



UNICAMP

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Faculdade de Engenharia Química

EDUARDO DE ALMEIDA

**ESTUDO EXPLORATÓRIO DO ACOPLAMENTO DOS
SOFTWARES ROCKY / FLUENT -
CASO: SEPARAÇÃO PNEUMÁTICA DE FRAÇÕES DE
BAGAÇO DE CANA**

**EXPLORATORY STUDY OF ROCKY / FLUENT SOFTWARE
COUPLING -
CASE: PNEUMATIC SEPARATION OF SUGARCANE
BAGASSE PARTICLES**

**CAMPINAS - SP
2018**

EDUARDO DE ALMEIDA

**ESTUDO EXPLORATÓRIO DO ACOPLAMENTO DOS SOFTWARES
ROCKY/FLUENT - CASO: SEPARAÇÃO PNEUMÁTICA DE FRAÇÕES DE
BAGAÇO DE CANA**

**EXPLORATORY STUDY OF ROCKY/FLUENT SOFTWARE COUPLING - CASE:
PNEUMATIC SEPARATION OF SUGARCANE BAGASSE PARTICLES**

*Tese apresentada à Faculdade
de Engenharia Química da
Universidade Estadual de
Campinas como parte dos
requisitos exigidos para a
obtenção do título Doutor em
Engenharia Química.*

Orientador: Prof. Dr. Osvaldir Pereira Taranto

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À
VERSÃO FINAL DA TESE DE DOUTORADO
EM ENGENHARIA QUÍMICA DEFENDIDA
PELO ALUNO EDUARDO DE ALMEIDA, E
ORIENTADA PELO PROF. DR. OSVALDIR
PEREIRA TARANTO.

CAMPINAS - SP

2018

Agência(s) de fomento e nº(s) de processo(s): CNPq, 145467/2012-0

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura
Rose Meire da Silva - CRB 8/5974

AL64e Almeida, Eduardo de, 1981-
Estudo exploratório do acoplamento dos softwares Rocky / Fluent - caso :
separação pneumática de frações de bagaço de cana / Eduardo de Almeida. –
Campinas, SP : [s.n.], 2018.

Orientador: Osvaldir Pereira Taranto.
Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de
Engenharia Química.

1. Fluidodinâmica computacional (CFD). 2. Método dos elementos
discretos. 3. Transporte por tubo pneumático. 4. Classificação. 5. Bagaço de
cana. I. Taranto, Osvaldir Pereira, 1963-. II. Universidade Estadual de
Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Exploratory study of Rocky / Fluent software coupling - case :
pneumatic separation of sugarcane bagasse particles

Palavras-chave em inglês:

Computational fluid dynamics (CFD)

Discrete element method (DEM)

Pneumatic transport

Classification

Sugarcane bagasse

Área de concentração: Engenharia Química

Titulação: Doutor em Engenharia Química

Banca examinadora:

Osvaldir Pereira Taranto [Orientador]

Guilherme José de Castilho

Louise Emy Kurozawa

Song Won Park

Wanderley Pereira Oliveira

Data de defesa: 22-11-2018

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

Tese de Doutorado defendida por Eduardo de Almeida e aprovada em 22 de novembro de 2018 pela banca examinadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. Osvaldir Pereira Taranto
FEQ/UNICAMP

Prof. Dr. Guilherme José de Castilho
FEQ/UNICAMP

Profa. Dra. Louise Emy Kurozawa
FEA/UNICAMP

Prof. Dr. Song Won Park
EP/USP

Prof. Dr. Wanderley Pereira Oliveira
FCFRP/USP

A Ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se no SIGA/Sistema de Fluxo de Tese e na Secretaria do Programa da Unidade.

*Dedico este trabalho aos meus
pais, Péricles e Mirandiva, às minhas irmãs,
Adriana e Márcia, aos meus cunhados,
sobrinhos e à minha namorada, Danieli.*

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Péricles de Almeida e Mirandiva Puggina de Almeida, pelas lições de respeito, humildade e caráter.

A todos meus familiares, amigos e em especial à minha namorada Danieli Martins Carvalho pelo apoio e incentivo em todos os momentos.

À Prof^a. Dr^a. Maria Aparecida Silva por todo seu conhecimento repassado e por ter acreditado em meu trabalho, uma pessoa esplêndida a quem serei para sempre grato.

Ao Prof. Dr. Osvaldir Pereira Taranto, um orientador sempre presente e dedicado.

Ao Prof. Dr. Luís Augusto Barbosa Cortez pelos ensinamentos, conselhos e oportunidades.

Aos professores, Prof. Dr. Guillermo Alfonso Roca Alarcón, Prof. Dr. Edgardo Olivares Gómez e Prof. Dr. Ricardo Baldassin Jr. pelas experiências profissionais compartilhadas durante a fase de estudos com o classificador pneumático.

Ao Prof. Dr. Nicolas Spogis, um grande amigo que por inúmeras vezes compartilhou toda sua experiência com simulações, algumas vezes enquanto degustávamos algumas cervejas caseiras de sua autoria.

Ao Prof. Dr. Milton Mori por ter gentilmente cedido o espaço no PQGe (Laboratório de Pesquisa em Processos Químicos e Gestão Empresarial) para a execução deste trabalho .

À empresa Engineering Simulation and Scientific Software (ESSS) por todo suporte técnico prestado para que fosse possível o desenvolvimento do presente estudo.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo incentivo ofertado a este trabalho de pesquisa.

“...Queira!
Basta ser sincero
E desejar profundo
Você será capaz
De sacudir o mundo...”

Raul Seixas / Paulo Coelho / Marcelo Motta

RESUMO

O escopo deste estudo foi avaliar o comportamento do bagaço de cana-de-açúcar quando separado em grupos de partículas em um leito fluidizado. Foram então realizadas simulações computacionais utilizando o software ANSYS Fluent® e ROCKY DEM® que modelaram os testes das separações com base nas teorias da fluidodinâmica computacional (CFD) e no método dos elementos discretos (DEM). As simulações permitiram a análise da separação variando-se diferentes velocidades do ar e o teor de umidade das partículas. Os melhores resultados foram obtidos quando foi utilizado na simulação características físicas do bagaço que o representassem como estando na umidade de equilíbrio, aproximadamente 7,5 % b. u., e o acoplamento CFD/DEM dito 2 Vias, ou seja, com a fase fluida interferindo no comportamento da fase sólida e vice-versa. Quando simulado o bagaço com características físicas que o classificavam como sendo úmido, em torno de 50% b. u., foi verificado que se tratava neste caso de um modelo ideal visto que a separação do bagaço úmido em condições atmosféricas normais de temperatura e pressão promove a secagem natural do material durante o processo de separação. Foi concluído que os modelos adotados foram bem satisfatórios, dependendo do grupo de partículas que se pretendia separar, sendo os resultados das simulações validados por meio da comparação com testes realizados em laboratório. Os experimentos de simulação se mostraram relevantes visto a possibilidade de expandir o uso dos modelos em simulações de outros processos que utilizam a fluidização do bagaço de cana-de-açúcar como a secagem, pirólise, gaseificação e outros, permitindo o estudo e desenvolvimento de equipamentos perto de uma configuração ideal, podendo economizar tempo e altos investimentos para tanto.

Palavras chave: CFD, DEM, transporte pneumático, classificação, bagaço de cana

ABSTRACT

The scope of this study was to evaluate the sugarcane bagasse behavior when separated into groups of particles in a fluidized bed. Computational simulations were performed using the ANSYS Fluent[®] and ROCKY DEM[®] software, which modeled the separation tests based on Computational Fluid Dynamics (CFD) and Discrete Elements Methods (DEM). The simulations allowed the analysis of the separation by varying different air velocities and the moisture content of the particles. The best results were obtained when physical characteristics of the bagasse at equilibrium moisture, approximately 7% moisture, w.b., and using the CFD/DEM coupling called 2-Way were simulated, i.e. with the fluid phase interfering on the solid behavior and vice versa. When it was simulated the bagasse with physical characteristics that allows classify it as being wet, around 50% w.b., it has been found that it was an ideal model since the separation of the wet bagasse under normal atmospheric conditions of temperature and pressure promotes the natural drying of the material during the separation process. It has been concluded that the adopted models were very satisfactory depending on the group of particles that were intended to be separated and the results of the simulations were validated through the comparison with laboratory tests. The simulation experiments were relevant considering the possibility of expanding the use of the models in simulations of other processes that use the fluidization of sugarcane bagasse such as drying, pyrolysis, gasification and others, allowing the study and development of equipment near an ideal configuration, saving time and high investments.

Keywords: CFD, DEM, pneumatic conveying, classification, sugarcane bagasse

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1:	Aspecto geral de um desmedulador. (O'HARA; MUNDREE, 2016)	4
Figura 2:	Equipamento classificador de bagaço. (ALMEIDA, 2012)	31
Figura 3:	a) Partes constituintes de um exemplar de cana-de-açúcar (SANTOS et al., 2013) e b) detalhe do colmo. (Adaptado de BAKKER, 1999)	35
Figura 4:	Processos envolvidos no setor de moendas de uma típica usina brasileira. (UDOP, 2016)	36
Figura 5:	Distribuição de tamanho de partículas acumulada do bagaço de cana-de-açúcar obtido por sistema de moenda e difusão. (CTC, 2012)	37
Figura 6:	Comportamento da fração de peso retida com a abertura média da peneira para as amostras obtidas pela moenda e pelo difusor. (ARNAO, 2007)	38
Figura 7:	Comportamento do Peso porcentual da Fibra e do Pó (Difusor). (ARNAO, 2007)	38
Figura 8:	Comportamento do Peso porcentual da Fibra e do Pó (Moenda). (ARNAO, 2007)	39
Figura 9:	Representação do colmo de cana-de-açúcar (esq.) e a visão microscópica de um corte transversa no entrenó deste (dir.). (Adaptado de FERNANDES, 1984)	42
Figura 10:	Fração casca do bagaço de cana-de-açúcar. (ALMEIDA, 2012)	43
Figura 11:	Representação de uma fibra e suas dimensões, comprimento “l” e diâmetros “a” e “b”. (NEBRA, 1985)	43
Figura 12:	Fração fibra do bagaço de cana-de-açúcar. (ALMEIDA, 2012)	44
Figura 13:	Representação da medula e suas dimensões. (NEBRA, 1985)	44
Figura 14:	Fração medula do bagaço de cana-de-açúcar (pó). (ALMEIDA, 2012)	45

Figura 15:	Densidades aparentes médias das partículas de bagaço em função de suas velocidades de separação. (LENÇO, 2010)	47
Figura 16:	Densidade aparente do bagaço em função do diâmetro de partícula. (adaptado de PÉREZ et al., 2015)	48
Figura 17:	Densidade aparente do bagaço em função do seu teor de umidade. (CORRÊA, 2003)	48
Figura 18:	Frações de bagaço obtidos após a classificação pneumática a) fração fina; b) fração grossa; c) fração grossa moída. (ALMEIDA, 2013)	51
Figura 19:	Diagrama de correlação entre o diferencial de pressão no leito e a velocidade do fluido. (Adaptado de KUNII; LEVENSPIEL, 1991)	54
Figura 20:	Diagrama esquemático dos regimes de fluidização. (Adaptado de GRACE, 1986)	56
Figura 21:	Identificação dos termos utilizados no leito fluidizado. (Adaptado de KUNII; LEVENSPIEL, 1991)	57
Figura 22:	Diagrama das fases densa e diluída no transporte pneumático. (adaptado de KLINZING et al., 2010)	59
Figura 23:	Esquema dos regimes de fluidização do transporte de partículas na fase diluída. (adaptado de RABINOVICH; KALM, 2011)	61
Figura 24:	Curvas do coeficiente de arraste dependendo do número de Reynolds da partícula para diferentes esfericidades. (KLINZING et al., 2010)	67
Figura 25:	Coeficientes de arraste em função do número de Reynolds das partículas de bagaço. (ARNAO, 2007)	68
Figura 26:	Balanco de forças de uma partícula em velocidade terminal	69
Figura 27:	Solução gráfica da equação 22. (KLINZING et al., 2010)	71
Figura 28:	Velocidades terminais do bagaço para diferentes diâmetros de partículas. (ARNAO, 2007)	74
Figura 29:	Diagrama de Geldart para caracterização de partículas fluidizadas por ar em condições ambiente. (GELDART, 1973)	75
Figura 30:	Ângulo de repouso α_M formado após os sólidos escorrerem pelo funil (SCHULZE, 2008)	77

Figura 31:	Diferentes escalas de modelagem para um sistema gás-sólido. (adaptado de MOSTOUFI et al., 2016)	80
Figura 32:	Possibilidades de modelos para descrição de fluxos gás-sólido no transporte pneumático. (adaptado de MANJULA et al., 2017)	82
Figura 33:	Balço de fluxos em um volume de controle	89
Figura 34:	Ilustração esquemática das forças e velocidades atuantes nas partículas i e j durante sua colisão. (MOSTOUFI et al., 2016)	104
Figura 35:	Diferentes abordagens do tratamento das partículas a) método superfície não resolvida e b) método superfície resolvida. (MOSTOUFI et al., 2016)	107
Figura 36:	Estrutura do acoplamento explícito no modelo CFD-DEM <i>superfície não-resolvida</i> . (Adaptado de MOSTOUFI et al., 2016)	112
Figura 37:	Método analítico de determinação da porosidade no volume de controle. (MOSTOUFI et al., 2016)	113
Figura 38:	Método PCM para a determinação da porosidade no volume de controle. (MOSTOUFI et al., 2016)	114
Figura 39:	Método PCM com compensação para a determinação da porosidade no volume de controle (MOSTOUFI et al., 2016)	114
Figura 40:	Método do sub-elemento para a determinação da porosidade no volume de controle. (Adaptado de MOSTOUFI et al., 2016)	115
Figura 41:	Configuração das partículas no leito fluidizado circulante após 0,7s de simulação. (CHU e YU, 2008)	123
Figura 42:	Padrões de fluxo das partículas para as velocidades a) 10 b) 13 c) 18,5 d) 30,5 e e) 30,5 m/s. (ZOU et al., 2009)	124
Figura 43:	Perfis de porosidade na tubulação do transporte pneumático diluído de partículas. (adaptado de STURM et al., 2010)	125
Figura 44:	Perfis de velocidades das partículas após 2s de simulação para os casos com o tubo a) horizontal-vertical b) vertical-horizontal e c) horizontal-horizontal. (adaptado de GUI et al., 2015)	126

Figura 45:	Resultados da simulação a) velocidade do gás b) lei de arraste de Ganser c) comparação entre leis de arraste. (adaptado de ALMEIDA et al.,2015)	128
Figura 46:	Simulação do movimento das partículas úmidas no riser. (Wang et al., 2014)	132
Figura 47:	Formatos padrões de partículas disponíveis no software Rocky DEM® aptos a edição. (ROCKY, 2017)	134
Figura 48:	Alguns exemplos de elementos que podem ser simulados. (ROCKY, 2017)	134
Figura 49:	Incremento de velocidade de simulação no software Rocky DEM® possibilitado pelo uso de GPU. (ENGISOFT, 2017)	140
Figura 50:	a) Esquema do equipamento elutriador utilizado nos experimentos de caracterização (LENÇO, 2010) b) zoom no tubo sedimentador elutriador com suas respectivas medidas	142
Figura 51:	Típica curva de carregamento e descarga em uma colisão elasto-plástica normal	148
Figura 52:	Modelo elasto-plástico esfera macia. (MOSTOUFI et al., 2016)	149
Figura 53:	Aparato utilizado para medição experimental do ângulo de repouso da palha de milho. (Adptado de ILELEJI; ZHOU, 2008)	153
Figura 54:	Variáveis utilizadas na medição do ângulo de repouso. (Adptado de ILELEJI; ZHOU, 2008)	154
Figura 55:	Distribuição de massas de partículas usadas na simulação	162
Figura 56:	Aproximação para as dimensões das partículas de bagaço. (LENÇO, 2010)	162
Figura 57:	Formato da partícula escolhido no software Rocky DEM	163
Figura 58:	Malha utilizada na simulação 1 via a) malha inteira b) detalha saída inferior c) detalhe da saída superior d) detalhe da alimentação	166
Figura 59:	Malha utilizada na simulação 2 vias a) malha inteira b) detalha saída inferior c) detalhe na saída superior d) detalhe na alimentação	167

