou. As técnicas experimentais contribuíram para o entendimento do seu comportamento. O uso da dinâmica de fluidos computacional (CFD) é reconhecido como uma ferramenta na modelagem, simulação e projeto do escoamento gás-sólido em leito fluidizado, denominada também como experimentação numérica. Neste item é desenvolvida uma revisão de alguns trabalhos envolvendo o uso do CFD no estudo do comportamento do escoamento gás-sólido em leito fluidizado.

Kuipers et al. (1991) ressaltaram a importância no desenvolvimento de simulações numéricas de leitos fluidizados gás-sólido especialmente em regime borbulhante. Segundo Nieuwland et al. (1996) o uso da teoria cinética do escoamento granular contém muitos termos que precisam ser modelados. A literatura apresenta diferentes modelos para descrever cada termo. Em função do estado da arte da época, ainda não havia um consenso sobre a seleção de um apropriado modelo.

Para Van Wachem et al. (1998) é necessário o uso de uma malha fina quando a simulação numérica de um leito fluidizado gás-sólido está numa baixa velocidade de fluidização. Diferentes tamanhos de malha foram usadas para diferentes velocidades de fluidização com a finalidade de obter frações volumétricas similares dentro das bolhas em diferentes condições de fluidização (uma malha de $0,007 \times 0,007$ m para uma velocidade de fluidização duas vezes o valor da velocidade mínima fluidização e $0,01 \times 0,01$ m no caso de quatro vezes a velocidade mínima de fluidização). O resultado das simulações indicou uma razoável previsão do tamanho e da velocidade de elevação da bolha.

Enwald et al. (1999) executaram um estudo sobre o refinamento da malha e a validação da aplicação da teoria cinética do escoamento granular para uma aplicação do leito fluidizado borbulhante. O refinamento da malha demonstrou que um elevado grau de refino é requerido para uma fluidização em condições atmosférica. Dois modelos diferentes derivados da Teoria Cinética do Escoamento Granular (TCEG) foram usados para representar o tensor das tensões, uma simulação que levou a resultados bastante similares.

Benyahia et al. (2000) utilizaram satisfatoriamente o software FLUENT para modelar o comportamento do escoamento gás-sólido num leito fluidizado circulante usando um modelo bidimensional transiente baseado na abordagem Euleriana-Euleriana e incorporando a TCEG para o tratamento da fase sólida. Uma corrente ascendente de ar e partículas sólidas de catalisador da unidade FCC com um diâmetro de $76 \mu\text{m}$ e uma massa específica de 1.712 kg/m^3 foram modelados num reator com um diâmetro de 20 cm e uma altura de 14,2 m em uma entrada a velocidade do gás próxima da condição de mínima fluidização. Neste caso, as simulações predizem o comportamento multifásico razoavelmente bem como visto nos experimentos. Somente foi explorada a fluidodinâmica do leito em velocidades acima e na mínima fluidização.

Goldschmidt et al. (2001) estudaram a influência do coeficiente de restituição sobre a fluidodinâmica de um leito fluidizado gás-sólido bidimensional, utilizando um modelo CFD baseado na abordagem Euleriana-Euleriana conjuntamente com as leis de fechamento da TCEG. O estudo demonstrou que, com a finalidade de obter uma razoável representação da fluidodinâmica do leito a partir das equações fundamentais, é necessário considerar o valor do coeficiente de restituição já que representa o efeito da dissipação da energia devido à colisão não ideal partícula-partícula.

Gelderbloom et al. (2003) aplicaram um modelo CFD utilizando o código aberto MFIX para simular um experimento industrial conhecido como colapso do leito. Estudaram muitos regimes fluidodinâmicos, incluindo a expansão do leito, borbulhamento e sedimentação do leito fluidizado. O resultado demonstrou que as simulações numéricas conseguem distinguir tamanhos de bolhas e taxas de colapso usando diferentes tipos de partículas do grupo A, B e C. Os resultados demonstraram que o uso de um modelo específico de arrasto e de um modelo para descrever o tensor das tensões da fase sólida, para partículas A e B tem pouco impacto na simulação do borbulhamento e colapso. Todas as simulações encontram-se dentro do erro experimental relatado.

Jakobsen (2003) desenvolveu uma comparação entre os diferentes esquemas de interpolação para o tratamento do termo convectivo na equação da quantidade de movimento. Os esquemas de primeira ordem (*Upwind*) são muito difusivos e deveriam ser evitados. O esquema de segunda ordem é mais estável e parece ser mais preciso; além disso, os esquemas de alta ordem apresentam boa exatidão, porém são mais difíceis. O estudo demonstrou que os esquemas de integração implícitos no tempo não são usualmente tão eficientes como o esquema explícito devido ao tempo computacional requerido no processo iterativo. Com um passo de tempo maior, a precisão do esquema implícito decresce significativamente. A escolha do esquema de segunda ordem foi determinada em função da difícil escolha entre a precisão e o tempo computacional.

Syamlal e O'Brien (2003) estudou a decomposição do ozônio em um reator de leito fluidizado bidimensional usando um modelo de dois fluidos mais a TCEG. Os resultados da independência da malha foram concordantes com os dados experimentais reportados da conversão total sobre uma faixa de velocidades de fluidização e alturas iniciais do leito. Os resultados confirmam a capacidade do modelo em capturar quantitativamente o efeito da fluidodinâmica sobre a reação química em um leito fluidizado borbulhante. Também a circulação e os padrões de distribuição de sólidos concordam qualitativamente com as observações realizadas no leito.

Taghipour et al. (2005) estudaram experimental e computacionalmente a fluidodinâmica de um leito fluidizado gás-sólido bidimensional utilizando o software FLUENT. Descreveram a flutuação da energia cinética da fase sólida variando o valor do coeficiente de restituição de 0,9 a 0,99. Com o aumento no valor do coeficiente de restituição se tem um incremento de 10 % na taxa de expansão do leito, refletindo um incremento das colisões partícula-partícula através de um elevado coeficiente de restituição.

O uso de um coeficiente de restituição de 0,99 para todas as funções de arrasto levou a previsões de borbulhamento vigoroso em velocidades abaixo da velocidade mínima fluidização, o qual não concorda com os experimentos. Sobre as mesmas condições de simulação, um valor de 0,9 para o coeficiente de restituição resultou num melhor ajuste com os experimentos. O resultado das simulações concorda muito bem com as medições da expansão do leito e qualitativamente com o padrão do escoamento gás-sólido. A previsão da queda de pressão foi relativamente próxima com as medições experimentais em velocidades superficiais acima da velocidade mínima de fluidização. Além disso, a previsão do perfil da fração volumétrica média apresentou similaridades com os resultados experimentais.

Zimmermann e Taghipour (2005) utilizaram o software FLUENT para resolver um modelo CFD baseado na abordagem Euleriana-Euleriana. Simularam a fluidodinâmica e a reação química de um leito fluidizado gás-sólido contendo partículas usadas como catalisador do FCC. Na simulação, os modelos de arrasto de Gidaspow (1994) e Syamlal e O'Brien (1989) superestimaram a força de arrasto exercida sobre as partículas e previram uma grande expansão do leito em comparação com os dados experimentais. Aplicaram um ajuste ao modelo de Syamlal e O'Brien (1989) baseado nas condições de mínima fluidização das partículas do FCC, e o resultado revelou uma melhor concordância com os dados experimentais.

Johansson et al. (2006) desenvolveram simulações numéricas no software CFX-4.4 com a finalidade de comparar a fluidodinâmica de um leito fluidizado usando diferentes modelos de fechamento e sistemas de alimentação do ar. Dois modelos diferentes para expressar a reologia da fase sólida, o primeiro modelo descreve a pressão da fase sólida por uma lei de potencia exponencial e assume uma viscosidade dinâmica constante e o segundo modelo descreve a pressão e a viscosidade dinâmica da fase sólida através da teoria cinética dos escoamentos granulares. Também foi estudada a influência da compressibilidade do gás.

O resultado da simulação demonstrou que o modelo baseado na TCEG apresenta um perfil do escoamento de bolhas mais bem distribuído sobre a área transversal, no entanto o modelo de viscosidade constante resulta em um perfil parabólico do escoamento de bolhas sobre a área transversal, com uma alta concentração no centro do leito. O referido trabalho demonstra que os resultados do modelo utilizando a TCEG concordam significativamente bem com os dados experimentais, e que a compressibilidade da corrente de gás não tem nenhuma influência significativa nos resultados.

Behjat et al. (2008) usaram um modelo baseado na abordagem Euleriana-Euleriana para estudar a fluidodinâmica e a transferência de calor de um leito fluidizado gás-sólido polidisperso. Resultado do estudo conclui que o modelo baseado nesta abordagem é adequado para modelar reatores de leito fluidizado industriais. Seus resultados indicaram que considerando duas fases sólidas, as partículas com menor diâmetro têm baixa fração volumétrica na parte inferior do leito e elevada fração volumétrica na parte superior e também a temperatura do gás se incrementa conforme se move ascendentemente através do reator devido ao calor da reação de polimerização levando a elevadas temperaturas na parte superior do leito.

2.6.1 Simulações envolvendo o estudo de modelos de arrasto

Van Wachem et al. (2001) compararam o efeito dos modelos de Gidaspow (1994) e Syamlal-O'Brien (1989) sobre a fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em leito fluidizado. O resultado demonstrou que o modelo de Syamlal-O'Brien (1989) prevê uma baixa queda de pressão e expansão do leito, além de pequenas bolhas.

Taghipour et al. (2005) executaram uma avaliação experimental e computacional da fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em um leito fluidizado bidimensional, avaliando o desempenho dos modelos de Syamlal-O'Brien (1989), Gidaspow (1994) e Wen e Yu (1966) por intermédio de simulação numérica usando o software FLUENT. Os resultados da simulação mostraram uma razoável concordância com os dados experimentais através dos perfis de fração volumétrica e de velocidade média dos sólidos.

Du et al. (2006) analisaram os modelos de Richardson e Zaki (1954), Gidaspow (1994), Syamlal-O'Brien (1989), Di Felice (1994) e Arastoopour (1990) na simulação numérica de um leito de jorro bidimensional usando o software FLUENT 6.1. Os resultados mostraram uma distribuição da fração de vazio muito mais complexa que em sistemas de fluidização normal. O estudo demonstrou que os modelos apresentaram boa concordância qualitativa com os experimentos, no entanto destaca ao modelo de Gidaspow (1994) como o mais próximo dos dados experimentais.

Behjat et al. (2008) estudaram numericamente o efeito da fluidodinâmica sobre a transferência de calor num reator de polimerização em leito fluidizado utilizando o código MFIX., e mostraram que o modelo de arrasto de Syamlal-O'Brien (1989) consegue dar uma melhor previsão que o modelo de Gidaspow (1994).

Hosseini et al. (2009) realizaram simulações numéricas de um leito fluidizado bidimensional em altas velocidades. O resultado da simulação determinou que o modelo de Arastoopour (1990) apresenta um melhor perfil de fração volumétrica sólidos.

Vejahati et al. (2009) executaram uma avaliação dos modelos de Di Felice (1994), Gibilaro et al. (1985), Hill-Koch-Ladd (2001), Syamlal-O'Brien (1989), Arastoopour (1990), Gidaspow (1994) e Wen e Yu (1966) através de simulações usando o software FLUENT 6.3.26. Os resultados foram validados com dados experimentais demonstrando que os modelos de Syamlal-O'Brien (1989) e Di Felice (1994) apresentam melhor concordância qualitativa.

Sobieski (2009) simulou um leito de jorro usando o software FLUENT avaliando o desempenho de diferentes modelos de arrasto. O resultado mostra que os modelos de Gidaspow (1994) e Syamlal-O'Brien (1989) são mais adequados na representação da fluidodinâmica.

Hosseini et al. (2010) estudaram os efeitos de diferentes modelos de arrasto sobre a fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em leito fluidizado usando o código MFIX, concluindo que o modelo de Syamlal-O'Brien (1989) e o modelo ajustado de Di Felice (1994) não são adequados para representar a fluidodinâmica do leito fluidizado.

Loha et al. (2012) avaliaram os modelos de Gidaspow (1994), Syamlal O'Brien (1989), Yang et al. (2003) e McKeen-Pugsley (2003) através de simulações numéricas usando o software FLUENT, no intuito de estudar a fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em leito fluidizado utilizando partículas de 530 μm . Os resultados apontaram que o modelo de Gidaspow (1994) se ajusta melhor com as medições experimentais da velocidade axial média das partículas.

2.6.2 Simulações envolvendo o estudo do coeficiente de restituição

Taghipour et al. (2005) estudaram o escoamento gás-sólido em um leito fluidizado bidimensional, reportando que a fluidodinâmica está diretamente vinculada ao valor do coeficiente de restituição. O resultado das simulações sugere um valor de 0,99 para simular a fluidodinâmica de um leito fluidizado acima da velocidade mínima de fluidização.

Du et al. (2006) destacaram que deve ser realizado um ensaio prévio para estimar o coeficiente de restituição quando nenhum dado experimental está disponível.

Trabalhos como o de Chandrasekaran et al. (2005) estudaram o problema da determinação experimental de parâmetros da fase sólida, estudando a fluidodinâmica de um leito com partículas de polietileno. No trabalho foi assumido um valor de 0,6 para o coeficiente de restituição como o mais adequado.

Wang e Ge (2006) pesquisaram e estudaram o efeito do coeficiente de restituição na fluidodinâmica do leito, utilizando micro partículas de vidro. Determinaram que o coeficiente de restituição deveria ter valores entre 0,99 e 0,99995.

Lindborg et al. (2007) pesquisaram a influência do coeficiente de restituição sobre parâmetros do leito fluidizado. Encontraram que o movimento das partículas sólidas é mais sensível ao valor do coeficiente de restituição. No estudo assumiram um valor de 0,997.

Reuge et al. (2008) estudaram a fluidodinâmica de um leito de partículas de alumina, escolhendo um valor arbitrário de 0,8 para o coeficiente de restituição, demonstrando que seu valor parece depender do regime de fluidização assim como também foi o primeiro em avaliar o efeito do valor do ângulo atrito interno na expansão do leito através de simulações numéricas.

Hosseini et al. (2010) estudaram a fluidodinâmica de um leito fluidizado considerando um valor de coeficiente de restituição de 0,9 baseado no trabalho de Taghipour et al. (2005).

Jakobsen et al. (2010) estudaram a sensibilidade do modelo de arrasto e o coeficiente de restituição em leitos fluidizados borbulhantes e circulantes, concluindo que o coeficiente de restituição precisa ser estimado dependendo da vazão do gás e as propriedades das partículas e que esta variável tem menor influência em leitos fluidizados circulantes.

Pode ser observado das seções anteriores que a maioria de trabalhos utilizam pacotes comerciais CFD, tais como: CFX e FLUENT. No entanto, código abertos tais como o MFIX podem ser usados no desenvolvimento de simulações conservando o mesmo grau de aproximação (HERZOG et al. 2012).

A finalidade desta tese é conseguir a melhor representação da fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em um leito fluidizado. O estudo da fluidodinâmica consiste em avaliar 11 modelos de arrasto através de simulações numéricas visando a determinação de parâmetros de projeto de leito fluidizado. A tese também avalia o desenvolvimento de uma correlação para o coeficiente de restituição em função da fração de vazio, no intuito de considerar o efeito do conjunto das partículas sólidas na dissipação de energia cinética, de forma diferente a outros estudos os quais utilizarem um valor constante para este coeficiente.

3 MODELAGEM MATEMÁTICA

A modelagem matemática consiste no desenvolvimento de um modelo que permita a representação de um fenômeno físico através de um conjunto de equações diferenciais ordinárias ou parciais, e a modelagem numérica consiste de um método capaz e eficiente que permita a solução do conjunto de equações que constituem o modelo. O desenvolvimento de uma modelagem matemática geral que consiga descrever o comportamento do escoamento multifásico tem sido uma tarefa desafiadora para pesquisadores neste campo.

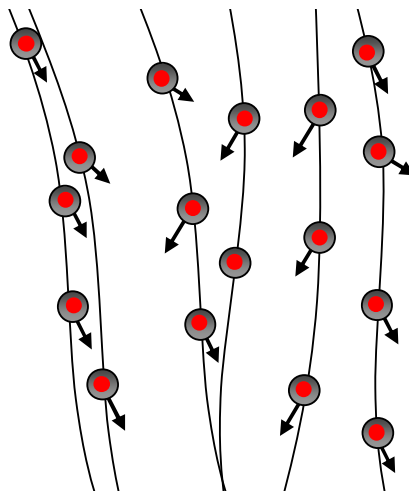
A modelagem do escoamento gás-sólido pode ser classificada basicamente em função da descrição da fase sólida. Quando a fase sólida é considerada como um conjunto ou grupo de partículas discretas as quais obedecem à lei de Newton, denomina-se abordagem Euleriana-Lagrangeana. Entretanto, se a fase sólida é considerada como um meio contínuo, neste caso é chamada de abordagem Euleriana-Euleriana (E-E). Ambas as abordagens têm como objetivo prever a fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em qualquer aplicação de engenharia (VAN DER HOEF et al. 2008).

3.1 ABORDAGEM EULERIANA-LAGRANGEANA

A abordagem Euleriana-Lagrangeana (E-L), também conhecida como modelo da partícula discreta e/ou modelo do elemento discreto (DEM - *Discrete Element Method*), vem recebendo mais interesse por parte dos pesquisadores em função do progresso computacional. A Figura 3.1 representa esta abordagem, onde um número finito de partículas sólidas é modelado baseado na abordagem de Lagrange. Através da mecânica clássica do corpo rígido aplicando a segunda lei do movimento de Newton, a qual inclui o efeito de forças externas, forças de interação com o gás e forças de interação partícula-partícula (colisões), pode-se descrever o comportamento individual e coletivo das partículas sólidas no escoamento. No entanto, a fase contínua é modelada baseada na abordagem Euleriana usando as equações clássicas de conservação da mecânica do contínuo (CROWE, 2006).

Para modelar a trajetória da partícula, o movimento é descrito por intermédio de equações diferenciais ordinárias em coordenadas de Lagrange, consequentemente, a velocidade da partícula e a trajetória podem ser resolvidas integrando diretamente a equação da partícula. Por essa razão a abordagem E-L é adequada quando se deseja expor a natureza transiente e individual do movimento das partículas.

Figura 3.1 – Representação da abordagem Euleriana-Lagrangeana.



Fonte: adaptado de (RANADE, 2002).

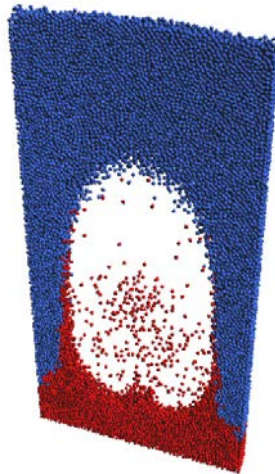
Um fator limitante da abordagem E-L é o número de partículas sólidas consideradas, esta condição pode influenciar a precisão da simulação tornando-a dependente do recurso computacional utilizado (VAN DER HOEF et al. 2008).

Levando em conta a capacidade computacional, esta abordagem é capaz de modelar escoamentos multifásicos diluídos contendo uma fração volumétrica de partículas sólidas abaixo de 10 % (VEJAHATI, 2006).

Com os atuais recursos computacionais esta abordagem se limita a uma quantidade de partículas relativamente baixa na ordem de 10^5 , em comparação à quantidade de partículas presentes em reatores industriais, que pode atingir um valor na ordem de 10^{12} . Por essa razão, para simulações em escala industrial, esta abordagem é computacionalmente intensiva e pode somente ser aplicada em simulações principalmente em equipamentos em escala de laboratório (KUIPERS et al. 2005).

A Figura 3.2 apresenta a simulação de um leito fluidizado gás-sólido baseado nesta abordagem. Pode-se verificar claramente a formação da bolha num meio polidisperso de partículas representado pelas cores vermelha e azul, na qual se observa a representação discreta da trajetória de cada partícula sólida.

Figura 3.2 – Formação de uma bolha num leito fluidizado baseado na abordagem E-L.

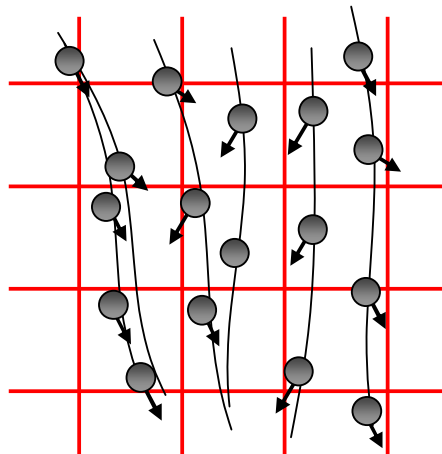


Fonte: (KUIPERS et al. 2005).

3.2 ABORDAGEM EULERIANA-EULERIANA

A abordagem Euleriana-Euleriana (E-E) ou modelo de dois fluidos se caracteriza por considerar ambas as fases como dois meios contínuos interagindo constantemente. Esta abordagem define um conjunto de equações diferenciais parciais (EDP) conservativas da massa, quantidade de movimento e energia desenvolvidos num volume de controle ocupado por ambas as fases como dois contínuos interpenetrando (RANADE, 2002). A Figura 3.3 representa esta abordagem, onde as frações volumétricas e as velocidades das fases estão definidas sobre uma malha composta de múltiplos volumes de controle.

Figura 3.3 – Representação da abordagem E-E.



Fonte: adaptado (RANADE, 2002).

No caso do escoamento gás-sólido, implica que a fluidodinâmica da fase sólida está representada por uma equação tipo Navier-Stokes, o que gera alguns termos especiais tais como pressão e viscosidade da fase sólida.

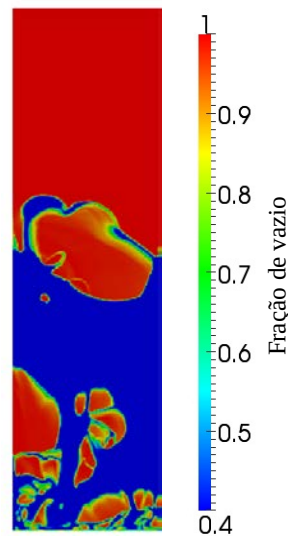
Segundo Enwald et al. (1996), a abordagem E-E precisa de leis de fechamento as quais permitem a representação dos termos não conhecidos das EDP conservativas. Estas leis de fechamento para a fase sólida são derivadas da Teoria Cinética do Escoamento Granular (TCEG) descrita por Lun et al. (1984) e basicamente está classificada em três tipos: *constitutivas*, de *transferência* e *topológicas*.

- a) *Leis constitutivas* permitem representar e descrever como se relacionam propriedades físicas de ambas as fases, geralmente são obtidos de medições experimentais ou axiomas, no entanto elas não descrevem parâmetros de transporte na interface. Por intermédio das leis constitutivas são modelados, (1) o tensor das tensões viscosas, (2) a viscosidade dinâmica, (3) a viscosidade volumétrica e (4) a pressão para ambas as fases.
- b) *Leis de transferência* são equações empíricas que descrevem as diferentes interações que ocorrem na interface de ambas as fases. Através das leis de transferência consegue-se descrever e modelar o transporte de massa, quantidade de movimento e energia.
- c) *Leis topológicas* descrevem a distribuição espacial de uma variável específica do escoamento, por exemplo, a função de distribuição radial.

Esta abordagem é muito útil na simulação do escoamento gás-sólido quando as frações volumétricas das fases são comparáveis ou quando a interação entre as fases domina significativamente a fluidodinâmica do sistema, conseguindo modelar o escoamento tanto em fase diluída e densa em diversas geometrias e a grande escala. Segundo Shah et al. (2011), a abordagem Euleriana-Euleriana é mais conveniente para simular reatores de leito fluidizado industriais grandes e complexos contendo bilhões de partículas sólidas, assim como simulações para o reator “riser” no processo de craqueamento catalítico do petróleo.

A Figura 3.4 representa a simulação do escoamento gás-sólido em leito fluidizado baseado na abordagem Euleriana-Euleriana. A região azul e vermelha representa a distribuição da fração de vazio no leito fluidizado, indicando a presença de partículas sólidas e gás respectivamente.

Figura 3.4 – Simulação do escoamento gás-sólido em leito fluidizado baseada na abordagem E-E.



Segundo Du et al. (2006), do ponto de vista do custo computacional, a abordagem E-E é mais adequada para aplicações práticas que envolvem escoamentos multifásicos complexos. O sucesso de uma simulação do escoamento gás-sólido depende de uma apropriada descrição da tensão dos sólidos e das forças interfaciais pela introdução dos conceitos de pressão e viscosidade a fase sólida. Uma vantagem desta abordagem é seu algoritmo de solução, o qual não é muito exigente computacionalmente, apresentando um menor tempo de cálculo comparado com a abordagem E-L. Gidaspow (1994) executou simulações de leitos fluidizados circulantes usando as duas abordagens e demonstrou que a abordagem E-E é a mais adequada para sistemas de escoamento gás-sólido. A modelagem de leitos fluidizados gás-sólido utilizando a abordagem E-E se mostra mais praticável em vista sistemas a escala industrial apresentam um grande número de partículas sólidas.

3.3 MODELO FLUIDODINÂMICO

Nesta seção é descrita a formulação matemática utilizada para o estudo do escoamento gás-sólido em leito fluidizado, a qual está baseada na abordagem E-E. A primeira característica é a incorporação do conceito denominado de fração volumétrica das fases representada pelo símbolo “ α ”. Este conceito representa o espaço ou volume ocupado por cada fase, no qual as leis de conservação da massa, quantidade de movimento e energia devem ser satisfeitas.

Dessa forma a somatória das frações volumétricas de ambas as fases em cada célula computacional é igual à unidade.

$$\alpha_g + \alpha_p = 1 \quad (3.1)$$

Conservação da massa para a fase gás

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g) + \nabla(\alpha_g \rho_g u_g) = 0 \quad (3.2)$$

Conservação da massa para a fase sólida

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s) + \nabla(\alpha_s \rho_s u_s) = 0 \quad (3.3)$$

Sendo, α_g e α_s as frações volumétricas, u_g e u_s as velocidades médias locais e por último ρ_g e ρ_s as massas específicas da fase gás e da fase sólida respectivamente. Na prática a fração volumétrica de gás também é chamada de fração de vazio. Nas equações (3.2) e (3.3) o primeiro termo à esquerda representa a variação temporal do acumulo de massa por unidade de volume e o segundo termo representa a variação do fluxo de massa convectivo.

Conservação da quantidade de movimento para a fase gás

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g u_g) + \nabla(\alpha_g \rho_g u_g u_g) = -\alpha_g \nabla p_g + \nabla \alpha_g \tau_g + \alpha_g \rho_g \vec{g} - F_D \quad (3.4)$$

Conservação da quantidade de movimento para a fase sólida

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s u_s) + \nabla(\alpha_s \rho_s u_s u_s) = -\alpha_s \nabla p_g - \nabla p_s + \nabla \alpha_s \tau_s + \alpha_s \rho_s \vec{g} + F_D \quad (3.5)$$

Em que, p_g e p_s são as pressões das duas fases τ_g e τ_s representa as tensões de cisalhamento do gás e do sólido respectivamente.

Nas equações da conservação da quantidade de movimento (3.4) e (3.5), o primeiro termo à esquerda representa a taxa líquida de aumento de quantidade de movimento e o segundo termo a transferência da quantidade de movimento por convecção. No lado direito das equações (3.4) e (3.5), o primeiro termo representa a quantidade de movimento devido ao gradiente de pressão atuando sobre um elemento fluido, o segundo é o tensor das tensões viscosas devido ao mecanismo molecular (*difusão*), o terceiro é a força da gravidade e o último a força de arrasto por unidade de volume. Pode ser notado que o termo da força de arrasto em ambas as equações está com sinais opostos, isto significa que uma quantidade de movimento que perde a fase gás é transmitida à fase sólida.

Adicionalmente a equação da quantidade de movimento da fase sólida requer a descrição dos termos da pressão e a tensão de cisalhamento. Quando a movimentação das partículas sólidas é dominada por colisões interpartículas, os conceitos da teoria cinética dos escoamentos granulares podem ser usados com a finalidade de descrever a tensão da fase sólida.

3.3.1 Força de arrasto

A força de arrasto é o termo que conecta as equações da transferência de quantidade de momento para ambas as fases. A fluidodinâmica do escoamento gás-sólido é dominada pela transferência da quantidade de movimento na interface ao longo do escoamento (BUCZEK, 2005).

A dinâmica da partícula em fluidos é governada pela segunda lei de Newton expresso pela equação (3.6). Esta simples equação oculta a complexa natureza fluidodinâmica da partícula e os diversos mecanismos que atuam sobre ela, tais como a força de *arrasto*, provocada por uma diferença de velocidades entre as fases; o *empuxo*, pelo gradiente de pressão do fluido; efeito de *massa virtual*, pela aceleração relativa entre as fases; a força de elevação *Saffman*, pelo gradiente de velocidade do fluido; a força *Magnus*, pela rotação da partícula; a força *Basset*, que depende do movimento das partículas através do fluido; força *Faxen*, que é uma correção aplicada para o efeito de força virtual e a força *Basset* para o gradiente de velocidade de fluido e forças devido a gradientes de temperatura e pressão (SYAMLAL, et al. 1993).

$$m_p \frac{d\vec{V}_p}{dt} = \sum \vec{F} \quad (3.6)$$

No entanto, na modelagem do escoamento gás-sólido, devido à grande diferença de massas específicas entre as fases, as forças interfaciais são menos significativas exceto a força de arrasto. Isso pode ser justificado como uma aproximação razoável já que a força de arrasto representa 90% da força total e de fato o movimento da partícula é dominada pelas flutuações de velocidade na fase gás (LARSEN, 2007).

A força de arrasto exercida sobre uma partícula imersa em um fluido em movimento é causada por dois mecanismos distintos; o primeiro é devido à tensão cisalhante viscosa na superfície conhecido como fricção por contato e o segundo é devido à distribuição de pressão que envolve o corpo, conhecida como arrasto de forma (DECKER, 2003).

Segundo Taghipour et al. (2005) a força de arrasto atuante numa simples esfera em um fluido foi estudada e empiricamente correlacionada para uma ampla faixa de números de Reynolds. No entanto, quando uma partícula sólida se movimenta em um escoamento gás-sólido, o arrasto é afetado pela presença de outras partículas, dessa forma essa influência deve ser levada em conta.

Na literatura, muita atenção tem sido dada sobre uma adequada modelagem deste termo, já que é um parâmetro importante na caracterização fluidodinâmica do escoamento. No caso do escoamento gás-sólido em leito fluidizado, uma formulação apropriada e entendimento deste termo são cruciais, uma vez que é o principal meio pelo qual as partículas sólidas conseguem fluidizar contra a força de gravidade (SHAH, 2012).

A equação (3.7) é a descrição matemática da força de arrasto por unidade de volume num escoamento gás-sólido, a qual está representada pelo produto de um modelo de arrasto e a diferença de velocidade entre as fases, também conhecida como velocidade relativa ou de escorregamento. A magnitude da força de arrasto é diretamente proporcional ao aumento da velocidade relativa entre as fases (DU et al. 2006).

$$F_D = \beta_{gs} (v_g - v_s) \quad (3.7)$$

3.3.1.1 Modelo de arrasto

O modelo de arrasto ou também chamado de coeficiente de transferência de quantidade de movimento, β_{gs} tem um papel fundamental na simulação do escoamento gás-sólido. O modelo de arrasto é uma correlação semiempírica a qual permite quantificar a transferência da quantidade de movimento atuando sobre a superfície das partículas sólidas.

A literatura apresenta uma grande quantidade de modelos de arrasto, equações que visam prever o arrasto no escoamento gás-sólido por intermédio do modelo de arrasto de transferência da quantidade de movimento na interface. Enwald et al. (1996) apresentam uma análise rigorosa sobre as metodologias usadas para obter o modelo de arrasto.

Muitos modelos de arrasto propostos estão baseados no modelo para uma única esfera. Para considerar o efeito de múltiplas partículas no escoamento, consideram a fração volumétrica de partículas sólidas como um fator de correção. Dessa forma é considerada a influência complexa e sutil das partículas sólida sobre a força de arrasto, a qual afeta a dinâmica das partículas (ZHONGHUA e MUJUMDAR, 2008).

Van Wachem et al. (2001) notaram que a aplicação de diferentes modelos de arrasto têm um efeito significativo na representação do escoamento gás-sólido. Isso significa que uma escolha inapropriada do modelo de arrasto pode produzir previsões imprecisas do modelo. Dessa forma, para conseguir uma simulação satisfatória da fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em leito fluidizado, uma escolha apropriada do modelo de arrasto é um fator chave no modelo numérico. A seguir será apresentada uma revisão dos modelos de arrasto mais usados e referenciados em diversos trabalhos envolvendo o estudo e simulação do escoamento gás-sólido em diversas aplicações.

A literatura apresenta o modelo de arrasto proposto por Richardson e Zaki¹ (1954 apud DU et al. 2006), que em seus experimentos encontraram uma relação entre a velocidade terminal de uma única esfera em um meio infinito e a velocidade terminal de sedimentação de um grupo de partículas, conforme a equação (3.8).

$$\beta_{gs} = \frac{\rho_s \alpha_g g}{u_t \alpha_s^{n-1}} \quad (3.8)$$

sendo o expoente “n” dependente do número de Reynolds baseado na velocidade terminal de uma partícula isolada, conforme a equação (3.9).

$$\frac{5,1-n}{n-2,7} = 0,1 \text{Re}_t^{0,9} \quad (3.9)$$

¹ Richardson, J.R., Zaki, W.N., 1954. Sedimentation and fluidization: part I. **Transactions of Institute of Chemical Engineering** 32 (1), 35–53.

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

O modelo de arrasto Wen e Yu (1966) é geralmente o mais usado para simular processos de escoamento em regime diluído tais como no transporte pneumático e leito fluidizado circulante. Este modelo é uma extensão do modelo de Richardson e Zaki (1954) adotado para uma baixa fração volumétrica de sólidos, conforme equação (3.10).

$$\beta_{gs} = \frac{3}{4} C_{D0} \frac{\alpha_s \alpha_g \rho_g |u_g - u_s|}{d_s} \alpha_g^{-2,65} \quad (3.10)$$

sendo C_{D0} o coeficiente de arrasto e Re_s o número de Reynolds da partícula de acordo com as equações (3.11) e (3.12) respectivamente:

$$C_{D0} = \frac{24}{\alpha_g Re_s} [1 + 0,15(\alpha_g Re_s)^{0,687}] \quad (3.11)$$

$$Re_s = \frac{\rho_g |u_g - u_s| d_s}{\mu_g} \quad (3.12)$$

O modelo de Gibilaro et al. (1985) é uma função contínua que considera uma força efetiva de empuxo para produzir um modelo para partículas individuais em uma suspensão fluidizada. O modelo considera um fator de correção do arrasto igual à fração de vazio elevado ao expoente -1.8 sendo:

$$\beta_{gs} = \left[\frac{17,3}{Re_s} + 0,336 \right] \frac{\rho_g |u_g - u_s| \alpha_s \alpha_g^{-1,8}}{d_s} \quad (3.13)$$

Este modelo considera uma forma particular para o número de Reynolds da partícula, expressado pela equação (3.14).

$$Re_s = \frac{\rho_g |u_g - u_s| d_s}{2\mu_g} \quad (3.14)$$

A equação (3.15) representa o modelo de Syamlal e O'Brien (1989), o qual está baseado na medição da velocidade terminal de partículas em um leito fluidizado. Este modelo pode ser usado tanto em simulações do escoamento gás-sólido em regime diluído como denso.

$$\beta_{gs} = \frac{3}{4} C_{D0} \frac{\alpha_s \alpha_g \rho_g |u_g - u_s|}{V_{r,s}^2 \cdot d_s} \quad (3.15)$$

na qual, C_{D0} é o coeficiente de arrasto proposto por Dalla Valle (1948), conforme a equação (3.16).

$$C_{D0} = \left(0,63 + 4,8 \sqrt{\frac{V_{r,s}}{\text{Re}_s}} \right)^2 \quad (3.16)$$

Syamlal e O'Brien (1989) aplicaram uma expressão analítica para a velocidade terminal para a fase sólida, $V_{r,s}$ derivada da correlação porosidade-velocidade proposta por Garside e Al-Dibouni (1977) sendo:

$$V_{r,s} = 0,5(A - 0,06\text{Re}_p + \sqrt{(0,06\text{Re}_p)^2 + 0,12\text{Re}_p(2B - A) + A^2}) \quad (3.17)$$

- para um regime denso, $\alpha_g \leq 0,85$:

$$A = \alpha_g^{4,14} \quad B = 0,8\alpha_g^{1,28}$$

- para um regime diluído, $\alpha_g > 0,85$:

$$A = \alpha_g^{4,14} \quad B = \alpha_g^{2,65}$$

Arastoopour et al. (1990) propuseram um modelo de arrasto derivado do modelo de Gibilaro et al. (1985) modificando o expoente do fator de correção do arrasto. Este modelo foi utilizado na simulação do escoamento gás-sólido em uma unidade de craqueamento denominada *riser*. Ao igual que o modelo de Gibilaro et al. (1985), este modelo pode ser usado para toda faixa de fração volumétrica de sólidos.

$$\beta_{gs} = \left[\frac{17,3}{\text{Re}_s} + 0,336 \right] \frac{\rho_g |u_g - u_s| \cdot \alpha_s \alpha_g^{-2,8}}{d_s} \quad (3.18)$$

$$\text{Re}_s = \frac{\rho_g |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s| d_s}{\mu_g} \quad (3.19)$$

O modelo de arrasto de Ma-Ahmadi² (1990 *apud* SOBIESKI, 2009) está compreendido para ser aplicado numa ampla faixa de número de Reynolds, assim na sua formulação evita-se a dependência de um modelo de coeficiente de arrasto, sendo:

$$\beta_{gs} = 18 \frac{\mu_g \alpha_s}{d_s^2} \left(\frac{\alpha_g}{\alpha_s} \right)^{-2.5\alpha_s} (1 + \text{Re}_s^{0.75}) \quad (3.20)$$

$$\text{Re}_s = \frac{\rho_g |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s| d_s}{\mu_g} \quad (3.21)$$

Di Felice (1994) propôs um modelo muito similar ao modelo de Wen e Yu (1966) representado na equação (3.22). Este modelo apresenta adicionalmente um fator de correção, α_g^{-n} , o qual considera os efeitos da presença de outras partículas no escoamento, e dessa forma, pode ser aplicado em qualquer regime.

$$\beta_{gs} = \frac{3}{4} C_{D0} \frac{\alpha_s \alpha_g^2 \rho_g |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s|}{d_s} \alpha_g^{-n} \quad (3.22)$$

No modelo de Di Felice (1994) o expoente, “ n ” é um fator que depende do número de Reynolds da partícula, de acordo com as equações (3.28) e (3.29).

$$n = 3,7 - 0,65 \exp \left(- \frac{(1,5 - \log \text{Re}_s)^2}{2} \right) \quad (3.23)$$

$$C_{D0} = \left(0,63 + \frac{4,8}{\sqrt{\text{Re}_s}} \right)^2 \quad (3.24)$$

² MA-AHMADI, G.J. A thermodynamic formulation for dispersed turbulence flows, **International Journal of Multiphase Flow**, v.16, p.323, 1990.
 SOBIESKI, W. Momentum Exchange in Solid-Fluid System Modeling with the Eulerian Multiphase Model, **Drying Technology**, v.27, p.653-671, 2009.