Figura 60:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 1 via, umidade de equilíbrio, velocidade do ar de 1,5 m.s ⁻¹	169
Figura 61:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 1 via, umidade de equilíbrio, velocidade do ar de 1,7 m.s ⁻¹	169
Figura 62:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 1 via, umidade de equilíbrio, velocidade do ar de 2,0 m.s ⁻¹	170
Figura 63:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 1 via, umidade de equilíbrio, velocidade do ar de 3,0 m.s ⁻¹	170
Figura 64:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 1 via, umidade de equilíbrio, velocidade do ar de 3,5 m.s ⁻¹	171
Figura 65:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 1 via, umidade de equilíbrio, velocidade do ar de 4,5 m.s ⁻¹	171
Figura 66:	Zoom da separação de bagaço próximo da saída inferior na simulação 1 via do bagaço em umidade de equilíbrio variando as velocidades do ar de a) 1,5 m.s ⁻¹ b) 1,7 m.s ⁻¹ c) 2,0 m.s ⁻¹ d) 3,0 m.s ⁻¹ e) 3,5 m.s ⁻¹ f) 4,5 m.s ⁻¹	172
Figura 67:	Zoom da separação de bagaço próximo da saída superior e alimentação na simulação 1 via do bagaço em umidade de equilíbrio variando as velocidades do ar de a) 1,5 m.s ⁻¹ b) 1,7 m.s ⁻¹ c) 2,0 m.s ⁻¹ d) 3,0 m.s ⁻¹ e) 3,5 m.s ⁻¹ f) 4,5 m.s ⁻¹	173
Figura 68:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, umidade de equilíbrio, velocidade do ar de 1,7 m.s ⁻¹	175
Figura 69:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, umidade de equilíbrio, velocidade do ar de 2,8 m.s ⁻¹	176
Figura 70:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, umidade de equilíbrio, velocidade do ar de 3,9 m.s ⁻¹	176
Figura 71:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, umidade de equilíbrio, velocidade do ar de 4,5 m.s ⁻¹	177
Figura 72:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, umidade de equilíbrio, velocidade do ar de 5,0 m.s ⁻¹	177
Figura 73:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, umidade de equilíbrio, velocidade do ar de 6,4 m.s ⁻¹	178

Figura 74:	Partículas formando uma pilha após serem despejadas do funil	180
Figura 75:	Resultado da simulação do ângulo de repouso do bagaço úmido	180
Figura 76:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, bagaço úmido, velocidade do ar de $1,7 \text{ m.s}^{-1}$	181
Figura 77:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, bagaço úmido, velocidade do ar de $2,8 \text{ m.s}^{-1}$	182
Figura 78:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, bagaço úmido, velocidade do ar de $3,9 \text{ m.s}^{-1}$	182
Figura 79:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, bagaço úmido, velocidade do ar de $4,5 \text{ m.s}^{-1}$	183
Figura 80:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, bagaço úmido, velocidade do ar de $5,0 \text{ m.s}^{-1}$	183
Figura 81:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, bagaço úmido, velocidade do ar de $6,4 \text{ m.s}^{-1}$	184
Figura 82:	Porcentagens de massa acumuladas do bagaço em umidade de equilíbrio separadas variando as velocidades do ar	185
Figura 83:	Porcentagens de massa acumuladas do bagaço úmido separadas variando as velocidades do ar	185
Figura 84:	Comparação da separação do bagaço com velocidade do ar a $4,5 \text{ m.s}^{-1}$ 1 a) seco 2 Vias e b) úmido 2 Vias	186
Figura 85:	Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, umidade de equilíbrio, considerando a força de adesão, velocidade do ar de $5,0 \text{ m.s}^{-1}$	188
Figura 86:	Aglomerado de partículas que ficou estável após 11 segundos da simulação até o seu final, vista x-y	188
Figura 87:	Zoom do aglomerado de partículas que ficou estável após 11 segundos da simulação até o seu final, vista x-y	189
Figura 88:	Aglomerado de partículas que ficou estável após 11 segundos da simulação até o seu final, vista x-z	189

Figura 89:	Malha utilizada na simulação com Acoplamento 1 Via	213
Figura 90:	Zoom na parte superior do tubo sedimentador/elutriador de partículas	214
Figura 91:	Parâmetros gerais no setup do ANSYS Fluent	215
Figura 92:	Modelo de turbulência escolhido	216
Figura 93:	Propriedades do ar	216
Figura 94:	Condições de contorno	217
Figura 95:	Perfil de velocidade após a passagem do ar	217
Figura 96:	Exportando resultados do ANSYS Fluent® para o ROCKY®	218
Figura 97:	Importação da geometria a ser utilizada	218
Figura 98:	Visão do software ROCKY® após importação da geometria e criação da entrada de partículas	219
Figura 99:	Adição de materiais	220
Figura 100:	Definição do tamanho da partícula	221
Figura 101:	Definição da geometria da partícula	221
Figura 102:	Vazões mássicas das partículas	223
Figura 103:	Definição do tipo de acoplamento e lei de arraste	224
Figura 104:	Configuração do tempo de simulação	225

Figura 105:	Escolha de hardware para realização da simulação e início da mesma	225
Figura 106:	Malha utilizada nos testes com destaque para a saída inferior	226
Figura 107:	Detalhe na escolha do regime transiente	227
Figura 108:	Criação da fase partículas	228
Figura 109:	Escolha do modelo Euleriano com duas fases, sendo uma o ar e a outra as partículas	228
Figura 110:	Selecionando o modelo de turbulência	229
Figura 111:	Condições de contorno da fase partículas	230
Figura 112:	Métodos de Solução	230
Figura 113:	Inicialização dos parâmetros	231
Figura 114:	Exportação dos resultados de simulação	232
Figura 115:	Definição dos passos de tempo	233
Figura 116:	Selecionando o tipo de acoplamento	234

LISTA DE TABELAS

Tabela 1:	Composição morfológica do bagaço limpo (base seca)	42
Tabela 2:	Composição química do bagaço de cana-de-açúcar (base seca)	46
Tabela 3:	Resultados obtidos com os experimentos de classificação pneumática e hidrólise enzimática do bagaço de cana-de-açúcar (ALMEIDA, 2012)	52
Tabela 4:	Comparação entre os modelos de esferas unidas e de formatos poliédricos (Rocky DEM [®]) para representação de partículas	135
Tabela 5:	Principais dados utilizados na simulação pneumática de bagaço de cana	161
Tabela 6:	Propriedades determinadas para serem utilizadas nas simulações	163
Tabela 7:	Velocidades terminais para os grupos de partículas, com C_D calculado utilizando a correlação de Ganser (1993)	164
Tabela 8:	Velocidades terminais para os grupos de partículas, com C_D calculado utilizando a correlação de Di Felice (1994)	164
Tabela 9:	Velocidades terminais das partículas e das velocidades do ar utilizadas nos casos simulados e realizado por Lenço (2010)	165
Tabela 10:	Valores das densidades das partículas em umidade de equilíbrio e úmidas	179
Tabela 11:	Informações úteis para o projeto de um classificador pneumático de bagaço	165

LISTA DE SÍMBOLOS

Letra	Descrição	Unidade
$A_{f,i}$	Área da face da célula	m^2
A_p	Área projetada da partícula	m^2
A_t	Área da seção transversal do leito	m^2
C_D	Coefficiente de arraste	-
C_{D0}	Correlação de DallaValle (1948) para o cálculo do coeficiente de arraste de uma partícula esférica simples	-
$C_{D\infty}$	Coefficiente de arraste em uma diluição infinita	-
$C_{D\varepsilon}$	Coefficiente de arraste de uma partícula simples na porosidade ε definida	-
C_{fml}	Coefficiente de fricção entre as fases sólidas	-
d	Diâmetro da base do cone formado pela pilha	m
d_n	Diâmetro de uma partícula esférica com a mesma área projetada da partícula real na direção do fluxo	m
d_p	Diâmetro da partícula	m
d_v	Diâmetro de uma partícula esférica com o mesmo volume de uma partícula real	m
e_{ml}	Coefficiente de restituição para colisão entre partículas sólidas	-
e_n	Coefficiente de restituição na direção normal	-
F_A	Força de aceleração	N
f_{adh}	Fração de força de adesão	N
F_D	Força de arraste sobre a partícula	N
F_E	Força de empuxo	N
F_G	Força gravitacional	N
F^{g-p}	Força de interação entre a fase sólida e gasosa	$N.m^{-3}$
f_g	Fração volumétrica da fase gasosa	-
f_g^*	Fração de vazios na mínima fluidização	-
$F_i^{\nabla\tau}$	Força viscosa devido ao esforço de cisalhamento do fluido	N
$F_i^{\nabla p}$	Força de gradiente de pressão	N
F_i^d	Força de arraste constante	N

F_{ij}^c	Força de contato entre as partículas i e j	N
F_{ij}^n	Força de contato normal entre as partículas i e j	N
F_{ij}^t	Força de contato tangencial entre as partículas i e j	N
F_i^l	Força de levitação	N
F_i^u	Força instável	N
$F_{n,adh}^t$	Força de contato normal adesiva no atual tempo, t	N
f_p	Fração volumétrica da fase sólida	-
f_{pm}	fração volumétrica da fase sólida de massa m	-
g	Aceleração da gravidade	$m.s^{-2}$
g_{0ml}	Função de distribuição radial	-
h'	Distância do orifício do funil até o pico da pilha formada	m
H	Altura do orifício do funil até o plano abaixo deste	m
I_i	Momento de inércia da partícula i	$kg.m^2$
I_j	Momento de inércia das partículas j	$kg.m^2$
I_r	Momento de inércia equivalente	$kg.m^2$
k_l	Rigidez da mola no carregamento	$N.m^{-1}$
k_r	Rigidez da mola resistente ao rolamento	N.m
k_{ul}	Rigidez da mola na descarga	$N.m^{-1}$
k_v	Número de partículas em cada volume de controle	-
k_1	Fator de forma de Stokes	-
k_2	Fator de forma de Newton	-
L_m	Altura da região de escoamento considerada	m
L_{mf}	Altura da região de escoamento considerada na mínima fluidização	m
m	Número de repetições no algoritmo de acoplamento CFD/DEM	-
m_{eff}	Massa efetiva	kg
m_f	Massa do fluido deslocado pelo movimento da partícula	kg
m_i	Massa da partícula i	kg
m_p	Massa da partícula	kg
n_f	número de faces da célula	-
M_r^m	Torque de mobilização	N.m
M_{diss}^r	Torque de rolamento viscoso	N.m

$M_{el,new}^r$	Torque de rolamento elástico no passo de tempo atual	N.m
$M_{el,old}^r$	Torque de rolamento elástico no passo de tempo anterior	N.m
M_{el}^r	Torque de rolamento elástico	N.m
M_{ij}^r	Torque de resistência ao rolamento na partícula i devido ao contato com a partícula j	N.m
M_{ij}^t	Torque tangencial sobre a partícula i devido contato com a partícula j	N.m
\vec{n}_{ij}	Vetor unitário apontando da partícula i para a partícula j	-
P_g	Pressão hidrostática da fase gasosa	Pa
pl	Sobrescrito usado no regime plástico	-
P_{pm}	Pressão da fase sólida	Pa
Q_{ml}	Transferência de quantidade de movimento entre as fases sólidas	$N.m^{-3}$
R_{eff}	Raio efetivo	m
r_i	Raio da partícula i	m
r_j	Raio da partícula j	m
s_n	Overlap normal de contato durante o tempo atual, t	m
t	Tempo	s
t_{col}	Tempo de duração da colisão	s
t_f	Passo de tempo na simulação CFD	s
t_{ij}	Vetor tangencial no ponto de contato	-
t_p	Passo de tempo na simulação DEM	s
tr	Operador traço da matriz	s
U_r	Velocidade relativa entre o fluido e a partícula	$m.s^{-1}$
U_t	Velocidade terminal da partícula	$m.s^{-1}$
v	Velocidade do fluido no tubo sem partículas	$m.s^{-1}$
ν	Sobrescrito usado no regime viscoso	-
V	Volume do elemento de tubo	m^3
V_{cell}	Volume da célula	m^3
v_ε	Velocidade do fluido nos poros	$m.s^{-1}$
v_g	Velocidade média local da fase gasosa	$m.s^{-1}$
v_i	Velocidade da partícula i	$m.s^{-1}$
V_i	Volume da partícula i	m^3

v_{ij}	Velocidade relativa entre as partículas em colisão	$m.s^{-1}$
v_{ij}^n	Velocidade relativa normal	$m.s^{-1}$
v_{ij}^t	Velocidade relativa tangencial	$m.s^{-1}$
v_j	Velocidade da partícula j	$m.s^{-1}$
v_{pm}	Velocidade média local da fase sólida	$m.s^{-1}$
$v_{rn,imp}$	Velocidade relativa normal de impacto	$m.s^{-1}$
v_s	Velocidade de deslizamento	$m.s^{-1}$
v_w	Velocidade rotacional relativa no ponto de contato	$m.s^{-1}$
W	Peso das partículas	N
ω_i	Velocidade angular da partícula	$rad.s^{-1}$
ω_j	Velocidade angular da partícula j	$rad.s^{-1}$
x_c	Posição do centroide da célula	m
x_i	Posição da partícula i	m
x_p	Posições da partícula	m

Letras gregas e caracteres especiais

Símbolo	Descrição	Unidade
α	Ângulo de repouso	($^{\circ}$)
β	Coeficiente que depende da fração de volume da célula onde o arrasto é calculado	$kg.m^{-3}.s^{-1}$
β_{gm}	Termo de arraste na interface	$kg.m^{-3}.s^{-1}$
β_{pml}	Termo referente ao arraste entre partículas	$kg.m^{-3}.s^{-1}$
γ	Índice calculado de acordo com o número de Reynolds da partícula	-
\bar{D}_g	Tensor taxa de deformação	s^{-1}
δ_n	Sobreposição normal	m
$\delta_{n,0}$	Sobreposição normal residual após completada a fase de descarga	m
δ_t	Sobreposição tangencial	-
$\Delta \vec{M}_{el}^r$	Mudança incremental no torque de rolamento elástico	N.m
ΔP	Diferencial de pressão no leito	Pa

ε	Porosidade do leito	-
η_r	Relação de amortecimento viscosa do torque de rolamento	-
μ_d	Coefficiente de atrito dinâmico	
μ_g	Viscosidade dinâmica do fluido	$\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$
μ_r	Coefficiente de resistência ao rolamento do modelo A	-
μ'_r	Coefficiente de resistência ao rolamento do modelo B	-
μ''_r	Coefficiente de resistência ao rolamento do modelo C	-
μ_s	Coefficiente de atrito estático	-
ρ_f	Densidade do fluido	kg.m^{-3}
ρ_p	Densidade da partícula	kg.m^{-3}
ρ_{pm}	Densidade da fase sólida de massa m	kg.m^{-3}
ρ_{real}	Densidade real das partículas	kg.m^{-3}
$\bar{\sigma}_g$	Tensor de tensões para a fase gasosa	Pa
$\bar{\sigma}_{pm}$	Tensor de tensões para a fase sólida	Pa
ϕ_c	Variável de fluido armazenadas no centro da célula	-
$\phi_{f,i}$	Valor da propriedade do fluido interpolado na face da célula	-
ϕ_p	Variável de fluido armazenadas na posição da partícula	-
ϕ_i	Fração volumétrica da partícula i que pertence à célula estimada	-
ϕ_s	Esfericidade da partícula	-
τ	Escalar de tempo	s
$\vec{\tau}_g$	Tensor das tensões de cisalhamento do gás	Pa
$\vec{\tau}_{pm}$	Tensor das tensões viscosas para a fase sólida	Pa
$\ U_r\ $	Norma do vetor da velocidade relativa	m.s^{-1}
\bar{U}	Tensor unitário	-
$\hat{\omega}_{ij}$	vetor unitário da velocidade angular das partículas i e j	rad.s^{-1}

SUMÁRIO

RESUMO.....	8
ABSTRACT	9
LISTA DE ILUSTRAÇÕES	10
LISTA DE TABELAS	18
LISTA DE SÍMBOLOS	19
CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	27
1.1 Motivação do estudo teórico da separação de partículas de bagaço	29
1.2 Objetivo do trabalho.....	32
CAPÍTULO 2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	34
2.1 Bagaço de cana-de-açúcar	34
2.1.1 Obtenção do bagaço	35
2.1.2 Constituição física do bagaço.....	40
2.1.2.1 Sólidos não solúveis	40
2.1.2.2 Sólidos solúveis e extrativos.....	40
2.1.2.3 Água.....	41
2.1.2.4 Material fibroso	41
2.1.2.4.1 Casca.....	42
2.1.2.4.2 Fibra	43
2.1.2.4.3 Medula	44
2.1.3 Composição química do bagaço.....	45
2.1.4 Densidade aparente do bagaço	46
2.1.5 Hidrólise enzimática do bagaço	48
2.2 Transporte pneumático vertical	52
2.2.1 Regimes de fluidização	53

2.2.2	Condição <i>choking</i> e transição de regimes em transporte vertical	58
2.2.3	Forças fluidodinâmicas no transporte vertical.....	62
2.2.3.1	Forças de campo	62
2.2.3.2	Forças volumares	62
2.2.3.3	Forças de superfície	63
2.2.3.3.1	Coeficiente de arraste	65
2.2.4	Velocidade terminal da partícula.....	69
2.2.5	Características fluidodinâmicas das partículas.....	74
2.2.6	Ângulo de repouso.....	76
2.3	Modelagem matemática e simulação numérica de sistemas multifásicos.....	77
2.3.1	Abordagem Euleriana-Euleriana	82
2.3.1.1	Método numérico de resolução do modelo Euleriano	88
2.3.2	Abordagem Euleriana-Lagrangeana.....	92
2.3.2.1	Método dos Elementos Discretos (DEM).....	93
2.3.2.1.1	Modelo esfera rígida	93
2.3.2.1.2	Modelo esfera-macia	94
2.3.2.1.3	Expressões de torque	96
2.3.2.1.3.1	Modelo A: modelo de torque constante.....	97
2.3.2.1.3.2	Modelo B: modelo viscoso	98
2.3.2.1.3.3	Modelo C: modelo elasto-plástico mola-amortecedor.....	99
2.3.2.1.4	Leis da força-deslocamento	102
2.3.2.2	Acoplamento CFD-DEM.....	106
2.3.3	Softwares aptos a simular fluxos multifásicos	117
2.4	Estado da arte da modelagem numérica no transporte de partículas.....	119
CAPÍTULO 3 - SOFTWARE ROCKY DEM®		133

CAPÍTULO 4 - MATERIAIS E MÉTODOS.....	142
4.1 Modelo matemático e simulação numérica.....	143
4.1.1 Modelagem Euleriana.....	144
4.1.2 Modelagem Lagrangeana	146
4.1.2.1 Modelo elasto-plástico.....	147
4.1.2.2 Modelo elástico com atrito	150
4.1.2.3 Modelos adesivos de força normal	151
4.1.3 Acoplamento entre os modelos Euleriano e Lagrangeano	155
4.2 Propriedades do bagaço utilizada nas simulações.....	160
4.3 Métodos de resolução dos modelos.....	165
CAPÍTULO 5 - RESULTADOS E DISCUSSÃO	168
5.1. Simulação 1 via do bagaço em umidade de equilíbrio.....	168
5.2 Simulação 2 vias do bagaço em umidade de equilíbrio	175
5.3 Simulação 2 vias do bagaço úmido	179
5.4 Observações finais a respeito do estudo teórico da classificação de partículas de bagaço.....	190
CAPÍTULO 6 - CONCLUSÕES	192
6.1 Sugestões para trabalhos futuros	193
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	195
APÊNDICE - TUTORIAL PARA REALIZAÇÃO DAS SIMULAÇÕES.....	213

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

O processo de obtenção de etanol e outros biomateriais a partir de materiais lignocelulósicos, que são materiais fibrosos constituídos basicamente por estruturas complexas de celulose, hemicelulose e lignina, encontrados na biomassa vegetal, é atualmente avaliado como um dos meios mais sustentáveis para o aumento da produção de biocombustível e outros materiais que hoje advém de fontes não renováveis.

Porém, a conversão dos materiais lignocelulósicos em biocombustível ou biomateriais é uma tarefa complexa que exige que a biomassa seja previamente hidrolisada. A hidrólise é uma reação que visa converter a celulose e hemicelulose, polissacarídeos presentes na biomassa, em açúcares fermentáveis, como a glicose (monossacarídeo), podendo ser catalisada por ácidos ou enzimas.

No caso da hidrólise ácida, o tempo de reação para que as cadeias de polissacarídeos sejam quebradas em monossacarídeos é da ordem de algumas horas, o que é uma vantagem ao processo, no entanto, verifica-se que ocorre nesta reação a formação de furfurais, compostos tóxicos para as leveduras utilizadas na posterior etapa de fermentação, no caso da produção de etanol.

Com relação à hidrólise enzimática, esta é vista por diversos especialistas como o método mais atrativo para a conversão de celulose em glicose por não formar tantos componentes inibitórios às leveduras, mas devido à natureza recalcitrante da maioria das espécies de biomassa a duração desta reação chega a ser da ordem de dias.

Um consenso, independente do catalisador utilizado na hidrólise, é que a biomassa necessita ser previamente fisicamente tratada visando, principalmente, um aumento da área superficial do material sólido, aumentando assim a eficiência da reação. Os tratamentos físicos mais utilizados na atualidade são o corte, moagem ou combinação destes, todavia, estes são processos que requerem um alto consumo de energia e conseqüentemente apresentam custos elevados.

De modo a quantificar os custos envolvidos no processo, a simulação do processo de obtenção de etanol a partir de materiais lignocelulósicos realizada por Macrelli et al. (2012), utilizando hidrólise enzimática, resultou num mínimo custo final de venda do etanol igual a US\$ 0,97 por litro. De acordo com Zhuang et al. (2007), em torno de 25% a 50% do custo total

da produção de etanol oriundo de material lignocelulósico é proveniente do custo de produção da enzima cellulase utilizada e, segundo Quintero-Ramirez (2010), tem-se estimado custos tão altos quanto US\$ 0,09 por litro de etanol celulósico na etapa de pré-tratamento, que pode incluir métodos físicos, químicos e térmicos ou uma combinação destes. Lembrando que a produção de etanol de primeira geração apresenta custo atual oscilando por volta de US\$ 0,50 por litro.

Assim, avaliando-se as informações previamente apresentadas deduz-se que ao se diminuir o consumo de energia para reduzir o tamanho de partículas da biomassa é possível reduzir o custo total de produção de etanol, e sendo a separação de partículas um processo de pré-tratamento da hidrólise, a geração de outros materiais oriundos do hidrolisado também se beneficiariam dessa redução de custos.

Neste sentido, no ano de 2008 foi desenvolvido, pelos professores Dr. Guillermo A. Roca Alarcon e Dr. Luís Augusto Barbosa Cortez, na Universidade Estadual de Campinas (Unicamp), um equipamento capaz de separar partículas de materiais polidispersos, mais especificamente bagaço de cana-de-açúcar, denominado classificador pneumático de bagaço de cana. Tal equipamento tem por função separar as partículas de bagaço, obedecendo ao princípio fluidodinâmico da separação pneumática de materiais particulados, em três frações distintas denominadas finas, com diâmetro médio de partículas menores que 0,5 mm, médias, com diâmetro médio entre 0,5 mm e 0,8 mm, e grossas, diâmetro médio maior que 1,5 mm.

Até então, tal separação visava principalmente à obtenção de frações mais homogêneas do bagaço de modo a facilitar sua manipulação, podendo ser expandido o uso das frações separadas para outras aplicações, como por exemplo, a obtenção de etanol. Deste modo, visto a possibilidade de hidrolisar a fração fina sem a necessidade de prévia moagem deste material, foram realizados diversos testes com o bagaço pneumáticamente separado.

Os resultados de todos os experimentos de hidrólise do bagaço separado podem ser conferidos na dissertação de Almeida (2012). No referido trabalho, o melhor resultado apresentado foi aquele em que houve a separação de até 36,74% da massa do bagaço classificado, com diâmetro médio geométrico de partícula de 0,437 milímetros, e conversão de celulose em glicose de 64,11% após 72 horas de hidrólise (Enzimas: cellulase NS 50013, 15 FPU/g de matéria seca, e β -glucosidase NS 50010, 50 UI/g de matéria seca; 2% de sólidos; temperatura: 47 °C; pH: 5,0).

Ainda como resultado relevante, notou-se que as frações grossas separadas, após serem moídas até alcançarem diâmetros médios de partículas menores que os das frações finas, apresentaram, mesmo assim, resultados piores de conversão de celulose em glicose após a

reação de hidrólise enzimática. A avaliação de tais resultados levou à conclusão de que as partículas são separadas no equipamento por tamanho e também grau de recalcitrância à hidrólise enzimática. Vale ressaltar que os testes realizados foram conduzidos com o material previamente seco para que se fossem evitadas a aderência entre as partículas, consequentemente melhorando a eficiência de separação. A relevância dos resultados obtidos com os experimentos de classificação pneumática foram, então, a inspiração inicial para que se aprofundassem os estudos teóricos de separação de bagaço por arraste de partículas em leito fluidizado.

1.1 Motivação do estudo teórico da separação de partículas de bagaço

O bagaço de cana é utilizado na indústria brasileira, principalmente, como fonte primária de energia nas usinas por meio da sua queima em caldeiras, porém, existe a possibilidade de agregar mais valor a este coproduto através da sua melhor exploração e de modo mais eficiente (CORTEZ et al., 2008).

Citando alguns exemplos, cerca de 30 países, incluindo o Brasil, utilizam o bagaço para a produção de papel e celulose. A perspectiva de crescimento no setor de embalagens e tecidos em países emergentes é em torno de 50% até o ano de 2035, consequentemente aumentando a demanda de bagaço para tal fim (O'HARA; MUNDREE, 2016).

Porém, é sabido que na fabricação de papel a partir de bagaço a fração mais fina de partículas, conhecida como medula, é extremamente prejudicial ao processo, uma vez que estas bloqueiam a passagem de água nos poros da esteira de papel, prejudicando a drenagem da água e consequentemente reduzindo a taxa de produção e características qualitativas do produto final (O'HARA; MUNDREE, 2016).

Assim, existe o consenso de que a retirada de em torno de 30% das menores partículas de bagaço se faz necessária visando: melhorar a drenagem da polpa nos lavadores e na máquina de papel; reduzir o uso de produtos químicos no cozimento; reduzir a formação de espuma; reduzir custos na manipulação e armazenamento; reduzir a quantidade de sujeira no papel; melhorar as propriedades de tração e melhorar a qualidade do liquor negro (O'HARA; MUNDREE, 2016).

Existiram ao longo da história vários equipamentos utilizados pela indústria de papel e celulose para separação da medula do bagaço; no entanto, atualmente os equipamentos mais modernos em operação são constituídos principalmente de um eixo com martelos envolto por uma peneira, conforme Figura 1.

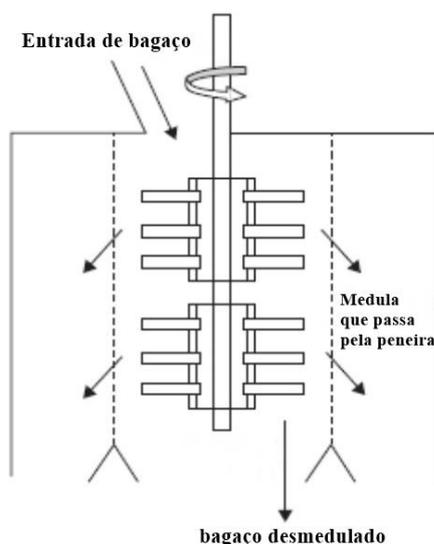


Figura 1: Aspecto geral de um desmedulador. (O'HARA; MUNDREE, 2016)

O princípio de funcionamento do mesmo é que o bagaço sendo alimentado pela parte superior do equipamento cai por ação da gravidade chocando-se com os martelos que estão girando em alta rotação. Devido ao choque, o bagaço é lançado contra a peneira que envolve o rotor sendo que as partículas menores atravessam a referida peneira e são assim separadas das demais (O'HARA; MUNDREE, 2016).

O grande problema deste tipo de equipamento, no entanto, é que se deve fazer manutenções regulares devido principalmente ao fato de haver desgaste dos martelos, obrigando muitas vezes suas trocas, o que torna o processo suscetível a paradas e dispendioso (O'HARA; MUNDREE, 2016).

O bagaço também pode ser utilizado na forma de hidrolisado em diversas rotas biotecnológicas para a obtenção de produtos tais como etanol, xilitol, proteína microbiana, aromas, enzimas e biomaterial na imobilização de células.

A importância da separação de partículas de bagaço se tornou evidente após o trabalho de Almeida (2012), como já citada no início deste capítulo, que propôs a separação pneumática das partículas visando melhorar a homogeneização do material, além de conseguir por meio desta a obtenção de partículas finas que poderiam ser enviadas diretamente ao processo de hidrólise enzimática sem a necessidade de operações adicionais que despendem gastos energético como a moagem, corte ou combinação destes.

Tais testes foram conduzidos no equipamento classificador pneumático, desenvolvido na Universidade Estadual de Campinas (Unicamp), sob coordenação dos

professores Dr. Luís Augusto Barbosa Cortez (Feagri / Unicamp) e Dr. Guillermo A. Roca Alarcon (Universidad de Oriente / Cuba), contando com auxílio da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), detalhado conforme a Figura 2.

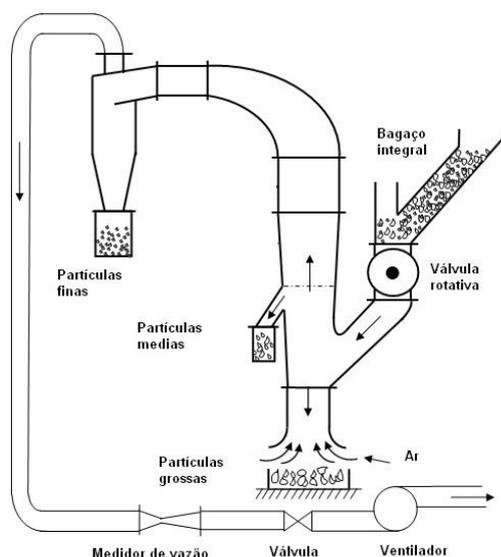


Figura 2: Equipamento classificador de bagaço. (ALMEIDA, 2012)

Os testes iniciais nesse equipamento se mostraram muito satisfatórios avaliando o ponto de vista da homogeneização das frações de partículas com diâmetros de partículas similares, o que por si só já representa uma grande evolução no tratamento desse material visto que a manipulação de materiais muito heterogêneos por parte da indústria é sempre uma tarefa complexa, mas além disso os resultados da hidrólise das frações ditas finas separadas foram muito satisfatórios.

Tais resultados motivaram Gómez et al. (2013) a separarem pneumaticamente as frações de bagaço, no mesmo equipamento, e compararem os desempenhos dessas partículas na hidrólise enzimática com o de outras partículas separadas por peneiramento. Os resultados novamente foram favoráveis à separação pneumática com um desempenho na conversão de celulose em glicose 42% maior para as partículas separadas pneumaticamente.

Estava assim comprovada a importância da separação pneumática de bagaço, seja para garantir a qualidade final dos produtos gerados ou mesmo para auxiliar na viabilização de processos que atualmente são dispendiosos e em alguns casos ineficientes, faltava então proceder uma avaliação teórica dos fenômenos visando fornecer meios para que novos testes em diferentes equipamentos e escalas possam ser conduzidos não somente de modo empírico, sendo esta a motivação do presente trabalho.

Desse modo, a avaliação teórica do comportamento das partículas de bagaço em um leito fluidizado rápido fornece a base necessária para que projetos de equipamentos de separação pneumática das partículas de bagaço possam ser dimensionados, evitando elevados custos e demasiado tempo em avaliações empíricas. Além do que, o bagaço também pode ser utilizado como matéria-prima em leitos fluidizados para obtenção de gás de síntese, bio-óleo, carvão, entre outros produtos, através dos processos de gaseificação e pirólise, sendo que este estudo teórico também pode beneficiar os projetos de dimensionamento dos equipamentos utilizados em tais processos.