Gidaspow (1994) depois de varias medições experimentais propôs um modelo de arrasto para ser utilizado em toda a faixa de fração volumétrica de partículas sólidas. Assim, aproveitou os modelos de Ergun (1952) e Wen e Yu (1966) e definiu o limite de aplicação para cada um deles em função da fração volumétrica de partículas sólidas. Dessa forma tem-se:

- para um regime denso, $\alpha_s > 0,2$

$$\beta_{Ergun} = 150 \frac{\alpha_s \mu_g}{\alpha_g d_s^2} + 1,75 \frac{\alpha_s \rho_g |u_g - u_s|}{d_s} \quad (3.25)$$

- para um regime diluído, $\alpha_s < 0,2$

$$\beta_{Wen-Yu} = \frac{3}{4} C_{D0} \frac{\alpha_s \alpha_g \rho_g |u_g - u_s|}{d_s} \alpha_g^{-2,65} \quad (3.26)$$

Neste ponto o valor do coeficiente de arrasto, C_{D0} depende da região do escoamento determinada pela faixa de número de Reynolds da partícula, sendo:

- para uma região laminar $Re_s < 1000$

$$C_{D0} = \frac{24}{\alpha_g Re_s} [1 + 0,15(\alpha_g Re_s)^{0,687}] \quad (3.27)$$

- para uma região turbulenta $Re_s > 1000$

$$C_{D0} = 0,44 \quad (3.28)$$

Para determinar o arrasto, Gidaspow (1994) juntou os modelos de Ergun (1952) e Wen e Yu (1966) através de uma função chave a qual permite uma rápida e suave transição de um regime.. Este modelo desenvolvido por Gidaspow (1994) é utilizado com muita frequência em processos de modelagem do escoamento gás-sólido em sistemas de fluidização, na qual predomina a maioria das vezes um regime variável entre diluído e denso conforme equações (3.29) e (3.30).

$$\Phi_{gs} = \frac{\tan^{-1}[150 \times 1,75(0,2 - \alpha_s)]}{\pi} + 0,5 \quad (3.29)$$

$$\beta_{gs} = (1 - \Phi_{gs})\beta_{Wen-Yu} + \Phi_{gs}\beta_{Ergun} \quad (3.30)$$

Nieuwland et al. (1994) apresentaram um modelo de arrasto similar ao proposto por Wen e Yu (1966), porém adicionalmente exibe um fator de correção em função da fração volumétrica de partículas sólidas. Este modelo pode ser utilizado em diferentes regimes do escoamento.

$$\beta_{gs} = \frac{3}{4} C_D \frac{\alpha_s \rho_g |u_g - u_s|}{d_s} f(\alpha_s) \quad (3.31)$$

- para um regime diluído, $\alpha_s < 0,1276$:

$$f(\alpha_s) = \frac{1}{0,997 + 442,35\alpha_s - 1733,42\alpha_s^2} \quad (3.32)$$

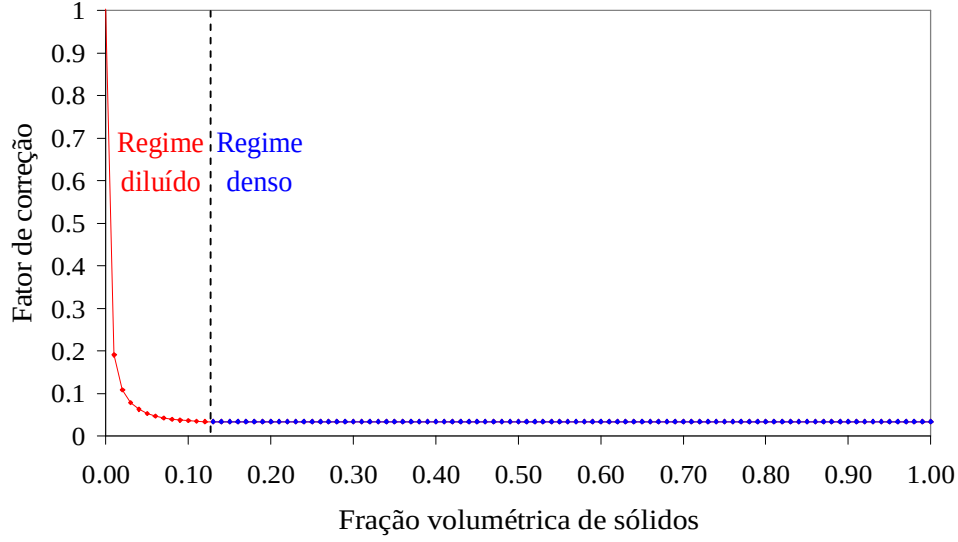
- para um regime denso, $\alpha_s \geq 0,1276$:

$$f(\alpha_s) = \frac{1}{29,22} \quad (3.33)$$

A Figura 3.5 apresenta o comportamento do fator de correção em função da fração volumétrica das partículas sólidas considerando ambos os regimes. Observa-se que o fator de correção possui uma maior variabilidade quando apresenta uma fração volumétrica de sólidos muito baixa, característico de um escoamento em regime diluído.

No entanto, o fator de correção atinge um valor constante conforme a fração volumétrica de sólidos aumenta, nesta situação o valor da força de arrasto é dependente somente do valor da diferença de velocidade das fases ou velocidade relativa.

Figura 3.5 – Fatores de correção do modelo de arrasto de Nieuwland et al. (1994).



O modelo de arrasto RUC (1994) ou modelo de célula única representativa está baseado na queda de pressão através de um meio poroso. Du Plessis e Masliyah (1988) propuseram este modelo para aplicação num meio isotrópico poroso. Du Plessis e Masliyah (1991) o modificaram para um meio granular e a última versão deste modelo foi usada no trabalho de Du Plessis (1994). O modelo RUC é uma modificação da equação de Ergun (1952). A equação de Kozeny-Carman descreve o regime viscoso e a equação de Burke-Plummer descreve o regime turbulento. A diferença principal do modelo RUC é a utilização de constantes derivadas analiticamente em vez dos coeficientes empíricos 150 e 1,75 usados normalmente na equação de Ergun (1952).

$$\beta_{gs} = A_{RUC} \frac{\mu_g \alpha_s^2}{\alpha_g d_s^2} + B_{RUC} \frac{\rho_g \alpha_s}{d_s} |u_g - u_s| \quad (3.34)$$

Os termos, A_{RUC} e B_{RUC} do modelo de arrasto de RUC basicamente estão em função da fração volumétrica, com as seguintes condições.

$$A_{RUC} = \begin{cases} \frac{26,8 \alpha_g^3}{H_e (1 - H_{et}) \cdot (1 - H_e)^2} & \alpha_g \leq 0,99 \\ 785,0 & \alpha_g > 0,99 \end{cases} \quad (3.35)$$

$$B_{RUC} = \begin{cases} \frac{\alpha_g}{(1 - H_e)^2} & \alpha_g > 0,01 \\ 2,25 & \alpha_g \leq 0,01 \end{cases} \quad (3.36)$$

Sendo,

$$H_{et} = (1 - \alpha_g)^{1/3} \quad (3.37)$$

$$H_e = (1 - \alpha_g)^{2/3} \quad (3.38)$$

Andrew e O'Rourke (1996) utilizaram um modelo de arrasto no estudo de leitos de jorro, este modelo pode ser aplicado para um regime denso e diluído, sendo:

$$\beta_{gs} = \frac{3}{8} C_D \frac{\rho_g}{\rho_s} \frac{|u_g - u_s|}{R_p} \quad (3.39)$$

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}_s} \left(\alpha_g^{-2,65} + \frac{\text{Re}_s^{2/3}}{6} \alpha_g^{-1,78} \right) \quad (3.40)$$

$$\text{Re}_s = \frac{2\rho_g |u_g - u_s| R_p}{\mu_g} \quad (3.41)$$

$$R_p = \left(\frac{3V_p}{4\pi} \right)^{1/3} \quad (3.42)$$

Hill-Koch-Ladd (2001) propuseram um modelo orientado à determinação da força de arrasto em partículas esféricas, através de simulações usando o método Lattice-Boltzmann (LBM). Este método é uma alternativa para a resolução das equações de Navier-Stokes, e usa a dinâmica de fluido estatística para descrever o escoamento.

As simulações produziram uma serie de modelos de arrasto para vários números de Reynolds e uma ampla faixa de fração volumétrica de partículas. Infelizmente, a brusca transição entre os modelos, provocou muitos problemas para modelar as transições.

No entanto, Benyahia et al. (2006) estenderam seu trabalho para desenvolver uma formula simples, a qual inclui-se suavemente a variação da faixa de número de Reynolds e fração volumétrica, de forma que pode ser aplicado a modelos multifásicos.

$$\beta_{gs} = 18 \cdot g (1 - \alpha_s)^2 \alpha_s \frac{F}{d_s^2} \quad (3.43)$$

O termo F é definido como:

$$\begin{aligned} F &= 1 + 3/8 \text{Re}_s \quad \alpha_s \leq 0,01 \quad e \quad \text{Re}_s \leq (F_2 - 1)/(3/8) - F_3 \\ F &= F_0 + F_1 \text{Re}_s^2 \quad \alpha_s > 0,01 \quad e \quad \text{Re}_s \leq F_3 + \sqrt{F_3^2 - 4F_1(F_0 - F_2)} / 2F_1 \\ F &= F_2 + F_3 \text{Re}_s \begin{cases} \alpha_s \leq 0,01 \quad e \quad \text{Re}_s > (F_2 - 1)/(3/8) - F_3 \\ \alpha_s > 0,01 \quad e \quad \text{Re}_s > F_3 + \sqrt{F_3^2 - 4F_1(F_0 - F_2)} / 2F_1 \end{cases} \end{aligned} \quad (3.44)$$

e os parâmetros são definidos como segue:

$$F_0 = \begin{cases} (1 - w) \left[\frac{1 + 3\sqrt{\alpha_s/2} + (135/64)\alpha_s \ln(\alpha_s) + 17,41\alpha_s}{1 + 0,681\alpha_s - 8,4\alpha_s^2 + 8,16\alpha_s^3} \right] + w[10\alpha_s/(1 - \alpha_s)^3] & 0,01 < \alpha_s < 0,4 \\ \frac{10\alpha_s}{(1 - \alpha_s)^3} & \alpha_s > 0,4 \end{cases} \quad (3.45)$$

$$F_1 = \begin{cases} \frac{\sqrt{(2/\alpha_s)}}{40} & 0,01 < \alpha_s \leq 0,1 \\ 0,11 + 0,00051 \cdot e^{(11,6\alpha_s)} & \alpha_s > 0,1 \end{cases} \quad (3.46)$$

$$F_2 = \begin{cases} (1 - w) \left[\frac{1 + 3\sqrt{\alpha_s/2} + (135/64)\alpha_s \ln(\alpha_s) + 17,89\alpha_s}{1 + 0,681\alpha_s - 11,03\alpha_s^2 + 15,41\alpha_s^3} \right] + w[10\alpha_s/(1 - \alpha_s)^3] & \alpha_s < 0,4 \\ \frac{10\alpha_s}{(1 - \alpha_s)^3} & \alpha_s \geq 0,4 \end{cases} \quad (3.47)$$

$$F_3 = \begin{cases} 0,9351\alpha_s + 0,03667, & \alpha_s < 0,0953 \\ 0,0673 + 0,212\alpha_s + 0,0232/(1-\alpha_s)^5, & \alpha_s \geq 0,0953 \end{cases} \quad (3.48)$$

$$\text{Re}_s = \frac{\rho_g d_s (1-\alpha_s) |u_g - u_s|}{2\mu_g} \quad (3.49)$$

$$w = e^{(-10(0,4-\alpha_s)/\alpha_s)} \quad (3.50)$$

Yan et al. (2003) propuseram uma nova abordagem derivando um novo modelo modificando os limites de aplicação dos modelos de arrasto de Ergun (1952) e Wen e Yu (1966) utilizados por Gidaspow (1994). Segundo Du et al. (2006) este modelo é capaz de representar a estrutura real dos mecanismos das interações do escoamento gás-sólido. Este modelo pode ser aplicado para um regime denso e diluído, sendo:

- para um regime denso, $\alpha_g < 0,74$

$$\beta_{gs} = 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g d_s^2} + 1,75 \frac{\alpha_s \rho_g |u_g - u_s|}{d_s} \quad (3.51)$$

- para um regime diluído, $\alpha_g \geq 0,74$

$$\beta_{gs} = \frac{3}{4} C_D \frac{\alpha_s \alpha_g \rho_g |u_g - u_s|}{d_s} \omega(\alpha_g) \quad (3.52)$$

Uma característica deste modelo, é que apresenta um fator de correção $\omega(\alpha_g)$ para a determinação do arrasto no regime diluído e seu valor depende do intervalo da fração de vazio em que se desenvolve o escoamento.

- para $0,74 < \alpha_g \leq 0,82$:

$$\omega(\alpha_g) = -0,5760 + \frac{0,0214}{4(\alpha_g - 0,7463)^2 + 0,0044} \quad (3.53)$$

- para $0,82 < \alpha_g \leq 0,97$:

$$\omega(\alpha_g) = -0,0101 + \frac{0,0038}{4(\alpha_g - 0,7789)^2 + 0,0040} \quad (3.54)$$

- para $\alpha_g > 0,97$:

$$\omega(\alpha_g) = -31,8295 + 32,8295\alpha_g \quad (3.55)$$

$$C_D = \frac{24}{\alpha_g \text{Re}_s} \left[1 + 0,5(\alpha_g \text{Re}_s)^{0,687} \right] \quad (3.56)$$

$$\text{Re}_s = \frac{\rho_g |v_g - v_s| d_s}{\mu_g} \quad (3.57)$$

McKeen e Pugsley (2003) estudaram a fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em leitos fluidizados com partículas do grupo A. Para isso modificaram o modelo de arrasto de Gibilaro et al. (1985) incluindo um fator de correção "C" com a finalidade de ajustar a força de arrasto. O valor para este fator está entre 0,1 e 0,2. Os resultados demonstraram uma razoável representação da fluidodinâmica do escoamento.

$$\beta_{gs} = C \left[\frac{17,3}{\text{Re}_s} + 0,336 \right] \frac{\rho_g |u_g - u_s| \alpha_s \alpha_g^{-1,8}}{d_s} \quad (3.58)$$

3.3.1.2 Coeficiente de arrasto

O coeficiente de arrasto é uma quantidade adimensional usada para corrigir o valor da do arrasto. Este coeficiente é basicamente desenvolvido a partir de medições experimentais. A literatura apresenta uma quantidade significativa de expressões para o coeficiente de arrasto, as quais podem ser classificadas em duas categorias (Mabrouk et al. 2007).

Segundo Mabrouk et al. (2007) a primeira categoria representada por C_{D0} , estão os coeficientes de arrasto desenvolvidos para uma única partícula esférica. A segunda categoria representada por, C_D , estão os coeficientes que consideram a influência do conjunto de partículas através da fração volumétrica dos sólidos, como por exemplo, o coeficiente de Haider e Levenspiel, (1989).

Uma característica das expressões da primeira categoria está no fato de que muitas foram obtidas experimentalmente a partir de condições de queda livre de partículas em meio líquido-sólido, no entanto são utilizadas na modelagem do escoamento gás-sólido em sistemas fluidizados (MABROUK et al. 2007).

Além disso, os coeficientes de arrasto para partículas individuais podem ser correlacionados para diferentes regiões de escoamento tais como Stokes, laminar e turbulento, delimitadas pelo número de Reynolds da partícula, Re_s , tem-se:

a) Região de Stokes ($0 < Re_s < 0,2$)

Quando Re_s tende a zero, o arrasto das partículas esféricas é devido inteiramente aos efeitos de atrito por contato.

$$C_{D0} = \frac{24}{Re_s} \quad (3.59)$$

b) Região viscosa ($0,2 < Re_s \leq 1000$)

Nesta região, o arrasto por contato e de forma, são importantes. O coeficiente de arrasto diminui uniformemente com o aumento do número de Reynolds. Muitas equações empíricas foram propostas para estimar o valor do coeficiente de arrasto nesta região. As equações (3.60) (3.61) (3.62) são expressões desenvolvidas por Schiller e Nauman (1935), Ihme et al., (1972) e Ishii e Zuber (1979) respectivamente extraídas do trabalho de Decker (2003), a saber:

$$C_{D0} = \frac{24}{Re_s} \left(1 + 0,15 Re_s^{0,687} \right) \quad (3.60)$$

$$C_{D0} = \frac{24}{Re_s} + 5,48 Re_s^{-0,573} + 0,36 \quad (3.61)$$

$$C_{D0} = \frac{24}{Re_s} (1 + 0,1 Re_s^{0,75}) \quad (3.62)$$

c) Região turbulenta ($Re_s > 1000$)

A região turbulenta é dominada pelo arrasto de forma, por conseguinte o coeficiente de arrasto não depende do número de Reynolds da partícula, sendo:

$$C_{D0} = 0,44 \quad (3.63)$$

d) Todas as regiões ($0 \leq Re_s \leq \infty$)

Um coeficiente de arrasto desenvolvido a partir de dados experimentais, o qual abrange todas as regiões tomando em consideração possíveis descontinuidades provocadas pela mudança da região de escoamento provocado pelo aumento na velocidade axial da fase gás.

Um exemplo desta descontinuidade seria uma mudança ao passar de uma região de Stokes para uma viscosa, a correlação de arrasto válida para qualquer região do escoamento é:

$$C_{D0} = \left[\left(\frac{24}{K_1 Re_s} \right)^{0,85} + K_2^{0,85} \right]^{1,18} \quad (3.64)$$

em que, K_1 e K_2 são constantes do modelo que dependem da esfericidade da partícula, Φ_s :

$$K_1 = 0,843 \cdot \log_{10} \left(\frac{\Phi_s}{0,065} \right)^{0,85} \quad (3.65)$$

$$K_2 = 5,31 - 4,88 \Phi_s \quad (3.66)$$

Haider e Levenspiel (1989) propuseram um coeficiente de arrasto para partículas esféricas e não esféricas obtidas através de medições em um fluido estacionário considerando a esfericidade das partículas:

$$C_D = \frac{24}{Re_s} (1 + b1 Re_s^{b2}) + \frac{b3 \cdot Re_s}{b4 + Re_s} \quad (3.67)$$

$$b1 = \exp(2,3288 - 6,4581\Phi_s + 2,4489\Phi_s^2) \quad (3.68)$$

$$b2 = 0,0964 + 0,5565\Phi_s \quad (3.69)$$

$$b3 = \exp(4,905 - 13,8944\Phi_s + 18,4222\Phi_s^2 - 10,2599\Phi_s^3) \quad (3.70)$$

$$b4 = \exp(1,4681 + 12,58\Phi_s - 20,7322\Phi_s^2 + 15,8855\Phi_s^3) \quad (3.71)$$

A esfericidade, Φ_s ou também chamado de fator de forma, é definido como:

$$\Phi_s = \frac{s}{S} \quad (3.72)$$

sendo “s” a área da superfície da esfera tendo o mesmo volume da partícula e, “S” a área real superficial da partícula.

3.3.2 Tensor das tensões

O tensor das tensões tem uma função muito importante na descrição fluidodinâmica do escoamento gás-sólido, especialmente na descrição da fase sólida. Ao longo da pesquisa sobre o escoamento gás-sólido, foram propostas muitas formas para descrever o tensor da fase sólida no intuito de representá-la matematicamente como um fluido. Essa consideração exige a definição de variáveis físicas tais como a pressão e a viscosidade para a fase sólida.

Assim, surgiram diversas alternativas, as quais vão desde a definição de valores constantes até o uso de teorias, tais como a Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares (TCEG), a qual permite a representação das variáveis pressão e viscosidade para a fase sólida, assumindo similaridade com um gás denso (GIDASPOW, 1994).

3.3.2.1 Tensor da tensão da fase gás

O tensor da tensão da fase gás, $\overline{\overline{S}}_g$ é composto por dois termos: o primeiro termo do lado direito da equação (3.73) representa a contribuição da pressão hidrostática, P_g e o segundo termo representa o tensor das tensões viscosas, $\overline{\overline{\tau}}_g$.

$$\bar{\bar{S}}_g = -P_g \bar{\bar{I}} + \bar{\bar{\tau}}_g \quad (3.73)$$

Para a fase gás, o tensor das tensões viscosas é modelado assumindo a hipótese de Stokes, e considerando o gás como um fluido newtoniano, dessa forma o tensor das tensões viscosas da fase gás é expresso por:

$$\bar{\bar{\tau}}_g = 2\mu_g \bar{\bar{D}}_g + \lambda_g \text{tr}(\bar{\bar{D}}_g) \bar{\bar{I}} \quad (3.74)$$

Sendo, μ_g e λ_g a viscosidade dinâmica e volumétrica da fase gás respectivamente, $\bar{\bar{I}}$ é tensor identidade e $\bar{\bar{D}}_g$ é denominado tensor taxa de deformação definido como:

$$\bar{\bar{D}}_g = \frac{1}{2} [\nabla \bar{\bar{v}}_g + (\nabla \bar{\bar{v}}_g)^T] \quad (3.75)$$

Assumindo a hipótese de Stokes, tem-se que:

$$\lambda_g + \frac{2}{3}\mu_g = 0 \quad (3.76)$$

O tensor das tensões viscosas para a fase gasosa é expresso por:

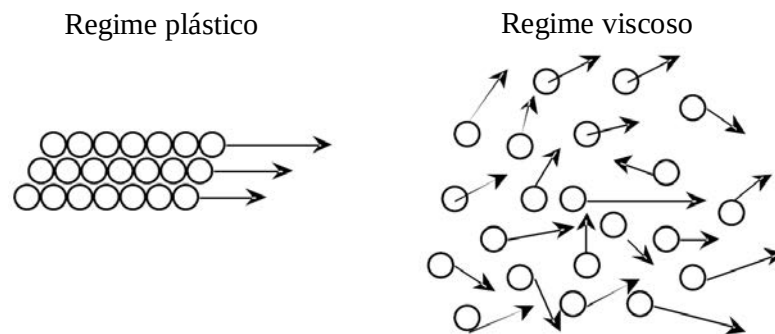
$$\bar{\bar{\tau}}_g = \alpha_g \mu_g (\nabla \bar{\bar{v}}_g + (\nabla \bar{\bar{v}}_g)^T) + \alpha_g (\lambda_g - \frac{2}{3}\mu_g) \nabla \cdot \bar{\bar{v}}_g \bar{\bar{I}} \quad (3.77)$$

3.3.2.2 Tensor da tensão da fase sólida

A modelagem do tensor das tensões da fase sólida se caracteriza por considerar a fase sólida como um fluido newtoniano. Para representar o tensor das tensões é utilizada a TCEG, que é resultado de uma analogia da teoria cinética dos gases densos. A TCEG se fundamenta no fato de que o escoamento gás-sólido apresenta partículas sólidas num movimento aleatório resultado das colisões interpartículas, assim de certa forma esse comportamento é semelhante ao movimento aleatório e caótico das moléculas num gás.

A TCEG define o escoamento gás-sólido ou escoamento granular como o resultado da interação entre a fase gás e a fase sólida. As partículas sólidas experimentam forças de tensão quando a fase gás escoar através dos espaços intersticiais entre as partículas sólidas provocando a sua movimentação e interação. O escoamento gás-sólido apresenta três mecanismos de interação para as partículas sólidas sendo: (1) *cinético* (2) *colisional* e (3) *atrito*. Quando a fração volumétrica de partículas sólidas é baixa, a interação interpartículas é dominada pelo mecanismo *cinético* e *colisional* desenvolvendo um regime viscoso, e quando o escoamento apresenta uma fração volumétrica de sólidos elevada ou próxima do ponto de compactação a interação interpartículas é dominada pelo mecanismo de atrito, dando origem a um regime plástico. A Figura 3.6 representa os dois regimes que desenvolve o escoamento gás-sólido, sendo o regime plástico e viscoso, conforme (RANADE, 2002).

Figura 3.6 - Regime plástico e viscoso no escoamento gás-sólido.



Fonte: (RANADE, 2002).

Segundo Syamlal et al. (1993) quando o escoamento está em regime denso ou plástico emprega-se a teoria do estado crítico de Schaeffer (1987). Este regime é descrito por uma deformação plástica do conjunto de partículas devido a uma tensão aplicada.

Para um escoamento em regime viscoso característico de um escoamento diluído se utiliza a teoria cinética dos escoamentos granulares descrita por Jenkins e Savage (1983), em que as partículas sólidas possuem um movimento caótico similar ao movimento das moléculas em um gás, por isso a este regime também se chama de “*escoamento rápido granular*”. Ambas as teorias são combinadas por meio de um ponto chave definido pela fração volumétrica no estado de compactação crítico, α_g^* , porém alguns autores consideram neste ponto o estado de mínima fluidização. Baseado no modelo proposto por Johnson e Jackson (1987), o tensor das tensões da fase sólida pode ser definido como:

- para um regime plástico se, $\alpha_g \leq \alpha_g^*$ tem-se:

$$\bar{\bar{S}}_s = -p_s^p \bar{\bar{I}} + \bar{\bar{\tau}}_s^p \quad (3.78)$$

- para um regime viscoso se, $\alpha_g > \alpha_g^*$ tem-se:

$$\bar{\bar{S}}_s = -p_s^v \bar{\bar{I}} + \bar{\bar{\tau}}_s^v \quad (3.79)$$

nos quais os sobrescritos, p e v indicam o regime plástico e viscoso respectivamente, $\bar{\bar{S}}_s$ é o tensor das tensões, p_s é a pressão do sólido, $\bar{\bar{\tau}}_s$ o tensor das tensões viscosas, $\bar{\bar{I}}$ é o tensor unitário e α_g^* é a fração volumétrica do gás na compactação crítico. Para um regime plástico, a formulação do tensor das tensões viscosas está baseada nos estudos de Schaeffer (1987) sendo:

$$\bar{\bar{\tau}}_s^p = 2\mu_s^v \bar{\bar{D}}_s \quad (3.80)$$

O tensor das tensões da fase sólida no regime viscoso é expresso por:

$$\bar{\bar{\tau}}_s^v = 2\mu_s^v \bar{\bar{D}}_s + \lambda_s^v tr(\bar{\bar{D}}_s) \bar{\bar{I}} \quad (3.81)$$

sendo que, μ_s^v e λ_s^v representam a viscosidade dinâmica e volumétrica da fase sólida no regime viscoso. Uma característica destas viscosidades é que não são propriedades reais.

3.2.2.2.1 Pressão na fase sólida

A pressão na fase sólida representa a força normal da fase sólida resultado da constante interação interpartícula. Na literatura existe uma aceitação geral sobre a representação matemática da pressão da fase sólida, que considera a contribuição dos três mecanismos de interação interpartícula, sendo (1) *cinético*, (2) *colisional* (3) *atrito* entre as partículas sólidas.

As equações para representar a pressão da fase sólida considerando os três efeitos foram extraídas de Syamlal et al. (1993), sendo:

$$p_s = p_{s,kin} + p_{s,col} + p_{s,fr} \quad (3.82)$$

em que, p_s é a pressão da fase sólida, $p_{s,kin}$, $p_{s,col}$ e $p_{s,fr}$ representam o efeito cinético, colisão e atrito, respectivamente. A equação (3.83) descreve a pressão do sólido pela interação cinética, a qual representa a transferência da quantidade de movimento no escoamento, resultado da circulação das partículas sólidas através de camadas imaginárias de cisalhamento no escoamento, representado como:

$$p_{s,kin} = \alpha_s \rho_s \theta_s \quad (3.83)$$

A equação (3.84) representa a pressão da fase sólida pela interação *colisional*, a qual descreve a transferência da quantidade de movimento resultado das colisões diretas entre as partículas sólidas, sendo:

$$p_{s,col} = 2\rho_s(1+e)\alpha_s^2 g_0 \theta_s \quad (3.84)$$

Conforme Lun et al. (1984), se o escoamento encontra-se num regime viscoso, a expressão matemática da pressão deve considerar a interação *cinética* e *colisional* numa única expressão aditiva, a mesma expressão foi corroborada por Syamlal et al. (1993) sendo:

$$p_s^v = p_{s,kin} + p_{s,col} \quad (3.85)$$

sendo, p_s^v a pressão do sólido no regime viscoso. Assim tem-se:

$$p_s^v = \alpha_s \rho_s \theta_s + 2\rho_s(1+e)\alpha_s^2 g_0 \theta_s \quad (3.86)$$

Quando a TCEG é usada aparecem novos termos tais como: “ θ_s ” que representa a temperatura granular, “ e ” o coeficiente de restituição e “ g_0 ” a função de distribuição radial.

Conforme Syamlal et al. (1993) para descrever a pressão da fase sólida em regime plástico, onde a interação por *atrito* é dominante, define-se uma função a partir da teoria de escoamento plástico, sendo:

$$p_{s,fr} = \alpha_s P^* \quad (3.87)$$

em que P^* é representado por uma lei empírica expresso na equação (3.88).

$$P^* = \alpha_s A (\alpha_g^* - \alpha_g)^n \quad (3.88)$$

sendo $A = 10^{25}$ e $n = 10$, a interação por atrito constitui uma forma particular dos escoamentos em regime plástico, assim a pressão da fase sólida no regime plástico é expressão como:

$$p_s^p = p_{s,fr} \quad (3.89)$$

3.2.2.2.2 Viscosidade da fase sólida

O tensor das tensões viscosas contém os termos da viscosidade dinâmica e volumétrica respectivamente. Estas viscosidades surgem pela transferência de quantidade de movimento entre as partículas sólidas devido às colisões e ao movimento (AHUJA e PATWARDHAN, 2008).

Da mesma forma que a pressão da fase sólida, para representar a viscosidade também se considera a interação *cinética*, *colisional* e por *atrito* interpartículas. A equação (3.90) representa a viscosidade dinâmica, na qual numa expressão aditiva, consideram-se os três mecanismos de interação.

$$\mu_s = \mu_{s,kin} + \mu_{s,col} + \mu_{s,fr} \quad (3.90)$$

sendo, μ_s a viscosidade da fase sólida e $\mu_{s,kin}$, $\mu_{s,col}$ e $\mu_{s,fr}$ representam a viscosidade da fase sólida devido à interação *cinética*, *colisional* e por *atrito* respectivamente.

A interação cinética atua de forma semelhante em ambas as fases. A transferência da quantidade de movimento é produzida pela movimentação aleatória das moléculas do gás assim como também das partículas sólidas, entre regiões próximas com diferentes velocidades. Gidaspow (1994) desenvolveu uma expressão para representar a interação *cinética*, sendo:

$$\mu_{s,kin} = \frac{10\rho_s d_s \sqrt{\theta\pi}}{96(1+e)g_0} \left[1 + \frac{4}{5} \alpha_s g_0 (1+e) \right]^2 \quad (3.91)$$

A interação por *colisão* se desenvolve de maneira semelhante em ambas as fases, tanto as moléculas e partículas sólidas entram em contato direto. Porém, no caso do gás, devido à grande distancia média entre moléculas, a interação por *colisão* é menor quando comparado à interação *cinética*. Por outro lado, no caso do escoamento gás-sólido a interação por *colisão* entre as partículas sólidas é dominante, assim Ding e Gidaspow (1990), desenvolveram uma expressão:

$$\mu_{s,col} = \frac{4}{5} \alpha_s \rho_s d_s g_0 (1+e) \left(\frac{\theta}{\pi} \right)^{1/2} \quad (3.92)$$

Quando o escoamento gás-sólido atinge um regime viscoso deve-se considerar tanto a interação *cinética* e por *colisão*, que ao igual que a pressão do sólido, pode ser expresso numa simples função aditiva, sendo, μ_s^v a viscosidade no regime viscoso.

$$\mu_s^v = \mu_{s,kin}^v + \mu_{s,col}^v \quad (3.93)$$

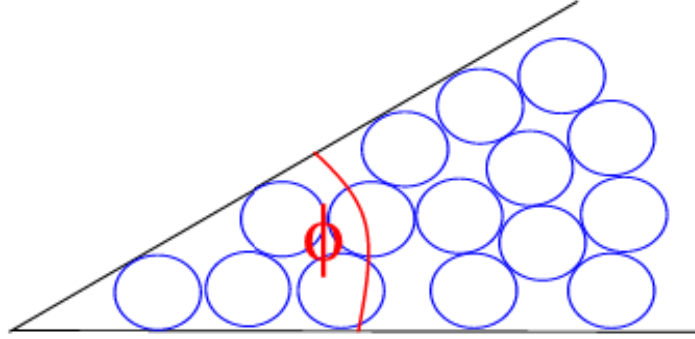
Quando o escoamento está num regime plástico, uma viscosidade por interação do *atrito* é introduzida conforme a fração volumétrica de gás (fração de vazio) se aproxima ao ponto de empacotamento crítico, ϕ_g^* . Por essa razão, o *atrito* entre as partículas sólidas geram uma grande quantidade de tensão, a qual é modelada pela expressão de Schaeffer (1987), sendo:

$$\mu_{s,fr} = \frac{P^* \cdot \sin \Phi}{2\sqrt{I_{2D}}} \quad (3.94)$$

A Figura 3.7 exibe a determinação do ângulo de atrito interno, " ϕ " para uma determinada quantidade de amostra de partículas sólidas. Pode-se observar que quando o ângulo de atrito interno tende a zero, a viscosidade por efeito de atrito tende também a zero.

O valor do ângulo de atrito interno varia dependendo do tipo da partícula sólida. Partículas lisas e arredondadas apresentam baixos valores de ângulo de atrito interno, por exemplo, partículas muito finas ou coesivas têm um elevado ângulo interno. Os valores para o ângulo de atrito interno esta na faixa entre 15° e 45°, com um típico valor de 30° (REUGE et al. 2008).

Figura 3.7 - Representação do ângulo de atrito interno.



Fonte: (DARTEVELLE, 2003).

no qual " I_{2D} " é o segundo invariante do tensor taxa de deformação expresso como:

$$I_{2D} = \frac{1}{6} \left[(D_{s11} - D_{s22})^2 + (D_{s22} - D_{s33})^2 + (D_{s33} - D_{s11})^2 \right] + D_{s12}^2 + D_{s23}^2 + D_{s31}^2 \quad (3.96)$$

Assim, a viscosidade no regime plástico é definida como:

$$\mu_s^p = \mu_{s,fr} \quad (3.95)$$

Por último a viscosidade volumétrica descreve o produto da translação e colisão na fase sólida, descrevem a resistência das partículas sólidas aos efeitos de compressão ou expansão (TEATERS, 2012).

As partículas sólidas no escoamento comportam-se como um fluido compressível no regime viscoso e chega a ser um meio incompressível quando atinge o ponto de empacotamento.

$$\lambda_s = \frac{4}{3} \alpha_s \rho_s d_s g_0 \left(1 + e \left(\frac{\theta}{\pi}\right)^{1/2}\right) \quad (3.97)$$

3.3.3 Teoria cinética dos escoamentos granulares

A Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares (TCEG) surge no intuito de representar a fase sólida como um meio contínuo e descrever matematicamente as propriedades físicas. A TCEG se apoia na analogia entre o movimento caótico e aleatório das partículas sólidas e as moléculas de um gás denso. A aplicação da TCEG dá surgimento a novas variáveis que precisam ser entendidas e definidas no escoamento, estas variáveis são a temperatura granular, coeficiente de restituição e a função de distribuição radial.