1.2 Objetivo do trabalho

Devido às já citadas vantagens que a separação pneumática de bagaço de cana pode trazer para a produção de biocombustíveis e outros materiais, o presente trabalho teve como objetivo desenvolver um modelo matemático que fosse descritivo do arraste pneumático de frações de partículas de tal biomassa. A validação do modelo foi realizada tendo por base a comparação dos resultados simulados com aqueles dos experimentos reais realizados em um equipamento piloto, instalado nas dependências da Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Estadual de Campinas, sendo os resultados dos testes reportados no trabalho de Lenço (2010).

Para tanto foi empregada uma abordagem Euleriana-Lagrangeana, sendo utilizados dois softwares comerciais para proceder as simulações. O software ANSYS Fluent[®] foi responsável pela análise dos sistemas que envolvem escoamento de fluido, neste caso simulando apenas a passagem do ar pelo equipamento classificador e o software Rocky DEM[®] permitiu a realização de cálculos de forças entre as partículas. Assim, o acoplamento dos resultados das equações de transporte de fluido (ANSYS Fluent[®]) e do movimento das partículas (Rocky DEM[®]) permitiu obter resultados realísticos do fenômeno em estudo.

Os testes foram conduzidos inicialmente considerando o material estando em umidade de equilíbrio, aproximadamente 7,5% de umidade base úmida, para na sequência explorar como seriam os resultados se caso o material estivesse úmido, com aproximadamente 50% de umidade base úmida, variando para tanto a densidade e a aderência entre partículas do material.

De posse dos modelos devidamente validados os mesmos poderão ser utilizados como base para que empresas ou instituições governamentais aprimorem o estudo da

fluidização e/ou do transporte e separação pneumática de partículas de bagaço, com características próximas às utilizadas neste estudo, através de simulações computacionais visando, dentre outros fins, a melhoria de processos como, por exemplo, na avaliação da melhor configuração de um determinado equipamento previamente à sua construção.

CAPÍTULO 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Bagaço de cana-de-açúcar

Desde o final do século XX, as nações vivenciam o desafio de buscar fontes energéticas que não se baseiem em combustíveis fósseis, já que tais combustíveis apresentam inconstâncias de preço, não são renováveis e respondem pela emissão de uma grande quantidade de gases causadores do efeito estufa.

Nesse contexto, tem-se investigado o uso de inúmeras fontes alternativas de energia destacando-se principalmente as fontes nuclear, solar, eólica, hidrelétrica, geotérmica e biomassa, sendo que esta última além do uso energético também pode ser convertida em outros produtos, tais como, bioplásticos, químicos, óleos lubrificantes e solventes, como exemplo. No caso brasileiro, as fontes renováveis responderam por 41,2% da fonte interna de energia em 2015, onde desse montante a biomassa derivada da cana-de-açúcar é responsável por 15,8% (BEN, 2017).

Focando a atenção para essa importante fonte de biomassa, a cana-de-açúcar é uma gramínea perene originária de países da Oceania e Ásia, trazida ao Brasil no período colonial. Tal cultivar adaptou-se muito bem às condições edafoclimáticas do país. Nos dias atuais, o Brasil é o maior produtor de cana-de-açúcar do mundo, respondendo por 43% de toda produção mundial, seguido de Índia e China, sendo que estes três países juntos plantam 70% de toda a cana cultivada no planeta. A cana-de-açúcar tem ocupado aproximadamente 10 milhões de hectares de área plantada no Brasil, o que corresponde a aproximadamente 1,2% de toda área do território nacional e 3% da área arável no país (FAOSTAT, 2017; IBGE, 2017).

A produção de cana-de-açúcar na safra 2016/2017 foi de 657,2 milhões de toneladas sendo que 354 milhões de toneladas dessa cana foram destinadas exclusivamente à produção de etanol, das quais produziu-se aproximadamente 27,8 bilhões de litros desse combustível (anidro + hidratado), e o restante utilizado na produção de açúcar (Conab, 2017).

Considerando a parte aérea da cana, que é a parte aproveitada pela indústria nos presentes dias, podemos decompô-la basicamente em colmo e folhas. O colmo corresponde a um conjunto de vários entrenós, separados por nós, apresentando em sua constituição fibras (celulose, hemicelulose e lignina), açúcares (sacarose, frutose e lactose) e água (BAKKER,

1999). As folhas são compostas por folhas verdes e folhas secas, as últimas também denominadas por palha (SANTOS et al., 2013). Para a melhor compreensão das definições, a Figura 3 apresenta as partes constituintes da cana-de-açúcar.

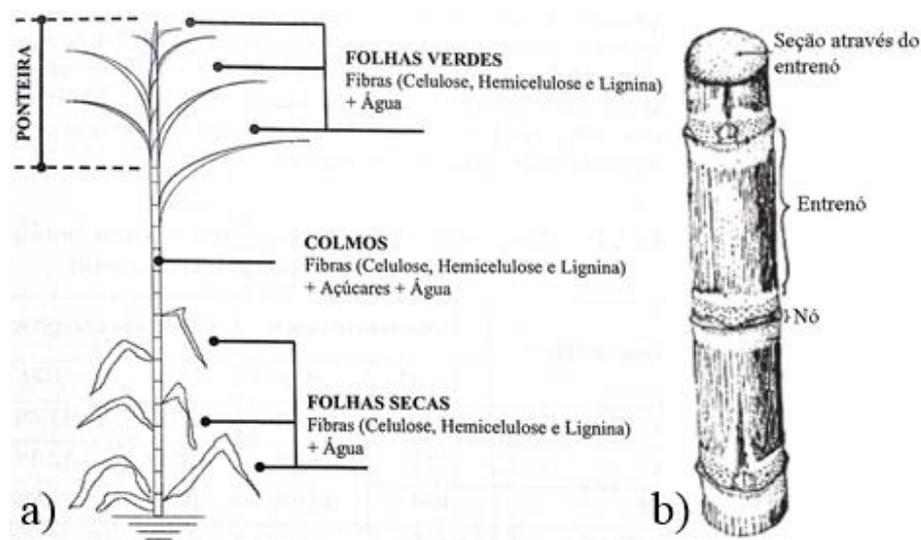


Figura 3: a) Partes constituintes de um exemplar de cana-de-açúcar (SANTOS et al., 2013) e b) detalhe do colmo. (Adaptado de BAKKER, 1999)

A indústria sucroalcooleira vem nos presentes dias processando os colmos da cana-de-açúcar para obtenção de açúcar e etanol. Numa descrição simplificada do processo empregado atualmente por grande parte das usinas do país, a cana tem seus colmos colhidos, levados à usina e submetidos a um sistema de retirada das impurezas minerais e em seguida a um sistema de extração que separa o caldo, rico em açúcares, da parte fibrosa ou comumente denominado bagaço de cana (CGEE, 2009).

2.1.1 Obtenção do bagaço

O bagaço da cana-de-açúcar é o material fibroso oriundo da cana-de-açúcar após esta sofrer uma série de etapas dentro da usina visando à separação do caldo. Dentre as principais etapas para alcançar a separação entre o caldo e o material fibroso, destacam-se (CGEE, 2009):

- Limpeza da cana-de-açúcar;
- Preparo da cana-de-açúcar (redução de tamanho valendo-se de jogos de facas rotativas niveladoras e desfibramento por meio de jogos de martelos oscilantes); e

- Extração do caldo (podendo ser obtido por meio de ternos de moagem ou difusores).

A seguir serão apresentados de forma sucinta os estágios básicos do processamento da cana-de-açúcar para a obtenção de etanol, destacando a fase de obtenção do bagaço.

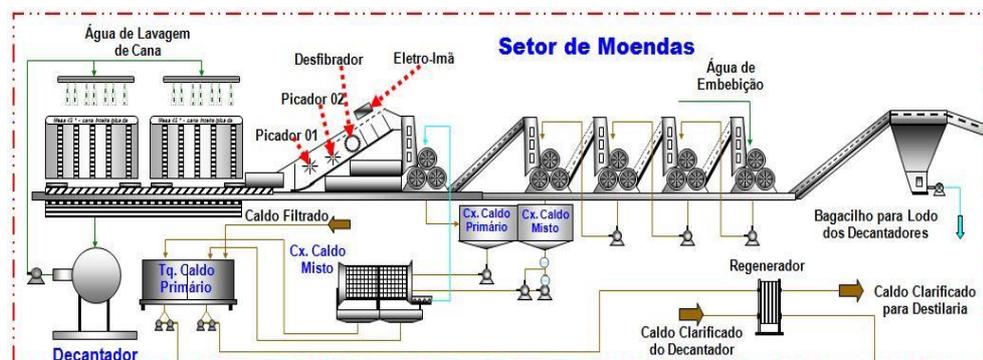


Figura 4: Processos envolvidos no setor de moendas de uma típica usina brasileira. (UDOP, 2016)

A produção de etanol tem início com a recepção da cana-de-açúcar no setor de moendas, onde a cana, que poderia estar armazenada em galpões da usina ou ser diretamente descarregada de caminhões, é entregue à mesa alimentadora.

Na mesa alimentadora, que pode ter inclinação variando de 5 a 45°, ocorre a limpeza da cana, através de lavagem com água ou a seco, sendo o objetivo de tal operação o de remover impurezas minerais e vegetais melhorando a qualidade do caldo a ser extraído e prolongando a vida útil de equipamentos pela redução de desgastes.

Após a cana estar limpa esta vai ser preparada para a extração do seu caldo. O preparo da cana ocorre em um sistema formado por um ou dois conjuntos de facas e um desfibrador, que é formado por um tambor com um eixo concêntrico no qual conjuntos de martelos oscilam. O objetivo deste processo é o de aumentar a densidade da cana, e consequentemente sua capacidade de ser moída, também forçando ao máximo a abertura de suas células, com o propósito de liberar o caldo e obter um maior rendimento na extração.

A cana agora preparada passa próxima a uma chapa de ferro onde, através da atuação de um campo magnético, são removidos em torno de 90% de materiais ferrosos sendo o objetivo desta operação proteger os equipamentos utilizados na extração do caldo (UDOP, 2016).

Os sistemas mais comuns de extração do caldo da cana-de-açúcar nas usinas brasileiras são os de extração por moenda ou por difusão, dependendo de qual destes sistemas for utilizado tem-se uma distribuição granulométrica diferente do bagaço gerado (CTC, 2012).

No sistema de moendas ocorre a separação do caldo por intermédio da pressão de rolos cilíndricos sobre a camada de cana-de-açúcar desfibrada. No sistema de difusão a separação ocorre pela lavagem da sacarose absorvida na camada de cana-de-açúcar desfibrada (MAPA, 2011).

Uma comparação da distribuição granulométrica do bagaço de cana-de-açúcar obtido após moagem e por difusão foi realizado pelo Centro de Tecnologia Canavieira, CTC e é apresentado na Figura 5.

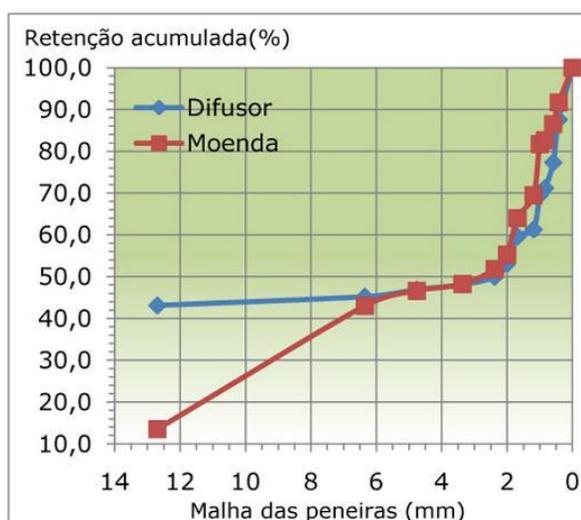


Figura 5: Distribuição de tamanho de partículas acumulada do bagaço de cana-de-açúcar obtido por sistema de moenda e difusão. (CTC, 2012)

Pela análise das curvas da Figura 05, percebe-se que o bagaço obtido por moagem apresenta em sua constituição aproximadamente 15% das partículas maiores que 12 mm, enquanto que o bagaço obtido por difusão a porcentagem de partículas maiores que 12 mm aumenta para em torno de 43% (CTC, 2012).

No trabalho realizado por Arnao (2007), a comparação entre a distribuição do tamanho de partículas do bagaço obtido por moagem e difusores confirma que o bagaço oriundo da difusão apresenta uma porcentagem de partículas com dimensões superiores a 5,66 mm muito superior ao apresentado pelo bagaço oriundo do processo de moagem, conforme Figura 6.

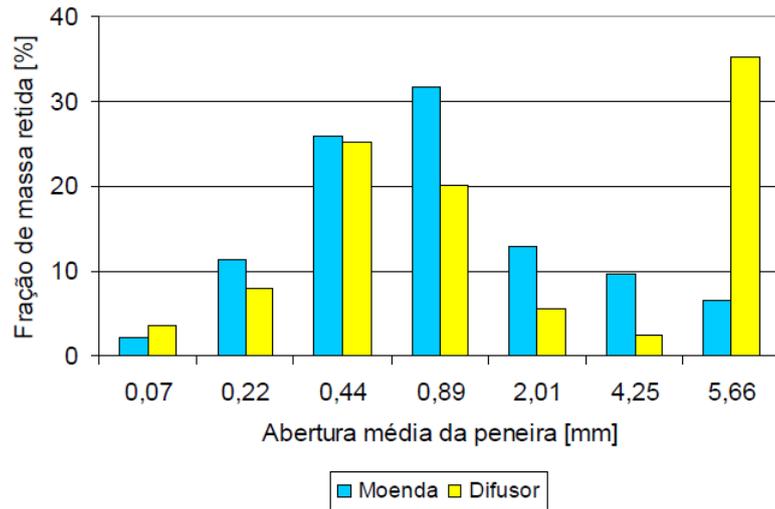


Figura 6: Comportamento da fração de peso retida com a abertura média da peneira para as amostras obtidas pela moenda e pelo difusor. (ARNAO, 2007)

Alguns autores, como Arnao (2007), consideram o bagaço constituído de apenas duas frações, fibra e pó. Segundo o estudo de Arnao (2007), as porcentagens de fibra e pó dos bagaços gerados por moagem e difusão seguem o mesmo padrão, apresentando ligeiras diferenças entre os mesmos, confirmando que o pó começa a apresentar proporções significativas em relação à fibra a partir de partículas menores que 2 milímetros, segundo as Figuras 7 e 8.

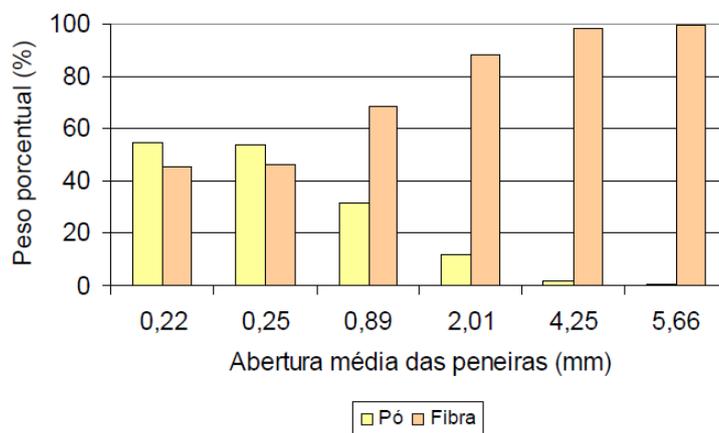


Figura 7: Comportamento do Peso porcentual da Fibra e do Pó (Difusor). (ARNAO, 2007)

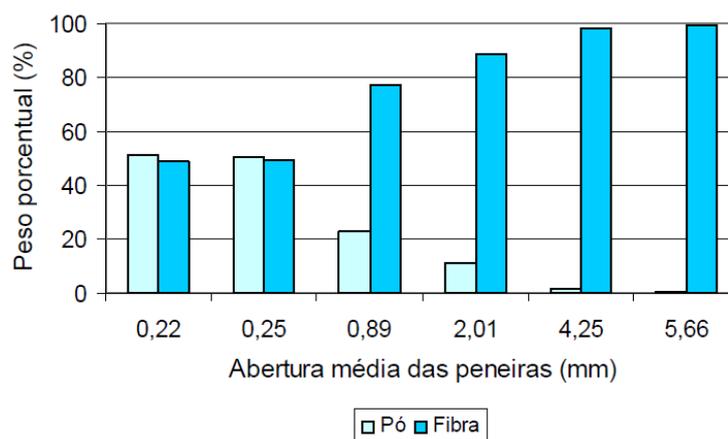


Figura 8: Comportamento do Peso percentual da Fibra e do Pó (Moenda). (ARNAO, 2007)

Após a etapa da moagem, o bagaço obtido na ordem de 240 kg a 280 kg por tonelada de cana processada é enviado para a caldeira, sendo o combustível responsável pela geração de energia térmica, caso do vapor utilizado para concentração do caldo, destilação e desidratação do etanol, bem como energia elétrica para acionamento de equipamentos como moendas, desfibradores, picadores, exaustores e bombas (CORTEZ et al.,2008; LEAL, 2010).