3.3.3.1 Temperatura granular

O termo tensão na fase sólida pode ser descrita, fazendo-se uma analogia entre o movimento aleatório das partículas sólidas e ou movimento térmico das moléculas em um gás, isto é conhecido como analogia da teoria cinética.

A viscosidade e pressão da fase sólida dependem da intensidade das flutuações da velocidade da partícula, assim como a tensão do gás depende da intensidade das flutuações da velocidade do gás. Portanto, a energia cinética associada com a componente da velocidade aleatória da fase sólida tem sido caracterizada como uma energia pseudotérmica ou “*temperatura granular*”, de forma similar à energia interna quando caracterizada por uma temperatura termodinâmica verdadeira. Este movimento aleatório das partículas é representado pela temperatura granular, a qual é proporcional à raiz média quadrada da velocidade da partícula (SYAMLAL et al. 1993; MANDICH, 2010).

$$\theta_s = \frac{1}{3} \langle u_s^2 \rangle \quad (3.98)$$

No entanto, a temperatura granular é proporcional à energia granular do contínuo, sendo que a energia granular é definida como a energia cinética específica da componente aleatória da velocidade da partícula:

$$E_s = \frac{3}{2} \theta_s \quad (3.99)$$

Como a tensão da fase sólida depende da magnitude das flutuações da velocidade da partícula, é necessário um balanço da energia granular na forma conservativa associada com estas flutuações da velocidade da partícula para suplementar o balanço do contínuo e a quantidade de movimento para ambas as fases, este balanço é expresso na forma:

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s \theta_s) + \nabla (\alpha_s \rho_s u_s \theta_s) \right] = (-P_s \bar{I} + \bar{\tau}_s) \nabla u_s + \nabla (k_{\theta_s} \nabla \theta_s) - \gamma_{\theta_s} - 3\beta \theta_s \quad (3.100)$$

O termo $(-P_s \bar{I} + \bar{\tau}_s) \nabla u_s$ representa a taxa de geração de energia pelo tensor de tensões da fase sólida. O termo, $\nabla (k_{\theta_s} \nabla \theta_s)$, representa o fluxo de energia por difusão, sendo o coeficiente de difusão para a energia granular de Gidaspow (1994).

$$k_{\theta_s} = \frac{150 \rho_s d_s \sqrt{\theta_s \pi}}{384(1+e)g_0} \left[1 + \frac{6}{5} \alpha_s g_0 (1+e) \right]^2 + 2 \alpha_s^2 \rho_s d_s (1+e) g_0 \sqrt{\frac{\theta_s}{\pi}} \quad (3.101)$$

O termo, Γ_s representa a dissipação da energia por efeito das colisões inelásticas de Lun et al. (1984) e usado por Syamlal et al. (1993), sendo:

$$\gamma_{\theta_s} = \frac{12(1-e^2)g_0}{d_s \sqrt{\pi}} \rho_s \alpha_s \theta_s^{3/2} \quad (3.102)$$

O termo, 3_{gs} proposto por Ding e Gidaspow (1990) representa a taxa de energia granular através do amortecimento viscoso, onde $_{gs}$ é o modelo de arrasto.

Conforme Syamlal et al. (1993) existe outra forma de determinar a temperatura granular, por intermédio de uma expressão algébrica derivada da equação de conservação da energia granular de Lun et al. (1984).

Para isso é assumindo que a energia granular é dissipada localmente, desprezando as contribuições de difusão e convecção e retendo somente os termos de dissipação e geração. Segundo Van Wachem et al. (2001) esta simplificação é uma suposição razoável no caso da modelagem do escoamento gás-sólido em leito fluidizado.

Deste modo consegue-se reduzir o esforço computacional por volta de 20 %, sem afetar os resultados da simulação. A expressão algébrica para calcular a temperatura granular da fase sólida é dada como:

$$\theta_s = \left\{ \frac{-K_1 \alpha_s tr(\bar{\bar{D}}_s) + \sqrt{K_1^2 tr^2(\bar{\bar{D}}_s) \alpha_s^2 + 4K_4 \alpha_s [K_2 tr^2(\bar{\bar{D}}_s) + 2K_3 tr^2(\bar{\bar{D}}_s)]}}{2K_4 \alpha_s} \right\}^2 \quad (3.103)$$

sendo os valores das constantes "K" definidos como:

$$K_1 = 2(1+e)\rho_s g_0 \quad (3.104)$$

$$K_2 = \frac{4d_s \rho_s (1+e)\alpha_s g_0}{3\sqrt{\pi}} - \frac{2}{3}K_3 \quad (3.105)$$

$$K_3 = \frac{d_s \rho_s}{2} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{3(3-e)} [1 + 0,4(1+e)(3e-1)\alpha_s g_0] + \frac{8\alpha_s g_0 (1+e)}{5\sqrt{\pi}} \right\} \quad (3.106)$$

$$K_4 = \frac{12(1-e^2)\rho_s g_0}{d_s \sqrt{\pi}} \quad (3.107)$$

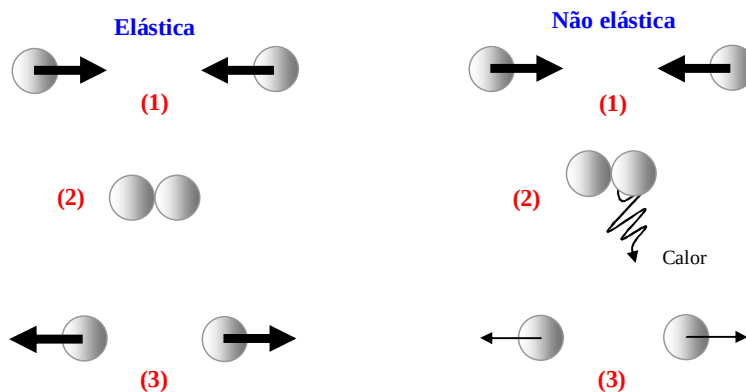
3.3.3.2 Coeficiente de restituição

O coeficiente de restituição " e " é um parâmetro adimensional que mede a quantidade de energia cinética conservada depois de uma colisão entre as partículas. Este parâmetro é definido na simulação de sistemas que apresentam o escoamento gás-sólido e o seu valor pode influenciar consideravelmente os resultados (JAKOBSEN et al. 2010).

Segundo Teaters (2012), na simulação de leitos fluidizados muitos autores definem valores de coeficiente de restituição na faixa entre 0,9 e 0,99. De modo que se o valor do coeficiente é igual a 0,9 significa que a colisão é 90% elástica, perdendo um 10 % da energia cinética na forma de calor.

A Figura 3.8 representa uma colisão das partículas dividida em três etapas, o (1) *encontro*, (2) a *colisão* e (3) *retorno*. Assim a figura do lado esquerdo, representa uma colisão elástica ($e = 1$) e a outra uma colisão inelástica ($e \neq 1$) caracterizada por uma perda de energia na forma de calor.

Figura 3.8 – Colisão binária de partículas sólidas no escoamento gás-sólido.

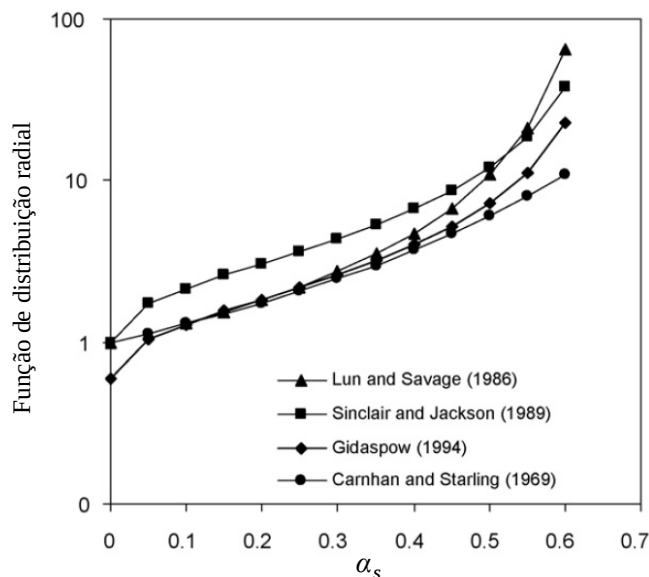


3.3.3.3 Função de distribuição radial

A função de distribuição radial, g_0 é considerada como uma medida ou fator de correção adimensional que modifica a frequência ou probabilidade de colisão das partículas dentro do escoamento gás-sólido quando está próximo do ponto de empacotamento, evitando o excesso de compactação das partículas (AHUJA e PATWARDHAN 2008).

A Figura 3.9 apresenta o comportamento deste parâmetro em função da fração volumétrica de partículas sólidas usando diferentes modelos da literatura.

Figura 3.9 – Comparação de funções de distribuição radial



Fonte: (AHUJA e PATWARDHAN 2008).

Segundo Ding e Gidaspow (1990), quando a fração volumétrica de partículas sólidas aumenta consegue-se atingir um valor próximo do ponto de empacotamento. Usualmente o valor da fração volumétrica de partículas sólidas no ponto de empacotamento está entre 0,6 e 0,7.

Neste ponto, as partículas sólidas mantêm um contínuo contato e o movimento das partículas sólidas é quase impossível. Nesse caso a função de distribuição radial aproxima-se do infinito. O código MFIX usa a forma padrão da função de distribuição radial de Carnahan e Starling (1969).

Dos trabalhos de Ahuja e Patwardhan (2008) são citados alguns modelos de função de distribuição radial presentes na literatura, sendo:

Carnahan e Starling (1969)

$$g_0 = \frac{1}{\alpha_g} + \frac{1,5\alpha_s}{\alpha_g^2} + \frac{0,5\alpha_s^2}{\alpha_g^3} \quad (3.108)$$

Lun e Savage (1986)

$$g_0 = \left(1 - \frac{\alpha_s}{\alpha_{s,\max}}\right)^{-2,5\alpha_{s,\max}} \quad (3.109)$$

Ma-Ahmadi (1986)

$$g_0 = \frac{(1 + 2,5\alpha_s + 4,5904\alpha_s^2 + 4,515439\alpha_s^3)}{[1 - (\alpha_s \alpha_{s,\max})]^{0,678021}} \quad (3.110)$$

Sinclair e Jackson (1989)

$$g_0 = \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,\max}}\right)^{1/3}\right]^{-1} \quad (3.111)$$

Ding e Gidaspow (1990); Gidaspow (1994) propuseram:

$$g_0 = \frac{3}{5} \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,\max}}\right)^{\frac{1}{3}}\right]^{-1} \quad (3.112)$$

Syamlal et al. (1993) desprezam o terceiro termo da equação (3.108) e adotam a função de distribuição radial sendo:

$$g_0 = \frac{1}{\alpha_g} + \frac{1,5\alpha_s}{\alpha_g^2} \quad (3.113)$$

sendo que, $\alpha_{s,\max}$ representa a fração volumétrica das partículas sólidas no leito, quando estas atingem o ponto de máxima compactação. O valor é função do tipo de material, porém as partículas apresentam um valor dentro na faixa de 0,6 e 0,7.

4. MODELAGEM NUMÉRICA

O progressivo avanço dos recursos computacionais durante as últimas três décadas tem levado ao desenvolvimento de códigos orientados à solução das equações governantes do escoamento multifásico. Deste modo, pesquisadores têm iniciado a solução numérica destas equações através do CFD, validando as aproximações numéricas com dados experimentais.

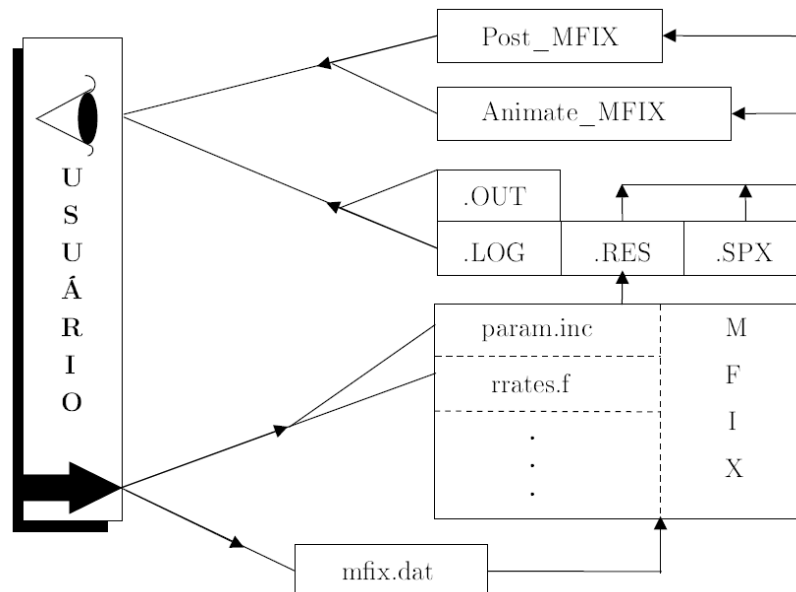
O CFD apresenta uma variedade de códigos computacionais, os quais podem ser classificados como códigos específicos (*in-house code*), códigos livres (*open-source code*) e os códigos comerciais. Como exemplos de códigos livres têm-se ao MFIX, o qual é utilizado em simulações numéricas de sistemas de escoamento fluido-sólido, outro código é o OpenFOAM, utilizado em uma variedade de problemas envolvendo ambos escoamento monofásico e multifásico, também tem sido utilizado em simulações nos últimos anos (GELDERBLOOM et al. 2003; HERZOG et al. 2012). Os códigos comerciais tais como CFX e FLUENT que atualmente são propriedade do ANSYS, são amplamente utilizados em simulações envolvendo escoamento monofásico e multifásico (YANG et al. 2003; TAGHIPOUR et al. 2005).

Para realizar as simulações utilizou-se o código computacional aberto MFIX (*Multiphase Flow with Interphase eXchanges*), escrito em linguagem de programação Fortran desenvolvido pelo *National Energy Technology Laboratory* (NETL). O código MFIX descreve a fluidodinâmica, transferência de calor e reações químicas em sistemas fluido-sólido. O código tem sido usado para simular o escoamento gás-sólido envolvendo operações de leito fixo, fluidizado, borbulhante, jorro e circulante. Os cálculos realizados pelo código MFIX fornecem dados transientes com distribuições tridimensionais de variáveis físicas tais como pressão, velocidade, temperatura e frações de massa para as espécies. A versão atual do código baseia-se nas formulações Euleriana-Euleriana e Euleriana-Lagrangeana para modelar o escoamento gás-sólido, respectivamente.

Para o desenvolvimento das simulações numéricas através do código MFIX utilizou-se como plataforma o sistema operativo UBUNTU 12.04 e como compilador o GNU Fortran 95, todos eles distribuídos gratuitamente. A interface entre o usuário e o código MFIX é esquematizada na Figura 4.1

A simulação numérica começa pela definição de um arquivo de entrada chamado “mfix.dat”. Este arquivo contém todas as informações da simulação tais como: as equações que serão resolvidas, tempo de simulação, rotinas que serão utilizadas entre outras.

Figura 4.1 - Interface entre o usuário e o código MFIX.



Fonte: (SYAMLAL, 1998).

No arquivo “mfix.dat” determina-se também os parâmetros físicos e numéricos que serão utilizados, a geometria, tipo de discretização, condições iniciais e de contorno, assim como os dados de saída e o intervalo em que estes dados serão atualizados e salvos nos respectivos arquivos. No caso de uma simulação envolva reações químicas, precisa-se da especificação de todas as reações envolvidas através da rotina “rrates.f”.

“Existem dois arquivos de texto de saída que o usuário poderá acessar diretamente, estes são: “.LOG” e “.OUT.” O arquivo “.LOG” contém as informações sobre o progresso da simulação tais como erros, convergência da simulação e o numero de iterações. O arquivo “.OUT” compreende as informações especificadas no arquivo “mfix.dat” e os valores padrões do MFIX, além de informações sobre a simulação em toda a malha computacional. Cada célula computacional é representada por uma sequencia de três caracteres, a qual permite identificar o tipo de célula e informações sobre condições iniciais e de contorno em toda a malha computacional, dessa forma é possível verificar se a entrada de dados foi processada corretamente.

O programa de pós-processamento “post_MFIX” é utilizado para extrair dados dos arquivos “.RES” ou “.SPX”, assim é possível examinar os resultados da simulação, tais como a fração de vazio, pressão, velocidade, temperatura, entre outros e escrevê-los em arquivos de texto.

No presente trabalho foram modificadas as seguintes rotinas do código MFIX: “drag_gs.f” e “cal_mu_s.f”.

A rotina “drag_gs.f” tem como função armazenar os modelos de arrasto e seus respectivos parâmetros envolvidos no cálculo da força de arrasto. Neste trabalho foram implementados vários modelos de arrasto com exceção dos modelos de Gidaspow (1994) e Syamlal O'Brien (1989). A rotina “cal_mu_s.f” é responsável de todos os parâmetros envolvidos no cálculo do tensor de cisalhamento para a fase sólida. As modificações desta rotina consistiram na implementação de uma correlação para o coeficiente de restituição.

4.1 DISCRETIZAÇÃO

Conforme Syamlal et al. (1993) a discretização das equações que modelam o escoamento gás-sólido está fundamentada no Método de Volumes Finitos (MVF). O MVF se caracteriza por manter um caráter conservativo, dividindo o domínio físico do problema em um número discreto de volumes de controle, nas quais as equações básicas que modelam o problema são integradas.

Uma importante vantagem deste método é que se assegura a conservação da massa, quantidade de movimento e energia. Este método é muito útil na modelagem de sistemas que apresentam grandes domínios, nos quais uso de uma malha fina implicaria um elevado custo computacional. Dessa forma pode-se fazer uso de uma malha grosseira para a solução do problema (PATANKAR, 1980; FORTUNA, 2000).

A discretização das equações é discutida usando a equação de transporte para uma propriedade escalar, ϕ , sendo:

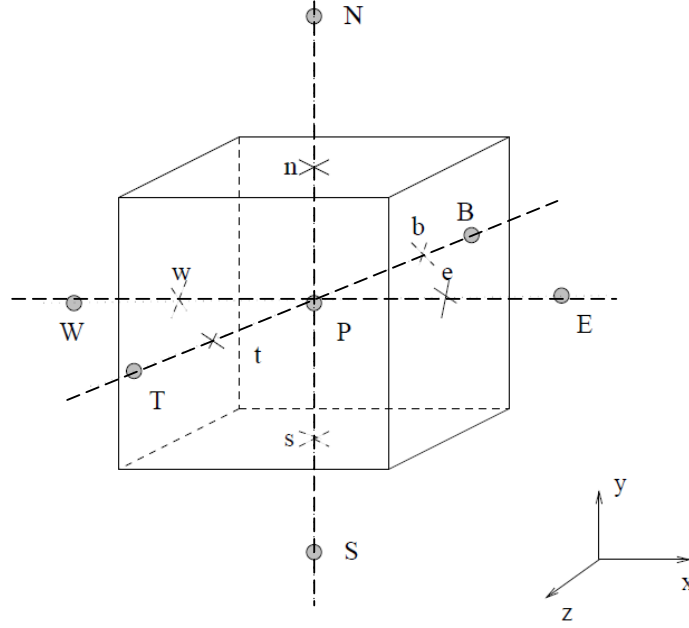
$$\frac{\partial}{\partial t}(\sum_m \phi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\sum_m v_m \phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + R_\phi \quad (4.1)$$

sendo que, $m = 0$ representa a fase gás e $m = 1$ denota a fase sólida, Γ_ϕ é o coeficiente de difusão para a variável escalar, ϕ e R_ϕ é o respectivo termo fonte.

No escoamento multifásico o termo fonte contabiliza a transferência de massa e de quantidade de movimento na interface. A equação (4.1) tem todas as características das equações para o escoamento multifásico exceto pelo termo da transferência na interface.

A Figura 4.2 apresenta o volume de controle onde a equação de transporte é integrada. O ponto ou nodo P se localiza no centro do volume de controle e as letras W, E, N, S, T e B representam os nodos centrais dos volumes de controle adjacentes ou vizinhos. A posição entre os nodos ou interface é designada como, w, e, n, s, t e b , respectivamente.

Figura 4.2 – Volume de controle.



Fonte: (SYAMLAL, 1998).

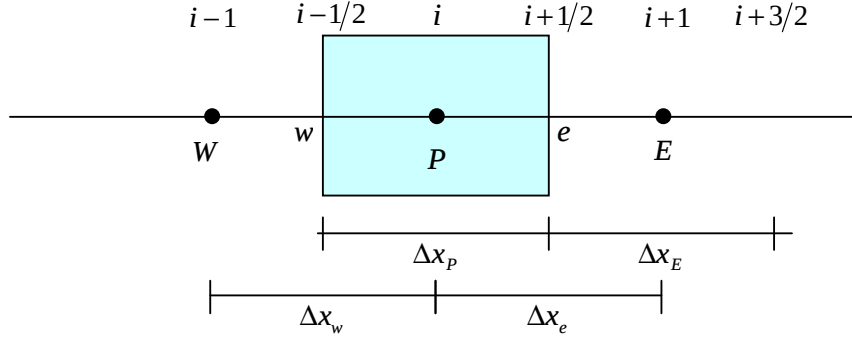
Uma equação unidimensional escalar é usada como de exemplo do processo de discretização. O termo de convecção e difusão tem a seguinte forma na direção x , sendo:

$$\rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \quad (4.2)$$

A equação (4.2) é integrada sobre um diferencial de volume de controle, dV , indicado na Figura 4.3 resultando:

$$\int_w^e \left[\rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right] dV = \left[\rho u \phi_e - \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \right] A_e - \left[\rho u \phi_w - \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] A_w \quad (4.3)$$

Figura 4.3 – Volume de controle unidimensional para a discretização na direção x .



Fonte: (SYAMLAL, 1998).

O passo seguinte é determinar, em função das incógnitas nos pontos discretos os valores dos termos difusivos. Para isso, esses termos podem ser aproximados por um simples esquema de interpolação de segunda ordem de precisão. Assim, tem-se:

$$\left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)_e \approx \Gamma_{\phi} \frac{(\Phi_e - \Phi_p)}{\Delta x_e} \quad (4.4)$$

$$\left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)_w \approx \Gamma_{\phi} \frac{(\Phi_p - \Phi_w)}{\Delta x_w} \quad (4.5)$$

A discretização dos termos convectivos é uma tarefa fundamental. Em escoamentos nos quais a convecção tem um papel importante, como aqueles que apresentam altos números de Reynolds, uma discretização adequada dos termos convectivos é de extrema importância para a qualidade da solução numérica.

A partir da equação (4.3), a discretização do termo de convecção equivale a determinar um valor ou expressão para q nas faces e e w do volume de controle. Uma interpolação linear entre os valores adjacentes de q resulta em:

$$\Phi_e = \frac{q_e + q_p}{2} \quad (4.6)$$

$$\Phi_w = \frac{q_p + q_w}{2} \quad (4.7)$$

Este tipo de interpolação, denominada de média simples, origina resultados de segunda ordem de precisão. Segundo Syamlal (1998) escoamentos dominados por convecção, assim como no caso do escoamento gás-sólido, este tipo de interpolação introduz oscilações na solução e conduz a um esquema numérico instável. Uma solução para estabilizar os cálculos é o esquema de discretização UPWIND, conhecido na literatura como FOUP (*First Order Up Winding*) (PATANKAR 1980).

$$\Phi_e = \begin{cases} \Phi_p & e \quad u \geq 0 \\ \Phi_E & e \quad u \leq 0 \end{cases} \quad (4.8)$$

$$\Phi_w = \begin{cases} \Phi_W & e \quad u \geq 0 \\ \Phi_p & e \quad u \leq 0 \end{cases} \quad (4.9)$$

A discretização UPWIND é de primeira ordem de precisão, e em geral introduz uma forte *difusão numérica* na solução. Apesar disso, por não produzir soluções oscilatórias, dispersivas, este esquema ainda é encontrado na literatura. Conforme Syamlal et al. (1993) os esquemas de *primeira ordem* quando utilizados na simulação do escoamento gás-sólido em leito fluidizado, geralmente produzem bolhas de aspecto diferente à física real por causa do esquema numérico utilizado.

De Souza Braun (2009) desenvolveu uma comparação detalhada entre esquemas de discretização de primeira e segunda ordem. Os resultados demonstraram que os modelos de segunda ordem conseguem reproduzir de forma muito aproximada o formato da bolha no leito. Comumente são utilizados esquemas de alta ordem para a discretização do termo convectivo, com a finalidade de prevenir a difusão numérica, a qual tipicamente ocorre com os esquemas de primeira ordem tais como o UPWIND.

No entanto, esquemas de “alta ordem” apresentam algumas deficiências devido às oscilações quando são encontradas descontinuidades. Não obstante, os esquemas TVD (*Total Variation Diminishing*) podem ajudar a evitar estas oscilações nos esquemas de “alta ordem”. Tais esquemas são utilizados como limitadores sobre umas variáveis dependentes.

O valor do escalar, Φ_e é um exemplo de um esquema TVD e tem a forma:

$$\Phi_e = \Phi_E + \Phi_p \quad (4.10)$$

Sendo, $\bar{\phi}_e = 1 - \phi_e$. O fator de peso convectivo, ϕ_e na equação (4.10) é calculado derivado do fator *Downwind* dwf_e , que segue as seguintes condições:

Se $u_e \geq 0$

$$\phi_e = dwf_e \cdot \phi_E + (1 - dwf_e) \cdot \phi_P$$

$$\phi_e = dwf_e$$

Se $u_e < 0$

$$\phi_e = dwf_e \cdot \phi_P + (1 - dwf_e) \cdot \phi_E$$

$$\phi_e = 1 - dwf_e$$

O fator *Downwind*, dwf_e é calculado usando o método *Superbee* de Sweby (1984) de segunda ordem, que é um esquema TVD implementado no MFIX. Este esquema pode ser aplicado a esquemas explícitos conservativos de convecção e difusão de qualquer ordem de precisão (SYAMLAL, 1998; XIE, 2007).

A formulação para a discretização em termos do fator *Downwind* para o esquema *Superbee* é dado como:

$$dwf_e = \frac{1}{2} \max[0, \min(1, 2\gamma), \min(2, \gamma)] \quad (4.11)$$

$$\Gamma = \frac{\tilde{\phi}_C}{(1 - \tilde{\phi}_C)} \quad (4.12)$$

sendo, Γ é a variável no calculo de dwf_e e $\tilde{\phi}_C$ é determinada seguindo as seguintes condições:

Se $u_e \geq 0$

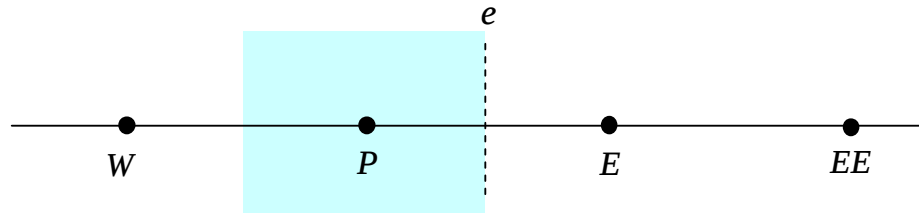
$$\tilde{\phi}_C = \frac{q_p - q_w}{\phi_E - \phi_w}$$

Se $u_e < 0$

$$\tilde{\phi}_C = \frac{q_E - q_{EE}}{\phi_P - \phi_{EE}}$$

A Figura 4.4 apresenta a localização dos escalares, ϕ_w , ϕ_P , ϕ_E , e ϕ_{EE} .

Figura 4.4 – Localização dos nodos para o esquema TVD.



Fonte: (SYAMLAL, 1998).

Dessa forma, utilizando o método de volumes finitos e as técnicas de discretização obtêm-se a versão discretizada integrando a equação de transporte (4.1) sobre o volume de controle da Figura 4.2 e escrevendo todos os termos, da esquerda para a direita, tem-se:

- Termo transiente

$$\int_{VC} \frac{\partial}{\partial t} (\phi_P V) \approx [\phi_P - \phi_P^{old}] \frac{\Delta V}{\Delta t} \quad (4.13)$$

- Termo convectivo

$$\begin{aligned}
 \int_{VC} \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_m v_{mi}) dV \approx & \left\{ \rho_e (\phi_m)_e - \rho_e (\phi_m)_P \right\} (u_m)_e A_e \\
 & - \left\{ \rho_w (\phi_m)_P - \rho_w (\phi_m)_w \right\} (u_m)_w A_w \\
 & + \left\{ \rho_n (\phi_m)_P - \rho_n (\phi_m)_n \right\} (v_m)_n A_n \\
 & - \left\{ \rho_s (\phi_m)_P - \rho_s (\phi_m)_s \right\} (v_m)_s A_s \\
 & + \left\{ \rho_t (\phi_m)_P - \rho_t (\phi_m)_t \right\} (w_m)_t A_t \\
 & - \left\{ \rho_b (\phi_m)_P - \rho_b (\phi_m)_b \right\} (w_m)_b A_b
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

- Termo difusivo

Os fluxos difusivos são discretizados utilizando as equações (4.6) sendo:

$$\begin{aligned}
 \int_{VC} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) dV \approx & \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e A_e - \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w A_w \\
 & + \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n A_n - \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s A_s \\
 & + \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_t A_t - \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_b A_b
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

- Termo fonte

O termo fonte é tipicamente linearizado devido a sua tendência não linear, da seguinte forma:

$$R_\phi \approx \bar{R}_\phi - R'_\phi \phi_P \tag{4.16}$$

Para a estabilidade do esquema numérico, é essencial que $R'_\phi \geq 0$ (PATANKAR, 1980).

Então a integral do termo fonte sobre um volume de controle origina:

$$\int_{VC} R_\phi dV \approx \bar{R}_\phi \Delta V - R'_\phi \phi_P \Delta V \tag{4.17}$$

Combinando as equações deduzidas acima, obtém-se:

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{(\phi'_m - \phi'_m)^{Old}}{\Delta t} \right) \frac{\Delta V}{\Delta t} \\
 & + \left\{ \phi'_e (\phi'_E - \phi'_P) - \phi'_e (\phi'_P - \phi'_E) \right\} (u_m)_e A_e - \left\{ \phi'_w (\phi'_P - \phi'_P) - \phi'_w (\phi'_P - \phi'_W) \right\} (u_m)_w A_w \\
 & + \left\{ \phi'_n (\phi'_N - \phi'_P) - \phi'_n (\phi'_P - \phi'_N) \right\} (v_m)_n A_n - \left\{ \phi'_s (\phi'_P - \phi'_P) - \phi'_s (\phi'_P - \phi'_S) \right\} (v_m)_s A_s \\
 & + \left\{ \phi'_t (\phi'_T - \phi'_P) - \phi'_t (\phi'_P - \phi'_T) \right\} (w_m)_t A_t - \left\{ \phi'_b (\phi'_P - \phi'_P) - \phi'_b (\phi'_P - \phi'_B) \right\} (w_m)_b A_b \\
 & = \left\{ (\Gamma_\phi)_e \frac{(\phi'_E - \phi'_P)}{\Delta x_e} A_e - (\Gamma_\phi)_w \frac{(\phi'_P - \phi'_W)}{\Delta x_w} A_w \right\} \\
 & + \left\{ (\Gamma_\phi)_n \frac{(\phi'_N - \phi'_P)}{\Delta y_n} A_n - (\Gamma_\phi)_s \frac{(\phi'_P - \phi'_S)}{\Delta y_s} A_s \right\} \\
 & + \left\{ (\Gamma_\phi)_t \frac{(\phi'_T - \phi'_P)}{\Delta z_t} A_t - (\Gamma_\phi)_b \frac{(\phi'_P - \phi'_B)}{\Delta z_b} A_b \right\} + (\bar{R}_\phi - R'_\phi) \Delta V
 \end{aligned} \tag{4.18}$$

Sendo que se definem as densidades macroscópicas como: $\phi'_m = \phi'_m$. A equação (4.18) pode ser rearranjada de forma a obter o seguinte sistema de equações lineares para ϕ , sendo:

$$a_p \phi_p = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + S_p \tag{4.19}$$

na qual S_p é a contribuição dos termos transientes e a integral do termo fonte linearizado, o subscrito nb representa a contribuição das faces e, w, n, s, t e b da célula.

A forma discretizada da equação da continuidade pode ser obtida da equação (4.18), assumindo $\phi=1$ e substituindo o termo fonte por $\sum R_i$.

Então, subtraindo a equação da continuidade discretizada multiplicada por ϕ da equação (4.18), obtém-se uma equação linear da forma (4.19), na qual os coeficientes são definidos como segue:

$$\begin{aligned}
a_E &= D_e - \bar{e}(\bar{m}_m)_E(u_m)_e A_e \\
a_W &= D_w - \bar{w}(\bar{m}_m)_W(u_m)_w A_w \\
a_N &= D_n - \bar{n}(\bar{m}_m)\Phi_N(v_m)_n A_n \\
a_S &= D_s - \bar{s}(\bar{m}_m)\Phi_S(v_m)_s A_s \\
a_T &= D_t - \bar{t}(\bar{m}_m)\Phi_T(w_m)_t A_t \\
a_B &= D_b - \bar{b}(\bar{m}_m)\Phi_B(w_m)_b A_b \\
a_p &= \sum_{nb} a_{nb} + a_p^0 + R'_\phi \Delta V + \left[\left[\sum R_l \right] \right] \Delta V \\
S_p &= a_p^0 \Phi_p + R'_\phi \Delta V + \Phi_p \left[\left[\sum R_l \right] \right] \Delta V \\
a_p^0 &= \frac{(\bar{m}_m)_0}{\Delta t} \Delta V \\
D_k &= \frac{(\Gamma_\phi)_k A_k}{\Delta x_k}, k = e, w, n, s, b, t
\end{aligned} \tag{4.20}$$

4.2 SOLUÇÃO NUMÉRICA

Esta seção descreve a solução numérica para escoamentos multifásicos implementada no código MFIX. Segundo Syamlal (1998) uma extensão do SIMPLE (Semi Implicit Method for Pressure-Linked Equations) de Patankar (1980) é utilizada para a resolução das equações discretizadas. Vários pontos importantes precisam ser discutidos quando algoritmos desenvolvidos para um escoamento monofásico é estendido para resolver as equações do escoamento multifásico. Spalding (1980) destaca três pontos característicos das equações multifásicas:

- No escoamento multifásico existem mais campos de variáveis e, portanto há mais equações comparadas com o escoamento monofásico. Esta condição desacelera o processo de cálculo, mas não torna o algoritmo mais complexo.
- A pressão aparece nas componentes da equação da quantidade de movimento para o escoamento monofásico, mas não há uma equação adequada para resolver o campo de pressão. O fundamental do algoritmo SIMPLE é a dedução de uma equação para a pressão – a equação de correção para a pressão. A correção da pressão propicia a correção para o campo tal que a equação da continuidade é satisfeita exatamente (para a precisão da máquina). Não há uma única maneira para a dedução de tal equação para escoamento multifásico, desde que há mais uma equação para a continuidade no escoamento multifásico.

- As equações da quantidade de movimento para o escoamento multifásico são fortemente acopladas por meio do termo de transferência de quantidade de movimento na interface. Fazer este termo totalmente implícito é essencial para o êxito do esquema numérico. No código MFIX, as equações de quantidade de movimento são resolvidas em todo o domínio computacional. Para tornar o termo de transferência na interface totalmente implícito, todas as equações para cada componente de velocidade (tanto da fase gás como da fase sólida) devem ser resolvidas juntas, o que origina uma matriz com estrutura não padrão. Uma alternativa mais comum é utilizar o algoritmo de eliminação parcial (PEA – *Partial Elimination Algorithm*) de Spalding (1980), que será discutido adiante.

No escoamento gás-sólido, outros dois pontos críticos determinam o sucesso do esquema numérico. O primeiro ponto é o tratamento das regiões com altas concentrações de partículas sólidas (região próxima ao empacotamento). A fração volumétrica de partículas sólidas varia de zero até um valor máximo aproximado de 0,6 na região do empacotamento, porém este valor pode variar minimamente dependendo do tipo da partícula sólida.

O limite inferior é facilmente manipulável, pela formulação das equações lineares, tais que valores não negativos da fração de volume são calculados. A restrição da fração volumétrica de partículas sólidas no ou abaixo do valor máximo é mais difícil. A formação da região de empacotamento é análoga ao ponto de condensação de vapor compressível em um líquido incompressível. As forças de reação que resistem à compactação das partículas sólidas resultam na pressão da fase sólida, a qual deve ser distinguida da pressão do fluido.

A função da pressão da fase sólida aproxima-se do limite do empacotamento, e assim retarda a compactação das partículas sólidas. Este método permite à fase sólida (meio granular) ser suavemente compressível, no entanto também pode ser considerado incompressível como foi feito por Syamlal e O'Brien (1989).

O MFIX utiliza uma equação para a correção da fração volumétrica da fase sólida. A equação para a correção da pressão da fase sólida precisa que o termo $\partial P_s / \partial \epsilon_s$ não desapareça quando $\epsilon_s \rightarrow 0$. A equação para a correção da fração volumétrica da fase sólida não possui tal restrição, porém deve contabilizar o efeito da pressão da fase sólida tal que a computação seja estabilizada na região de empacotamento.