A sobra de bagaço passou a ocorrer após as usinas terem alcançado a autossuficiência energética, com caldeiras operando aproximadamente com vapor a pressão de 22 bar e temperatura de 300° C, com tal sobra variando de 0% a 10%, sendo que tais valores podem aumentar significativamente caso a palha de cana-de-açúcar, hoje deixada no campo após a colheita mecânica, seja utilizada na geração de energia.

Por outro lado, o caldo da cana, que atualmente é o principal substrato utilizado pelas usinas brasileiras para fermentação alcoólica e posterior produção de etanol, apresentando concentrações de 10% a 19% de açúcares logo que extraído, segue para as dornas de fermentação (CORTEZ et al., 2008).

A etapa final da produção de etanol de cana-de-açúcar é a destilação do mosto fermentando, ou vinho, que ocorre nas colunas de destilação. Nesta etapa pode-se obter o álcool hidratado, com graduação alcoólica em torno de 93,2° INPM, geralmente utilizado como combustível de automóveis, ou o álcool anidro, a partir da desidratação do álcool hidratado, com teor alcoólico superior a 99,3° INPM, em geral utilizado como aditivo à gasolina.

Se for possível integrar o processo de produção de etanol de segunda geração ao processo atualmente utilizado nas usinas, o equipamento classificador pneumático de partículas de bagaço, objeto desse estudo, poderia ser alocado na linha de produção, inclusive com a

possibilidade de utilização do vapor de processo para a secagem do bagaço, separando as partículas finas para a hidrólise e enviando as partículas grossas para ser moída ou utilizadas na caldeira.

Os próximos parágrafos procuram fornecer ao leitor uma ideia das características físico-químicas do bagaço de cana-de-açúcar.

2.1.2 Constituição física do bagaço

Fisicamente, logo que extraído o caldo da cana-de-açúcar, o bagaço constitui-se basicamente de quatro frações: material fibroso (45%), sólidos não solúveis (2% a 3%), sólidos solúveis (2% a 3%) e água (51% a 49%) (TRIANA et al., 1990).

2.1.2.1 Sólidos não solúveis

Os sólidos não solúveis constituem-se principalmente de substâncias inorgânicas como rochas, solos, materiais estranhos e, dos compostos minerais em pequenas proporções que fazem parte da constituição do bagaço. A presença dos sólidos insolúveis é influenciada pelos principais fatores a seguir destacados (CGEE, 2009):

- Os diferentes tipos de solos onde ocorre o cultivo da cana-de-açúcar (solos arenosos, latossolos, entre outros);
- Os procedimentos realizados durante a colheita (manual ou mecanizada, com ou sem queimadas) e carregamento, ocorrendo maior ou menor arraste de terra, areia e resíduos vegetais;
- A eficácia dos diferentes procedimentos realizados na usina para limpeza da cana, por exemplo, limpeza a seco por revolvimento em mesas, limpeza por arrasto de corrente de água ou limpeza pneumática;

2.1.2.2 Sólidos solúveis e extrativos

Os sólidos solúveis são constituídos basicamente de sacarose, cuja extração torna-se economicamente inviável na usina. O bagaço também apresenta junto aos componentes da parede celular muitas substâncias orgânicas de baixo peso molecular, denominadas extrativos, compreendidas principalmente por compostos aromáticos (fenólicos), terpenos, ácidos graxos

saturados e insaturados, proteínas e flavonóides, que podem ser extraídos com solventes orgânicos, sendo que alguns deles também podem ser extraídos em água (GOLDSTEIN, 1981).

2.1.2.3 Água

Com relação à água presente no bagaço, a mesma apresenta-se retida neste por mecanismos de adsorção e capilaridade. A adsorção se deve à capacidade dos componentes químicos presentes no bagaço de adsorverem moléculas de água, sendo que tal mecanismo depende das condições de umidade relativa do ambiente. Já a retenção de água por capilaridade e tensão superficial se deve à natureza porosa do bagaço (TRIANA et al., 1990).

A elevada umidade do bagaço inviabiliza uma série de processos a serem realizados com tal biomassa como seu transporte a grandes distâncias, gaseificação (exige bagaço com umidade de até 15%), melhoria na eficiência de caldeiras, entre outros. Deste modo, empresas e centros de pesquisa vêm desenvolvendo e testando equipamentos que promovam a secagem do bagaço (CTC, 2012).

2.1.2.4 Material fibroso

O material fibroso corresponde a toda fração sólida orgânica do bagaço, não solúvel em água, descontando os extrativos, encontrada originalmente no caule da cana-de-açúcar, apresentando valores de densidade absoluta próximos de 1470 kg/m^3 (CGEE, 2009). Encontra-se em sua constituição fibras exteriores próximas da casca, ricas em feixes fibrovasculares e outras formas fibrosas que garantem resistência e dureza ao tecido vegetal, quantidades abundantes de células parenquimatosas, com paredes porosas que possuem função de reserva de sacarose e condução de nutrientes a pequenas distâncias, e segmentos de vasos, com função de condução de nutrientes e distintos das células parenquimatosas pelo seu grande comprimento. Em menor quantidade encontram-se as células epidérmicas, que dão origem ao tecido de revestimento e caracterizadas por apresentarem bordas irregulares (SANJUÁN et al., 2001; TRIANA et al., 1990).

A Tabela 1 apresenta a composição morfológica do material fibroso do bagaço de cana-de-açúcar limpo.

Tabela 1: Composição morfológica do bagaço limpo (base seca)

Célula	%
Fibras	50
Parênquima	30
Vasos	15
Epiderme	5

Fonte: TRIANA et al.,1990

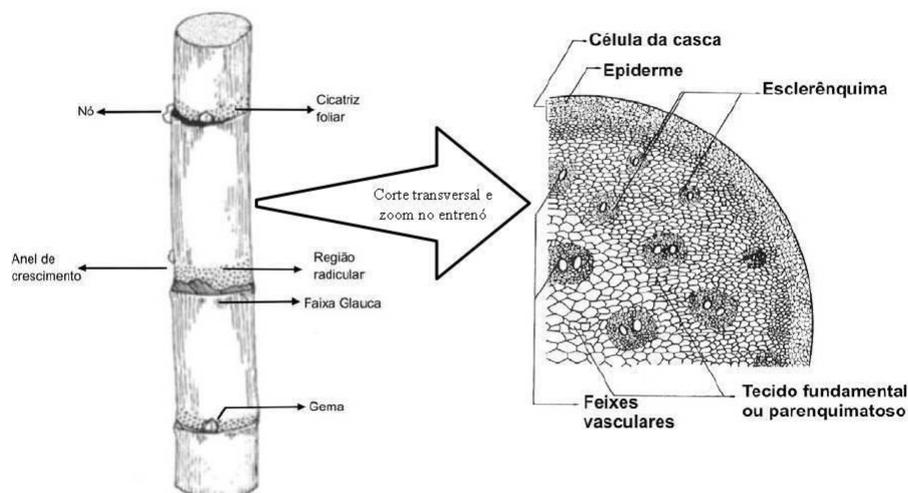


Figura 9: Representação do colmo de cana-de-açúcar (esq.) e a visão microscópica de um corte transversa no entrenó deste (dir.). (Adaptado de FERNANDES, 1984)

Assim, tanto morfológicamente como por tamanhos de partículas, o bagaço pode ser caracterizado como sendo um material heterogêneo. Pode-se ainda classificá-lo em três diferentes frações com características peculiares que seriam a casca, a fibra e a medula (CGEE, 2009).

2.1.2.4.1 Casca

Esta fração do bagaço corresponde a um material de tamanho bem maior se comparado às demais frações, apresentando-se como lâminas grosseiramente retangulares. A densidade aparente da casca situa-se em uma faixa de valores próximo de 550 kg/m^3 (CGEE, 2009).



Figura 10: Fração casca do bagaço de cana-de-açúcar. (ALMEIDA, 2012)

2.1.2.4.2 Fibra

A fibra, constituída por feixes fibrovasculares e outras formas fibrosas garantindo resistência ao colmo da cana, apresenta-se como partículas representadas por um prisma de base elíptica (ver Figuras 11 e 12) (NEBRA, 1985; TRIANA et al., 1990). A razão de aspecto, ou seja, o valor da razão entre o seu comprimento e seu diâmetro está próximo de 50. A densidade aparente para esta fração de partículas está em torno de 520 kg/m^3 (CGEE, 2009).

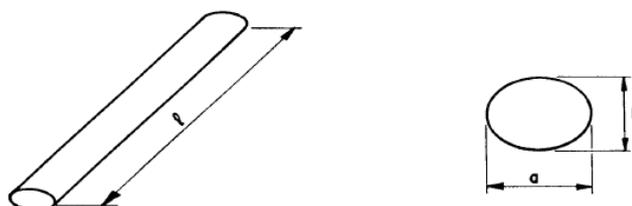


Figura 11: Representação de uma fibra e suas dimensões, comprimento “l” e diâmetros “a” e “b”. (NEBRA, 1985)



Figura 12: Fração fibra do bagaço de cana-de-açúcar. (ALMEIDA, 2012)

2.1.2.4.3 Medula

A medula, ou miolo da cana-de-açúcar, apresenta predominância de tecido vegetal parenquimatoso, é formada por partículas esponjosas apresentando formato achatado (ver Figuras 13 e 14). Sua densidade aparente encontra-se em torno de 220 kg/m^3 (CGEE, 2009).

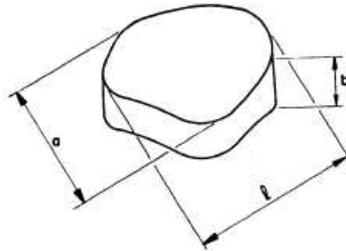


Figura 13: Representação da medula e suas dimensões. (NEBRA, 1985)



Figura 14: Fração medula do bagaço de cana-de-açúcar (pó). (ALMEIDA, 2012)

Cabe ressaltar que em alguns estudos sobre bagaço de cana-de-açúcar, em escala laboratorial, as frações fibra e medula costumam ser separadas manualmente pelos pesquisadores com auxílio de um microscópio estereoscópico, onde objetiva-se separar os feixes de fibras vasculares das células de parênquima, epitelial e vasos.

Porém, outros pesquisadores costumam promover a separação das frações fibra e medula de modo mecânico por meio de um conjunto de peneiras, onde as partículas que apresentem dimensões superiores a 0,6 milímetros são consideradas fibra, por apresentarem predominância de feixes vasculares, e as partículas de menores dimensões são denominadas medula, onde há predominância de células de parênquima, epitelial e vasos (DRIEMEIER et al., 2011).

O método de separação por peneiramento mecânico das frações fibra e medula também costuma ser utilizado em maiores escalas pela indústria de papel e celulose, conseguindo aumentos na concentração de fibra do bagaço de 60% para 80%, uma vez que a fração medula pode causar problemas durante o processo de fabricação do papel, a mesma acaba sendo utilizada na geração de vapor (SANJUÁN et al., 2001).

2.1.3 Composição química do bagaço

Outras propriedades que apresentam igual importância para compreensão do bagaço de cana-de-açúcar e seu potencial como matéria-prima para produção de etanol de segunda geração é a composição química deste. Tal composição não apresenta variações significativas de acordo com a variedade de cana, sendo o bagaço constituído principalmente

pelos polímeros naturais, celulose, hemicelulose e lignina, além de outros componentes em menores quantidades, como cinzas, sólidos solúveis, entre outros (TRIANA et al., 1990).

A Tabela 2 apresenta a composição química média de variedades mescladas de bagaço integral e de suas frações fibra e medula.

Tabela 2: Composição química do bagaço de cana-de-açúcar (base seca)

Componente	Bagaço Integral (%)	Fibra (%)	Medula (%)
Celulose	46,6	47,0	41,2
Pentosanas	25,2	25,1	26,0
Lignina	20,7	19,5	21,7
Organossolúveis	2 – 3	-	-
Aquosolúveis	2 – 3	-	-
Cinzas	2,6	1,4	5,4
Umidade	48 – 52	-	-

Fonte: Adaptado de CGEE (2009) e Triana et al. (1990)

2.1.4 Densidade aparente do bagaço

A densidade aparente de uma partícula pode ser definida como a razão entre a massa desta pelo seu volume, incluindo os seus poros, dada na unidade de kg/m^3 . Tal propriedade é muito importante quando se estuda a fluidodinâmica de um material, pois, a massa e o volume da partícula estão intimamente relacionados a suas características de fluidização.

No trabalho de Lenço (2010) foi mensurado o volume de uma quantidade conhecida de partículas de bagaço por meio da técnica de avaliação do deslocamento do fluido de trabalho, no caso o n-heptano, em um picnômetro. Sabendo o volume médio das partículas e sua massa foi possível determinar a sua densidade aparente média.

A Figura 15 apresenta os resultados das densidades aparentes médias obtidas para diferentes frações de bagaço, estando a umidade de equilíbrio em torno de 7% (base úmida), que haviam sido separadas pneumaticamente por meio do seu arraste em um tubo, variando a velocidade do ar. Para tanto foram realizados dois experimentos denominados amostra 1 e amostra 2.

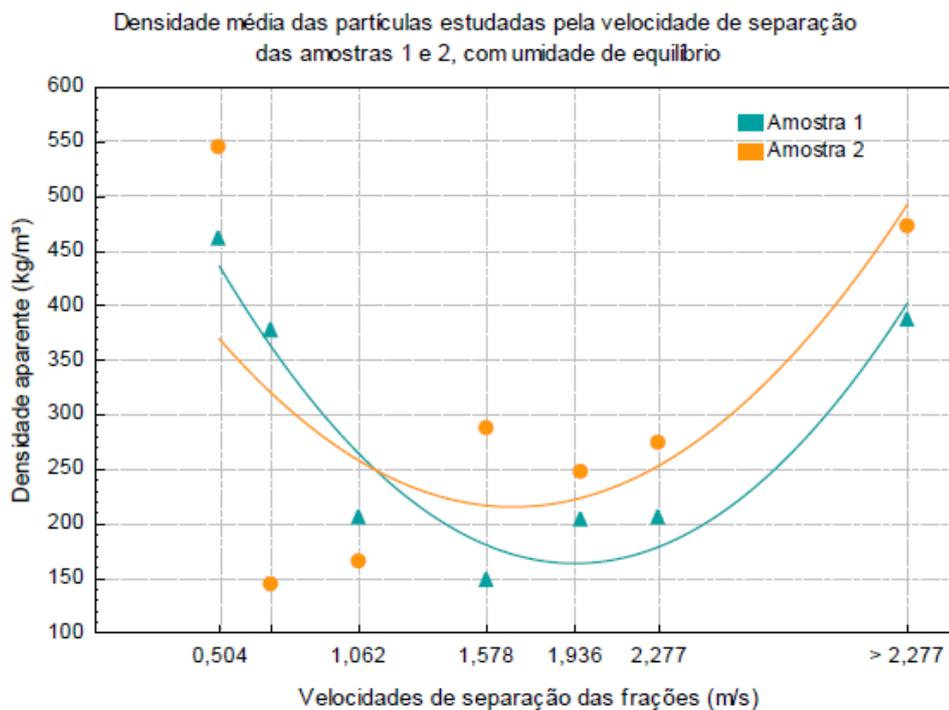


Figura 15: Densidades aparentes médias das partículas de bagaço em função de suas velocidades de separação. (LENÇO, 2010)

No trabalho de Pérez et al. (2015) a mesma técnica de determinação do volume de partícula pelo picnômetro foi utilizada, porém, os autores utilizaram água como fluido de trabalho. Os experimentos foram realizados em triplicata e, neste caso, as partículas foram separadas pelo método do peneiramento. Deste modo, a Figura 16 resume os resultados encontrados da densidade aparente das partículas de bagaço em função do seu diâmetro, com o material estando na umidade de equilíbrio de aproximadamente 8% (base úmida).