Um segundo ponto importante é a dificuldade no cálculo dos campos das variáveis nas interfaces nas quais uma fração volumétrica tende a zero. O campo das variáveis associado a uma fase não está definido nas regiões em que a fração volumétrica é zero, e assim pode admitir valores arbitrários. Entretanto, um algoritmo computacional não deve utilizar tal arbitrariedade no conjunto de valores. O cálculo das componentes das velocidades em tais interfaces é mais difícil do que as quantidades escalares devido a linearização dos termos convectivos não lineares. Numa interface na qual a fração volumétrica da fase está próxima de zero a componente normal da velocidade torna-se muito grande. Desde que o produto da fração volumétrica da fase e da componente da velocidade é ainda próximo de zero, o erro na conservação de quantidade de movimento é negligenciável.

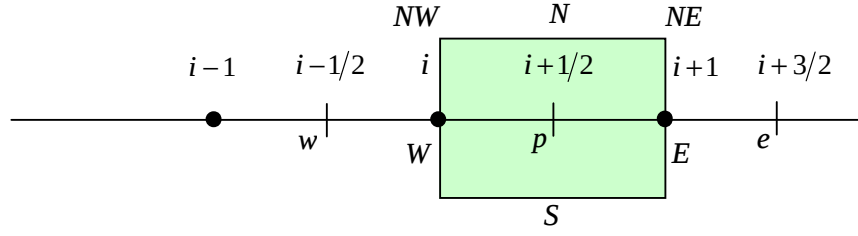
Entretanto, valores elevados da velocidade da fase rapidamente desestabilizam os cálculos, é necessário que o método para prevenir tais desestabilizações. O MFIX utiliza um cálculo aproximado da velocidade normal nas interfaces (definido por um pequeno valor inicial para a fração volumétrica da fase sólida). O escoamento gás-sólido é inerentemente instável e cálculos no estado estável (regime permanente) são possíveis somente para poucos casos, tais como no transporte pneumático em regime diluído. Para a maioria de casos envolvendo escoamento gás-sólido, é conduzida uma simulação em regime transiente e os resultados são médias temporais. Simulações transientes divergem, quando o passo temporal é muito grande, no entanto, um passo temporal muito pequeno torna a computação muito lenta. O código MFIX ajusta automaticamente a amplitude do passo temporal, dentro de limites especificados pelo usuário, com a finalidade de reduzir o tempo de processamento.

4.2.1 Equação da conservação da quantidade de movimento discretizada

A discretização das equações da quantidade de movimento é semelhante àquela de transporte escalar, com a diferença que os volumes de controle estão deslocados. De acordo com Patankar (1980), se as componentes de velocidade e pressão são armazenadas em um mesmo local da malha, leva a uma série de problemas.

Uma malha deslocada é usada para prevenir resultados não físicos para os campos de pressão. Conforme mostrado na Figura 4.5, em relação ao volume de controle escalar, a direção, x é deslocada para a metade leste da célula do volume de controle. Similarmente as direções y e z são deslocadas para a metade das células.

Figura 4.5 - Volume de controle unidimensional deslocado para a componente x



Fonte: (SYAMLAL, 1998).

Para calcular a convecção na variação da quantidade de movimento, as componentes da velocidade são requeridas nas posições E, W, N, S . Elas são calculadas a partir dos valores vizinhos, por meio de uma média aritmética:

$$(u_m)_E = f_E (u_m)_p + (1 - f_E)(u_m)_e \quad (4.21)$$

$$(v_m)_N = f_p (v_m)_{NW} + (1 - f_p)(v_m)_{NE} \quad (4.22)$$

O valor da fração volumétrica requerida no centro da célula p é calculado de maneira semelhante:

$$(m)_p = f_p (m)_W + (1 - f_p)(m)_E \quad (4.23)$$

sendo:

$$f_E = \frac{\Delta x_e}{\Delta x_p + \Delta x_e} \quad (4.24)$$

$$f_p = \frac{\Delta x_E}{\Delta x_W + \Delta x_E} \quad (4.25)$$

A componente x da equação da quantidade de movimento pode ser escrita como:

$$a_p(u_m)_p = \sum_{nb} a_{nb}(u_m)_{nb} + b_p - A_p \left((P_g)_E - (P_g)_W \right) + \left(\sum_l F_{lm} (u_l - u_m)_p \right) \Delta V_e \quad (4.26)$$

A equação (4.26) é similar à equação de transporte escalar discretizada, porém com uma diferença nos dois últimos termos: o termo do gradiente de pressão é determinado baseado no campo de pressão real P_g e é adicionado ao termo fonte da equação linear.

O termo de transferência na interface acopla todas as equações para a mesma componente (x, y e z). A definição dos termos restantes na equação (4.26) é dada a seguir:

$$\begin{aligned} a_e &= D_E - \bar{D}_E (u_m)_E A_E \\ a_w &= D_W - \bar{D}_W (u_m)_W A_W \\ a_n &= D_N - \bar{D}_N (v_m)_N A_N \\ a_s &= D_S - \bar{D}_S (v_m)_S A_S \\ a_t &= D_T - \bar{D}_T (w_m)_T A_T \\ a_b &= D_B - \bar{D}_B (w_m)_B A_B \\ a_p &= \sum_{nb} a_{nb} + a_p^0 + R'_{u_m} \Delta V_e + \left[\sum R_l \right] \Delta V_e + S' \\ b &= a_p^0 u_m^0 + \bar{R}_{u_m} \Delta V_e + u_m \left[- \sum R_l \right] \Delta V_e + (u_m)_e g_x \Delta V_e + \bar{S} \\ a_p^0 &= \frac{(u_m)_e^0 \Delta V_e}{\Delta t} \\ D_E &= \frac{(u_m)_E A_E}{\Delta x_E} \end{aligned} \quad (4.27)$$

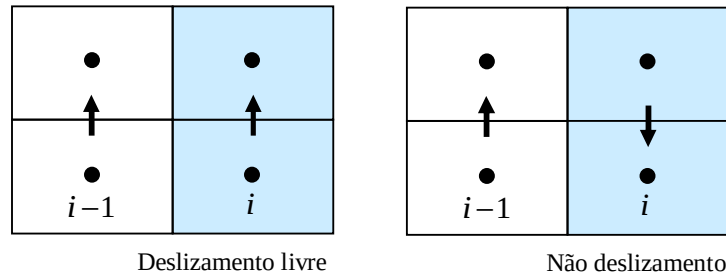
O coeficiente central a_p e o termo fonte b contêm os termos adicionais S' e $\bar{S}$, os quais contabilizam as fontes que surgem das coordenadas cilíndricas, do modelo de meio poroso e do termo da tensão de cisalhamento.

4.2.2 Condições de contorno

Na simulação de um escoamento gás-sólido em leito fluidizado bidimensional, utilizou-se para a fase gás uma condição de contorno de não escorregamento, a qual estabelece que a componente normal e tangencial do vetor velocidade é nula na superfície da parede, isto é, $u_g = v_g = 0$. No caso da fase sólida, a definição das condições de contorno na parede é mais complicada devido à dificuldade da caracterização da interação das partículas sólidas com a superfície parede. As condições de contorno na parede, implementadas no MFIX para a solução da equação linear são dadas a seguir (SYAMLAL, 1998).

A componente da velocidade na direção, y na parede leste é utilizada como um exemplo (Figura 4.6). A implementação para as outras componentes é análoga.

Figura 4.6 - Condição de deslizamento livre e de não deslizamento



Fonte: (SYAMLAL, 1998).

- Deslizamento livre

$$v_m(i, j+1/2, k) - v_m(i-1, j+1/2, k) = 0 \quad (4.28)$$

- Não escorregamento

$$v_m(i, j+1/2, k) + v_m(i-1, j+1/2, k) = 0 \quad (4.29)$$

- Escorregamento parcial

$$\frac{\partial v_m}{n} + h_v(v_m - v_w) \quad (4.30)$$

sendo que $\partial v_m / n$ denota a diferenciação ao longo da direção normal. A forma discretizada da equação (4.30), por exemplo, face leste é:

$$v_m(i, j+1/2, k) \left(\frac{h_v}{2} + \frac{1}{\Delta x_E} \right) + v_m(i-1, j+1/2, k) \left(\frac{h_v}{2} - \frac{1}{\Delta x_E} \right) = h_v v_w \quad (4.31)$$

A equação (4.31) é uma condição de escorregamento generalizada. Os coeficientes h_v e v_w podem descrever a condição de não escorregamento quando $h_v \rightarrow 0$ e $v_w = 0$, escorregamento livre quando $h_v = 0$ e uma condição de escorregamento parcial quando $h_v \neq 0$ e $v_w \neq 0$.

4.2.3 Eliminação parcial do acoplamento na interface

A presença dos termos de transferência na interface é uma característica que distingue as equações do escoamento multifásico do monofásico. Normalmente, os termos de transferência na interface acoplam fortemente as componentes da velocidade e temperatura de cada fase às correspondentes variáveis da outra fase. O desacoplamento das equações por meio do cálculo dos termos de transferência na interface a partir dos valores da interação anterior tornará as iterações instáveis ou forçará passos temporais pequenos.

No outro extremo, a resolução de todas as equações discretas para certa componente gerará uma matriz não padrão de ordem elevada. Uma alternativa efetiva que mantém um alto grau de acoplamento entre as equações enquanto fornece uma matriz septadiagonal padrão (3D) é o algoritmo de eliminação parcial de Spalding (1980). O algoritmo é ilustrado com a seguinte equação modelo:

$$m_m \frac{\partial \Phi}{\partial t} + m_m (v_m)_i \frac{\partial \Phi_m}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_{\phi m} \frac{\partial \Phi_m}{\partial x_i} \right) + R_{\phi m} - \Phi_m \left(\sum R_{lm} \right) + \sum_{l=0}^M F_{lm} (\Phi - \Phi_m) \quad (4.32)$$

O último termo da equação (4.32) acopla as equações. A equação discretizada correspondente é:

$$(a_m)_p (\phi_m)_p = \sum_{nb} (a_m)_{nb} (\phi_m)_{nb} + b_m + \Delta V \sum_{l=0}^M F_{lm} [(\phi)_p - (\phi_m)_p] \quad (4.33)$$

Primeiramente, discute-se o problema com um desacoplamento direto das equações. Considerando um escoamento bifásico, em que as equações (4.34) e (4.35) representam a forma discretizada para a fase gás e sólido respectivamente

$$(a_0)_p (\phi_0)_p = \sum_{nb} (a_0)_{nb} (\phi_0)_{nb} + b_0 + \Delta V F_{10} [(\phi)_p - (\phi_0)_p] \quad (4.34)$$

$$(a_1)_p (\phi_1)_p = \sum_{nb} (a_1)_{nb} (\phi_1)_{nb} + b_1 + \Delta V F_{10} [(\phi)_p - (\phi_1)_p] \quad (4.35)$$

Quando $F_{10} \rightarrow 0$ as duas equações estão desacopladas e a solução para $(\phi_0)_p$, por exemplo, é:

$$(\phi_0)_p = \frac{\sum_{nb} (a_0)_{nb} (\phi_0)_{nb} + b_0}{(a_0)_p} \quad (4.36)$$

Quando $F_{10} \rightarrow \infty$ as equações estão fortemente acopladas e as soluções são:

$$(\phi)_p = (\phi_1)_p = \frac{\sum_{nb} (a_0)_{nb} (\phi_0)_{nb} + b_0 + \sum_{nb} (a_1)_{nb} (\phi_1)_{nb} + b_1}{(a_0)_p + (a_1)_p} \quad (4.37)$$

Um esquema iterativo que trata o termo de transferência na interface meramente como um termo fonte fornecerá a solução correta para valores pequenos de F_{10} , entretanto falhará no caso em que $F_{10} \rightarrow \infty$. Para tal aproximação, a amplitude do passo temporal deverá ser o suficientemente pequeno tal que o valor de F_{10} seja pequeno em comparação aos valores b_0 e b_1 . Para obter convergência enquanto utilizam-se grandes amplitudes para o passo temporal, o esquema iterativo deve ser projetado tal que ele possa calcular as duas soluções limitadas acima. Por esta razão Spalding (1980) sugere o seguinte algoritmo de eliminação parcial. Resolve-se para $(\phi)_p$ da equação (4.35) para obter:

$$(a_1)_P = \frac{\sum_{nb} (a_1)_{nb} (\Phi_1)_{nb} + b_1 + \Delta VF_{10} (\Phi_0)_P}{(a_1)_P + \Delta VF_{10}} \quad (4.38)$$

Substitui na equação (4.34) para obter-se:

$$\left[(a_0)_P + \frac{(a_1)_P \Delta VF_{10}}{(a_1)_P + \Delta VF_{10}} \right] (\Phi_0)_P = \sum_{nb} (a_0)_{nb} (\Phi_0)_{nb} + b_0 + \frac{\Delta VF_{10}}{(a_1)_P + \Delta VF_{10}} \left\{ \sum_{nb} (a_1)_{nb} (\Phi_1)_{nb} + b_1 \right\} \quad (4.39)$$

Seguidamente a dedução da equação para outra fase:

$$\left[(a_1)_P + \frac{(a_0)_P \Delta VF_{10}}{(a_0)_P + \Delta VF_{10}} \right] (\Phi_1)_P = \sum_{nb} (a_1)_{nb} (\Phi_1)_{nb} + b_1 + \frac{\Delta VF_{10}}{(a_0)_P + \Delta VF_{10}} \left\{ \sum_{nb} (a_0)_{nb} (\Phi_0)_{nb} + b_0 \right\} \quad (4.40)$$

O conjunto de equações lineares para Φ_0 e Φ_1 são desacoplados por meio do tratamento dos últimos termos nas equações (4.39) e (4.40) com termos fontes avaliados como $(\Phi_0)_{nb}$ e $(\Phi_1)_{nb}$. Quando $F_{10} \rightarrow 0$ e $F_{10} \rightarrow \infty$, pode-se recorrer aos limitantes das soluções das equações acima. Portanto, a expectativa é que um esquema iterativo baseado na equação anterior convirja para todos os valores de F_{10} .

4.2.4 Equação para correção da pressão do fluido

Um passo importante é a dedução da equação discreta para a pressão do fluido, a qual será descrita nesta seção. A componente x para a equação da quantidade de movimento discreta para ambas as fases, é dada como:

$$a_{0P} (u_0)_P = \sum_{nb} a_{0nb} (u_0)_{nb} + b_0 - A_P (u_0)_P [(P_g)_E - (P_g)_W] + F_{10} [(u_1)_P - (u_0)_P] \Delta V \quad (4.41)$$

$$\begin{aligned}
a_{1P}(u_1)_P &= \sum_{nb} a_{1nb}(u_1)_{nb} + b_1 - A_P \left(\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \end{smallmatrix} \right)_P \left[(P_g)_E - (P_g)_W \right] \\
&+ F_{10} \left[(u_0)_P - (u_1)_P \right] \Delta V - A_P \left[(P_s)_E - (P_s)_W \right]
\end{aligned} \tag{4.42}$$

Onde o subscrito 0 denota a fase fluida (fase gás) e $P_s = P_s \left(\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \end{smallmatrix} \right)$ é a pressão do sólido. Primeiro resolve-se as equações (4.41) e (4.42) utilizando o campo de pressão, P_g^* e o campo da fração de vazio ϵ_0^* , obtidos da iteração anterior para calcular uma tentativa para os campos de velocidade u_0^* , u_1^* e outras componentes da velocidade.

$$\begin{aligned}
a_{0P}(u_0^*)_P &= \sum_{nb} a_{0nb}(u_0^*)_{nb} + b_0 - A_P \left(\begin{smallmatrix} 0 \\ 0 \end{smallmatrix} \right)_P \left[(P_g^*)_E - (P_g^*)_W \right] \\
&+ F_{10} \left[(u_1^*)_P - (u_0^*)_P \right] \Delta V
\end{aligned} \tag{4.43}$$

$$\begin{aligned}
a_{1P}(u_1^*)_P &= \sum_{nb} a_{1nb}(u_1^*)_{nb} + b_1 - A_P \left(\begin{smallmatrix} 1 \\ 0 \end{smallmatrix} \right)_P \left[(P_g^*)_E - (P_g^*)_W \right] \\
&+ F_{10} \left[(u_0^*)_P - (u_1^*)_P \right] \Delta V - A_P \left[(P_s^*)_E - (P_s^*)_W \right]
\end{aligned} \tag{4.44}$$

Os valores reais diferem das tentativas (valores de entrada) pelas seguintes correções:

$$\begin{aligned}
(P_g)_E &= (P_g^*)_E + (P_g')_E \\
(P_s)_E &= (P_s^*)_E + (P_s')_E \\
(u_0)_P &= (u_0^*)_P + (u_0')_P \\
(u_1)_P &= (u_1^*)_P + (u_1')_P
\end{aligned} \tag{4.45}$$

Para as outras componentes da velocidade as formulas são semelhantes. Substituem-se as correções dadas pela equação (4.45) nas equações (4.41) e (4.42), e da equação resultante subtraem-se as equações (4.43) e (4.44) para obter-se:

$$\begin{aligned}
a_{0P}(u_0')_P &= \sum_{nb} a_{0nb}(u_0')_{nb} - A_P \left(\begin{smallmatrix} 0 \\ 0 \end{smallmatrix} \right)_P \left[(P_g')_E - (P_g')_W \right] \\
&+ F_{10} \left[(u_1')_P - (u_0')_P \right] \Delta V
\end{aligned} \tag{4.46}$$

$$a_{1P}(u_1)_P = \sum_{nb} a_{1nb}(u_1)_{nb} - A_P \begin{pmatrix} * \\ 1 \end{pmatrix}_P [(P_g)_E - (P_g)_W] + F_{10} [(u_0)_P - (u_1)_P] \Delta V - A_P [(P_s)_E - (P_s)_W] \quad (4.47)$$

Para desenvolver uma equação aproximada para a correção da pressão do fluido, omitiram-se os termos de convecção e pressão do sólido da equação de quantidade de movimento, obtendo-se:

$$a_{0P}(u_0)_P = -A_P \begin{pmatrix} * \\ 0 \end{pmatrix}_P [(P_g)_E - (P_g)_W] + F_{10} [(u_1)_P - (u_0)_P] \Delta V \quad (4.48)$$

$$a_{1P}(u_1)_P = -A_P \begin{pmatrix} * \\ 1 \end{pmatrix}_P [(P_g)_E - (P_g)_W] + F_{10} [(u_0)_P - (u_1)_P] \Delta V \quad (4.49)$$

Note que as simplificações acima não afetariam a precisão da solução convergida. Entretanto, pode afetar a taxa de convergência das interações. Da equação (4.49), obtém-se:

$$(a_{1P} + F_{10} \Delta V)(u_1)_P = -A_P \begin{pmatrix} * \\ 1 \end{pmatrix}_P [(P_g)_E - (P_g)_W] + F_{10}(u_0)_P \Delta V \quad (4.50)$$

Substituindo na equação (4.46), tem-se:

$$a_{0P}(u_0)_P = -A_P \begin{pmatrix} * \\ 0 \end{pmatrix}_P [(P_g)_E - (P_g)_W] + F_{10} \left[\frac{-A_P \begin{pmatrix} * \\ 1 \end{pmatrix}_P [(P_g)_E - (P_g)_W] + F_{10}(u_0)_P \Delta V}{a_{1P} + F_{10} \Delta V} - (u_0)_P \right] \Delta V \quad (4.51)$$

Resolvendo para $(u_0)_P$, obtém-se:

$$\left[a_{0P} + \frac{F_{10} \Delta V a_{1P}}{a_{1P} + F_{10} \Delta V} \right] (u_0)_P = - \left[A_P \begin{pmatrix} * \\ 0 \end{pmatrix}_P + A_P \begin{pmatrix} * \\ 1 \end{pmatrix}_P \frac{F_{10} \Delta V}{a_{1P} + F_{10} \Delta V} \right] [(P_g)_E - (P_g)_W] \quad (4.52)$$

A qual se pode reescrever como:

$$(u_0)_P = -d_{0P} [(P_g)_E - (P_g)_W] \quad (4.53)$$

sendo:

$$d_{0P} = \frac{A_p \left[\left(\alpha_0^* \right)_P + \frac{\left(\alpha_1^* \right)_P F_{10} \Delta V}{a_{1P} + F_{10} \Delta V} \right]}{\left[a_{0P} + \frac{F_{10} \Delta V a_{1P}}{a_{1P} + F_{10} \Delta V} \right]} \quad (4.54)$$

De forma análoga,

$$\left(u_1' \right)_P = -d_{1P} \left[\left(P_g' \right)_E - \left(P_g' \right)_W \right] \quad (4.55)$$

$$d_{1P} = \frac{A_p \left[\left(\alpha_1^* \right)_P + \frac{\left(\alpha_0^* \right)_P F_{10} \Delta V}{a_{0P} + F_{10} \Delta V} \right]}{\left[a_{1P} + \frac{F_{10} \Delta V a_{0P}}{a_{0P} + F_{10} \Delta V} \right]} \quad (4.56)$$

Assim, as correções para as velocidades são dadas por:

$$\left(u_m \right)_P = \left(u_m^* \right)_P - d_{mP} \left[\left(P_g' \right)_E - \left(P_g' \right)_W \right] \quad (4.57)$$

Substituindo a equação (4.57) e equações semelhantes para as demais componentes da velocidade na equação da continuidade na sua forma discreta (equação 4.18), (tal equação é a equação de transporte discreta para $\mathcal{Q}=1$, detalhes de sua dedução podem ser encontrados em Syamlal (1998) para a fase fluido, obtém-se uma equação para a correção da pressão.

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{(\bar{0} \ 0)_P - (\bar{0} \ 0)_P^0}{\Delta t} \right) \Delta V \\
& + \left\{ (\bar{0} \ 0)_{E \ e} + (\bar{0} \ 0)_{P \ e}^- \right\} \cdot \left[(u_0^*)_e - d_{0e} \left((P_g')_E - (P_g')_P \right) \right] A_e \\
& - \left\{ (\bar{0} \ 0)_{P \ w} + (\bar{0} \ 0)_{W \ w}^- \right\} \cdot \left[(u_0^*)_w - d_{0w} \left((P_g')_P - (P_g')_W \right) \right] A_w \\
& + \left\{ (\bar{0} \ 0)_{N \ n} + (\bar{0} \ 0)_{P \ n}^- \right\} \cdot \left[(v_0^*)_n - d_{0n} \left((P_g')_N - (P_g')_P \right) \right] A_n \\
& - \left\{ (\bar{0} \ 0)_{P \ s} + (\bar{0} \ 0)_{S \ s}^- \right\} \cdot \left[(v_0^*)_s - d_{0s} \left((P_g')_P - (P_g')_S \right) \right] A_s \\
& + \left\{ (\bar{0} \ 0)_{T \ t} + (\bar{0} \ 0)_{P \ t}^- \right\} \cdot \left[(w_0^*)_t - d_{0t} \left((P_g')_T - (P_g')_P \right) \right] A_t \\
& - \left\{ (\bar{0} \ 0)_{P \ b} + (\bar{0} \ 0)_{B \ b}^- \right\} \cdot \left[(w_0^*)_b - d_{0b} \left((P_g')_P - (P_g')_B \right) \right] A_b \\
& = \Delta V \sum_l (R_{lm})_P
\end{aligned} \tag{4.58}$$

Sendo $\bar{\xi}_e = 1 - \xi_e$. A equação (4.58) qual pode ser escrita na forma padrão:

$$a_P (P_g')_P = \sum_{nb} a_{nb} (P_g')_{nb} + b \tag{4.59}$$

sendo:

$$\begin{aligned}
a_E &= \left\{ (\bar{0} \ 0)_{E \ e} + (\bar{0} \ 0)_{P \ e}^- \right\} \cdot d_{0e} A_e \\
a_W &= \left\{ (\bar{0} \ 0)_{P \ w} + (\bar{0} \ 0)_{W \ w}^- \right\} \cdot d_{0w} A_w \\
a_N &= \left\{ (\bar{0} \ 0)_{N \ n} + (\bar{0} \ 0)_{P \ n}^- \right\} \cdot d_{0n} A_n \\
a_S &= \left\{ (\bar{0} \ 0)_{P \ s} + (\bar{0} \ 0)_{S \ s}^- \right\} \cdot d_{0s} A_s \\
a_T &= \left\{ (\bar{0} \ 0)_{T \ t} + (\bar{0} \ 0)_{P \ t}^- \right\} \cdot d_{0t} A_t \\
a_B &= \left\{ (\bar{0} \ 0)_{P \ b} + (\bar{0} \ 0)_{B \ b}^- \right\} \cdot d_{0b} A_b
\end{aligned} \tag{4.60}$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B \tag{4.61}$$

Após resolver a equação (4.59) para a correção da pressão do fluido, as velocidades do fluido e do sólido são corrigidas. Note que quando uma tentativa para o campo de velocidade do fluido satisfaz a equação da continuidade, a correção para a pressão vai à zero. Além de que o campo de velocidade corrigida para o fluido é tal que satisfaz a equação da continuidade.

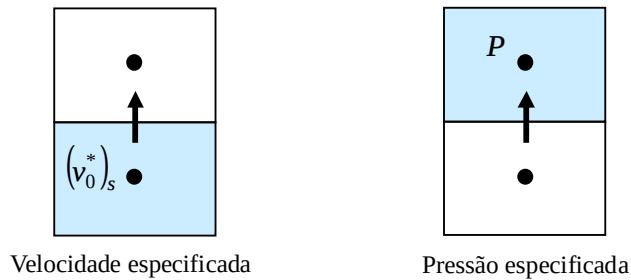
$$\begin{aligned}
b = & - \left\{ \left(\frac{(\alpha_0 \rho_0)_P - (\alpha_0 \rho_0)_P^0}{\Delta t} \right) \Delta V \right. \\
& + [(\alpha_0 \rho_0)_E \zeta_e + (\alpha_0 \rho_0)_P \bar{\zeta}_e] \cdot (u_0^*)_e A_e \\
& - [(\alpha_0 \rho_0)_P \zeta_w + (\alpha_0 \rho_0)_W \bar{\zeta}_w] \cdot (u_0^*)_w A_w \\
& + [(\alpha_0 \rho_0)_N \zeta_n + (\alpha_0 \rho_0)_P \bar{\zeta}_n] \cdot (v_0^*)_n A_n \\
& - [(\alpha_0 \rho_0)_P \zeta_s + (\alpha_0 \rho_0)_S \bar{\zeta}_s] \cdot (v_0^*)_s A_s \\
& + [(\alpha_0 \rho_0)_T \zeta_t + (\alpha_0 \rho_0)_P \bar{\zeta}_t] \cdot (w_0^*)_t A_t \\
& - [(\alpha_0 \rho_0)_P \zeta_b + (\alpha_0 \rho_0)_B \bar{\zeta}_b] \cdot (w_0^*)_b A_b \\
& \left. - \Delta V \sum_l (R_{lm})_P \right\}
\end{aligned} \tag{4.62}$$

4.2.4.1 Condições de contorno

As condições de contorno para as equações de correção da pressão nas fronteiras de entrada e saída de fluxo são formulados como seguem. A Figura 4.7 ilustra o volume fictício e as adjacentes para ambos os casos, onde o volume de controle fictício está sombreado.

Nenhuma equação para a correção da pressão é disponível nesses volumes. A equação para a correção da pressão para os volumes internos adjacentes é modificada como segue, pelo uso da informação das condições de contorno.

Figura 4.7 - Condição de contorno de velocidade e pressão especificada



Fonte: (SYAMLAL, 1998).

- Velocidade especificada

Para a condição de entrada ilustrada na Figura 4.7, a substituição da velocidade especificada na equação (4.61), resulta em:

$$a_S = 0$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_T + a_B \quad (4.63)$$

Note-se que $(v_0^*)_s$ no termo b na equação (4.62) é o mesmo que $(v_0)_s$ especificado na fronteira de entrada. As demais fronteiras de entrada são tratadas de maneira análoga. A condição de contorno nas paredes impermeáveis é semelhante àquela das fronteiras de entrada, desde que a velocidade normal à parede é especificada como zero.

- Pressão especificada

Quando a pressão é especificada numa célula, a pressão corrigida naquele volume é zero, e para a condição ilustrada na Figura (4.7), tem-se:

$$(P_g')_n = 0 \quad (4.64)$$

4.2.5 Equação para a correção da fração de volumétrica da fase sólida

O sucesso da técnica numérica depende principalmente da sua capacidade para tratar ponto de empacotamento das partículas sólidas. No código MFIX, os cálculos desses limites são estabilizados pela inclusão do efeito de pressão do sólido na discretização da equação da continuidade da fase sólida. Isto é realizado derivando uma equação de correção para a fração volumétrica da fase sólida, como descrito nesta seção.

- Termo convectivo

Para este método necessita-se de uma equação de estado que relacione a pressão do sólido com a fração volumétrica da fase sólida.

$$P_m = P_m(\alpha_m) \quad (4.65)$$

Define-se

$$K_m = \frac{\partial P_m}{\partial \alpha_m} \quad (4.66)$$

Então, uma pequena mudança na pressão dos sólidos pode ser calculada em função de uma variação na fração volumétrica do sólido.

$$P'_m = K_m \alpha'_m \quad (4.67)$$

Como discutido anteriormente, integrando o termo convectivo em um volume de controle, por exemplo, tem-se:

$$\int_{VC} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_m u_m) dV = (\alpha_m u_m)_e A_e - (\alpha_m u_m)_w A_w \quad (4.68)$$

Dessa forma, precisa-se desenvolver formulas para calcular os fluxos como $(\alpha_m \rho_m u_m)_e$. Denota-se a velocidade da fase sólida obtida de uma tentativa para os campos de pressão e fração volumétrica do solido por $(u_m^*)_e$. Este é o campo de velocidade da fase sólido. A velocidade real da fase sólida pode ser representada como:

$$(u_m)_e = (u_m^*)_e + (u'_m)_e \quad (4.69)$$

Onde a correção $(u'_m)_e$ está relacionada com a correção no campo de pressão da fase sólida:

$$(u'_m)_e = e_e [(P_m^*)_P - (P'_m)_E] \quad (4.70)$$

Similarmente à seção anterior. Agora, substituindo a equação (4.67) na equação (4.70), obtém-se:

$$(u'_m)_e = e_e [(K_m)_P (\alpha'_m)_P - (K_m)_E (\alpha'_m)_E] \quad (4.71)$$

Além disso, as frações volumétricas podem ser expressas como uma soma dos valores atuais acrescidos de uma correção, assim:

$$\left(\begin{smallmatrix} \\ m \end{smallmatrix} \right)_e = \left(\begin{smallmatrix} * \\ m \end{smallmatrix} \right)_e - \left(\begin{smallmatrix} ' \\ m \end{smallmatrix} \right)_e \quad (4.72)$$

Multiplicando as equações (4.69) e (4.72) e substituindo na equação (4.71), obtém-se:

$$\begin{aligned} \left(\begin{smallmatrix} \\ m \end{smallmatrix} \right)_e (u_m)_e &\approx \left(\begin{smallmatrix} * \\ m \end{smallmatrix} \right)_e (u_m^*)_e + \left(\begin{smallmatrix} ' \\ m \end{smallmatrix} \right)_e (u_m^*)_e + \left(\begin{smallmatrix} * \\ m \end{smallmatrix} \right)_e (u_m')_e \\ &\approx \left(\begin{smallmatrix} * \\ m \end{smallmatrix} \right)_e (u_m^*)_e + \left(\begin{smallmatrix} ' \\ m \end{smallmatrix} \right)_e (u_m^*)_e + \left(\begin{smallmatrix} * \\ m \end{smallmatrix} \right)_e e_e \left[(K_m)_P \left(\begin{smallmatrix} ' \\ m \end{smallmatrix} \right)_P - (K_m)_E \left(\begin{smallmatrix} ' \\ m \end{smallmatrix} \right)_E \right] \end{aligned} \quad (4.73)$$

Nesta equação ignorou-se o produto das correções. Relembrando que o valor da face de um volume de controle pode ser escrito em função dos valores do centro do volume usando O fator de peso convectivo, tem-se:

$$(\alpha_m)_e = (\alpha_m)_E \zeta_e + (\alpha_m)_P \bar{\zeta}_e \quad (4.74)$$

Agora o fluxo $(\alpha_m \rho_m u_m)_e$ pode ser escrito como: (ρ_m é constante no MFIX)

$$\begin{aligned} (\rho_m)_e (\alpha_m)_e (u_m)_e &\approx (\rho_m)_e (\alpha_m^*)_e (u_m^*)_e + (\rho_m)_e \left[\zeta_e (\alpha_m')_E + \bar{\zeta}_e (\alpha_m')_P \right] (u_m^*)_e \\ &+ (\rho_m)_e (\alpha_m^*)_e e_e \left[(K_m)_P (\alpha_m')_P - (K_m)_E (\alpha_m')_E \right] \end{aligned} \quad (4.75)$$

o qual pode ser rearranjado como:

$$\begin{aligned} (\rho_m)_e (\alpha_m)_e (u_m)_e &\approx (\rho_m)_e (\alpha_m^*)_e (u_m^*)_e + (\rho_m)_e \left[\bar{\zeta}_e (u_m^*)_e + (\alpha_m^*)_e (K_m)_P e_e \right] (\alpha_m')_P \\ &+ (\rho_m)_e \left[\zeta_e (u_m^*)_e - (\alpha_m^*)_e (K_m)_E e_e \right] (\alpha_m')_E \end{aligned} \quad (4.76)$$

- Termo transiente

$$\begin{aligned}
 \int_{VC} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_m \alpha_m)_P dV &\approx \frac{(\alpha_m)_P (\rho_m)_P - (\alpha_m)_P^0 (\rho_m)_P^0}{\Delta t} \Delta V \\
 &= \frac{\left[\left((\alpha_m^*)_P + (\alpha_m^*)_P \right) (\rho_m)_P - (\alpha_m)_P^0 (\rho_m)_P^0 \right]}{\Delta t} \Delta V \\
 &= \frac{(\alpha_m^*)_P (\rho_m)_P \Delta V}{\Delta t} + \frac{\left[(\alpha_m^*)_P (\rho_m)_P - (\alpha_m)_P^0 (\rho_m)_P^0 \right]}{\Delta t} \Delta
 \end{aligned} \tag{4.77}$$

- Termo fonte

$$\begin{aligned}
 \int_{VC} \sum R_{lm} dV &= \Delta V \sum R_{lm} = \Delta V \left(\left[\sum R_{lm} \right] - \left[- \sum R_{lm} \right] \right) \\
 &= \Delta V \left(\left[\sum R_{lm} \right] - \left[- \sum R_{lm} \right] \frac{(\rho_m \alpha_m)_P}{(\rho_m \alpha_m)_P} \right) \\
 &= \Delta V \left(\left[\sum R_{lm} \right] - \left[- \sum R_{lm} \right] \frac{(\rho_m)_P (\alpha_m^* + \alpha_m^*)_P}{(\rho_m \alpha_m^*)_P} \right) \\
 &= \Delta V \left(\left[\sum R_{lm} \right] - \left[- \sum R_{lm} \right] - \left[- \sum R_{lm} \right] \frac{(\rho_m)_P (\alpha_m^*)_P}{(\rho_m \alpha_m^*)_P} \right) \\
 &= \Delta V \sum R_{lm} - \left[- \sum R_{lm} \right] \frac{(\alpha_m^*)_P (\rho_m)_P}{(\rho_m \alpha_m^*)_P} \Delta V
 \end{aligned} \tag{4.78}$$

O termo fonte é manipulado levando-se em conta a definição da função de duplo colchete de Syamlal (1998).

- Equação de correção

Combinando todos os termos, uma equação para a correção da fração de volume do solido pode ser escrita como:

$$a_P = (\alpha_m^*)_P = \sum_{nb} a_{nb} (\alpha_m^*)_{nb} + b \tag{4.79}$$

$$\begin{aligned}
a_E &= \left[(\rho_m \alpha_m)_e^* e_e (K_m)_E - \bar{\zeta}_e (\rho_m)_E (u_m^*)_e \right] A_e \\
a_W &= \left[(\rho_m \alpha_m)_w^* e_w (K_m)_W - \bar{\zeta}_w (\rho_m)_W (u_m^*)_w \right] A_w \\
a_N &= \left[(\rho_m \alpha_m)_n^* e_n (K_m)_N - \bar{\zeta}_n (\rho_m)_N (v_m^*)_n \right] A_n \\
a_S &= \left[(\rho_m \alpha_m)_s^* e_s (K_m)_S - \bar{\zeta}_s (\rho_m)_S (v_m^*)_s \right] A_s \\
a_T &= \left[(\rho_m \alpha_m)_t^* e_t (K_m)_T - \bar{\zeta}_t (\rho_m)_T (w_m^*)_t \right] A_t \\
a_B &= \left[(\rho_m \alpha_m)_b^* e_b (K_m)_B - \bar{\zeta}_b (\rho_m)_B (w_m^*)_b \right] A_b
\end{aligned} \tag{4.80}$$

$$\begin{aligned}
a_P &= (\rho_m)_P \left[\bar{\zeta}_e (u_m^*)_e A_e - \bar{\zeta}_w (u_m^*)_w A_w \right. \\
&\quad + \bar{\zeta}_n (v_m^*)_n A_n - \bar{\zeta}_s (v_m^*)_s A_s \\
&\quad + \bar{\zeta}_t (w_m^*)_t A_t - \bar{\zeta}_b (w_m^*)_b A_b \left. \right] \\
&\quad + (K_m)_P \left[(\rho_m \alpha_m)_e^* e_e A_e + (\rho_m \alpha_m)_w^* e_w A_w \right. \\
&\quad + (\rho_m \alpha_m)_n^* e_n A_n + (\rho_m \alpha_m)_s^* e_s A_s \\
&\quad + (\rho_m \alpha_m)_t^* e_t A_t + (\rho_m \alpha_m)_b^* e_b A_b \left. \right] \\
&\quad + (\rho_m)_P \frac{\Delta V}{\Delta t} + \left[- \sum R_{lm} \right] \frac{(\rho_m)_P \Delta V}{(\rho_m \alpha_m)_P^*}
\end{aligned} \tag{4.81}$$

$$\begin{aligned}
b &= (\rho_m \alpha_m)_e^* (u_m^*)_e A_e + (\rho_m \alpha_m)_w^* (u_m^*)_w A_w \\
&\quad - (\rho_m \alpha_m)_n^* (u_m^*)_n A_n + (\rho_m \alpha_m)_s^* (u_m^*)_s A_s \\
&\quad - (\rho_m \alpha_m)_t^* (u_m^*)_t A_t + (\rho_m \alpha_m)_b^* (u_m^*)_b A_b \\
&\quad + \left[(\rho_m \alpha_m)_P^* - (\rho_m \alpha_m)_P^0 \right] \frac{\Delta V}{\Delta t} \\
&\quad + \Delta V \sum R_{lm}
\end{aligned} \tag{4.82}$$

Nos cálculos da equação de correção para a fração de volumétrica do sólido, nenhum fator de sub-relaxação foi aplicado. No entanto, uma exceção será aberta, ao aplicar uma sub-relaxação nas regiões densamente empacotadas.

Sumarizando o procedimento de calculo para o escoamento gás-sólido, apresenta-se o algoritmo que ilustra os passos da solução numérica envolvendo as equações apresentadas no decorrer deste capítulo.

Algoritmo de solução

1. Início do passo temporal. Cálculo das propriedades físicas, coeficientes de intercâmbio e taxas de reação.
2. Cálculo do campo de velocidade baseado no campo de pressão atual: equações (4.21) e (4.22) respectivamente.
3. Cálculo da correção da pressão do fluido P_g' através da equação (4.59).
4. Atualizando o campo de pressão do fluido aplicando uma sob relaxação: $P_g = P_g' + \omega_{pg} P_g'$. Calcula a "velocidade de correção" de P_g' e atualiza o campo de velocidade: $u_m = u_m^* + u_m'$, para $m = 0$ até M. Para a fase sólida, u_m calculado neste passo é denotado como u_m^* no passo 6).
5. Calcula os gradientes $\frac{\partial P_m}{\partial \alpha_m}$ para utilizar na equação de correção da fração volumétrica da fase sólida. Calcula a correção da fração volumétrica da fase sólida α_m' através da (4.79).
6. Atualização da fração volumétrica da fase sólida ($\alpha_m \rho_m$ no MFIX): $\alpha_m = \alpha_m^* + \omega_{ps} \alpha_m'$. Sob relaxação somente nas regiões onde $\alpha_0 < \alpha_{cp}$ e $\alpha_m > 0$; isto é, onde as partículas sólidas estão densamente empacotadas e a fração volumétrica da fase sólida está aumentando. Calcula-se a correção da velocidade para a fase sólida e atualiza o campo de velocidade da fase sólida: $u_m = u_m^* + u_m'$ (para $m = 1$ até M).
7. Calcula-se a fração volumétrica do gás (fração de vazio): $\alpha_0 = \alpha_v - \sum_{m \neq 0} \alpha_m$ (α_v é usualmente igual a 1).
8. Cálculo da pressão do sólido a partir da equação de estado $P_m = P_m(\alpha_m)$.
9. Cálculo da temperatura e espécies.
10. Utiliza-se o resíduo normalizado calculado nos passos 2, 3, 5 e 9 para checar a convergência. Se o critério de convergência não é satisfeito continua as iterações (passo 2), senão incrementa-se o passo temporal (passo 1).

4.2.6 Condições iniciais

As condições iniciais devem ser especificadas com valores coerentes e realistas para promover a convergência da solução. As condições iniciais que devem ser especificadas na região do leito e no *freeboard* são as velocidades e a fração volumétrica para ambas as fases. O leito é modelado como uma mistura homogênea mistura com uma uniforme massa específica e fração de vazio.

A velocidade inicial do gás especificada através do leito, U_{g0} é resolvida pelo balanço da vazão que entra ao reator, $Q = AU_g$ e a vazão volumétrica através do leito que tem ambos material granular e gás, equacionando ambas as vazões, tem-se:

$$AU_g = A_g U_{g0} \quad (4.83)$$

sendo, A é a área da seção transversal do leito, U_g a velocidade superficial do gás na entrada, e A_g a área da seção transversal ocupado pelo gás no leito. A fração volumétrica do gás (*fração de vazio*) no leito pode ser definida como a proporção do volume ocupado pelo gás, V_g sobre o volume total do leito, V_T , assim temos:

$$\alpha_g = \frac{V_g}{V_T} = \frac{A_g h_{leito}}{A h_{leito}} = \frac{A_g}{A} \quad (4.84)$$

Combinando as equações (4.84) e (4.85) e resolvendo para U_{g0} :

$$U_{g0} = \frac{U_g}{\alpha_g} \quad (4.85)$$

A velocidade inicial no leito é especificada usando a equação (4.85). O *freeboard* é inicialmente modelado com uma fração de vazio igual à unidade, significando que somente é ocupado pela fase gás. O valor inicial da velocidade do gás no *freeboard* é igual ao valor da velocidade do gás na entrada, U_g .

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste item são apresentadas as considerações para o desenvolvimento das simulações numéricas no estudo do escoamento gás-sólido em leito fluidizado usando a técnica CFD implementada no código MFIX.

Para validar os resultados das simulações são utilizados os dados experimentais de Taghipour et al. (2005), os quais estão constituídos por uma curva da queda de pressão e expansão do leito em função da velocidade de fluidização, assim como também dois perfis médios temporais da fração de vazio medidos a 0,20 m acima do ponto de entrada do ar considerando velocidades de fluidização de 0,38 e 0,46 m/s respectivamente. Os dados experimentais foram recolhidos num leito experimental de 0,28 m de largura, 1 m de altura e 0,025 de espessura. Devido à reduzida espessura, este tipo de leito pode ser considerado pseudo-bidimensional.

A determinação dos perfis de fração de vazio foi através de uma sonda de fibra óptica refletiva PC-4 *Powder Voidmeter*. A sonda possui um diâmetro de 4 mm e cada fibra possui um diâmetro de 15 μm . Esta sonda esta composta de um conjunto de fibras emissoras e receptoras de luz. Quando as partículas sólidas atravessam a luz projetada pelas fibras emissoras, elas refletem parte da luz a qual é recebida pelas fibras receptoras. Dessa forma, a quantidade de partículas sólidas é proporcional à quantidade de luz refletida, assim consegue-se correlacionar esse efeito para medir a fração de vazio.

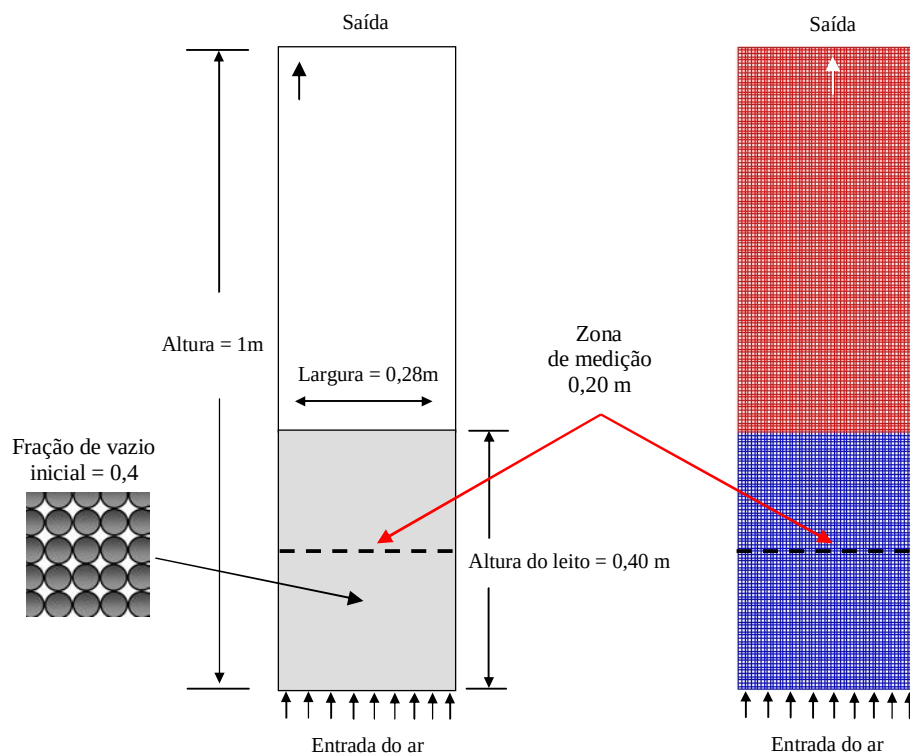
Os perfis de velocidade média temporal das partículas sólidas obtidos da simulação numérica serão comparados com o perfil apresentado por Taghipour et al. (2005) obtido através da simulação numérica utilizando o software FLUENT 6.0.

As curvas experimentais do trabalho de Taghipour et al. (2005) foram extraídas através do software digitalizador de dados WinDig, obtendo uma série contínua de pontos.

5.1 DEFINIÇÃO DOS PARÂMETROS DA SIMULAÇÃO

A Figura 5.1 exibe uma representação esquemática do leito fluidizado e o domínio computacional utilizado nas simulações numéricas. As características geométricas são obtidas do trabalho de Taghipour et al. (2005) o qual apresenta um leito de 0,28 m de largura e 1m de altura.

Figura 5.1 - Representação do leito fluidizado e o domínio computacional com malha de 0,005 x 0,005 m.



O trabalho considera um leito fluidizado bidimensional em coordenadas cartesianas, o qual pode ser usado satisfatoriamente para modelar e prever um regime de borbulhamento, evitando problemas da assimetria como no caso de coordenadas cilíndricas. De acordo com Hosseini et al. (2009) os modelos bidimensionais tem sido recomendados com o intuito de reduzir o tempo computacional conservando o grau de precisão.

Para representar o escoamento gás-sólido foi considerada como fase gás uma corrente de ar em condição padrão e como fase sólida um leito composto de microesferas de vidro (*glass beads*), classificada como partícula do grupo B em função das suas propriedades físicas. As microesferas de vidro formam um leito fixo com aproximadamente uma fração de vazios de 0,4 e uma altura estática inicial de 0,40 m (TAGHIPOUR et al. 2005).

No domínio computacional a distribuição das fases é representada pela fração volumétrica de gás ou fração de vazios a qual está definida por uma escala de cores. Uma cor azul corresponde ao valor mínimo da fração de vazios, característico do ponto de compactação das partículas sólidas no leito e a cor vermelha representa o máximo valor indicando unicamente a presença da fase gás.

Depois de uma análise de sensibilidade de malha, determinou-se que um tamanho de 0,005 m para o volume de controle pode ser utilizado sem alterar significativamente os resultados da simulação. Assim, o domínio computacional está formado por uma malha uniforme ortogonal a qual apresenta volumes de controle de 0,005 x 0,005 m equivalente a 11200 elementos.

A definição de um adequado passo temporal é muito importante no desenvolvimento da simulação numérica, no intuito de manter uma estabilidade numérica e atingir a convergência. Muitos trabalhos geralmente consideram valores no intervalo de 10^{-3} e 10^{-5} (TAGHIPOUR et al. 2005; HOSSEINI et al. 2010; HERZOG et al. 2012).

As simulações foram conduzidas em regime transiente utilizando um esquema de discretização de segunda ordem (*Superbee*) para a equação da quantidade de movimento baseado no trabalho de De Souza Braun et al. (2010), com a finalidade de evitar efeitos de difusão numérica.

O acoplamento pressão-velocidade foi resolvido utilizando o algoritmo SIMPLE (*Semi Implicit Pressure Linked Equation*) modificado por Syamlal et al. (1998). O código MFIX estabelece de forma padrão fatores de sub-relaxação com a finalidade de manter a estabilidade numérica nas simulações.

Uma série de condições de contorno precisam ser estabelecidas antes de realizar a simulação. Assim, na parte inferior do leito é definida a entrada do ar considerando um valor constante e uniforme para a velocidade de fluidização. A parte superior é a saída do leito, onde determinou-se um valor constante de pressão neste caso é considerada a pressão atmosférica. Em ambas as paredes do leito consideraram-se a condição de não escorregamento para ambas as fases. Todas estas condições de contorno são as mesmas apresentadas no trabalho de Taghipour et al. (2005).

Segundo Johansson et al. (2006) o efeito de compressibilidade do gás em sistemas de leito fluidizado não mostra nenhuma diferença significativa, dessa forma para o desenvolvimento das simulações manteve-se a massa específica do gás constante.

Outro assunto importante é a consideração dos efeitos de turbulência. Conforme Loha et al. (2012) no caso de um leito fluidizado, os resultados obtidos através de simulação numérica considerando um regime laminar e turbulento não apresentam uma diferença significativa. Dessa forma, as simulações numéricas deste trabalho não consideram os efeitos de turbulência sobre o escoamento.

A Tabela 5.1 apresenta os parâmetros do modelo o qual engloba as propriedades físicas de ambas as fases e os parâmetros numéricos definidos para a simulação.

Tabela 5.1 – Parâmetros do modelo para a simulação.

Parâmetros	Valores
Massa específica do ar	1,225 kg/m ³
Viscosidade dinâmica do ar	1,8x10 ⁻⁵ Pa.s
Massa específica da partícula	2500 kg/m ³
Diâmetro médio da partícula	275 µm
Fração de vazio no leito	0,4
Coefficiente de restituição	0,9
Velocidade de fluidização	0,025 – 0,50 m/s
Velocidade mínima de fluidização (exp.)	0,065 m/s
Tamanho da malha	0,005 m
Tamanho de passo de tempo	1x10 ⁻⁵ s

5.2 PROCESSAMENTO DOS RESULTADOS

Devido à natureza transiente do leito fluidizado, as propriedades do escoamento são normalmente tratadas como um valor médio sobre um intervalo de tempo. Para a obtenção dos dados, o código MFIX possui um arquivo executável chamado “post_mfix”, o qual permite a extração dos resultados da simulação.

No processamento dos resultados é importante não considerar os primeiros segundos da simulação devido à grande instabilidade das variáveis do leito. Geralmente avalia-se a partir de 3 a 5 segundos após iniciada a simulação para o processamento de dados. Nesta condição pode-se considerar que o escoamento atinge um regime quase permanente, mantendo as suas variáveis quase constantes. Incrementando o tempo médio, as flutuações nas variáveis do leito são reduzidas, deste modo o valor médio atinge valores quase como aqueles em “*regime permanente*”. O tempo de simulação foi definido a 20 segundos, e um processamento depois de 5 segundos até 20, baseado no trabalho de Herzog et al. (2012).

Apesar disso, com a finalidade de minimizar o esforço computacional é importante encontrar um valor ótimo entre precisão e tempo computacional. No presente caso foi encontrado que um período médio de oito segundos é o intervalo de tempo satisfatório para analisar as propriedades do leito. Se o período médio fosse incrementado levaria um tempo computacional maior sem uma significativa melhora na precisão dos resultados.

As simulações numéricas visam estimar a queda de pressão, expansão do leito e perfis de fração de vazio os quais são parâmetros importantes no projeto do leito fluidizado. Embora estes parâmetros sejam relativamente fáceis de medir em experimentos, a maneira de extrair os resultados médios das simulações numéricas não é claro e usualmente não é mencionado com a exceção do trabalho de Lindborg et al. (2007).

Para a visualização da fluidodinâmica do leito foi utilizado o software PARAVIEW 3.98, o qual permite a visualização e análise de dados através de técnicas qualitativas e quantitativas. Uma análise estatística é desenvolvida com a finalidade de analisar os resultados obtidos das simulações numéricas. Segundo Hosseini et al. (2009) pode-se utilizar a raiz quadrada média do desvio padrão (RMSD) como ferramenta estatística na determinação de uma tendência dos dados. A equação (5.1) apresenta a formulação, sendo:

$$\delta_{RMSD} = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{V_{exp} - V_{num}}{V_{exp}} \right)^2 \right]^{1/2} \times 100 \quad (5.1)$$

sendo, N é o número de elementos considerados, V_{exp} corresponde ao valor experimental e V_{num} é o valor obtido através da simulação numérica.

5.3 ANÁLISE DOS MODELOS DE ARRASTO

Nesta seção é apresentada a avaliação dos modelos de arrasto analisando o seu desempenho através da determinação dos principais parâmetros de projeto do leito fluidizado tais como: a queda de pressão, a velocidade de mínima fluidização, a expansão do leito e o perfil de fração volumétrica. As simulações numéricas consideram um aumento progressivo da velocidade de fluidização de forma similar ao trabalho de Taghipour et al. (2005), dando como resultado dez valores de velocidade de fluidização sendo: 0,025; 0,065; 0,10; 0,15; 0,20; 0,30; 0,38; 0,40; 0,46 e 0,50 m/s.

5.3.1 Determinação da curva de fluidização

A curva de fluidização consiste na determinação da queda de pressão numa faixa de velocidades de fluidização, este parâmetro é muito importante na caracterização e monitoramento do regime de fluidização.

As Figuras 5.2 e 5.3 exibem a curva de fluidização prevista pelos modelos de arrasto. Em ambas Figuras a linha contínua representa a queda de pressão experimental obtida por Taghipour et al. (2005) e a região de mínima de fluidização é ressaltada com um ponto vermelho sobre a linha contínua. As características mais evidentes é que inicialmente a maioria dos modelos exibe um comportamento similar. A maioria preveem uma estabilização da queda de pressão entre 5000 e 6000 Pa, indicando uma mudança do regime de fluidização passando de um leito fixo para um fluidizado. No entanto, no regime de mínima fluidização o valor previsto está acima do valor experimental equivalente a 4400 Pa. Alguns modelos resultam numa estabilização tardia da queda de pressão dando como resultado um atraso na mudança de regime.

Observa-se na Figura 5.2 que os modelos de arrasto conseguem produzir um perfil de queda de pressão quase similar, porém conforme aumenta a velocidade de fluidização cada modelo apresenta um ponto de estabilização singular da queda de pressão em função da velocidade de fluidização, atingindo o regime de mínima fluidização. Conforme aumenta a velocidade de fluidização, todos os modelos preveem o mesmo valor de queda de pressão.

Na Figura 5.2 destacam-se os modelos de Gidaspow (1994) e Hill-Koch-Ladd (2001), os quais se comportam de forma idêntica. Ambos modelos conseguem uma previsão muito aproximada da queda de pressão quando a velocidade de fluidização esta abaixo da mínima fluidização, além disso, apresentam uma estabilização na queda de pressão numa velocidade de fluidização muito próxima do regime de mínima fluidização (indicando a transição de leito fixo a fluidizado), porém a queda de pressão prevista por ambos os modelos está acima do valor experimental.

Os modelos de Arastoopour et al. (1990) e Di Felice (1994) também apresentam um comportamento muito similar, porém a sua previsão está relativamente afastada dos valores experimentais, ao igual que o modelo de Syamlal O'Brien (1989). Esses três últimos modelos exibem uma estabilização da queda de pressão tardia prevendo um atraso na mudança do regime de fluidização.

Figura 5.2 – Comparação dos modelos de arrasto na determinação da curva de fluidização (A)

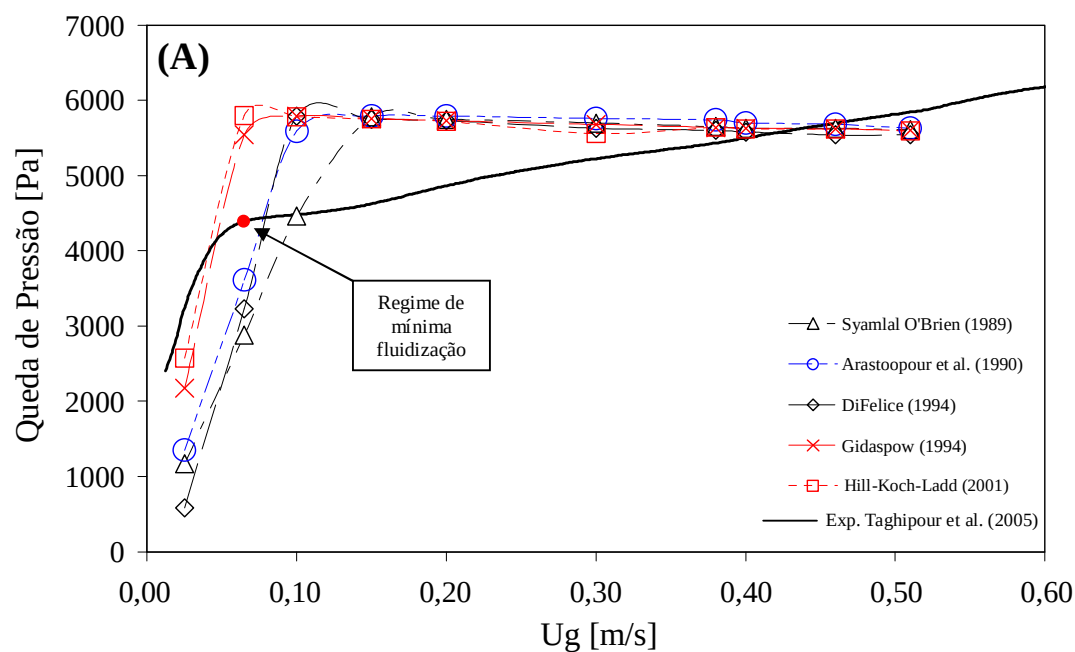
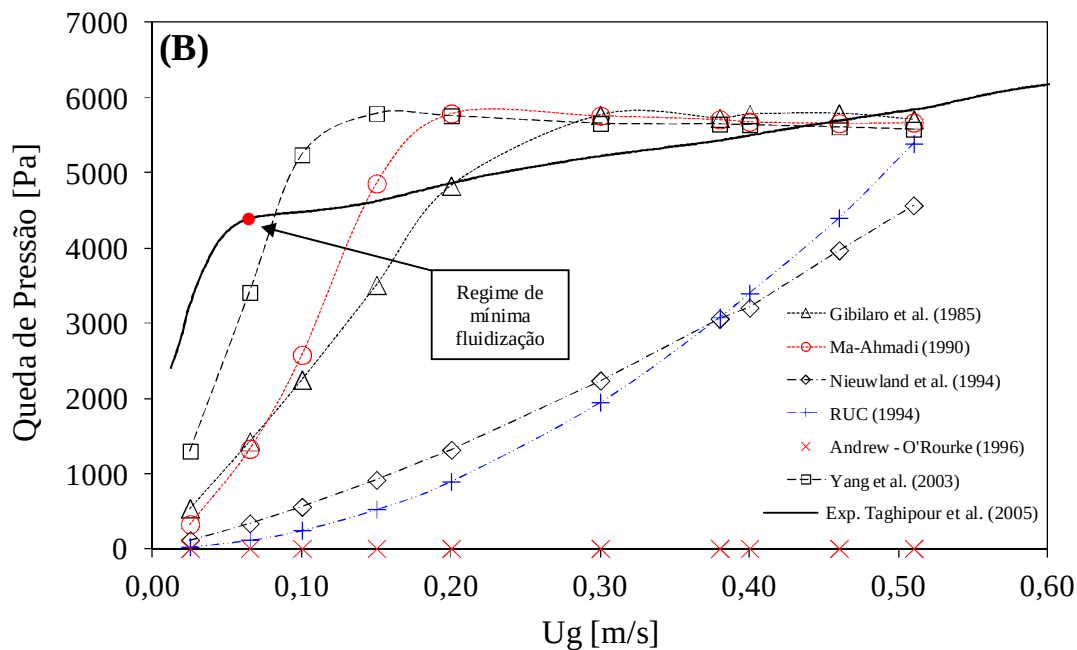


Figura 5.3 – Comparação dos modelos de arrasto na determinação da curva de fluidização (B)



Na Figura 5.3 mostra-se outro grupo de modelos de arrasto, os quais exibem uma previsão um pouco afastada da curva experimental. As curvas de queda de pressão produzida pelos modelos de Yang et al. (2003); Ma-Ahmadi (1990) e Gibilaro et al. (1985) apresentam uma tendência parecida, expondo uma resposta tardia à estabilização da pressão em diferentes velocidades de fluidização, porém ao final a queda de pressão na estabilização é semelhante nos três modelos. No entanto, o modelo de Yang et al. (2003) proporciona a previsão mais próxima da curva experimental.

Os modelos de RUC (1994) e Nieuwland et al. (1994) apresentam uma curva com a mesma tendência, subestimando o valor da queda de pressão. Ambos os modelos se caracterizam por oferecer um perfil muito diferente dos outros modelos de arrasto dentro da faixa de velocidade de fluidização estabelecida.

No caso do modelo de Nieuwland et al. (1994), como o regime de fluidização encontra-se numa condição de regime denso, o fator de correção na formulação do arrasto (equação 3.33) apresenta um valor equivalente a 0,034. Esse valor produz uma redução considerável da transferência de quantidade de movimento levando a uma subestimação do valor da queda de pressão. Portanto, o valor do arrasto está condicionado principalmente ao valor da velocidade relativa entre as fases. Da mesma forma acontece com o modelo de RUC (1994), já que a fluidização se desenvolve ainda no intervalo de um regime denso, as constantes A_{RUC} e B_{RUC} na equação (3.34) apresentam mínimos valores provocando uma redução do arrasto consequente uma subestimação da queda de pressão.

O modelo de Andrew e O'Rourke (1996) não exibe nenhuma resposta dentro da faixa de velocidades de fluidização definida no trabalho. A queda de pressão permanece nula, esse comportamento pode ser devido a sua formulação. Analisando a formulação do modelo de Andrew e O'Rourke (1996) (equação 3.39) o valor da massa específica das partículas encontra-se como um elemento divisor. Nesse caso qualquer que seja a magnitude da diferença de velocidades entre as fases, a quantidade de movimento será dividida por 2500 (valor da massa específica). Isto faz com que o leito se mantenha fixo devido à redução na transferência da quantidade de movimento.

Pode-se observar que o modelo de Arastoopour et al. (1990) apresenta um melhor desempenho que o modelo Gibilaro et al. (1985), devido à modificação do expoente no fator de correção do modelo, o qual determina um aumento da quantidade de movimento melhorando a previsão da queda de pressão.

Por ultimo, os resultados das simulações numéricas são muito semelhante aos resultados de Taghipour et al. (2005), no caso da avaliação numérica dos modelos de Gidaspow (1994) e Syamlal O'Brien (1989).

Para analisar quantitativamente o grau de aproximação das curvas obtidas através das simulações numéricas, desenvolve-se uma análise estatística dos dados utilizando como métrica o menor valor de RMSD. Assim, a Tabela 5.2 exhibe os resultados da análise estatística, onde os modelos de arrasto de Hill-Koch-Ladd (2001) e Gidaspow (1994) fornecem as curvas da queda de pressão mais próximas à experimental.

Tabela 5.2 – RMSD dos perfis de queda de pressão.

Modelo de arrasto	RMSD %
Gibilaro et al. (1985)	38,37
Syamlal O'Brien (1989)	25,15
Arastoopour et al. (1990)	23,39
Ma-Ahmadi (1990)	39,08
Di Felice (1994)	30,49
Nieuwland et al. (1994)	67,42
RUC (1994)	71,07
Gidaspow (1994)	19,04
Andrew e O'Rourke (1996)	99,79
Hill-Koch-Ladd (2001)	18,01
Yang et al. (2003)	23,32

5.3.2 Determinação da velocidade mínima de fluidização

A velocidade mínima de fluidização é outro importante parâmetro no projeto do leito fluidizado e a capacidade de estimá-la através de simulações numéricas é muito útil.

A velocidade mínima de fluidização é atingida quando o incremento da queda de pressão no leito atinge uma estabilização mantendo um valor constante em função do aumento da velocidade de fluidização.

Para determinar a velocidade de mínima fluidização, projeta-se uma reta normal ao eixo da velocidade de fluidização a partir da interseção formado por duas retas entre os pontos de incremento e os pontos de estabilidade.

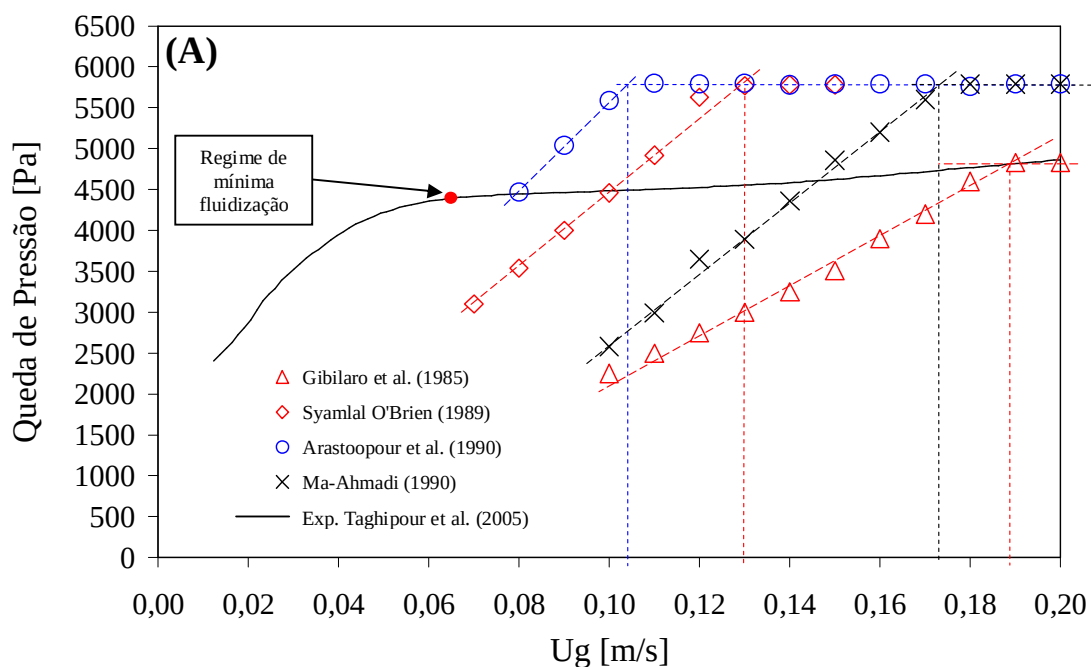
Nesta análise não foram considerados os modelos de Nieuwland et al. (1994), RUC (1994) e Andrew e O'Rourke (1996) por não apresentarem uma estabilização da queda de pressão, essencial na determinação da velocidade de mínima fluidização.

As Figuras 5.4 e 5.5 comparam a capacidade dos modelos de arrasto na previsão da velocidade mínima de fluidização. Em ambas as Figuras 5.4 e 5.5, o ponto vermelho sobre a curva de fluidização (linha contínua) indica a velocidade mínima de fluidização experimental equivalente a 0,065 m/s determinada por Taghipour et al. (2005).

Todos os modelos de arrasto apresentados na Figura 5.4 superestimam o valor da velocidade mínima de fluidização. Sendo que os modelos de Arastoopour et al. (1990) e Gibilaro et al. (1985) conseguem prever o valor mais próximo e o mais afastado do experimental respectivamente.

Como o modelo de Arastoopour (1990) é derivado do modelo de Gibilaro (1985), acredita-se que a modificação do fator de correção na formulação do arrasto, tenha uma forte influência na transferência da quantidade de movimento e por consequência na determinação de parâmetros fluidodinâmicos.

Figura 5.4 – Avaliação dos modelos de arrasto na determinação da velocidade mínima de fluidização (A).

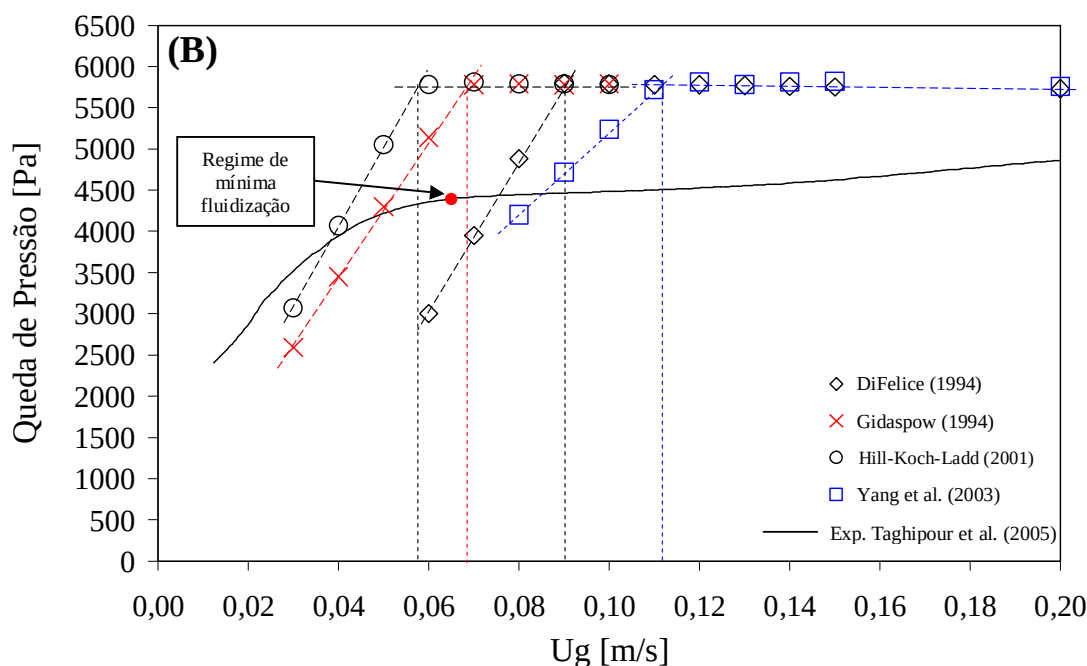


Na Figura 5.5 pode-se observar que os modelos de arrasto conseguem uma previsão da velocidade mínima de fluidização muito mais próxima aos dados experimentais.

O modelo de Hill-Koch-Ladd (2001) é o único que subestima levemente o valor da velocidade mínima de fluidização. O modelo de Gidaspow (1994) superestima levemente o valor seguido do modelo de Di Felice (1994). Neste grupo, o modelo de Yang et al. (2003) apresenta a previsão mais distante.

Comparando ambas as Figuras 5.4 e 5.5 pode-se notar que entre todos os modelos de arrasto, os modelos Gidaspow (1994) e Hill-Koch-Ladd (2001) conseguem determinar a velocidade mínima de fluidização mais próxima da medida experimental.

Figura 5.5 – Avaliação dos modelos de arrasto na determinação da velocidade mínima de fluidização (B).



A Tabela 5.3 apresenta o resultado da análise estatística desenvolvida aos modelos de arrasto na determinação da velocidade mínima de fluidização. Os modelos de Gidaspow (1994) e Hill-Koch-Ladd (2001) apresentam o menor valor de erro relativo.

Assim, pode-se refletir sobre o uso destes modelos na determinação da velocidade mínima de fluidização. No caso dos outros modelos, a previsão superestima em até três vezes o valor da velocidade mínima de fluidização.

Tabela 5.3 – RMSD do perfil de queda de pressão na determinação da velocidade de mínima fluidização.

Modelo de arrasto	U_{mf} m/s	Erro relativo %
Gibilaro et al. (1985)	0,189	190
Syamlal O'Brien (1989)	0,130	100
Arastoopour et al. (1990)	0,104	60
Ma-Ahmadi (1990)	0,173	166
Di Felice (1994)	0,09	38,46
Nieuwland et al. (1994)	-	-
RUC (1994)	-	-
Gidaspow (1994)	0,068	4,61
Andrew e O'Rourke (1996)	-	-
Hill-Koch-Ladd (2001)	0,057	12,30
Yang et al. (2003)	0,113	73,84

5.3.3 Determinação da expansão do leito

A expansão do leito é uma das características macroscópica mais importante e em consequência disso a mais relatada. O conhecimento do grau de expansão do leito é essencial na definição da altura de alimentação das partículas sólidas, assim como também um adequado *freeboard* no projeto do leito (Hosseini et al. 2009).

Da Figura 5.6 pode-se observar que inicialmente a maioria dos modelos de arrasto exibe uma tendência a subestimar a expansão do leito até um intervalo de velocidade de fluidização entre 0,20 a 0,30 m/s. Os modelos de Di Felice (1994), Gidaspow (1994) e Hill-Koch-Ladd (2001) apresentam quase a mesma tendência, sendo que em velocidades de fluidização acima de 0,20 m/s os resultados da simulação começaram a superestimar o valor da expansão do leito. O modelo de Syamlal O'Brien (1989) subestima a expansão do leito, porém em velocidades de fluidização próximas de 0,30 m/s o valor previsto começa a estar muito próximo do experimental. Porém nas velocidades posteriores o modelo consegue superestimar levemente a expansão do leito. Conforme a velocidade de fluidização aumenta todos os modelos apresentam um distanciamento dos dados experimentais com exceção do modelo de Arastoopour et al. 1990, o qual subestima a expansão do leito na faixa de velocidade de fluidização estabelecida no estudo.