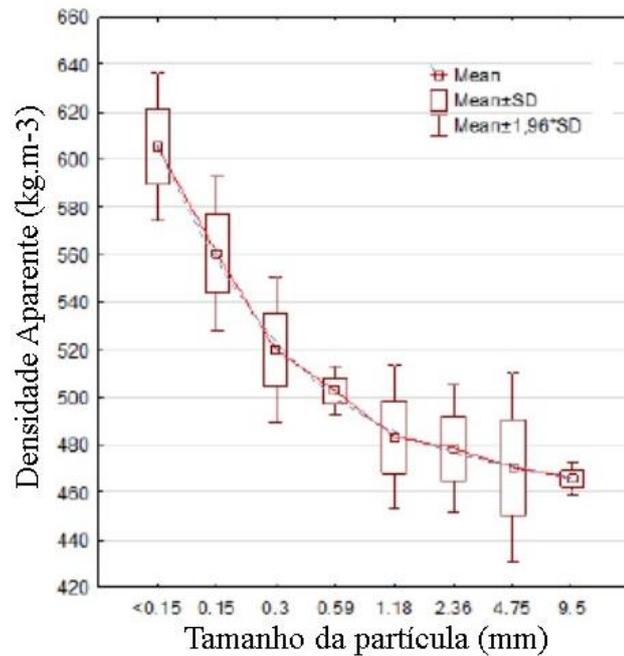


Figura 16: Densidade aparente do bagaço em função do diâmetro de partícula. (adaptado de PÉREZ et al., 2015)

No estudo de Corrêa (2003) foi avaliada a densidade aparente do bagaço também por meio do picnômetro, desta vez com tolueno como fluido de trabalho, porém, com o diferencial de avaliar tal densidade para variados teores de umidade das partículas. A Figura 17 apresenta o ajuste da curva do modelo obtido a partir dos resultados da densidade aparente variando o teor de umidade de 0 a 85,8%, na base úmida (b.u.).

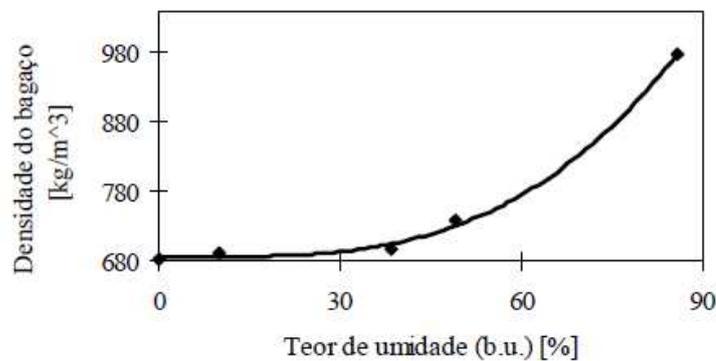


Figura 17: Densidade aparente do bagaço em função do seu teor de umidade. (CORRÊA, 2003)

2.1.5 Hidrólise enzimática do bagaço

Como já destacado no item 1.1 do capítulo 1, diversos produtos podem ser obtidos a partir do bagaço de cana, sendo muitos deles oriundos do bagaço hidrolisado. Considerando especificamente o caso do aumento da produção de etanol derivado de bagaço, será enfatizado neste item alguns aspectos relevantes do método da hidrólise enzimática por entender que o mesmo possui o maior potencial a ser viável em processos industriais, conforme argumentos que serão apresentados. No final do item são mostrados alguns dados relevantes obtidos a partir da hidrólise enzimática de partículas de bagaço de cana separadas pneumaticamente em um equipamento classificador.

Devido ao fato de haver sobras de bagaço na usina, como comentado no item 2.1.1, vislumbra-se obter etanol a partir dos açúcares fermentáveis desta biomassa, os quais podem ser extraídos pelo processo de hidrólise e, assim, aumentar a produção de etanol sem a necessidade de expansão de áreas de cultivo de cana-de-açúcar. Deste modo, o estudo de alguns cenários prevê que a produtividade atual de 85 litros de etanol por tonelada de cana, situação atualmente comum em destilarias do setor sucroalcooleiro, poderia aumentar com a viabilização do processo de hidrólise para até 124 litros de etanol por tonelada de cana-de-açúcar até o ano de 2025 considerando o caso mais otimista, segundo avaliação do Centro de Gestão e Estudos Estratégicos (CGEE, 2009).

Em escala laboratorial, a hidrólise do bagaço de cana-de-açúcar já consiste em um processo consolidado, porém apresenta uma série de gargalos quando se trata de escala industrial, sendo o principal deles a viabilidade econômica (SOCCOL et al., 2010).

Existem diferentes métodos de hidrólise propostos, sendo destacada a utilização de duas rotas principais. A primeira rota trata da hidrólise ácida, nesta ocorre a degradação da celulose em glicose em um intervalo curto de tempo, alguns minutos ou horas, tanto em meio ácido diluído a elevadas temperaturas (190 a 240 °C) como concentrado, utilizando geralmente ácido sulfúrico ou clorídrico (OLSSON et al., 2005; SÁNCHEZ; CARDONA, 2008).

Porém, os principais inconvenientes são que em meio ácido diluído é inevitável a degradação da glicose em hidroximetilfurfural, xilose em furfural, entre outros componentes tóxicos à levedura que inibem a posterior atividade fermentativa. Por outro lado, em meio ácido concentrado, o uso de grandes quantidades de ácido torna-se um fator econômico crítico (SÁNCHEZ; CARDONA, 2008).

Já a segunda rota utiliza o pré-tratamento da biomassa seguido de sua hidrólise enzimática para produção de açúcares redutores a partir da celulose. Neste caso, tem-se um processo lento, chegando a durar dias; no entanto, tem demonstrado melhores resultados na

subsequente fermentação devido à não formação de componentes inibitórios a esta (OLSSON et al., 2005; SÁNCHEZ; CARDONA, 2008).

A hidrólise enzimática é realizada por enzimas celulase as quais são costumeiramente uma mistura de diversas enzimas, destacando três maiores grupos envolvidos no processo que são endoglucanase, exoglucanase e β -glucosidase, além de enzimas auxiliares que realizam o ataque à hemicelulose como a glucuronidase, xilanase, glucomanase, entre outras (SUN; CHENG, 2002).

As celulasas podem ser produzidas por bactérias ou fungos, e como vantagem sobre a hidrólise ácida pode-se citar que as celulasas atuam no processo de hidrólise em condições moderadas (pH 4,8 e temperatura 45 a 50 °C) evitando-se problemas de corrosão (SUN; CHENG, 2002).

Com relação ao ganho de eficiência da hidrólise enzimática, o mesmo está ligado a uma série de fatores destacando-se características do substrato, atividade da celulase e condições de reação, tais como, temperatura, pH e outros parâmetros. Focando no substrato, pesquisadores notaram que por meio de aumento da superfície de contato e remoção da lignina da biomassa é possível aumentar notoriamente as taxas de hidrólise (SUN; CHENG, 2002).

Deste modo, uma série de pré-tratamentos podem ser utilizados para alterar o substrato permitindo melhorias no acesso das enzimas à celulose, sendo classificados como pré-tratamentos biológicos, mecânicos, físico-químicos e químicos.

Como exemplos, podem ser citados o pré-tratamento por Fungos, Moagem, Explosão a Vapor, Explosão da Fibra por Amônia (AFEX), Explosão por CO₂, Oxidação Úmida, Organosolv, Ácido (diluído ou concentrado), Microondas, entre outros, onde são notadas vantagens e desvantagens, sendo os principais parâmetros para escolha de um ou uma combinação destes: a biomassa utilizada, a eficiência do processo, a geração de componentes inibitórios à hidrólise e fermentação e os custos envolvidos (SUN; CHENG, 2002).

Cabe ressaltar que é comum a ambas principais rotas de hidrólise, ácida ou enzimática, o material lignocelulósico ser primeiramente mecanicamente triturado ou moído para promover aumento da área superficial sendo observado elevado consumo de energia, que depende do tamanho final de partícula pretendido (OLSSON et al., 2005).

No trabalho de Almeida (2012), frações de bagaço foram separadas pneumáticamente, chamadas finas e grossa, para posteriormente serem submetidas à hidrólise enzimática, sendo os principais resultados apresentados a seguir.

As frações ditas finas e grossas foram então hidrolisadas nas seguintes condições: Enzimas - cellulase NS 50013, 15 FPU/g de matéria seca, e β -glucosidase NS 50010, 50 UI/g de matéria seca; 2% de sólidos; temperatura de 47 °C; pH 5,0. As frações médias foram avaliadas, mas devido à pequena porcentagem do material separada nessa fração decidiu-se focar os testes nas outras frações. As frações grossas necessitaram ser moídas antes da hidrólise, apresentando diâmetro médio de partícula de aproximadamente 0,2 mm, já as finas foram submetidas ao mesmo método do modo como foram separadas, com diâmetro médio de partícula na ordem de 0,4 mm (ALMEIDA, 2012).

A Figura 18 apresenta fotografias das frações fina e grossa e também da fração grossa moída, fornecendo ao leitor uma ideia do material descrito.



Figura 18: Frações de bagaço obtidos após a classificação pneumática a) fração fina; b) fração grossa; c) fração grossa moída. (ALMEIDA, 2013)

Os resultados de um dos testes de separação e hidólise do bagaço podem ser verificados na Tabela 3. Por tais resultados provou-se que é possível separar quase 40% de bagaço obtendo-se dessa fração excelente desempenho na conversão de celulose em glicose após 72h, em torno de 60%, próximo dos resultados obtidos por SIQUEIRA et al. (2011), sem a necessidade de nenhum pré-tratamento e consequentemente evitando gastos no processo de produção de etanol de segunda geração.

Tabela 3: Resultados obtidos com os experimentos de classificação pneumática e hidrólise enzimática do bagaço de cana-de-açúcar (ALMEIDA, 2012)

FRAÇÃO	MASSA (g)	% DE MASSA DO TOTAL	DIÂMETRO MÉDIO DE PARTÍCULA (mm) (Sauter)	DIÂMETRO MÉDIO DE PARTÍCULA (mm) (geométrico)	HIDRÓLISE Glicose (g/L) 72h	CONVERSÃO DE CELULOSE EM GLICOSE (%) 72h (*)
Fina	113,66	36,74	0,326	0,437	5,42	64,11
Grossa	175,43	56,71	1,387	2,394	3,14	32,51(**)

(*) A conversão de celulose para glicose foi calculada baseada nos teores de celulose encontrados: fração fina – 42.27%; fração grossa – 48.29%).

(**) Resultado para fração grossa de bagaço moído (diâmetro médio de partícula ~ 0.2 mm).

Além disso, observando o resultado da hidrólise da fração grossa moída em comparação com o da fração fina foi possível concluir que o equipamento não só faz a separação física do material como também separa partículas constituídas por células com características que possibilitam uma melhor acessibilidade da celulose por parte das enzimas.

2.2 Transporte pneumático vertical

O transporte pneumático, segundo Klinzing et al. (2010), é definido como o transporte de materiais sólidos, pulverulentos ou granulares, através de tubulações por meio de uma corrente gasosa.

O transporte pneumático é uma tecnologia muito utilizada pela indústria, uma vez que o elevado contato gás-partícula dentro do canal de fluxo favorece altas taxas de transferência de calor e massa. Assim, pode-se utilizar o transporte pneumático para outros fins além do transporte propriamente dito, como em diversas operações unitárias citando-se a separação de partículas, o pré-aquecimento, a secagem, o craqueamento catalítico e outras reações gás-sólidos (KLINZING et al., 2010).

O transporte pneumático pode ser dividido em transporte pneumático vertical e horizontal, mas devido ao presente trabalho ter sido feito baseado em duto transportador vertical de partículas, tal revisão se limita a esse caso em específico. Assim, para a fundamentação do fenômeno físico do transporte pneumático vertical inicialmente será abordado de forma sucinta uma visão geral dos diversos regimes de fluidização em um leito fluidizado até se chegar ao transporte pneumático propriamente dito e alguma de suas principais características.

2.2.1 Regimes de fluidização

Segundo Geldart (1986), denomina-se leito fluidizado um sistema formado por um leito de partículas sustentado por um distribuidor por onde passa um fluido, mais especificamente um gás.

Para que a fluidização seja iniciada, é preciso que a força de arraste devido à movimentação ascendente do gás se iguale ao peso das partículas do leito, em termos matemáticos podem-se expressar as condições de mínima fluidização como (KUNII; LEVENSPIEL, 1991),

$$\Delta P \times A_t = W \quad (01)$$

Onde, ΔP = diferencial de pressão no leito [Pa];
 A_t = área da seção transversal do leito [m²];
 W = peso das partículas [N];

O peso das partículas pode ser representado em termos de características do sólido e do leito, sendo assim, a expressão (01) pode ser expandida para (KUNII; LEVENSPIEL, 1991),

$$\Delta P A_t = A_t L_{mf} (1 - \varepsilon_{mf}) (\rho_p - \rho_f) g \quad (02)$$

Rearranjando tal equação tem-se,

$$\Delta P / L_{mf} = (1 - \varepsilon_{mf}) (\rho_p - \rho_f) g \quad (03)$$

Onde, ΔP = diferencial de pressão no leito [Pa];
 A_t = área da seção transversal do leito [m²];
 L_{mf} = altura da região de escoamento considerada [m];
 ε_{mf} = porosidade do leito;
 ρ_p = densidade do sólido [kg.m⁻³];
 ρ_f = densidade do fluido [kg.m⁻³];
 g = aceleração da gravidade [m.s⁻²];

A correlação entre o diferencial de pressão do leito e a velocidade do fluido passando por este é determinada empiricamente e apresentada em forma de diagrama, como apresentado na Figura 19. Pela curva característica é observado que existe uma relação de proporcionalidade entre o diferencial de pressão e a velocidade do gás no leito para velocidades inferiores à velocidade de mínima fluidização.

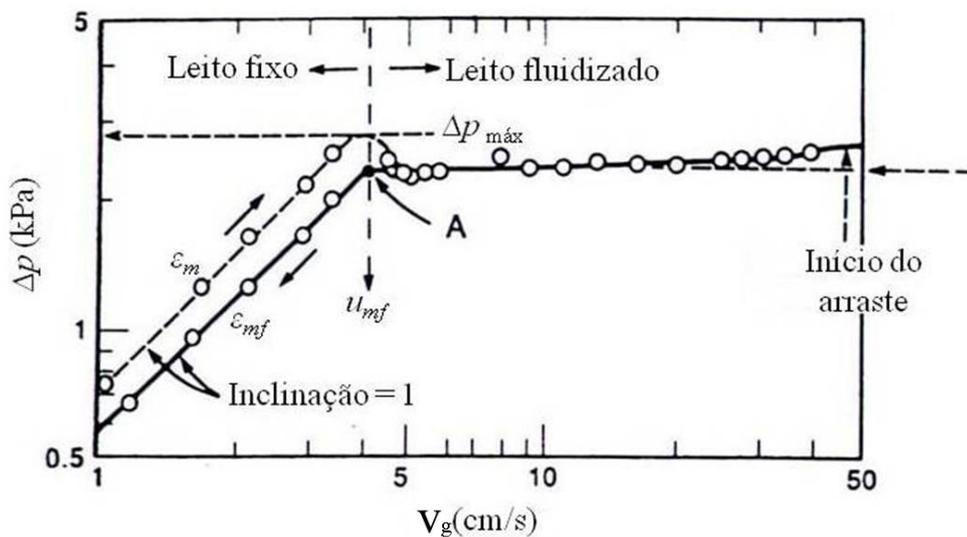


Figura 19: Diagrama de correlação entre o diferencial de pressão no leito e a velocidade do fluido. (Adaptado de KUNII; LEVENSPIEL, 1991)

Na literatura podem ser encontradas diversas correlações empíricas para a proporcionalidade mencionada, porém a mais difundida é denominada correlação de Ergun, considerada para leitos fixos de determinada altura contendo sólidos isotrópicos de tamanho único de diâmetro de partícula conhecido, dada por (KUNII; LEVENSPIEL, 1991),

$$\frac{\Delta P}{L_m} = \frac{150(1-\epsilon_m)^2}{\epsilon_m^3} \frac{\mu_g v_g}{(\varphi_s d_p)^2} + \frac{1,75(1-\epsilon_m)}{\epsilon_m^3} \frac{(\rho_f v_g^2)}{(\varphi_s d_p)} \quad (04)$$

Onde, ΔP = diferencial de pressão no leito [Pa];

L_m = altura da região de escoamento considerada [m];

ϵ_m = porosidade do leito;

μ_g = viscosidade do fluido [$\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$];

v_g = velocidade superficial do fluido [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$];

φ_s = esfericidade da partícula;

d_p = diâmetro de partícula [m];

ρ_f = densidade do fluido [$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$];

Relacionando as Equações 03 e 04 encontra-se uma equação pela qual é possível calcular a velocidade de mínima fluidização (KUNII; LEVENSPIEL, 1991),

$$\frac{1,75}{\varepsilon_{mf}^3 \varphi_s} \left(\frac{d_p u_{mf} \rho_f}{\mu_g} \right)^2 + \frac{150(1-\varepsilon_{mf})}{\varepsilon_{mf}^3 \varphi_s^2} \left(\frac{d_p u_{mf} \rho_f}{\mu_g} \right) = \frac{d_p^3 \rho_g (\rho_s - \rho_f) g}{\mu^2} \quad (05)$$

No entanto, o número de Reynolds da partícula é dado por (KUNII; LEVENSPIEL, 1991),

$$\text{Re}_{p,mf} = \left(\frac{d_p u_{mf} \rho_f}{\mu_g} \right)^2 \quad (06)$$

e o número de Archimedes corresponde a (KUNII; LEVENSPIEL, 1991),

$$\text{Ar} = \frac{d_p^3 \rho_g (\rho_s - \rho_f) g}{\mu_g^2} \quad (07)$$

Renomeando os demais termos, como segue (KUNII; LEVENSPIEL, 1991),

$$k_1 = \frac{1,75}{\varepsilon_{mf}^3 \varphi_s} \quad (08)$$

$$k_2 = \frac{150(1-\varepsilon_{mf})}{\varepsilon_{mf}^3 \varphi_s^2} \quad (09)$$

A equação 05 também pode ser expressa por (KUNII; LEVENSPIEL, 1991),

$$k_1 \text{Re}_{p,mf}^2 + k_2 \text{Re}_{p,mf} = \text{Ar} \quad (10)$$

Desde que foi percebido que k_1 e k_2 permanecem próximos de constantes para diferentes tipos de partículas sob uma ampla gama de condições, vários pesquisadores tem reportado, ao longo dos anos, diversos valores representativos de tais constantes em diversos

estudos, cabendo ao pesquisador decidir qual deles apresenta as condições em que melhor se enquadra a situação onde se pretende avaliar a mínima velocidade de fluidização (KUNII; LEVENSPIEL, 1991).

A partir da velocidade de mínima fluidização, o leito passa da condição de leito fixo para leito fluidizado e, aumentando-se a velocidade de passagem do gás, observa-se sequencialmente, mas que não necessariamente ocorram em tal evolução, os regimes de fluidização homogênea, fluidização borbulhante, fluidização pistonada, fluidização turbulenta, fluidização rápida e transporte pneumático.

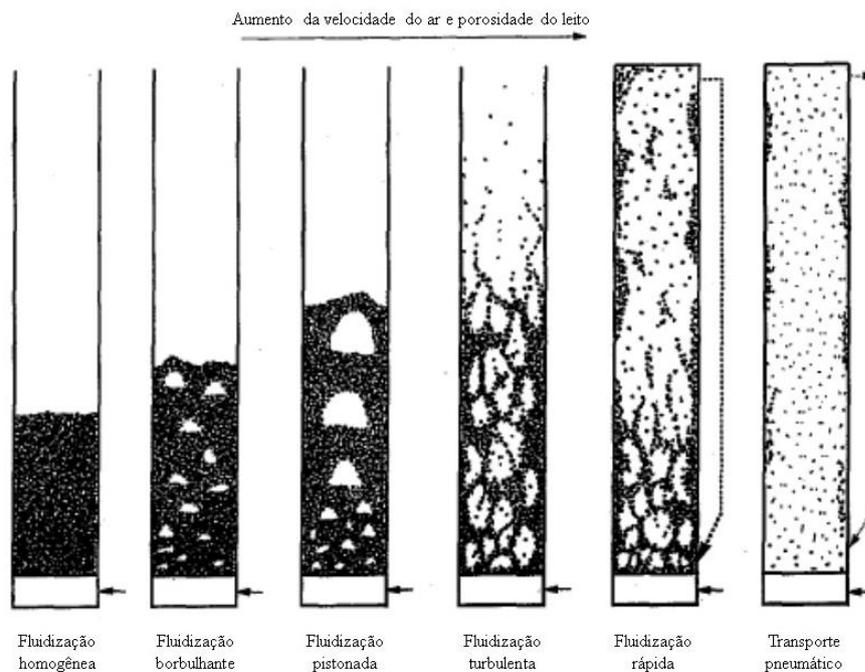


Figura 20: Diagrama esquemático dos regimes de fluidização. (Adaptado de GRACE, 1986)

Pela observação dos regimes de fluidização da Figura 20, nota-se que até o regime de fluidização pistonada o leito fluidizado apresenta duas zonas distintas, caracterizadas por uma fase densa de partículas e tendo acima desta uma superfície mais ou menos distinta que a separa da fase dispersa, onde a densidade dos sólidos decresce com a altura do leito. A seção do tubo entre a superfície da fase densa e a saída da vazão de gás é denominada *freeboard* e sua altura é denominada *altura de freeboard* (H_f) (KUNII; LEVENSPIEL, 1991).

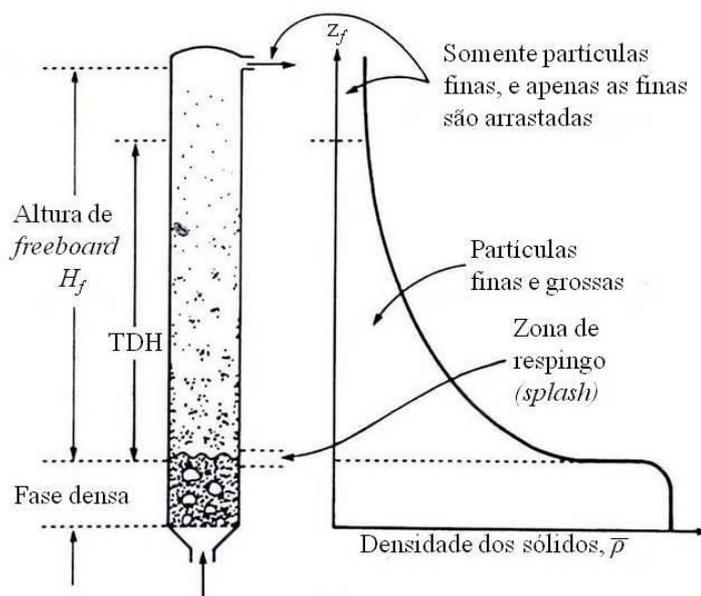


Figura 21: Identificação dos termos utilizados no leito fluidizado. (Adaptado de KUNII; LEVENSPIEL, 1991)

Devido à densidade de sólidos decrescer com a altura na região *freeboard*, aumentando a *altura de freeboard* o arraste de partículas do leito é diminuído, até que seja alcançada uma altura em que mudanças no arraste passem a ser imperceptíveis, tal altura é denominada *transport disengaging height* (TDH). Assim, quando o fluxo de gás sai acima da *transport disengaging height*, ou $H_f > TDH$, tanto a taxa de arraste de partículas quanto a sua distribuição de tamanho ficam aproximadamente constantes (KUNII; LEVENSPIEL, 1991).

A saturação da capacidade de transporte de sólidos pelo fluxo de gás representa o maior fluxo de partículas que podem ser arrastados para fora do leito cuja saída se encontra acima da TDH, dependendo de propriedades das partículas e condições do fluxo de gás (KUNII; LEVENSPIEL, 1991).

No caso de $H_f > TDH$, são encontradas na seção *freeboard* partículas de todos os tamanhos presentes no leito, porém as maiores não conseguem ser arrastadas pelo fluxo de ar e caem por gravidade, enquanto as menores podem ser arrastadas inclusive para fora do leito, com a distribuição de tamanho de partículas na fase dispersa mudando com a altura do leito, sendo possível nesta zona separar partículas de acordo com seu tamanho (KUNII; LEVENSPIEL, 1991).

À separação ou remoção de partículas finas de uma mistura de sólidos, ocorrendo em um leito fluidizado, independente de pequenas ou grandes alturas H_f , dá-se o nome de *elutriação* (KUNII; LEVENSPIEL, 1991).

Quando a taxa de alimentação de sólidos no leito é baixa e a velocidade do gás é alta, todas as partículas serão arrastadas acima do tubo, amplamente dispersas no gás. Até determinado ponto pode-se alterar a taxa do fluxo de gás ou sólido que ainda assim se mantém partículas dispersas no fluxo ascendente da mistura gás-sólido, sendo tal regime denominado regime de transporte pneumático (KUNII; LEVENSPIEL, 1991).

Assim, como o trabalho em questão visou a separação de partículas no leito fluidizado, será dada ênfase ao arraste das mesmas, sendo apresentado na sequência algumas características peculiares ao seu transporte.

2.2.2 Condição *choking* e transição de regimes em transporte vertical

Segundo Klinzing et al. (2010), existem dois tipos básicos de sistema gás-sólido, um denominado sistema em fase densa e o outro em fase diluída, que podem ser classificados conhecendo-se a concentração de sólidos no tubo.

À transição abrupta entre os regimes das fases densa e diluída denomina-se condição *choking*, caracterizada por um colapso no movimento da suspensão das partículas, dando origem a um escoamento pulsátil, ou *slugging flow*, cuja característica é a de ser um escoamento instável e com quedas de pressão elevadas e oscilatórias (KLINZING et al., 2010). Muitos pesquisadores têm classificado ao longo dos anos a condição de *choking*, tais como, Leung et al. (1971); Bandrowski; Kacmarzyk. (1981); Bi et al. (1993).

Devido à importância do regime *choking*, vários autores trabalharam para determinar correlações que buscam prever a velocidade crítica do fluido em tal regime, citando alguns, como Leung et al. (1971), Yang (1975) e Matsen (1982).

Avaliando a transição de regimes de fases densa e diluída para o transporte vertical, muitos pesquisadores vêm propondo ao longo do tempo diagramas que representam tal transição, citando Zenz e Othmer (1960), Yerushalmi et al. (1976), Leung (1980), Matsen (1982), Grace (1986), Rizk (1986). Na maioria dos estudos, os diagramas são feitos baseando-se na velocidade do gás, vazões de partículas e na queda de pressão pela altura do leito considerado. Um exemplo de diagrama pode ser verificado na Figura 22.

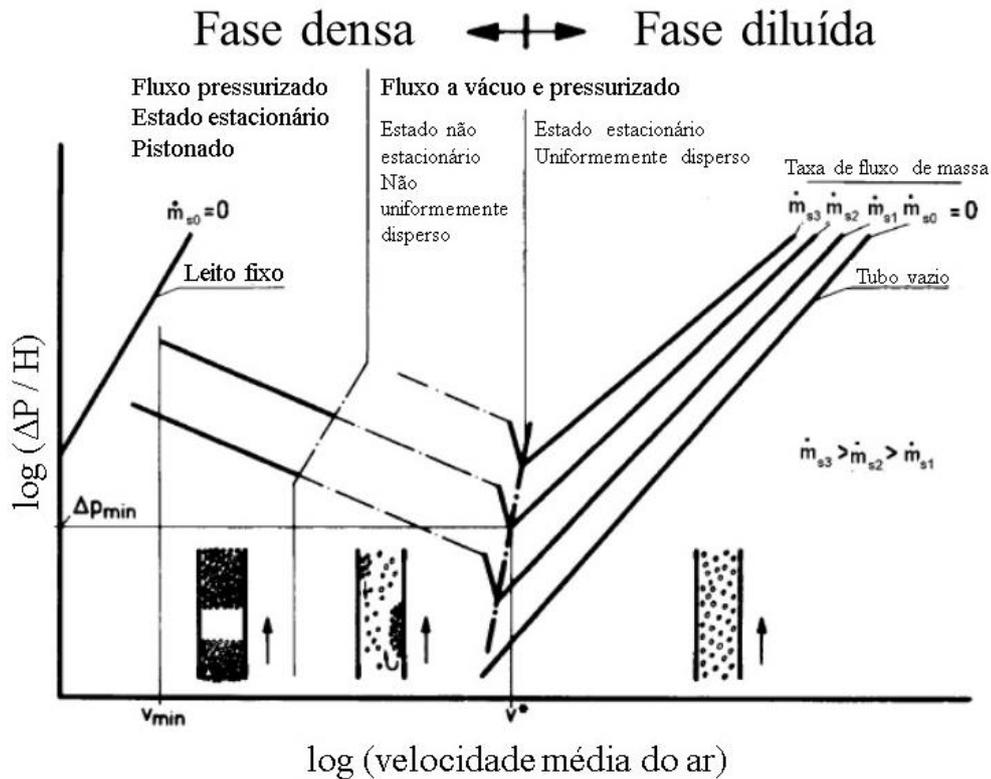


Figura 22: Diagrama das fases densa e diluída no transporte pneumático. (adaptado de KLINZING et al., 2010)

Analisando o diagrama da Figura 22, observa-se que para velocidades altas do fluido o regime é o dito diluído, caracterizado pela baixa concentração de partículas. Estando na fase diluída e diminuindo-se a velocidade do gás, se nota que o gradiente de pressão também diminui, sendo que a diferença inicial era devida principalmente ao atrito entre o fluido escoando e a parede do tubo, até que o gradiente de pressão atinge um valor mínimo, com velocidade do fluido v^* , sendo tal ponto o limite entre os regimes denso e diluído.

A velocidade de *choking* é atingida diminuindo-se ainda mais a velocidade do fluido, no momento onde se passa a ter o escoamento pulsátil das partículas ou *slugging flow*. A partir da fase densa em regime pistonado o gradiente de pressão se dá predominantemente em função da carga estática de partículas.

As curvas no gráfico também variam de acordo com o fluxo mássico, no caso da Figura 22 tem-se $\dot{m}_{s3} > \dot{m}_{s2} > \dot{m}_{s1} > \dot{m}_{s0} = 0$. No caso do fluxo mássico igual a zero, diz respeito ao fluido escoando em um tubo vertical sem a presença de partículas, devendo-se ao atrito do fluido com a parede do tubo o diferencial de pressão apresentado no diagrama.

Apesar do diagrama de fases poder ser facilmente compreendido, não existe consenso na literatura sobre como localizar o limite real entre os regimes de escoamento. O

regime diluído pode ser classificado como uma vazão alta de gás arrastando uma porção homogênea de sólidos com concentração abaixo de 5%. Já o regime denso com uma vazão relativamente baixa de gás arrastando uma elevada concentração de sólidos, conferindo heterogeneidade à suspensão, uma vez que se observa aglomerados e recirculação de tais sólidos, com valores de porosidade do leito variando de 0,75 a 0,80 (LEUNG, 1980).

Alguns pesquisadores deduziram empiricamente como prever o local exato da mudança de regime por meio de equações, como foi o caso de Rizk (1986), outros, como aqueles citados no início desse item, elaboraram diagramas que variaram dos mais simples até formatos bem elaborados. A questão é que existe muita discussão acerca das divergências encontradas na forma de definir e identificar limites e fica claro que no regime denso a compreensão do fenômeno é um desafio maior visto que existem muitas variações no modo do escoamento no intervalo que contempla do escoamento pulsátil até o início do regime diluído. Para este trabalho, as operações ocorreram apenas no regime diluído.