Figura 5.6 – Comparação dos modelos de arrasto na determinação da expansão do leito (A).

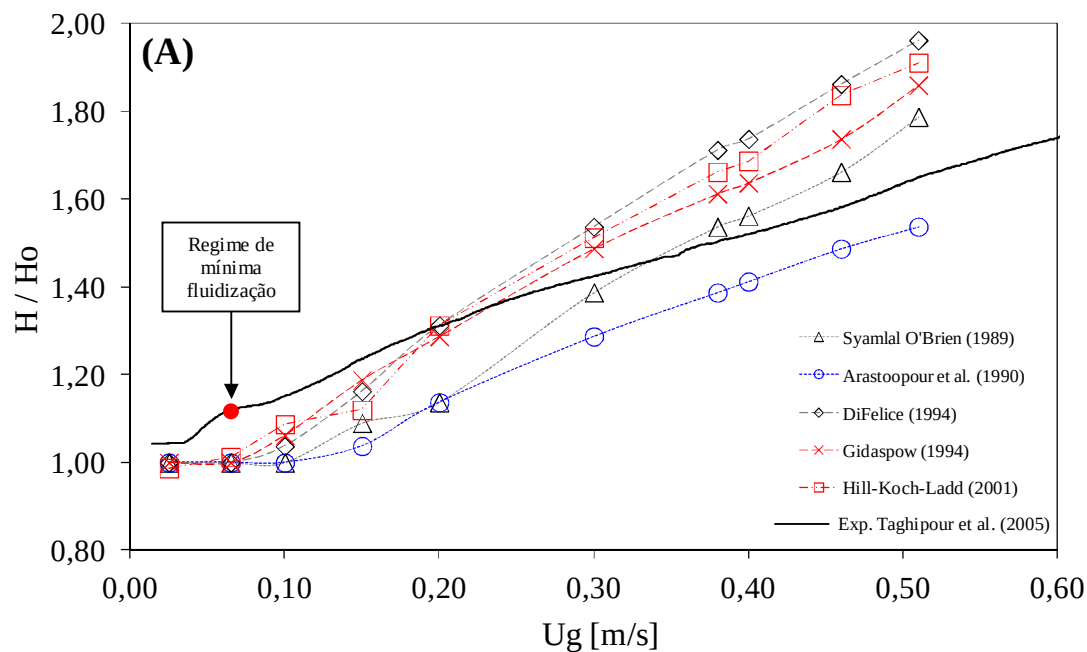
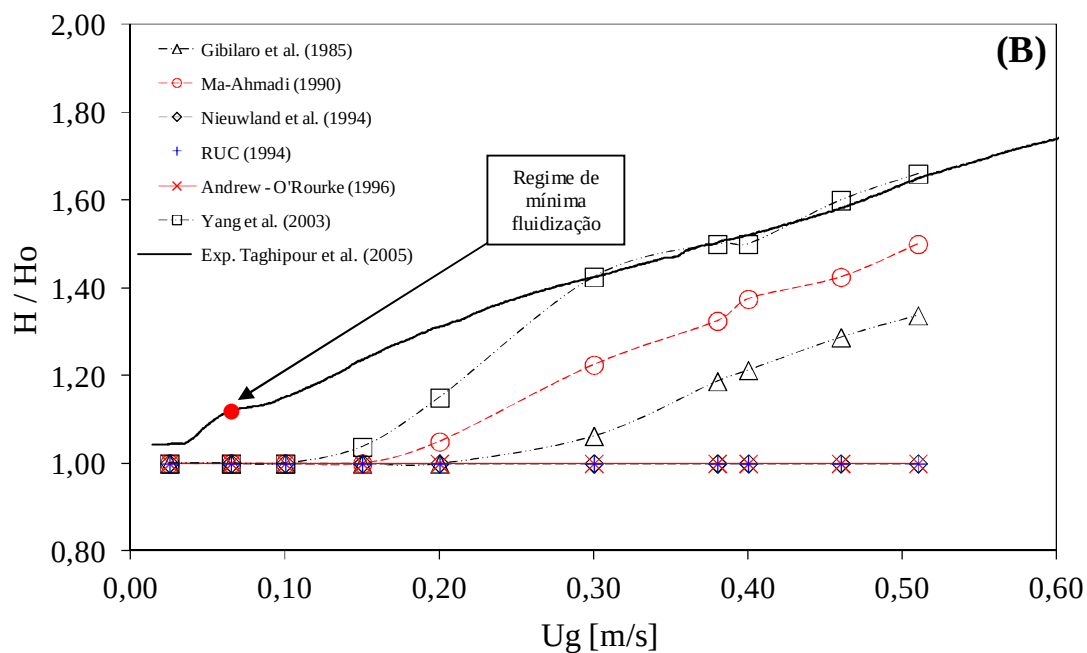


Figura 5.7 – Comparação dos modelos de arrasto na determinação da expansão do leito (B).



Na Figura 5.7 pode-se notar que os modelos de Nieuwland et al. (1994), Andrew e O'Rourke (1996) e RUC (1994) não apresentam expansão do leito na faixa de velocidade de fluidização definida neste estudo. O modelo de Yang et al. (2003) apresenta um comportamento muito diferente aos outros modelos, já que inicialmente subestima o valor da expansão do leito, no entanto quando a velocidade de fluidização atinge um valor de 0,15 m/s começa a ter uma expansão do leito e quando chega a 0,30 m/s a previsão do modelo é muito próxima da expansão do leito experimental. Os modelos de Gibilaro et al. (1985) e Ma-Ahmadi (1990) apresentam uma resposta quando a velocidade está no intervalo entre 0,15 e 0,20 m/s, em todos os casos sempre subestimando a expansão do leito.

Analizando os modelos de Arastoopour et al. (1990) e Gibilaro et al. (1985) pode-se notar o grau de influência que há no fator de correção na formulação do arrasto (equação 3.13). Comparando os resultados, entende-se que a modificação no valor do expoente aumenta a transferência da quantidade de movimento permitindo uma maior aproximação ao fenômeno físico. Basicamente o modelo de Arastoopour et al. (1990) subestima de forma uniforme a expansão do leito, porém está mais próximo dos dados experimentais.

Finalmente, determina-se o valor de RMSD para cada modelo, de forma a verificar quantitativamente seu grau de aproximação. A Tabela 5.4 apresenta os resultados da análise estatística, onde os modelos de Gidaspow (1994), Syamlal O'Brien (1989) e Yang et al. (2003) apresentam o melhor desempenho na previsão da expansão do leito.

Tabela 5.4 – RMSD da expansão do leito.

Modelo de arrasto	RMSD %
Gibilaro et al. (1985)	19,75
Syamlal O'Brien (1989)	8,92
Arastoopour et al. (1990)	10,80
Ma-Ahmadi (1990)	13,03
Di Felice (1994)	12,05
Nieuwland et al. (1994)	27,77
RUC (1994)	27,00
Gidaspow (1994)	7,80
Andrew e O'Rourke (1996)	27,00
Hill-Koch-Ladd (2001)	10,19
Yang et al. (2003)	9,34

5.3.4 Determinação do perfil médio temporal da fração de vazio

Um parâmetro muito importante no estudo da fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em leito fluidizado é a distribuição das fases, a qual pode ser determinada através da medição da fração de vazio ou fração volumétrica do gás. Ter conhecimento da distribuição das fases no escoamento permite ter uma melhor visão dos fenômenos que se desenvolvem dentro do leito. No caso de simulações de sistemas de leito fluidizado, o valor da fração de vazio varia na faixa de 0,4 na região densa de partículas sólidas até um valor máximo de 1 no *freeboard*.

Os resultados das simulações são validados com os perfis experimentais médios temporais da fração de vazio do trabalho de Taghipour et al. (2005), os quais foram medidos a 0,20 m acima da placa distribuidora e distribuídos em quase toda a largura do leito "X".

As Figuras 5.8 e 5.9 apresentam os perfis médios temporais da fração de vazio obtidos pelas simulações para uma velocidade de fluidização de 0,38 m/s. Em ambas Figuras, o perfil experimental médio temporal da fração de vazio é representado por uma linha contínua de comportamento não uniforme. Esse comportamento é devido ao regime de fluidização desenvolvido, o qual apresenta uma movimentação de bolhas na zona central do leito o que leva a um incremento na fração de vazio e conseqüentemente numa expansão do leito.

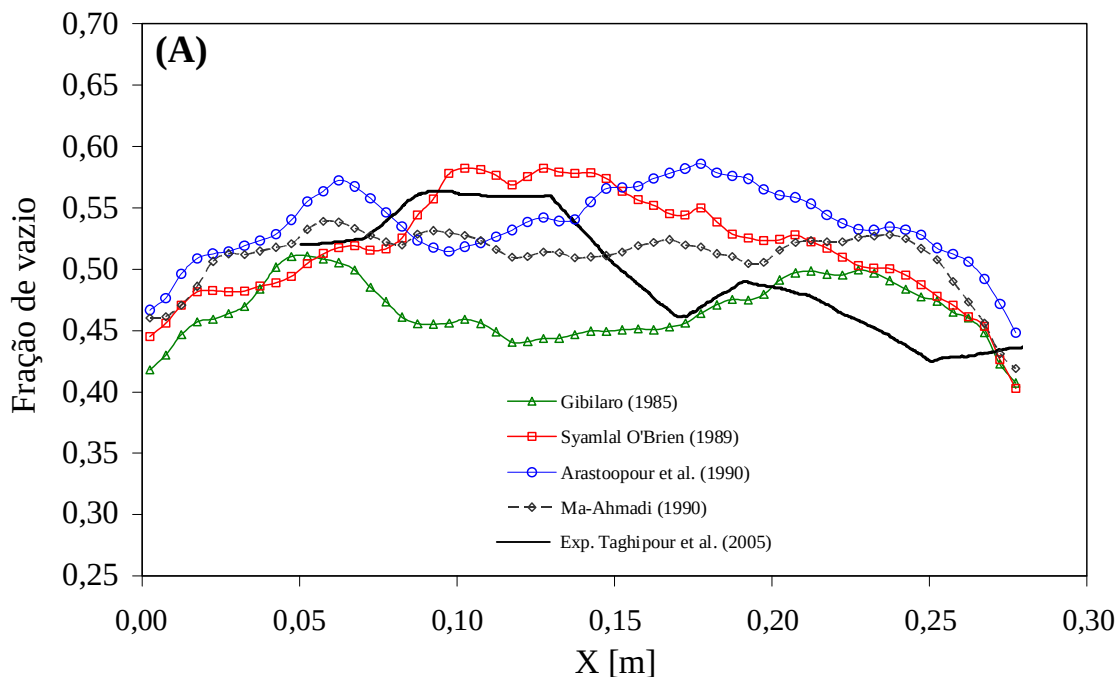
Nas Figuras 5.8 e 5.9 pode-se observar que as simulações dão perfis similares ao experimental. Nota-se que a maioria prediz uma fração de vazio menor nos extremos da curva e um máximo no centro do leito. Isso significa que há uma maior quantidade de partículas sólidas próximo às paredes, e na parte central do leito há uma maior circulação de gás na forma de bolhas, as quais provocam um aumento da fração de vazio.

Na Figura 5.8 a maioria dos modelos de arrasto consegue reproduzir um perfil aproximado ao experimental, onde a fração de vazio apresenta um valor máximo de 0,60 na região central do leito.

O modelo de Gibilaro et al. (1985) produz um perfil que subestima a fração de vazio. O formato do perfil indica uma circulação de bolhas próxima às paredes do leito corroborado pelo incremento da fração de vazio. Comparando-o com o perfil previsto pelo modelo de Arastoopour et al. (1990) percebe-se que a mudança do fator de correção na formulação do arrasto produz uma melhora na representação da fluidodinâmica do leito fluidizado.

O modelo de Syamlal O'Brien (1989) apresenta um comportamento similar ao modelo de Arastoopour et al. (1990). Já o modelo de Ma-Ahmadi (1990) apresenta um perfil mais liso determinando uma distribuição mais uniforme da fração de vazio, sendo mais aproximado dos valores experimentais.

Figura 5.8 – Perfil médio temporal da fração de vazio com $U_g = 0,38$ m/s (A).



A Figura 5.9 exibe a previsão do outro grupo de modelos de arrasto, onde claramente se nota a superestimação do perfil médio temporal da fração de vazio.

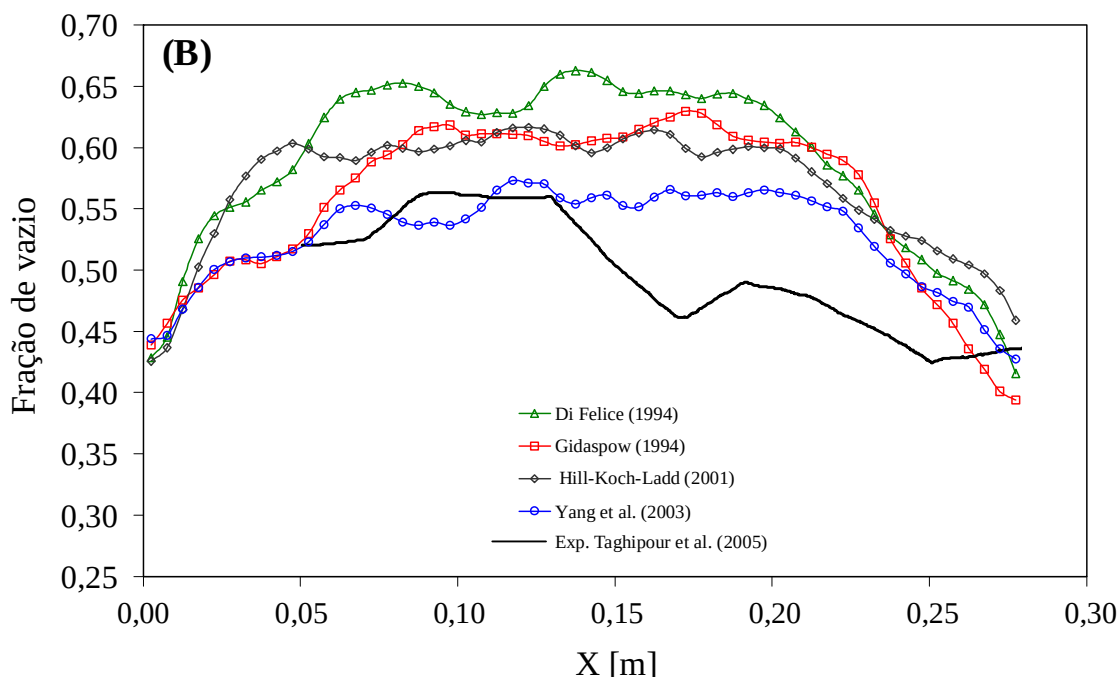
Os modelos de Di Felice (1994), Gidaspow (1994) e Hill-Koch-Ladd (2001) apresentam um comportamento muito semelhante, superestimando a fração de vazio atingindo um valor máximo na zona central e um mínimo nas paredes do leito. A superestimação da fração de vazio é comparável com a previsão da expansão do leito apresentada na Figura 5.6. Entretanto, o modelo de Yang et al. (2003) determinou o perfil mais aproximado ao experimental. O resultado do modelo de Yang et al. (2003) está diretamente relacionado com refinamento no cálculo do arrasto.

As Figuras 5.10 e 5.11 apresentam os perfis médios temporais da fração de vazio previstos pelos modelos de arrasto para uma velocidade de fluidização de $0,46$ m/s. Analisando o perfil experimental da fração de vazio de Taghipour et al. (2005) pode-se notar que conforme a velocidade de fluidização incrementou-se de $0,38$ a $0,46$ m/s exibe uma maior irregularidade, ressaltado pela tendência parabólica da curva experimental.

Da Figura 5.10 pode-se notar que os perfis previstos pelos modelos de arrasto superestimam levemente a fração de vazio. Os modelos de Syamlal O'Brien (1989), Ma-Ahmadi (1990) e Arastoopour et al. (1990) apresentam perfis de maior irregularidade diferente da curva experimental.

Todos os modelos exibem um comportamento similar devido ao aumento de tamanho e coalescência das bolhas provocado pelo incremento na velocidade de fluidização. No entanto, o modelo de Gibilaro et al. (1985) subestima em parte o perfil da fração de vazio.

Figura 5.9 – Perfil médio temporal da fração de vazio com $U_g = 0,38$ m/s (B).



Na Figura 5.11 pode-se destacar que os modelos de Di Felice (1994), Gidaspow (1994) e Hill-Koch-Ladd (2001) superestimam consideravelmente a fração de vazio, além disso, nota-se uma tendência similar nos perfis de fração de vazio previstos. Sendo o modelo de Di Felice (1994) o que apresenta a maior superestimação da fração de vazio.

No entanto, o modelo de Yang et al. (2003) prevê um perfil de fração de vazio o qual subestima levemente o experimental porém é o mais aproximado. Analisando este modelo pode-se entender que o refinamento no cálculo do arrasto consegue melhorar representar de forma mais aproximada a distribuição das fases dentro do leito.

Pode-se destacar que os perfis de fração volumétrica previstos pelos modelos apresentam uma maior regularidade, analogamente à curva experimental, conforme aumenta a velocidade de fluidização. Aparentemente uma maior velocidade de fluidização provoca uma estabilidade no perfil de fração de vazio devido ao aumento no número, tamanho e coalescência das bolhas.

Figura 5.10 – Perfil médio temporal da fração de vazio com $U_g = 0,46$ m/s (A).

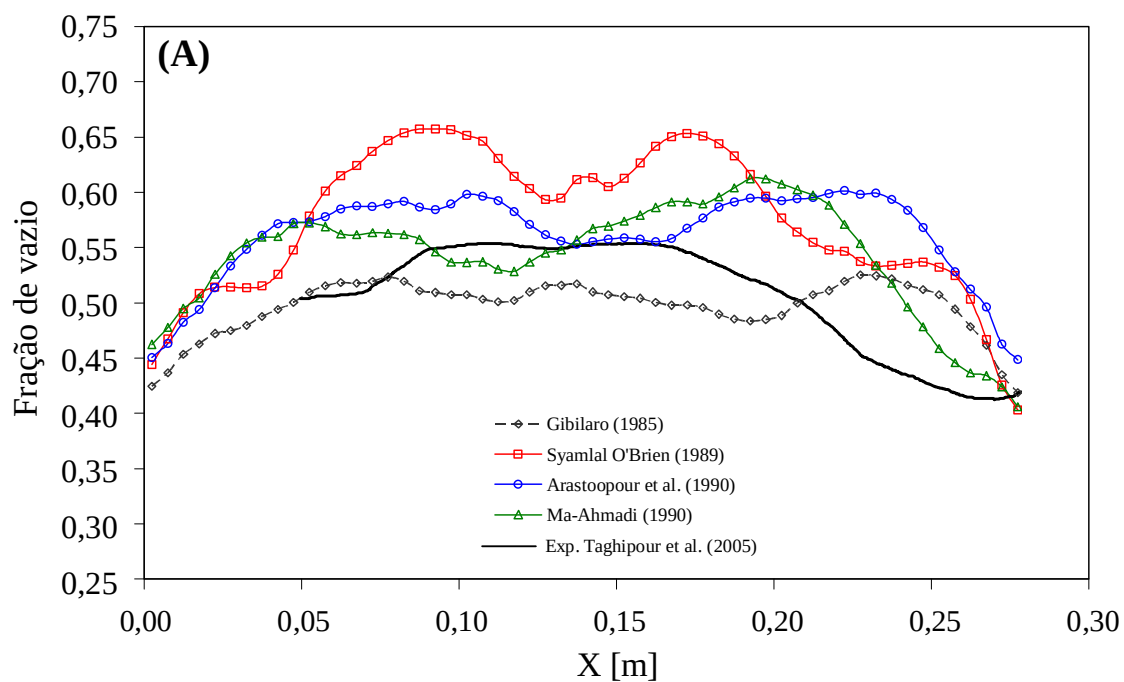
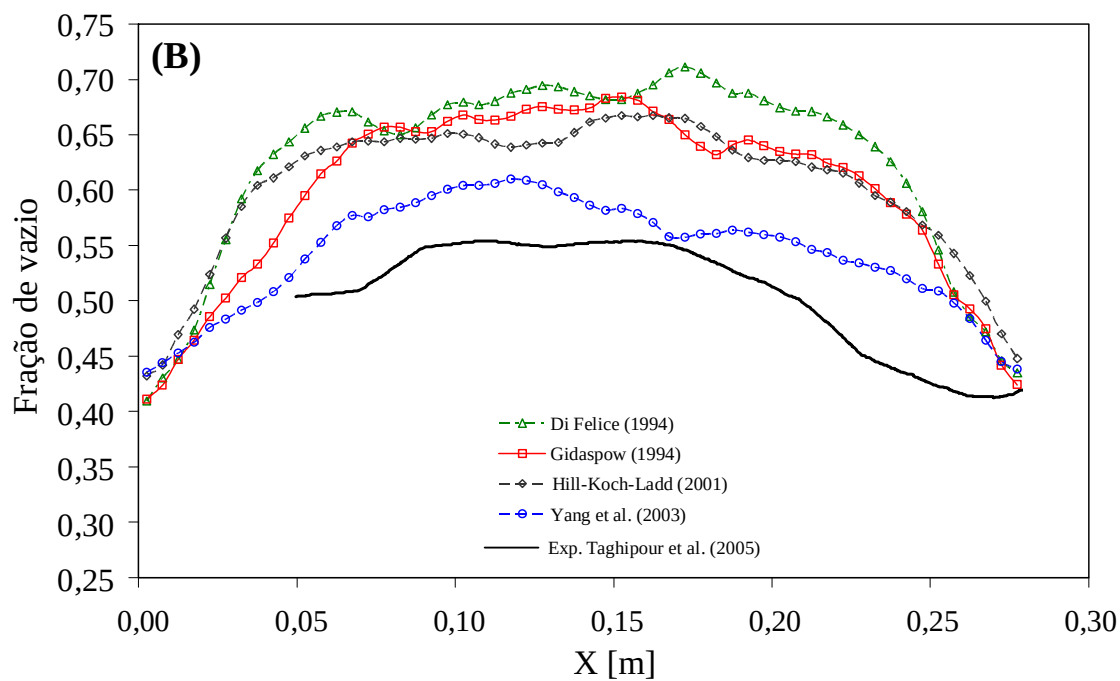


Figura 5.11 – Perfil médio temporal da fração de vazio com $U_g = 0,46$ m/s (B).



Devido à irregularidade nos valores do perfil médio temporal da fração de vazio são muito difíceis de avaliar qualitativamente, é necessário o uso da análise estatística para ter um valor quantitativo representativo do perfil.

A Tabela 5.5 apresenta os resultados da análise estatística, na qual o modelo de arrasto de Gibilaro et al. (1985), Ma-Ahmadi (1990) e Yang et al. 2003 apresentam os valores mais baixos de dispersão nas duas velocidades de fluidização. Apesar disso, esses resultados são questionais já que esses modelos em geral subestimam outras variáveis de projeto, assim pode-se entender que a previsão aproximada de um parâmetro de projeto não garante que consiga prever outros. Portanto, uma consideração muito importante na seleção de um modelo de arrasto é que consiga prever com boa aproximação o maior numero de parâmetros necessários no projeto do leito fluidizado.

Tabela 5.5 – RMSD dos perfis médio temporais de fração volumétrica.

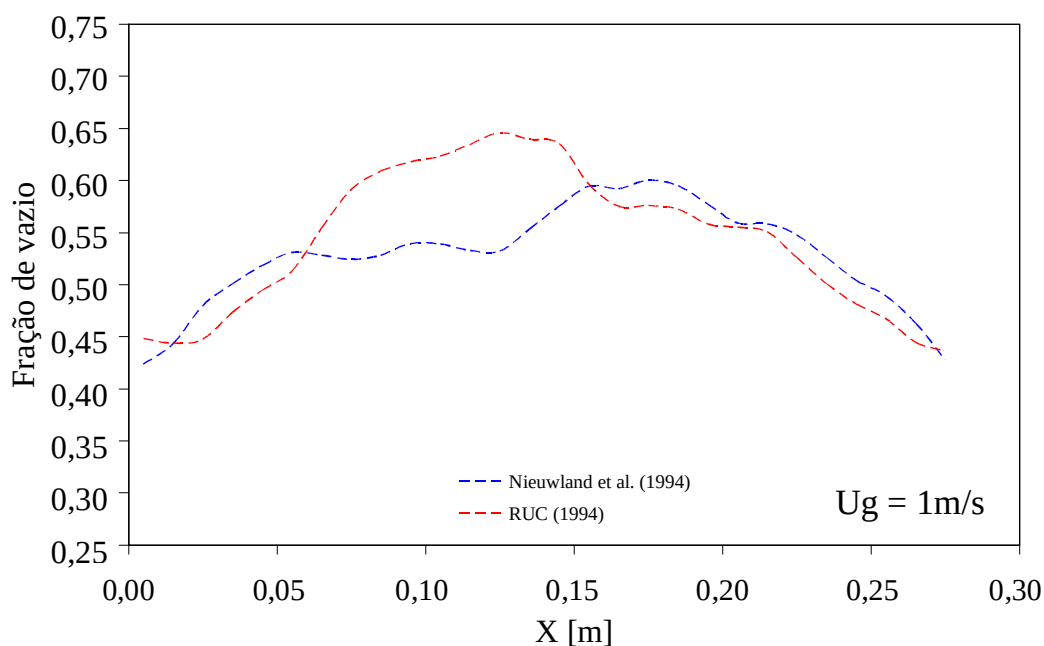
Modelo de arrasto	RMSD %	
	0,38 m/s	0,46 m/s
Gibilaro et al. (1985)	11,55	9,89
Syamlal O'Brien (1989)	9,19	14,65
Arastoopour et al. (1990)	14,40	15,07
Ma-Ahmadi (1990)	9,44	9,52
Di Felice (1994)	23,26	28,92
Nieuwland et al. (1994)	-	-
RUC (1994)	-	-
Gidaspow (1994)	16,77	23,07
Andrew e O'Rourke (1996)	-	-
Hill-Koch-Ladd (2001)	18,16	23,49
Yang et al. (2003)	11,54	11,37

Segunda a análise estatística, o modelo Syamlal et al. (1989) consegue representar com boa aproximação o perfil de fração de vazio numa velocidade de fluidização de 0,38 m/s, porém a previsão se vê reduzida conforme aumenta para 0,46 m/s. A mesma tendência ocorre com os modelos de Di Felice (1994), Gidaspow (1994), Hill-Koch-Ladd (2001) e em menor intensidade no modelo de Arastoopour et al. (1990) e Ma-Ahmadi (1990). Destes resultados pode-se notar que alguns modelos de arrasto apresentam um desempenho crítico em altas velocidades de fluidização.

As simulações numéricas demonstraram que os modelos de arrasto de RUC (1994), Andrew e O'Rourke (1996) e Nieuwland et al. (1994) não mostraram alguma previsão da fração de vazio na faixa de velocidades de fluidização estabelecida no estudo (0,025 – 0,51 m/s).

Sim embargo, foram utilizadas velocidades de fluidização acima da faixa estabelecida com a finalidade de conseguir alguma resposta, deste modo os modelos RUC (1994) e Nieuwland et al. (1996) conseguiram apresentar uma resposta em velocidades superiores à faixa estabelecida no estudo. A Figura 5.12 apresenta o perfil de fração de vazio obtida por ambos os modelos.

Figura 5.12 – Fração de vazio usando os modelos de Nieuwland et al. (1994) e RUC (1994) com $U_g = 1\text{m/s}$.



No caso do modelo de Andrew e O'Rourke (1996) as simulações não conseguiram prever o perfil de fração de vazio, mesmo em altas velocidades de fluidização.

Este comportamento é similar ao apresentado por Sobieski (2009) o qual avaliou este modelo no estudo da fluidodinâmica de um leito de jorro numa velocidade de fluidização de 30 m/s, sem apresentar alguma resposta.

5.3.5 Determinação do perfil médio temporal da velocidade das partículas.

Neste item são apresentados os perfis médios temporais da velocidade das partículas previstos pelos modelos de arrasto em duas velocidades de fluidização 0,38 e 0,46 m/s respectivamente.

É importante destacar que o trabalho de Taghipour et al. (2005) não proporciona medidas experimentais do perfil de velocidade das partículas. Assim, para analisar os resultados obtidos numa velocidade de fluidização de 0,38 m/s, é determinado um perfil médio usando os resultados obtidos a partir das simulações. Para uma velocidade de fluidização de 0,46 m/s, Taghipour et al. (2005) apresenta os perfil média da velocidade das partículas obtido através do software FLUENT 6.0. Ambos os perfis são utilizados no intuito de comparar e estimar o grau de previsão de cada modelo.

No trabalho, as simulações numéricas tiveram os mesmos parâmetros numéricos utilizados por Taghipour et al. (2005) com a finalidade de evitar divergências na comparação.

As Figuras 5.13 e 5.14 apresentam os perfis médios temporais da velocidade das partículas para uma velocidade de fluidização de 0,38 m/s.

A maioria de modelos de arrasto prevê a existência de uma estrutura *central-anelar* formada pelas partículas no escoamento, a qual exibe uma *região central* onde as partículas sólidas são transportadas pelas bolhas e uma *região anelar* resultado da circulação descendente das partículas sólidas. Nas simulações numéricas esse comportamento é representado por um valor negativo dos perfis de velocidade média das partículas, indicando uma circulação descendente das partículas sólidas próximo às paredes e um valor positivo na zona central do leito representa a movimentação das partículas produto da circulação das bolhas.

Na Figura 5.13 os modelos de Gibilaro et al. (1985), Arastoopour et al. (1990) e Ma-Ahmadi (1990) apresentam uma subestimação do perfil médio de velocidade das partículas.

O perfil previsto pelo modelo de Gibilaro et al. (1985) apresenta um padrão singular exibindo dois picos laterais. Esse comportamento é produto da circulação lateral ascendente de bolhas, o qual provoca o escoamento descendente de partículas sólidas na zona central no leito. Já o modelo de Arastoopour et al. (1990) apresenta um perfil com uma tendência parabólica. O modelo de Ma-Ahmadi (1990) apresenta um perfil com um padrão mais regular, exibindo velocidades próximas a zero na região central. Esse perfil é característico da formação de vorticidades naquela região. O modelo de Syamlal-O'Brien (1989) apresenta um perfil com uma superestimação parcial na região central do leito.

Figura 5.13 – Perfil médio temporal da velocidade das partículas com $U_g = 0,38$ m/s (A).

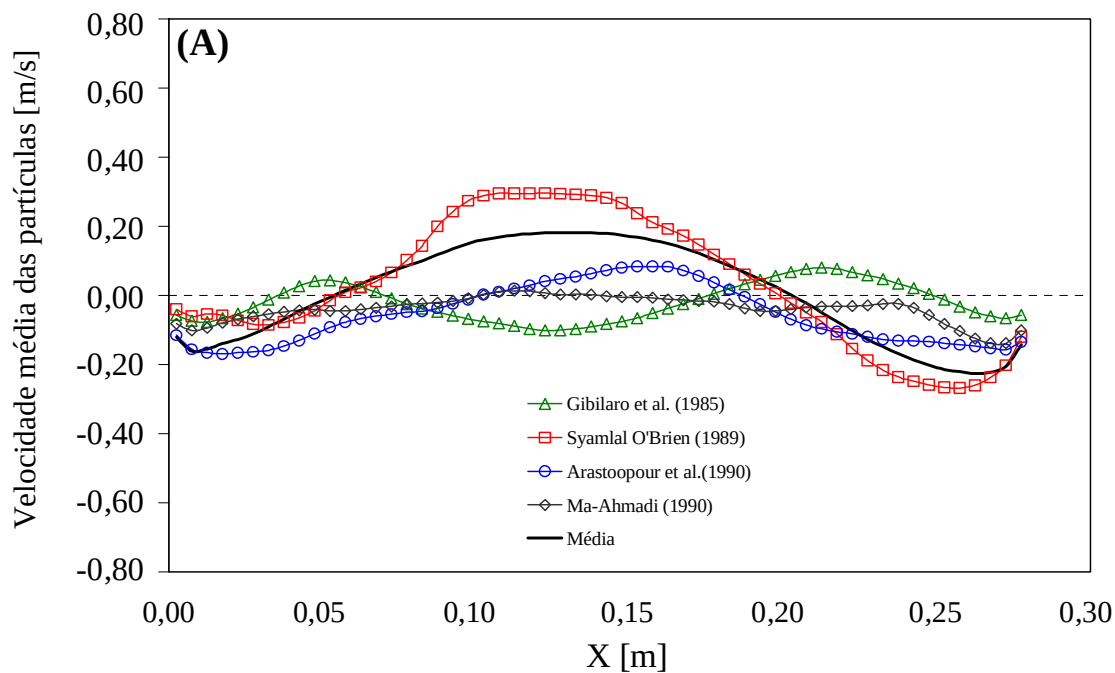
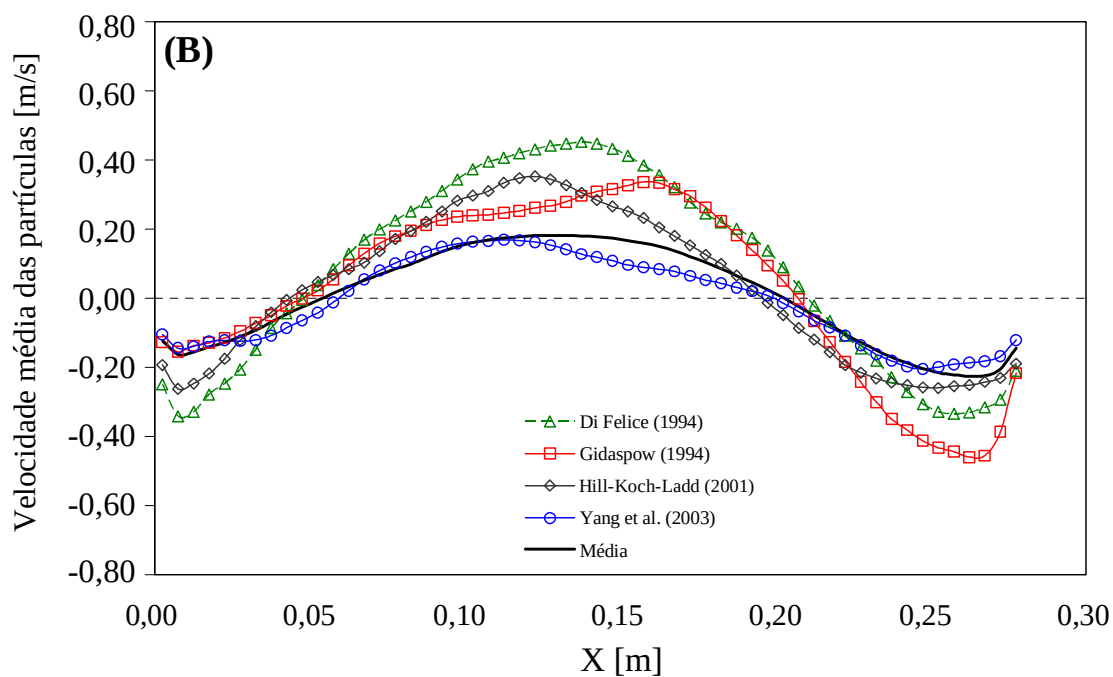


Figura 5.14 – Perfil médio temporal da velocidade das partículas com $U_g = 0,38$ m/s (B).



Na Figura 5.14, os modelos de arrasto apresentam uma previsão semelhante, exibindo uma circulação mais intensa de sólidos nas paredes do leito. Na Figura 5.14 a superestimação por parte dos modelos de Di Felice (1994), Gidaspow (1994), Hill-Koch-Ladd (2001) concorda com as previsões dos outros parâmetros de projeto anteriormente discutidos. O modelo de arrasto de Di Felice (1994) apresenta um amplo perfil parabólico, assim como também prevê o maior perfil de velocidade das partículas. Esse comportamento é similar aos resultados obtidos na previsão da fração de vazio onde também exibe a mesma tendência. Por último, o modelo de Yang et al. (2003) mostra o perfil mais aproximado.

As Figuras 5.15 e 5.16 apresentam os perfis médios temporais da velocidade das partículas para uma velocidade de fluidização de 0,46 m/s. A simulação numérica de Taghipour é representada pela linha contínua.

Na Figura 5.15 os modelos de Syamlal-O'Brien (1989) e Gibilaro et al. (1985) continuam mantendo uma tendência similar ao perfil mostrado na Figura (5.14), porém neste último a região central apresenta um leve incremento de velocidade. O modelo de Ma-Ahmadi (1990) também apresenta um incremento na região central do leito, assim como também um incremento na velocidade lateral, isso se pode entender como um aumento na circulação de sólidos.

A Figura 5.16 apresenta os modelos de Gidaspow (1994), Hill-Koch-Ladd (2001) e Yang et al. (2003) mantendo uma tendência similar, no entanto o modelo de Yang et al. (2003) apresenta a menor previsão. O modelo de Di Felice (1994) é o único que consegue atingir parcialmente na região central do leito de forma similar ao perfil numérico de Taghipour et al. (1995), além disso mantendo e intensificando o padrão de circulação lateral de sólidos.

A Tabela 5.6 apresenta o resultado da análise estatística submetida aos perfis de velocidade. Nota-se que todos apresentam um grau de dispersão muito grande. Para uma velocidade de fluidização de 0,38 m/s, os modelos de Syamlal-O'Brien (1989) e Yang et al. (2003) são os mais próximos do perfil médio calculado.

Para uma velocidade de fluidização de 0,46 m/s, todos os modelos apresentam valores de RMSD acima dos 100%, sendo os modelos de Gibilaro et al. (1985) e Hill-Koch-Ladd (2001) com os menores valores.

Neste ponto, deve-se destacar que as métricas utilizadas para desenvolver a análise estatística tais como o perfil médio de todas as previsões não é o mais ideal, assim os resultados estatísticos estão sujeito a mudanças.

Figura 5.15 – Perfil médio temporal da velocidade das partículas com $U_g = 0,46$ m/s (A)

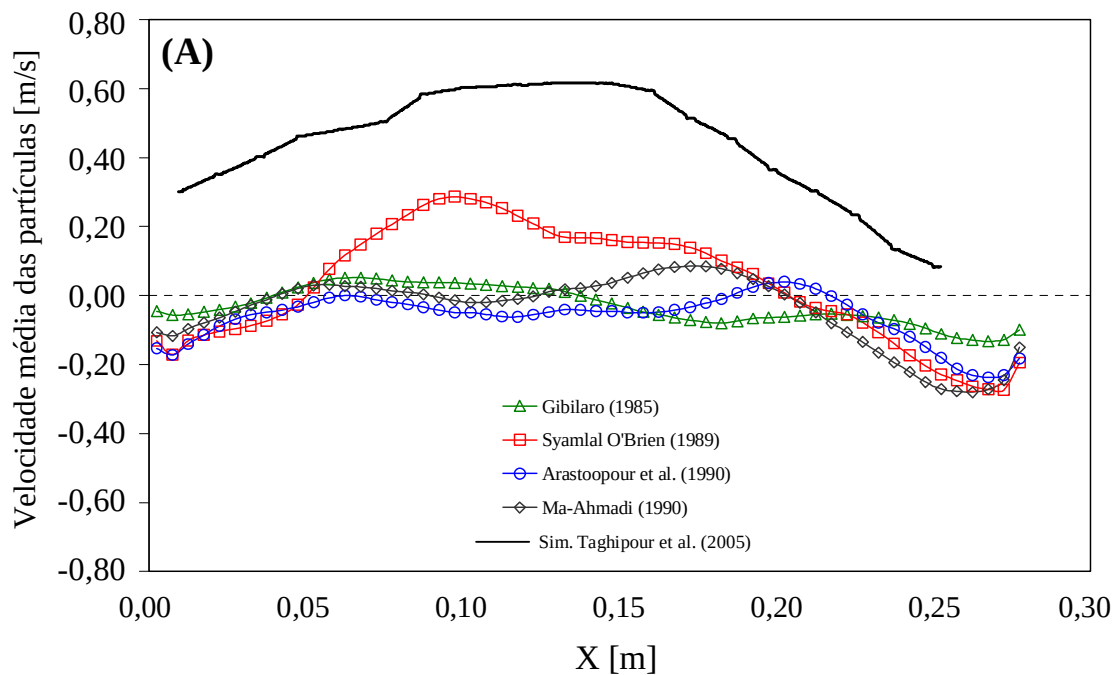


Figura 5.16 – Perfil médio temporal da velocidade das partículas com $U_g = 0,46$ m/s (B)

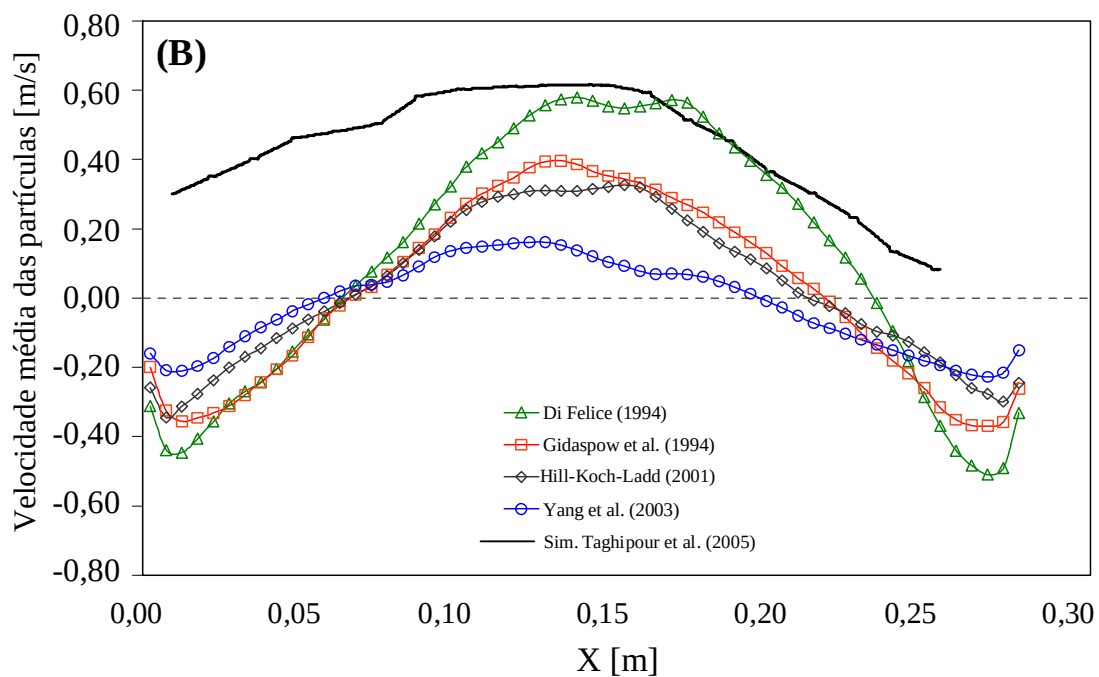


Tabela 5.6 – RMSD do perfil médio temporal da velocidade das partículas.

Modelo de arrasto	RMSD	
	0,38 m/s	0,46 m/s
Gibilaro et al. (1985)	138,94	115,19
Syamlal O'Brien (1989)	49,77	121,05
Arastoopour et al. (1990)	145,12	125,08
Ma-Ahmadi (1990)	117,39	139,50
Di Felice (1994)	157,28	136,66
Nieuwland et al. (1994)	-	-
RUC (1994)	-	-
Gidaspow (1994)	108,41	141,73
Andrew e O'Rourke (1996)	-	-
Hill-Koch-Ladd (2001)	96,53	117,84
Yang et al. (2003)	44,36	127,87

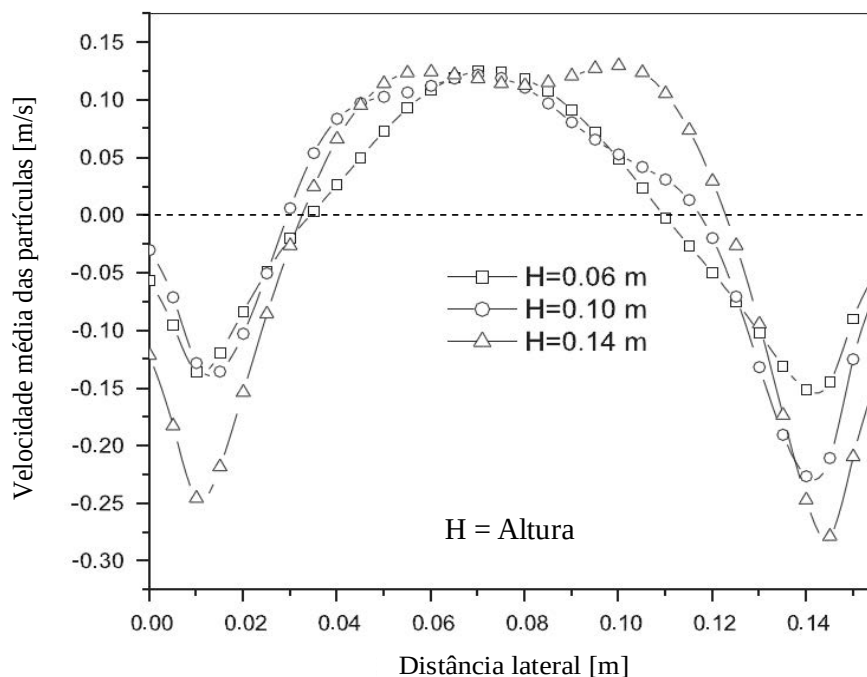
Os perfis médios temporais da velocidade das partículas obtidos em ambas velocidades de fluidização mostram uma tendência muito particular e de certa forma discordam consideravelmente com a tendência do perfil de velocidade média das partículas apresentada por Taghipour et al. (2005).

Dessa forma, com a finalidade de confirmar as previsões obtidas neste trabalho a Figura (5.17) exibe os perfis médios temporais da velocidade das partículas num leito fluidizado em três alturas diferentes do trabalho de Loha et al. (2012). Esses perfis foram obtidos através de simulações utilizando o pacote comercial FLUENT.

Comparando os perfis previstos das Figuras 5.13 até 5.16 com a Figura (5.17) observa-se uma tendência muito aproximada. Qualitativamente, as simulações revelam principalmente a formação da estrutura *central-anelar*, desenvolvida pela circulação de bolhas na zona central a qual promove o escoamento lateral descendente de partículas sólidas.

Finalmente a maioria dos modelos de arrasto consegue prever um perfil médio temporal da velocidade das partículas com um comportamento similar ao apresentado por Loha et al. (2012).

Figura 5.17 – Simulação do perfil médio temporal da velocidade das partículas sólidas em leito fluidizado em diversas alturas de Loha et al. (2012).



Fonte: (LOHA et al. (2012)).

5.3.6 Comparação qualitativa dos modelos de arrasto

As Figuras (5.18) até (5.21) são imagens instantâneas da fluidodinâmica do leito fluidizado obtido com cada modelo de arrasto a 6 segundos da simulação em diferentes velocidades de fluidização. Observando as figuras pode-se ter uma noção qualitativa mais clara do desempenho de cada modelo de arrasto, assim como também compreender conceitos tais como, o regime de fluidização, expansão do leito, formação, crescimento e coalescência de bolhas.

A Figura (5.18) apresenta a fluidodinâmica do leito quando a velocidade de fluidização é 0,10 m/s. Os modelos Syamlal-O'Brien (1989), Arastoopour et al. (1990), Ma-Ahmadi (1990), Di Felice (1994), RUC (1994), e Yang et al. (2003) mantêm um leito fixo exibindo um aumento na fração de vazio na superfície do leito. Os modelos Di Felice (1994), Gidaspow (1994) e Hill-Koch-Ladd (2001), apresentam uma ligeira expansão do leito. Esse comportamento pode ser confirmado visualizando os perfis apresentados nas Figuras (5.6) e (5.7), onde alguns modelos apresentam uma expansão do leito, porém não da mesma ordem do experimental.

Na Figura (5.19) pode ser observado que numa velocidade de fluidização de 0,20m/s, os modelos Syamlal-O'Brien (1989), Arastoopour et al. (1990), Ma-Ahmadi (1990), Di Felice (1994), Gidaspow (1994), Hill-Koch-Ladd (2001) e Yang et al. (2003) apresentam uma notável expansão do leito e uma movimentação, porém a diferença está na intensidade.

Por exemplo, os modelos Syamlal-O'Brien (1989), Arastoopour et al. (1990), Ma-Ahmadi (1990) e Yang et al. (2003), exibem uma fluidodinâmica mais uniforme, própria de um regime borbulhante com uma superfície do leito bem definida, e os modelos Di Felice (1994), Gidaspow (1994) e Hill-Koch-Ladd (2001), apresentam uma fluidodinâmica mais ativa.

A Figura (5.20) exhibe o comportamento quando a velocidade de fluidização é 0,38 m/s, onde a maioria de modelos apresenta uma intensa fluidização. Ressaltando, o modelo de Di Felice (1994) o qual apresenta maior expansão e agitação do leito. Nesta condição o regime de borbulhamento encontra-se na transição para um regime de escoamento pistonado e em alguns modelos já é visível a presença de grandes bolhas e a formação de pistões.

Quando a velocidade de fluidização atinge um valor de 0,46 m/s, a maioria dos leitos exhibe uma intensa fluidização, onde a formação de pistões é muito clara confirmando uma mudança de regime. Os modelos Gibilaro et al. (1985), Syamlal-O'Brien (1989), Arastoopour et al. (1990), Ma-Ahmadi (1990), Gidaspow (1994) e Hill-Koch-Ladd (2001) apresentam um regime quase na transição de pistonado a turbulento, já os modelos Di Felice (1994) e Yang et al. (2003) apresentam uma fluidodinâmica em regime turbulento, onde a superfície do leito não é distinguível e apresenta uma maior expansão.

No entanto, os modelos Nieuwland et al. (1994), RUC (1994) e Andrew e O'Rourke (1996) ainda permanecem estáticos em todas as velocidade de fluidização.

Por último a Figura (5.22) exhibe uma sequencia do desenvolvimento da fluidização em função do aumento da velocidade superficial de gás, aos 6 segundos após o início da simulação. Para isto baseado na análise prévia dos modelos de arrasto, selecionamos o modelo de Gidaspow (1994) ao prever valores mais próximos dos valores experimentais.

Observa-se que quando a velocidade de fluidização é igual a 0,070 m/s o leito começa a fluidizar. Quando o leito atinge um valor de 0,080 m/s desenvolve um regime de fluidização homogênea, onde aparecem pequenas bolhas e é visível uma leve expansão do leito, este comportamento continua até uma velocidade de fluidização igual a 0,10 m/s. Valores acima de 0,10 m/s provocam um comportamento completamente em regime pistonado e turbulento, onde o leito desenvolve uma notável e gradual expansão do leito.

Figura 5.18 – Comportamento fluidodinâmico do leito utilizando os modelos de arrasto $U_g = 0,10$ m/s.

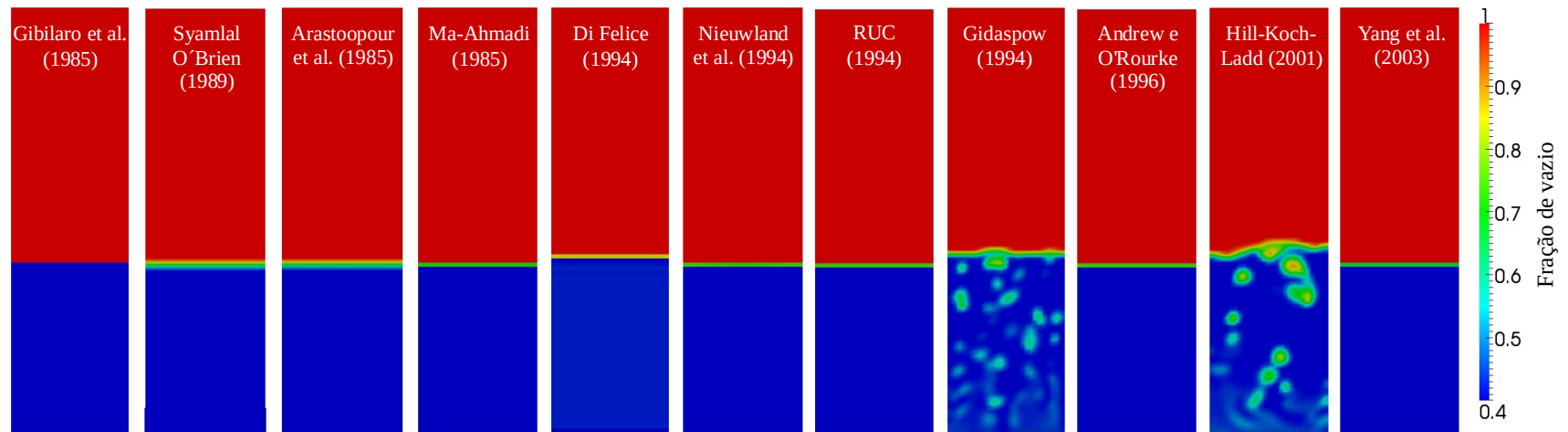


Figura 5.19 – Comportamento fluidodinâmico do leito utilizando os modelos de arrasto $U_g = 0,20$ m/s.

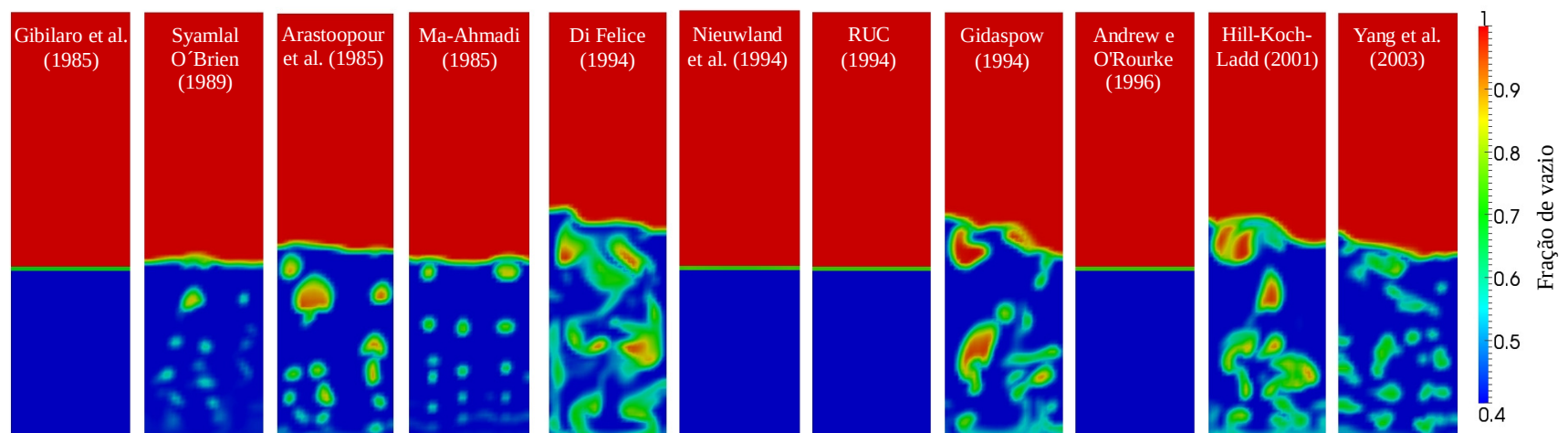


Figura 5.20 – Comportamento fluidodinâmico do leito utilizando os modelos de arrasto $U_g = 0,38$ m/s.

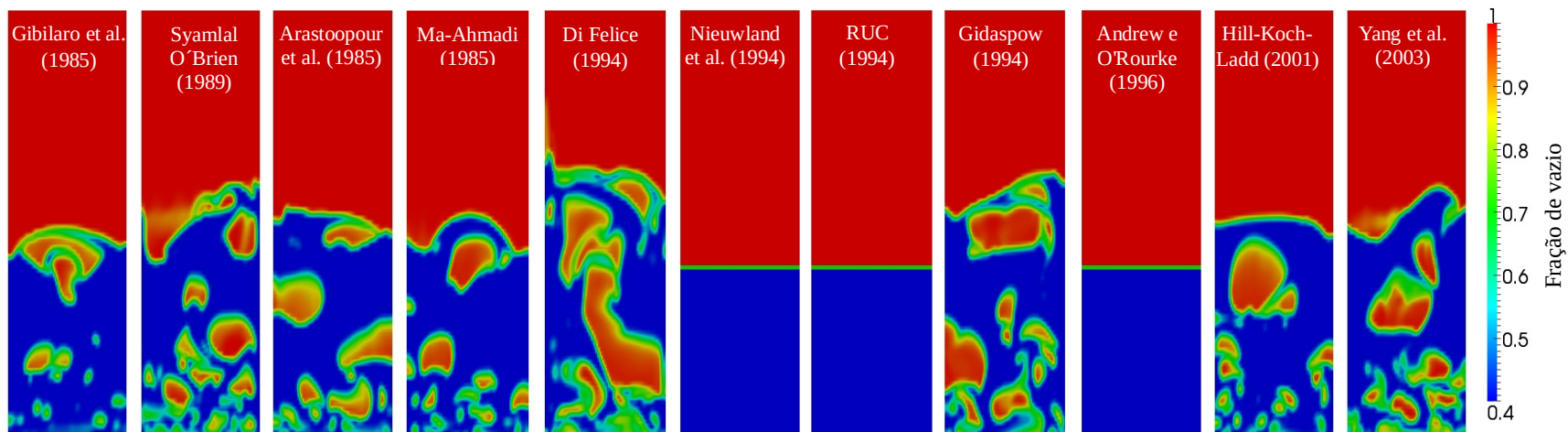


Figura 5.21 - Comportamento fluidodinâmico do leito utilizando os modelos de arrasto $U_g = 0,46$ m/s.

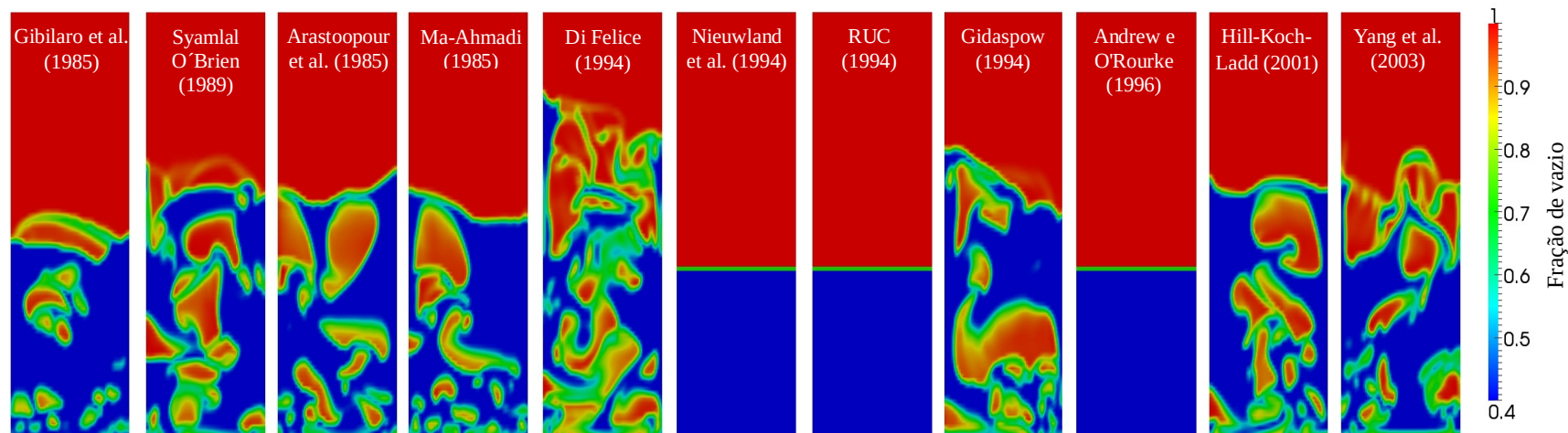
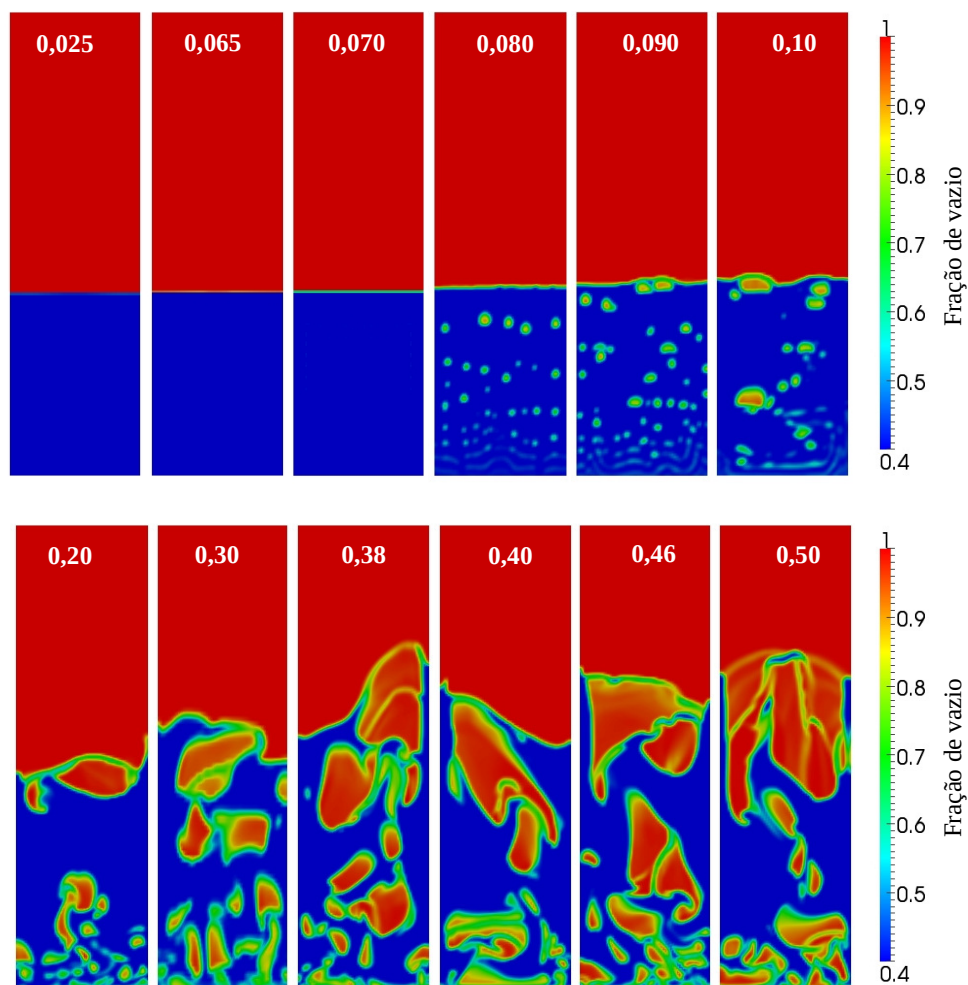


Figura 5.22 – Fluidodinâmica do leito utilizando o modelo de Gidaspow (1994) na faixa de velocidades de fluidização (tempo 6 segundos)



Depois de avaliar todos os modelos de arrasto, pode-se observar que o modelo de Gidaspow (1994) apresenta bom desempenho na representação da fluidodinâmica através da previsão do maior numero de parâmetros de projeto do leito fluidizado.

Dessa forma, este modelo é utilizado para verificar a influencia do coeficiente de restituição, assim como também para desenvolver uma correlação em função de uma variável do escoamento.

5.4 DESENVOLVIMENTO DE UMA CORRELAÇÃO PARA O COEFICIENTE DE RESTITUIÇÃO

O coeficiente de restituição é a variável do escoamento gás-sólido a qual determina o comportamento das colisões entre as partículas sólidas. Este coeficiente é uma medida da elasticidade das colisões, representando a dissipação da energia cinética numa colisão (REUGE et al. 2008; JAKOBSEN et al. 2010).

Baseado na sua definição na TCEG, o coeficiente de restituição representa a dissipação de energia devido a uma colisão inelástica binária. Outros efeitos tais como múltiplas colisões são desprezadas. Sim embargo, as colisões desenvolvidas nos leitos fluidizados são muito mais complicadas que a consideração de uma simples colisão binária (JAKOBSEN et al. 2010).

Segundo Jakobsen et al. (2010) a dissipação de energia produto das colisões de um conjunto de partículas deve ser representada por uma perda total de energia considerando todos os efeitos. Portanto, um coeficiente de restituição constante na TCEG não pode representar completamente a dissipação de energia. Para conseguir uma descrição mais precisa do leito fluidizado, o valor local do coeficiente de restituição deveria estar relacionado com variáveis do escoamento tais como: a velocidade de fluidização, velocidade das partículas sólidas ou a fração de vazio.

Deste modo, avalia-se a possibilidade de correlacionar o coeficiente de restituição com fração de vazio, no intuito de considerar o efeito do conjunto das partículas na dissipação da energia cinética.

Teoricamente o valor do coeficiente de restituição está na faixa de zero (0), para uma colisão perfeitamente inelástica com uma completa dissipação da energia cinética, e a unidade (1) para uma colisão elástica sem nenhuma dissipação de energia cinética. Além disso, o seu valor depende também das propriedades da partícula sólida (JAKOBSEN et al. 2010).

Segundo Esmaili e Mahinpey (2011) trabalhos envolvendo simulação do escoamento gás-sólido em diferentes aplicações exibem valores na faixa de 0,73 e 1. Dessa forma, para o desenvolvimento da correlação é determinada uma faixa entre 0,7 e 1 para o coeficiente de restituição, definindo quatro valores a serem avaliados sendo: 0,7; 0,8; 0,9 e 0,99.

Sabe-se que o aumento gradual da velocidade de fluidização induz um incremento da fração de vazio no leito. Assim, definem-se 10 valores de velocidade de fluidização com o objetivo de determinar a fração de vazio média desenvolvida no leito.

Há duas condições críticas na definição de um valor para o coeficiente de restituição, a primeira é a definição de um valor no ponto de mudança de regime denso para diluído e a segunda é o seu máximo valor. Por conseguinte, são assumidas as seguintes suposições:

- No ponto de mudança de regime denso a diluído, o coeficiente de restituição terá um valor de 0,9. Baseado principalmente em diversos trabalhos consideram este valor.
- Quando o escoamento alcance um regime completamente diluído, o coeficiente de restituição apresentará um valor máximo de 0,99.

Para o desenvolvimento das simulações numéricas, considerou-se o modelo de arrasto de Gidaspow (1994), a seguir é descrita a metodologia utilizada sendo:

1. Primeiramente desenvolvem-se as simulações nas velocidades de fluidização especificadas, avaliando os 4 diferentes valores do coeficiente de restituição.
2. Resultado de cada simulação são obtidos quatro perfis médios temporais da fração de vazio, dos quatro perfis procede-se a calcular um perfil médio o qual será utilizado como métrica na análise estatística.
3. Através da análise estatística procede-se a selecionar o coeficiente de restituição que produz o perfil de fração de vazio com o menor valor de RMSD.
4. Definido o valor do coeficiente de restituição, com o perfil da fração de vazio selecionado calcula-se um valor local da fração de vazio média representativo.

As Figuras 5.23 e 5.24 apresentam os perfis de fração de vazio para velocidades de fluidização é 0,38 e 0,46 m/s respectivamente, com diferentes valores de coeficiente de restituição. Comparando ambas as Figuras 5.23 e 5.24, pode-se notar que o valor do coeficiente de restituição possui um efeito no perfil médio da fração de vazio. Na Figura 5.23 o perfil médio de fração de vazio em diferentes valores do coeficiente de restituição não apresenta grandes diferenças. No entanto, na Figura 5.24 um aumento na velocidade de fluidização o efeito do coeficiente de restituição se mostra considerável.

Figura 5.23 – Efeito do coeficiente de restituição sobre o perfil médio temporal da fração de vazio, $U_g = 0,38$ m/s.

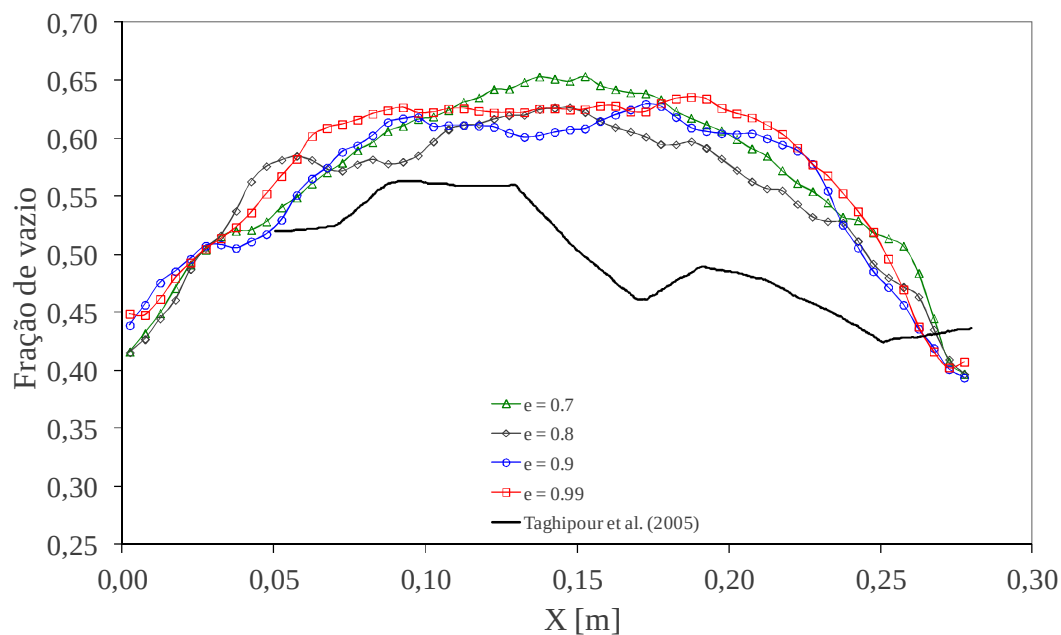
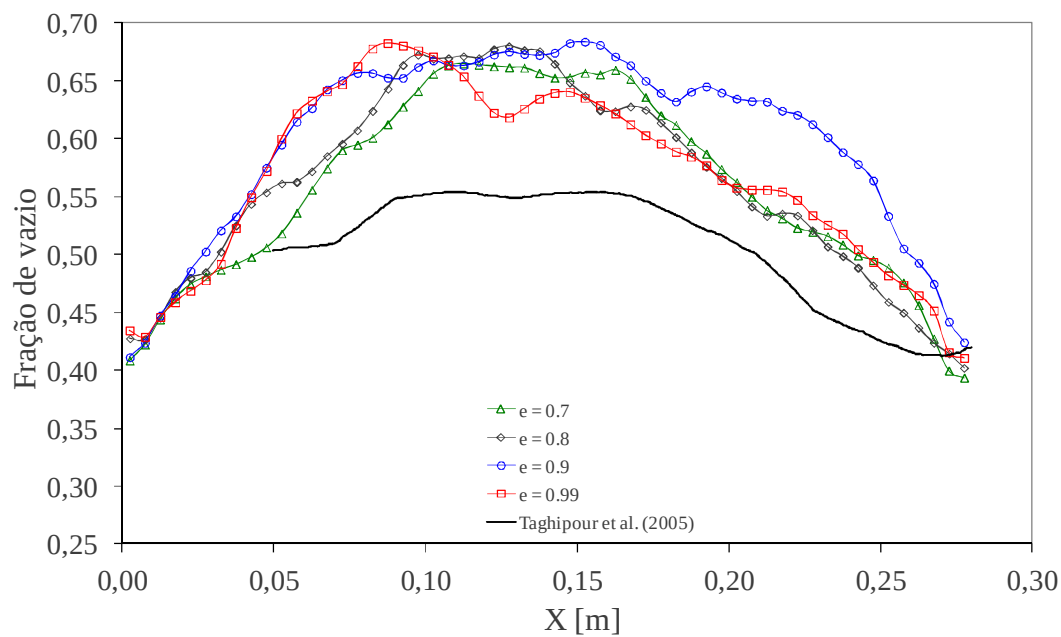


Figura 5.24 – Efeito do coeficiente de restituição sobre o perfil médio temporal da fração de vazio, $U_g = 0,46$ m/s.



A Tabela 5.7 apresenta os resultados da análise estatística aplicada às simulações em 10 velocidades de fluidização avaliando diferentes valores do coeficiente de restituição.

Pode-se observar que nos 10 pontos o menor valor de RMSD encontra-se com maior frequência quando se considera um valor de coeficiente de restituição de 0,7 e 0,8.

Os resultados também apresentam um notável aumento no valor de RMSD em função do incremento da velocidade de fluidização. Cabe destacar que nas velocidades de fluidização de 0,38 e 0,46 m/s para análise estatística utilizou-se os dados experimentais de Taghipour et al. (2005).

A maneira de exemplo nota-se que numa velocidade de fluidização de 0,38 m/s, um coeficiente de restituição com o valor de 0,8 produz um perfil médio temporal da fração de vazio com menor valor de RMSD. Esse valor é totalmente diferente ao definido no trabalho de Taghipour et al. (2005).

Tabela 5.7 – RMSD dos perfis médios temporais da fração de vazio em função do coeficiente de restituição a diferentes velocidades de fluidização.

U _g m/s	Coeficiente de restituição (<i>e</i>)			
	0,7	0,8	0,9	0,99
0,10	1,19	1,96	1,31	2,91
0,20	2,63	2,73	3,83	2,90
0,30	16,02	17,21	18,16	19,35
0,38	20,66	16,41	18,68	21,27
0,46	15,84	15,09	23,07	16,85
0,50	2,76	3,60	4,08	3,58
0,60	3,37	5,88	3,49	8,55
0,70	4,32	4,93	4,85	9,36
0,80	4,58	4,79	4,59	11,39
0,90	5,61	4,07	4,64	11,16

A partir dos dados da Tabela 5.7 é organizada a Tabela 5.8, a qual apresenta a relação entre a fração de vazio média local “ $\overline{\epsilon}_g$ ” e o coeficiente de restituição em cada velocidade de fluidização. Onde a fração de vazio média local foi obtida a partir do perfil médio temporal da fração de vazio em cada velocidade de fluidização e a seleção do coeficiente de restituição foi definida segundo o menor valor de RMSD.

Tabela 5.8 – Fração de vazio média local e o coeficiente de restituição.

U _g m/s	$\frac{U_g}{g}$	$e = cte$
0,10	0,43	0,7
0,20	0,49	0,7
0,30	0,53	0,7
0,38	0,56	0,8
0,46	0,58	0,8
0,50	0,59	0,7
0,60	0,63	0,7
0,70	0,66	0,7
0,80	0,67	0,7
0,90	0,69	0,8

A Figura 5.25 exibe o valor do coeficiente de restituição em função da fração de vazio média local construída a partir dos dados da Tabela 5.8, assim como também as duas condições críticas (resaltadas num círculo azul) na definição de um valor para o coeficiente de restituição. Onde, a fração de vazio média local no ponto de mudança de regime denso a diluído é igual a 0,8, valor estabelecido pelo modelo de arrasto de Gidaspow (1994) e no caso de um escoamento em regime completamente diluído o valor é igual a 0,99.

A primeira característica do conjunto de dados na Figura 5.25 é seu comportamento não linear. Dessa forma, aplicando um ajuste de curva não linear através do software OriginPro 8.0 gerou-se a seguinte expressão:

$$e = 0,72402 + \frac{0,989888 - 0,72402}{1 + 10^{(Log 0,77358 - a_g)11,70974}} \quad (5.2)$$

A equação 5.2 relaciona o valor do coeficiente de restituição com a fração de vazio médio local no leito. Na Figura 5.25 também se apresenta a curva obtida com a correlação desenvolvida neste estudo. A forma de comparação a Figura 5.26 apresenta o comportamento do coeficiente de restituição em função da velocidade de fluidização obtido do trabalho de Jakobsen et al. (2010), o qual apresenta uma tendência similar ao modelo obtido. No entanto, a diferença está em que na correlação proposta, o valor do coeficiente muda constantemente em função da fluidodinâmica das partículas sólidas no leito fluidizado.

Figura 5.25 – Coeficiente de restituição em função da fração de vazio média local.

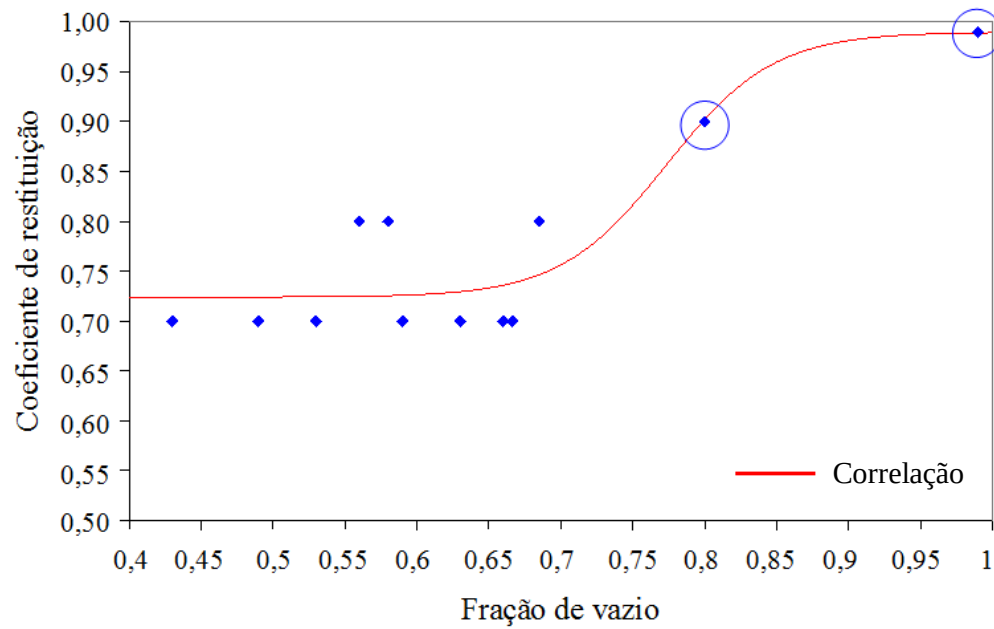
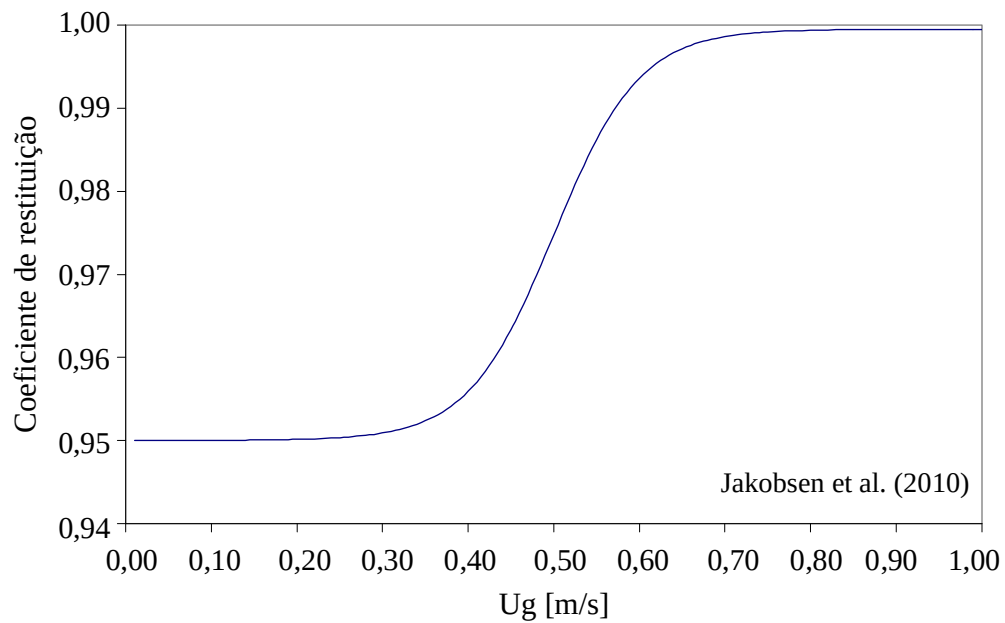


Figura 5.26 – Relação entre o coeficiente de restituição e a velocidade de fluidização.



Fonte: (JAKOBSEN et al. 2010).

Da Figura 5.26, a ideia de Jakobsen et al. (2010) era encontrar uma forma de relacionar o coeficiente de restituição com outra variável do escoamento, no intuito de evitar a suposição desse valor na simulação numérica do escoamento gás-sólido em qualquer aplicação.

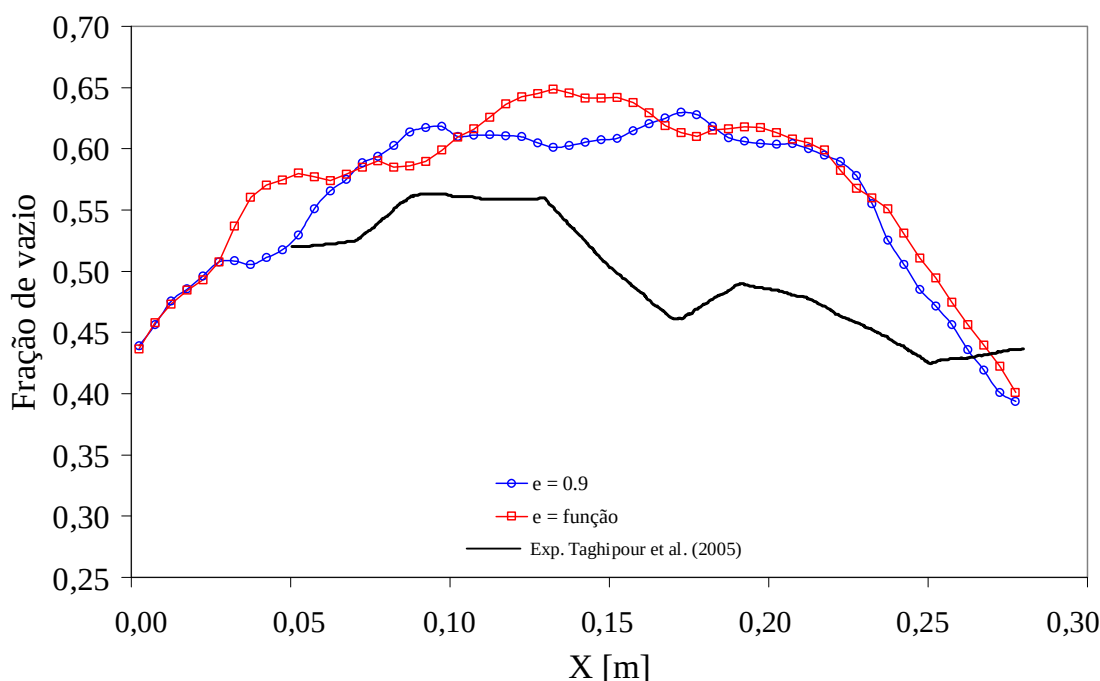
A correlação obtida (equação 5.2) foi implementada na rotina “cal_mu_s.f.” no código MFIX, dessa forma é possível avaliar a sua influência na representação da fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em leito fluidizado. Para validar esta correlação, foram desenvolvidas duas simulações considerando velocidades de fluidização de 0,38 e 0,46 m/s respectivamente as quais possuem dados experimentais do perfil de fração de vazio.

As Figuras 5.27 e 5.28 apresentam os perfis médios temporais da fração de vazio obtidos a partir da aplicação da correlação. Analisando ambas as Figuras 5.27 e 5.28, pode-se observar que na parte central dos perfis temporais da fração de vazio previstas, ainda apresentam uma tendência a superestimar o valor da fração de vazio.

Da Figura 5.27 pode-se observar que utilizando um valor constante ou uma correlação para o coeficiente de restituição não produz mudanças consideráveis na previsão do perfil médio temporal da fração de vazio quando a velocidade de fluidização é igual a 0.38 m/s.

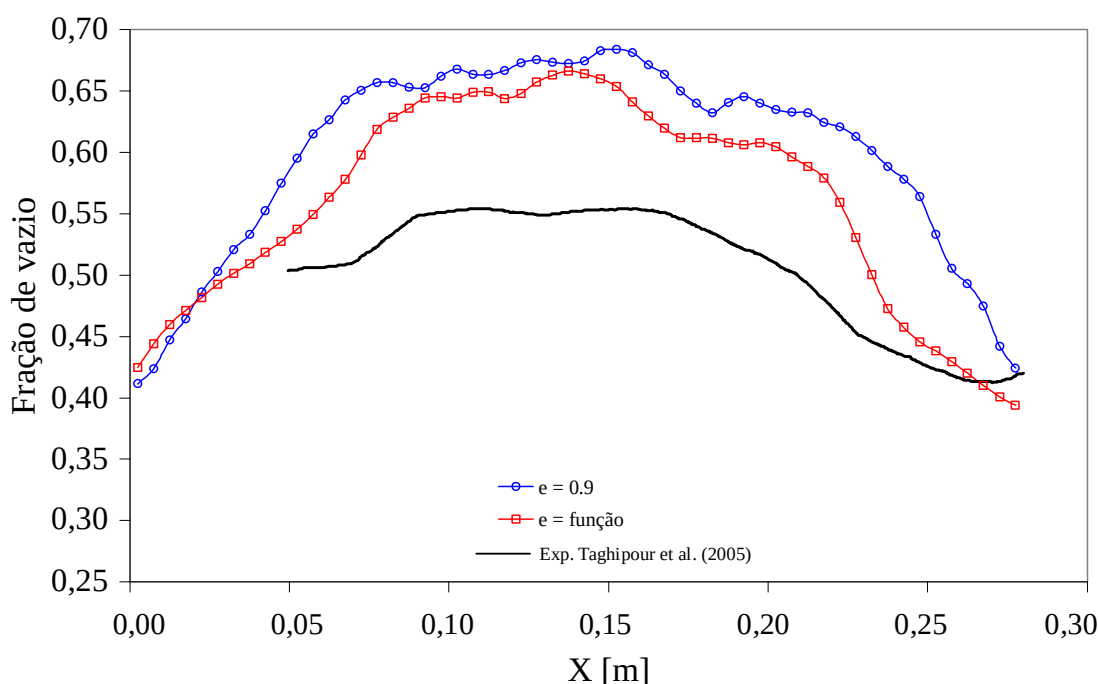
Os perfis apresentam um perfil mais regular que o experimental, além disso, nota-se que em ambos extremos a previsão é muito semelhante, no entanto exibem uma redução no valor da fração de vazio próxima à parede do leito, porém na zona central ainda existe uma superestimação na determinação do perfil.

Figura 5.27 – Comparação dos perfis médios temporais da fração de vazio considerando o coeficiente de restituição como valor constante e uma correlação, $U_g = 0,38$ m/s.



Analisando a Figura 5.28 observa-se uma notável diferença na previsão do perfil médio temporal da fração de vazio. Nota-se que ao considerar o valor do coeficiente de restituição como uma função da fração de vazio, consegue-se aproximar mais ao perfil experimental e de certa forma até mesmo reduzir consideravelmente a superestimação do perfil na parte central do leito. Este resultado valida em parte a hipótese sobre a relação existente entre o valor do coeficiente de restituição e as variáveis do escoamento tais como a fração de vazio.

Figura 5.28 – Comparação dos perfis médios temporais da fração de vazio considerando o coeficiente de restituição como valor constante e uma correlação, $U_g = 0,46$ m/s.



A Tabela 5.9 apresenta o resultado da análise estatística desenvolvida aos perfis médios temporais da fração de vazio obtidos considerando um valor constante e uma correlação em função da fração de vazio para o coeficiente de restituição respectivamente.

Dessa forma, quando o coeficiente de restituição é tratado como uma função, se observa que numa velocidade de fluidização de 0,38 m/s há um leve incremento quase desprezível no valor de RMSD. Porém, numa velocidade de fluidização 0,46 m/s o perfil obtido considerando o coeficiente de restituição como função apresenta uma redução no valor do RMSD, significando uma melhora na previsão do perfil médio temporal da fração de vazio.

Tabela 5.9 – RMSD do perfil médio temporal da fração de vazio utilizando o coeficiente de restituição constante e em função da fração de vazio.

U _g m/s	RMSD $e = 0,9$	RMSD $e = f(\varphi_g)$
0,38	18,68	20,29
0,46	23,71	15,04

6 CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS

6.1 CONCLUSÕES

O presente trabalho teve como objetivo estudar a influência de diferentes modelos de arrasto e do coeficiente de restituição sobre a fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em leito fluidizado. O código livre MFIX foi usado para estudar a fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em leito fluidizado bidimensional através de um modelo E-E e a TCEG.

- As simulações desenvolvidas com o código MFIX conseguiram representar a complexa fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em leito fluidizado. A maioria dos modelos mostraram uma concordância qualitativa com os dados experimentais.
- Os modelos de arrasto apresentam um comportamento qualitativo similar, porém comparando os resultados da simulação com os dados experimentais, demonstram que cada modelo apresenta um resultado diferente. Os modelos de arrasto podem superestimar ou subestimar a previsão de um parâmetro medido experimentalmente, i entendendo-se que o modelo esta determinando uma maior ou menor transferência de quantidade de movimento da fase gás para a sólida respectivamente.
- As simulações numéricas reportam que os modelos de Gidaspow (1994) e Hill-Koch-Ladd (2001) predizem a queda de pressão e a velocidade mínima de fluidização com adequada aproximação. No caso da expansão do leito destacam-se os modelos de Gidaspow et al. (1994) seguido por Syamlal-O'Brien (1989) e Yang et al. (2003) respectivamente. A determinação do perfil médio temporal da fração de vazio foi um assunto crítico, já que os modelos de Ma-Ahmadi (1990), Syamlal O'Brien (1989), Yang et al. (2003) e Gibilaro et al. (1985) apresentam uma boa aproximação, sim embargo, esses modelos não exibem um bom desempenho na previsão de outros parâmetros. A partir destes resultados pode-se concluir que a previsão satisfatória de alguns parâmetros de projeto ou fluidodinâmicos usando um específico modelo de arrasto não garantem a previsão de outras na mesma forma. Deste modo, conclui-se que o desempenho dos modelos de arrasto na previsão de parâmetros de projeto de leito fluidizado está em função da faixa de velocidade de fluidização na qual se desenvolve a operação.

- Analisando os modelos de arrasto de Gibilaro et al. (1985) e Arastoopour et al. (1990) pode-se perceber que segundo o valor do expoente no fator de correção na sua formulação, pode melhorar o calculo do arrasto conseguindo uma previsão mais aproximada dos parâmetros de projeto do leito fluidizado. No caso dos modelos de Syamlal O'Brien (1989), Di Felice (1994), Gidaspow (1994) e Andrew e O'Rourke (1996), a previsão destes modelos é dependente do coeficiente de arrasto, assim como do fator de correção presentes na sua formulação. Do modelo de Yang et al. (2003) pode-se notar que a mudança do intervalo entre regime denso e diluído no calculo do arrasto, assim como também o refinamento na determinação do arrasto no regime diluído, consegue melhorar notavelmente a previsão. No caso dos modelos de Nieuwland et al. (1994) e RUC (1994) uma avaliação paramétrica dos fatores de correção do arrasto poderiam melhorar a sua previsão. Hill-Koch-Ladd (2001) ajusta o valor arrasto em função do número de Reynolds e da fração de vazio. Esta característica faz com que o modelo apresente bom desempenho na determinação dos parâmetros de projeto.
- Os resultados obtidos nas simulações foram comparados com os dados experimentais do trabalho de Taghipour et al. (2005) e demonstraram que entre todos os modelos de arrasto, o modelo de Gidaspow (1994) representa melhor desempenho na determinação da maioria dos parâmetros de projeto do leito fluidizado, porém superestimando evidentemente o perfil médio temporal da fração de vazio. Assim, pode-se observar que o modelo de arrasto de Gidaspow (1994) precisa de ajustes.
- Ao considerar o coeficiente de restituição em função da fração de vazio pode-se observar uma redução considerável da superestimação do perfil médio temporal da fração de vazio resultando numa previsão mais próxima do perfil experimental. Assim, são necessários uma quantidade maior de perfis médios temporais da fração de vazio para continuar validando esta correlação.
- A abordagem Euleriana-Euleriana ainda não é capaz de descrever completamente a física do escoamento, certamente tentar descrever o coeficiente de restituição em função da fração de vazio, é uma tentativa de aproximação ao fenômeno físico do escoamento. Portanto, ainda existem muitas questões envolvidas na fluidodinâmica do escoamento gás-sólido as quais precisam de maiores discussões e esclarecimentos.

- O código MFIX demonstrou ser uma ferramenta muito versátil no estudo da fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em leito fluidizado. Este código permite a possibilidade de ter um contato com a implementação das equações governantes e os esquemas numéricos para a solução do modelo.
- Como contribuição deste trabalho, pode-se destacar que os resultados obtidos deveriam significativamente ampliar o conhecimento sobre o modelo de arrasto e facilitar o entendimento, acelerando o processo de simulação do escoamento gás-sólido em leito fluidizado. Assim como também servir de informação fundamental para outras aplicações que apresentam esta classe de escoamento. Ao considerar o coeficiente de restituição como uma função da fração de vazio resulta numa forma mais aproximada de representar a dissipação da energia cinética levando em conta a influência do conjunto de partículas sólidas no escoamento.

6.2 TRABALHOS FUTUROS

- Estudar o desempenho dos modelos de arrasto na fluidodinâmica do escoamento gás-sólido em leito fluidizado usando partículas do grupo A, tais como o catalisador usado na unidade de craqueamento catalítico FCC.
- Avaliar a possível mistura de modelos de arrasto dando origem a um modelo de arrasto geral, com a finalidade de descrever de forma mais aproximada a fluidodinâmica do escoamento gás-sólido.
- Desenvolver um estudo experimental do leito fluidizado bidimensional similar ao de Taghipour et al. (2005) no intuito de aumentar o número de dados experimentais.
- Atualmente há um crescimento do uso da tecnologia de fluidização para geração de energia e síntese de combustíveis a partir da biomassa. Propõe-se estudar o desempenho dos modelos de arrasto na representação da fluidodinâmica de biomassas.

REFERÊNCIAS

AHUJA, G.N. ; PATWARDHAN, A.W. CFD and experimental studies of solids hold-up distribution and circulation patterns in gas–solid fluidized beds. **Chemical Engineering Journal**, v.143, p.147–160, 2008.

ANDREWS, M. J.; O’ROURKE, J. The multiphase particle-in-cell (MP-PIC) method for dense particulate flows. **International Journal of Multiphase Flow**, v.22, p.379-402, 1996.

ARASTOOPOUR, H.; PAKDEL, P.; ADEWUMI, M. Hydrodynamic Analysis of Dilute Gas-Solids flow in a Vertical Pipe. **Powder Technology**, v.62, p.163-170, 1990.

ARMSTRONG, L.M.; GU, S.; LUO, K.H. Study of wall-to-bed heat transfer in a bubbling fluidised bed using the kinetic theory of granular flow, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.53, p.4949–4959, 2010.

BASU, P. **Combustion and gasification in fluidized beds**. Boca Raton, CRC/Taylor & Francis. 2006. 461 p.

BEHJAT, Y.; SHAHHOSSEINI, S.; HASHEMABADI, S. H. CFD modeling of hydrodynamic and heat transfer in fluidized bed reactors. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v.35, p.357-368, 2008.

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, p.24-33, 2000.

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.

BUCZEK, P. **On the drag experienced by particles in fluid**, 2005. 192f. Thesis (Master of Science) - Faculty of graduate studies and research, University of Alberta, Canada, 2005.

CHANDRASEKARAN, B. K.; VAN DER LEER, L.; HULME, I.; KANTZAS, A. A simulation and experimental study of the hydrodynamics of a bubbling fluidized bed of linear low density polyethylene using bubble properties and pressure fluctuations. **Macromolecular Materials and Engineering**, v.209, p.592-609, 2005.

CROWE, C. **Multiphase Flow Handbook**. CRC Press, 2006. 1128p.

DALLA VALLE, J.M. **Micromeritics**, Pitman, London, p. 23, 1948.

DARTEVELLE, S., **Numerical and granulometric approaches to geophysical granular flows**, Ph.D. Thesis, Michingan Technology University, Department of Geological and Mining Engineering, Houghton, Michigan, 2003.

DECKER, K. R. **Modelagem e Simulação Tridimensional Transiente do Escoamento Gás-Sólido**. Faculdade de Engenharia Química – Universidade de Campinas – UNICAMP. Tese (Mestrado em Engenharia Química), UNICAMP 2003.

DEEN, N.G.; VAN SINT ANNALAND, M.; VAN DER HOEF, M.A.; KUIPERS, J.A.M. Review of discrete particle modeling of fluidized beds, **Chemical Engineering Science**, v.62, p.28-44, 2007.

DE SOUZA BRAUN, M. P. **Efeitos numéricos na simulação de escoamentos gás-sólido em leito fluidizado borbulhante utilizando a teoria cinética dos escoamentos granulares**. 2009. 108f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Faculdade Engenharia do Campus de Bauru, Universidade Estadual Paulista, Bauru, 2009.

DE SOUZA BRAUN, M. P.; MINETO, A. T.; NAVARRO, H. A.; CABEZAS-GÓMEZ, L. DA SILVA, R. C., The effect of numerical diffusion and the influence of computational grid over gas-solid two-phase flow in a bubbling fluidized bed, **Mathematical and Computer Modelling**, v.52. 1390-1402, 2010.

DI FELICE, R. The voidage functions for fluid-particle interaction system. **International Journal of Multiphase Flow**, v.20 (1), p.153–159, 1994.

DING, J.; GIDASPOW, D. A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow. **AIChE J.**, v.36, p.523-538, 1990.

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

DU PLESSIS, J. P.; MASLIYAH J. H., Mathematical modeling of flow through consolidated isotropic porous media **Transport in Porous Media**, v3, p.145-161, 1988.

DU PLESSIS, J. P.; MASLIYAH J. H., Flow through isotropic granular porous media, **Transport in porous media**, v6, p.207-221, 1991.

DU PLESSIS, J. P. Analytical Quantification of coefficients in the Ergun Equation for Fluid Friction in a Packed Bed, **Transport in Porous Media**, v.16, p.189-207, 1994.

ENWALD, H.; PERIANO, E.; ALMSTEDT, A. E., Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization, **International Journal of Multiphase Flow**, v.22, p.12-66, 1996.

ENDWALD, H.; PERIANO, E.; ALMSTEDT, A. E. E LECKNER, B. Simulation of the fluid dynamics of a bubbling fluidized bed. Experimental validation of the two-fluid model and evaluation of a parallel multi-block solver. **Chemical Engineering Science**, v.54, p.311-328, 1999.

ENGLAND, J. **Numerical Modeling and Prediction of Bubbling Fluidized Beds**. 2011. 96f. Dissertation (Master of Science in Mechanical Engineering) - Faculty of Mechanical Engineering, Virginia Polytechnic Institute and State University, Blacksburg, VA, 2011.

FAN, L. S. Z. **Principles of Gas-Solid Flows**. New York: Cambridge University press. 2005.

FORTUNA, A. O. Técnicas **Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações**. Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2000.

GARSDIE, J.; AL-DIBOUNI, M. R. Velocity-voidage relationship for fluidization and sedimentation in solid-liquid systems. **I&EC Process Des. Dev.**, v.16, p.206-214, 1977.

GELDART, D. Types of gas fluidization. **Powder Technology** v.7, p.285-292, 1973.

GELDERBLOOM, S. J.; GIDASPOW, D.; LYCZKOWSKY, R. W. CFD simulations of bubbling collapsing fluidized beds for three Geldarts groups. **AIChE. J.**, v.49, p.844-858, 2003.

GIBILARO, L.G.; DI FELICE, R.; WALDRAM, S.P. Generalized friction factor and drag coefficient correlations for fluid-particle interactions, **Chemical Engineering Science**, v.40, 1817-1823, 1985.

GIDASPOW, D. **Multiphase Flow and Fluidization**, 1 ed. London Academic Press. 1994. 467 p.

GOLDSCHMIDT, M. J. V.; KUIPERS, J. A. M.; VAN SWAAIJ, W. P. M. Hydrodynamic modeling of dense gas-fluidized beds using the kinetic theory of granular flow: effect of coefficient of restitution on bed dynamics. **Chemical Engineering Science**, v.26, p.571-578, 2001.

GUPTA, C.K; SATHIYAMOORTHY, D. **Fluid Bed Technology in Materials Processing**, CRC, Florida, 1999, 498 p.

HAIDER, A., LEVENSPIEL, O. Drag coefficient and terminal velocity of spherical and nonspherical particles. **Powder Technology**, v58, 63. 1989.

HERZOG, N.; SCHREIBER, M.; EGBERS, C.; KRAUTZ, H. J., A comparative study of different CFD codes for numerical simulation of gas solid fluidized bed hydrodynamics, **Computers and Chemical Engineering**, v.39, 41-46, 2012.

HILL, R. J.; KOCH, D. L.; LADD, J. C. Moderate Reynolds Number Flows in Ordered and Random Arrays of Spheres. **Journal of Fluid Mechanics**, v.448, p.243-278, 2001.

HORIO, M. Fluidization Science its development and future. **Particuology**, v.8, p.514-524, 2010.

HOSSEINI, H. S.; ZIVDAR, M.; RAHIMI, R.; SAMIMI, A., CFD simulation of solid hold-up fluidized bed at high gas velocities. **Chemical Product and Processing Modeling**, v.4, p.1-17, 2009.

HOSEINI, H. S.; ZHONG, W.; ESFAHANY, M. N.; POURJAFAR, L.; AZIZI, S. CFD Simulation of the Bubbling and Slugging Gas-Solid Fluidized Beds. **Journal of Fluids Engineering**, v.132, p.1-10, 2010.

JAKOBSEN, H. A. Numerical Convection Algorithms and Their Role in Eulerian CFD Reactor Simulations. **International Journal of Chemical Reactor Engineering**, v.1, Article A1, 2003.

JAKOBSEN, H. A.; CHAO, Z.; WANG, Y. A sensitivity Study of the Two-Fluid Model Closure Parameters (β , e) Determining the Main Gas-Solid Flow Pattern Characteristics, **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v.49, p.3433-3441, 2010.

JOHANSSON, K.; VAN WACHEM, B.G.M.; ALMSTEDT, A.E. Experimental validation of CFD models for fluidized beds: Influence of particle stress models, gas phase compressibility and air inflow models, **Chemical Engineering Science**, v.61, p.1705–1717, 2006.

KUIPERS, J. A. M.; PRINS, W. E.; VAN SWAAIJ, W. P. M. Theoretical and experimental bubble formation at a single orifice in a two-dimensional gas-fluidized bed, **Chemical Engineering Science**, v.46, p.2881-2894, 1991.

KUIPERS, J. A. M.; VAN DER HOEF, M. A.; VAN SINT ANNALAND, M.. Computational fluid dynamics for dense gas-solid fluidized beds: a multi-scale modeling strategy. **China Particuology**, v.3, p.69-77, 2005

KUNII, D.; LEVENSPIEL, O. **Fluidization Engineering**, 2. ed. Boston, Butterworth-Heinemann. 1991. 491p.

LARSEN, K. F. **Investigation of particle velocity and drag with spherical and non-spherical particles through a backward facing step.** 2007. 151f. Thesis (Doctor of Philosophy in Mechanical Engineering) Faculty of Brigham Young University, Brigham Young University, 2007.

LI, P.; LAN, X.; XU, C.; WANG, G.; LU, C.; GAO, J. Drag models for simulating gas–solid flow in the turbulent fluidization of FCC particles, **Particuology**. v.7, p. 269–277, 2009.

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

LOHA, C.; CHATTOPADHYAY, H.; CHATTERJEE, P. K. Assessment of drag models in simulating bubbling fluidized bed hydrodynamics. **Chemical Engineering Science**, v.75, p.400-407, 2012.

LUN, C. K. K., SAVAGE SB, JEFFREY DJ, CHEPURNIY N. Kinetic theories for granular flow: Inelastic particles in Couette-flow and slightly inelastic particles in a general flow field. **Journal of Fluid Mechanics**. v.140, p.223–256, 1984.

MABROUK, R.; CHAOKI J.; GUY, C. Effective drag coefficient investigation in the acceleration zone of an upward gas–solid flow. **Chemical Engineering Science**, v.62, p.318-327, 2007.

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

MANDICH, K. M. **An Experimental Study of a Vertical Tube Gas-Fluidized Bed**, 2010. 123f. Thesis (Master of Science) Faculty of Mechanical Engineering, University of California, San Diego, 2010.

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

NIEUWLAND, J.J., HUIZENGA, P., KUIPERS, J.A.M., VAN SWAAIJ, W.P.M. Hydrodynamic modeling of circulating fluidised beds. **Chemical Engineering Science**, v49 p.5803–5811, 1994.

NIEUWLAND, J. J.; VAN SINT ANNALAND, M., KUIPERS, J. A. M. E VAN SWAAIJ, W. P. M. Hydrodynamic modeling of gas-particle flows in riser reactors, **AIChE J.**, v.42, p.1569-1582, 1996.

OKA, S.; ANTHONY, E. J. **Fluidized bed combustion**, Marcel Dekker, New York, 2003, 600p.

PATANKAR, S., **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**, Hemisphere Publishing, New York, 1980, 197 p.

PAUDEL, B. **Experimental study on fluidization of biomass, inert particles, and biomass/sand mixtures**, 2011. Thesis (Master of Science) Faculty of Mechanical and Energy Engineering, University of North Texas, Texas, 2011.

RAMOS, G.; GARCÍA RUIZ, M.; PRIETO MARQUÉS, J. J. GUARDIOLA SOLER, J. Minimum fluidization velocities for gas-solid 2D beds. **Chemical Engineering and Processing**, v.41, p.761-764, 2002.

RANADE, V. V. **Computational flow modeling for chemical reactor engineering**. San Diego, Academic Press, 2002. 475 p.

REUGE, N.; CADORET, L.; COUFORT-SAUDEJAU, C.; PANNALA, S.; SYAMLAL, M.; CAUSSAT, B. Multifluid Eulerian modeling of dense gas-solids fluidized bed hydrodynamics - Influence of the Dissipation Parameters. **Chemical Engineering Science**, v.63, p.5540-5551, 2008.

RHODES, M. **Introduction to Particle Technology**, 2.ed. John Wiley & Sons, 2008, 466 p.

SCHAEFFER, D. Instability in Jenkins e Savage the evolution equations describing incompressible granular flow, **J. Differential Equations** 66 (1987) 19-50.

SHAH, RANJEET P. UTIKAR, MOSES O. TADE, VISHNU K. PAREEK, MILINKUMAR, T.; GEOFFREY M. EVANS, Simulation of gas–solid flows in riser using energy minimization multiscale model: Effect of cluster diameter correlation. **Chemical Engineering Science**, v.66, p.3291–3300, 2011.

SHAH, S. (2012). **Analysis and validation of space averaged drag model for numerical simulation of gas-solid flows in fluidized beds**. 2012. 106f. Thesis (Doctor of Science) Lappeenranta University of Technology, Finland, 2012.

SOBIESKI, W. Momentum Exchange in Solid-Fluid System Modeling with the Eulerian Multiphase Model, **Drying Technology**, v.27, p.653-671, 2009.

SPALDING, D. B. Numerical computation of multi-phase fluid flow and heat transfer, in: Taylor, C., Morgan, K. (Eds.), **Recent Advances in Numerical Methods in Fluids**, v.1. Pineridge Press, Swansea, p.139-168, 1980.

SUN, J.; ZHOU, Y.; REN, C.; WANG, J.; YANG, Y. CFD simulation and experiments of dynamic parameters. **Chemical Engineering Science**, v.66, p.4972-4982, 2011.

SWEBY, P. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws, **SIAM Journal on Numerical Analysis**, v.21 (5), p.995-1011, 1984.

SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T. J. Computer simulation of bubbles in a fluidized bed, **AIChE Symp.** v.85, p.22–31, 1989.

SYAMLAL, M.; ROGERS, W.; O'BRIEN, T.J. **MFIX Documentation: Theory Guide**. U.S Department of Energy, Morgantown Energy Technology Center, Technical Note, DOE/METC-95/1013, 1993.

SYAMLAL, M. **MFIX Documentation: Numerical Technique**, EG and G technical report, DE-AC21-95M31346, 1998.

SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T. J. Fluid dynamic simulation of O₃ decomposition in a bubbling fluidized bed. **AIChE J.**, Particle Technology and Fluidization, v.49, p. 2793-2801, 2003.

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

TEATERS, L. **A computational study of the hydrodynamics of gas-solid fluidized beds**. 2012. 77f. Dissertation (Master of Science in Mechanical Engineering) - Faculty of Mechanical Engineering, Virginia Polytechnic Institute and State University, Blacksburg, VA, 2012.

VAN DER HOEF, M. A.; VAN SINT ANNALAND, M.; DEEN, N. G.; KUIPERS, J. A. M. Numerical simulation of dense gas-solid fluidized beds: a multiscale modeling strategy. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v.70, p.40-70, 2008.

VAN WACHEM, B. G. M.; SCHOUTERF, J. C.; KRISHNAB, R.; VAN DEN BLEEK, C. M. Eulerian Simulations of Bubbling Behavior in Gas-Solid Fluidized Beds, **Computers & Chemical Engineering**, v.22, p.299-306. 1998.

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

VEJAHATI, F. **CFD Simulation of gas solid bubbling fluidized bed**. 2006. 149f. Thesis (Master of Applied Science In Environmental Systems Engineering) - Faculty of Graduate Studies and Research, University of Regina, Saskatchewan, Canada, 2006.

VEJAHATI, F.; MAHINPEY, N.; ELLIS, N.; NIKOO, M. B., CFD Simulation of Gas-Solid Bubbling Fluidized Bed: A New Method for Adjusting Drag Law, The **Canadian Journal of Chemical Engineering**, v.87, p.19-30, 2009.

WANG, J.; GE, W. Multi-scale analysis on particle-phase stresses of coarse particles in bubbling fluidized beds. **Chemical Engineering Science**, v.61, p.2736-2741, 2006.

WEN, C.Y.; YU, Y.H. Mechanics of fluidization. **Chemical Engineering Progress Symposium Series** v.62, p.100-111, 1966.

XIE, N. **Computational analyses for modeling fluidized bed gasification processes**. 2007. 175f. Thesis (Doctor of Philosophy in Mechanical Engineering), Iowa State University Ames, Iowa, 2007.

YANG, W.C. **Handbook of Fluidization and Fluid-Particle Systems**, 1 ed. CRC Press 2003, 1868 p.

YANG, N.; WANG, W.; GE, W.; LI, J. CFD simulations of concurrent up gas solid flow in CFB with structure dependent drag coefficient. **Chemical Engineering Journal**, v.96, p.71-80, 2003.

YEOH, G. H.; TU, J. **Computational Techniques for Multi-Phase Flows**. 1. ed. USA, 2010, 644 p.

ZIMMERMANN, S.; TAGHIPOUR, F. CFD modeling of the hydrodynamics and reaction kinetics of FCC fluidized bed reactors, **Ind. Eng. Chem.** v.44, p.9818-9827, 2005.

ZHONGHUA, W.; MUJUMDAR, A. CFD modeling of the gas-particle flow behavior in spouted beds. **Powder Technology**, v.183, p.260-272, 2008.