Existe também a possibilidade de a transição entre os regimes da fase diluída e densa ocorrer de forma difusa. Nesse caso, a porosidade do leito é reduzida gradativamente e passam a coexistir dentro do tubo diferentes regiões de transporte, havendo circulação interna das partículas. Assim, observa-se em destaque uma região de escoamento diluído e movimento ascendente da fase sólida na parte central do tubo, e uma região de escoamento denso e descendente das partículas próxima das paredes do tubo, conforme a Figura 23 (KLINZING et al., 2010).

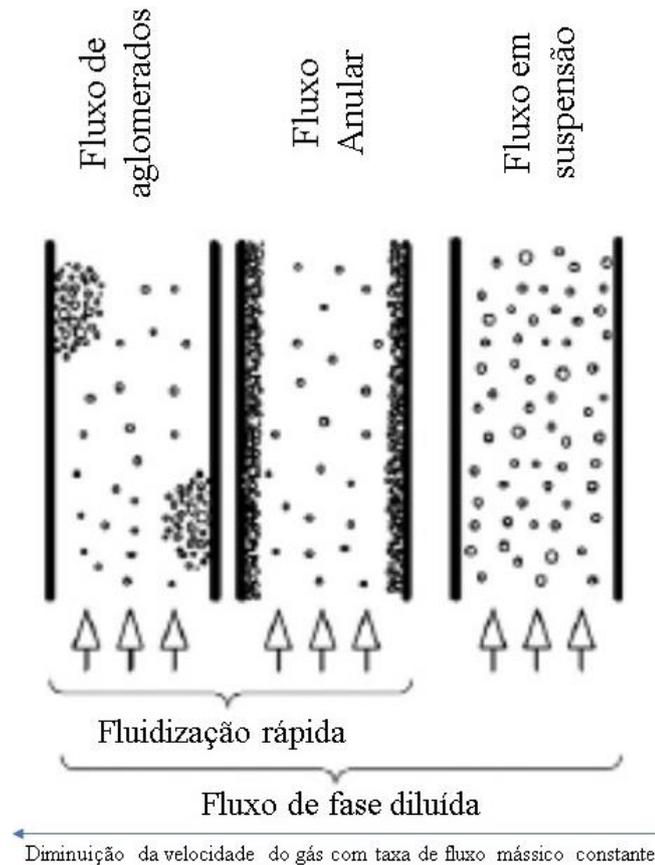


Figura 23: Esquema dos regimes de fluidização do transporte de partículas na fase diluída. (adaptado de RABINOVICH; KALM, 2011)

Em sistemas de transporte pneumático é desejável que o fluxo de fluido seja o menor possível visando a economia de energia, evitar problemas de erosão na tubulação e relacionados ao atrito entre as partículas. Assim, em um transporte de fase diluída, pode-se ajustar o sistema de transporte vertical para operar na velocidade mínima de transporte por meio da velocidade *chocking*.

No caso deste trabalho a ideia é a separação de conjuntos de partículas em específico, portanto, considerando um sistema de fase diluída com baixo carregamento de partículas podemos aproximar as velocidades do gás e de um determinado grupo de partículas à sua velocidade terminal, sendo este valor de maior interesse no *setup* das simulações.

O conceito e cálculo da velocidade terminal das partículas, bem como outros aspectos importantes para a compreensão da interação fluido-partícula no transporte pneumático serão apresentados nos itens subsequentes.

2.2.3 Forças fluidodinâmicas no transporte vertical

Existem algumas forças que são fundamentais quando se considera a interação fluidodinâmica entre o gás, os sólidos e a parede interior do tubo de transporte pneumático que são: Forças de Campo, Forças Volumares e as Forças de Superfície (KLINZING et al., 2010).

2.2.3.1 Forças de campo

As forças de campo são devidas à influência de um campo de força externa, como por exemplo, um campo eletromagnético ou gravitacional, e atuam majoritariamente sobre as partículas. A força de campo devido ao campo gravitacional, ou força peso da partícula, é a mais relevante no transporte pneumático vertical, pois, tal força, junto da força de atrito entre a partícula e a parede do tubo, tende a retardar o movimento ascendente das partículas no transporte pneumático vertical por atuarem no sentido contrário ao movimento do fluido (KLINZING et al., 2010).

$$F_G = (m_p - m_f)g \quad (11)$$

Onde, F_G é a força gravitacional [N];
 m_p é a massa da partícula [kg];
 m_f é a massa do fluido deslocado pelo movimento da partícula [kg];
 g aceleração da gravidade [$m \cdot s^{-2}$];

2.2.3.2 Forças volumares

A principal força volumar é a força de empuxo, que pode ser definida como a força exercida sobre uma partícula submersa em um fluido, apresentando intensidade proporcional ao peso do fluido deslocado por tal partícula. Porém, a força de empuxo pode ser negligenciada no caso do transporte pneumático vertical, visto que esta contribui pouco para o movimento de elevação das partículas devido à baixa densidade do meio fluido de transporte (ANANDHAKRISHNAN; SARKAR, 2011).

2.2.3.3 Forças de superfície

As forças de superfície são aquelas devido à interação entre o fluido e a superfície da partícula, das quais podem ser geradas forças de pressão e tensões viscosas. As forças de superfície que mais se destacam são a força de arrasto e a força de sustentação. As forças de sustentação são significativas quando estão alinhadas perpendicularmente ao movimento da partícula, por exemplo, no caso do transporte pneumático horizontal (ANANDHAKRISHNAN; SARKAR, 2011).

As forças de sustentação são divididas em dois grupos de acordo com o efeito na partícula por estas gerado. Assim, um grupo apresenta como efeito a saltação, ou efeito Saffman, que ocorre devido à existência de um gradiente de velocidade do fluido ao redor da partícula, o que contribui com uma distribuição não uniforme de pressão no entorno da mesma, fazendo com que apareça uma força, força de *Saffman*, que atua em tal partícula perpendicularmente à direção do escoamento (KLINZING et al., 2010). O outro grupo apresenta como efeito a rotação da partícula, também conhecido como efeito Magnus, estando este efeito intimamente envolvido com a dinâmica de choques entre partícula-partícula e partícula-parede de um tubo.

No caso do transporte pneumático vertical, o deslocamento da partícula tem mais destaque do que seu movimento de rotação e também devido ao tamanho das partículas transportadas ser costumeiramente pequeno pode-se considerar a força de Saffman desprezível quando comparada à força de arraste. Com relação a força de *Magnus*, a mesma também pode ser negligenciada num modelo teórico de transporte pneumático vertical devido à baixa velocidade angular das partículas no transporte (ANANDHAKRISHNAN; SARKAR, 2011).

Sendo assim, a força de arrasto é a maior responsável pela elevação do sólido num leito fluidizado vertical e está associada à resistência da partícula em ser arrastada pelo fluido. A força de arraste pode ser decomposta em três termos principais que são a força de Stokes, a força de massa virtual e a força de Basset, representados pelas letras (A), (B) e (C) respectivamente na equação 12 (CREMASCO, 2012).

$$F_D = \underbrace{-3\pi d_p \mu_g v_p}_{(A)} - \underbrace{\frac{1}{2} m_f \frac{dv_p}{dt}}_{(B)} - \underbrace{\frac{3}{2} d_p^2 \int_0^t \left(\frac{dv_p}{d\tau} \right) \frac{d\tau}{\sqrt{(t-\tau)}}}_{(C)} \quad (12)$$

Onde, d_p é o diâmetro da partícula [m];

μ_g é a viscosidade dinâmica do fluido deslocado pelo movimento da partícula [$\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$];

v_p refere-se ao vetor velocidade da partícula [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$];

m_f é a massa do fluido deslocado pelo movimento da partícula [kg];

t é o tempo [s];

τ é o escalar de tempo [s];

A força de massa virtual se deve às diferenças de aceleração entre as fases sólida e fluida, ou seja, tal diferença nas acelerações da fase sólida faz com que o fluido que está próximo da mesma, dependendo da situação, seja acelerado ou desacelerado junto desta.

Já a força de *Basset* é responsável por efeitos viscosos e está relacionada ao atraso temporal no desenvolvimento da camada limite à medida que a velocidade relativa entre a partícula e o fluido muda com o tempo.

No caso do transporte pneumático vertical, as forças de massa virtual e *Basset* costumam ser negligenciadas na modelagem de tal fenômeno, uma vez que as partículas não são aceleradas a taxas consideráveis sob as quais esses termos necessitam ser considerados na dinâmica, além de serem termos difíceis de serem implementados. No caso da força de *Basset*, a sua ausência também pode ser justificada pelo fato da razão de densidade fluido-partícula ser suficientemente pequena ($<10^{-4}$).

Já a força de Stokes é um termo muito importante da força de arraste presente no transporte pneumático vertical de partículas e resulta da contribuição do arraste devido ao atrito e forma da partícula, também podendo ser expressa por meio do coeficiente de arraste da partícula, conforme equação 13 (CREMASCO, 2012).

$$F_{\text{Stokes}} = C_d \frac{1}{2} A_p \rho_f \|U_r\| U_r \quad (13)$$

Onde, C_d é o coeficiente de arraste

A_p é área projetada da partícula [m^2];

ρ_f é a densidade do fluido [$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$];

U_r é a velocidade relativa entre o fluido e a partícula [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$];

$\|U_r\|$ é a norma do vetor da velocidade relativa [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$];

2.2.3.3.1 Coeficiente de arraste

O coeficiente de arraste é um número adimensional que, simplificadamente, fornece a quantificação da resistência de um objeto ou material quando o mesmo está em contato com um fluido em movimento. Avaliando o movimento de uma partícula esférica em um fluido, define-se o coeficiente de arraste como sendo a razão entre a força exercida sobre a partícula e a pressão fluidodinâmica causada pelo fluido vezes a área projetada pela partícula, rearranjando a equação 13 para uma determinada direção (YANG, 2003), obtém-se:

$$C_D = \frac{F_{\text{arraste}}}{(1/2)\rho_f U_r^2 A_p} \quad (14)$$

Onde, C_D é o coeficiente de arraste
 F_{arraste} é a força sobre a partícula [N];
 ρ_f é a densidade do fluido [kg.m^{-3}];
 U_r é a velocidade relativa entre o fluido e a partícula [m.s^{-1}];
 A_p é a área projetada da partícula [m^2];

Nota-se por tal expressão que o coeficiente de arraste é função do número de Reynolds da partícula (Re_p), dado pela equação 15.

$$Re_p = \frac{\rho_f d_p U_r}{\mu_g} \quad (15)$$

Onde, ρ_f = densidade do fluido [kg.m^{-3}];
 d_p = diâmetro de partícula [m];
 U_r = velocidade relativa entre o fluido e a partícula [m.s^{-1}];
 μ_g = viscosidade do fluido [$\text{kg.m}^{-1}\text{s}^{-1}$]

Desse modo, verificou-se que dependendo da magnitude do número de Reynolds da partícula notava-se uma diferença de regimes bem estabelecida. Assim, para Re_p menor que 0,2, o regime é dito laminar ou regime de Stokes, sendo a característica desse regime a viscosidade do fluido ser dominante, com o coeficiente de arraste dado por $C_D = \frac{24}{Re_p}$; para Re_p entre 0,2 e 1000 o regime é dito intermediário ou de transição e, nesse caso, o coeficiente de

arraste passa a ser uma função do número de Reynolds, dado por $C_D = f[Re_p]$; e, finalmente, para Re_p maior que 1000 o regime é dito turbulento ou regime de Newton, observando-se nesse regime que a força sobre a partícula é em grande parte devido à inércia do fluido ao invés de sua viscosidade, sendo o coeficiente de arraste constante e dado por $C_D = 0,44$.

Existe ainda a classificação para o regime quando Re_p excede o valor de 2×10^5 , dito regime supercrítico, caracterizado por uma queda acentuada do valor do coeficiente de arraste para valores próximos de 0,1, sendo que a partir desse ponto começa a ocorrer um ligeiro aumento de tal valor à medida que o número de Reynolds vai aumentando. A avaliação do coeficiente de arraste de partículas em regimes supercríticos ainda foi pouco explorada. (KLINZING et al., 2010)

A partir das observações anteriores, começaram a ser propostas correções para as aproximações dos regimes de fluidização dependendo do número de Reynolds da partícula e, assim, muitas correlações de coeficiente de arraste para partículas esféricas surgiram, até que Pettyjohn e Christiansen (1948) introduziram fatores de correção “K” para a determinação de correlações de coeficientes de arraste de partículas não esféricas.

O fator de correção “K” é uma razão entre a velocidade relativa de uma partícula com o fluido pela velocidade relativa entre uma esfera de volume equivalente à partícula e o fluido. A partir de então, novos trabalhos surgiram propondo novas correlações para o coeficiente de arraste dependendo, além do número de Reynolds da partícula, também da esfericidade da mesma. A esfericidade é definida como a razão entre a área superficial da esfera e área superficial da partícula, ambas com o mesmo volume (WADELL, 1933).

A Figura 24 apresenta um gráfico relacionando o número de Reynolds da partícula com o coeficiente de arraste da mesma, variando-se os valores da esfericidade.

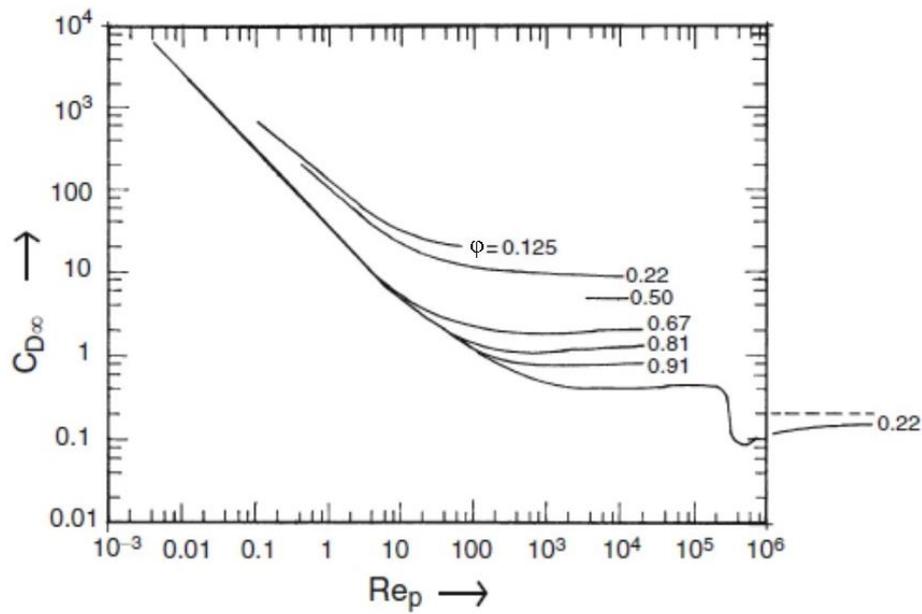


Figura 24: Curvas do coeficiente de arraste dependendo do número de Reynolds da partícula para diferentes esfericidades. (KLINZING et al., 2010)

Pela Figura 24, nota-se que o coeficiente de arraste foi representado por $C_{D\infty}$, isso porque tal nomenclatura representa o coeficiente de arraste de uma partícula em uma diluição infinita, ou seja, sem influência de outras partículas ou paredes.

Porém, deve-se atentar ao fato de que é reconhecido que o arrasto aumenta à medida que se aumenta a concentração de partículas no leito e, deste modo, deve-se considerar a porosidade do leito como um fator importante na determinação do coeficiente de arraste.

Wen e Yu (1966) estabeleceram uma correlação empírica relacionando o efeito da porosidade do leito sobre o coeficiente de arraste de partículas.

$$C_{D\varepsilon} = \varepsilon^{-4,7} C_{D\infty} \quad (16)$$

Onde, $C_{D\varepsilon}$ é o coeficiente de arraste de uma partícula simples na porosidade ε definida;

$C_{D\infty}$ é o coeficiente de arraste em uma diluição infinita;

ε é a porosidade do leito;

Na Figura 25, obtida do trabalho de Arnao (2007), foram comparados os valores do coeficiente de arraste das partículas de bagaço, para diferentes correlações encontradas na literatura, em função do número de Reynolds da partícula.

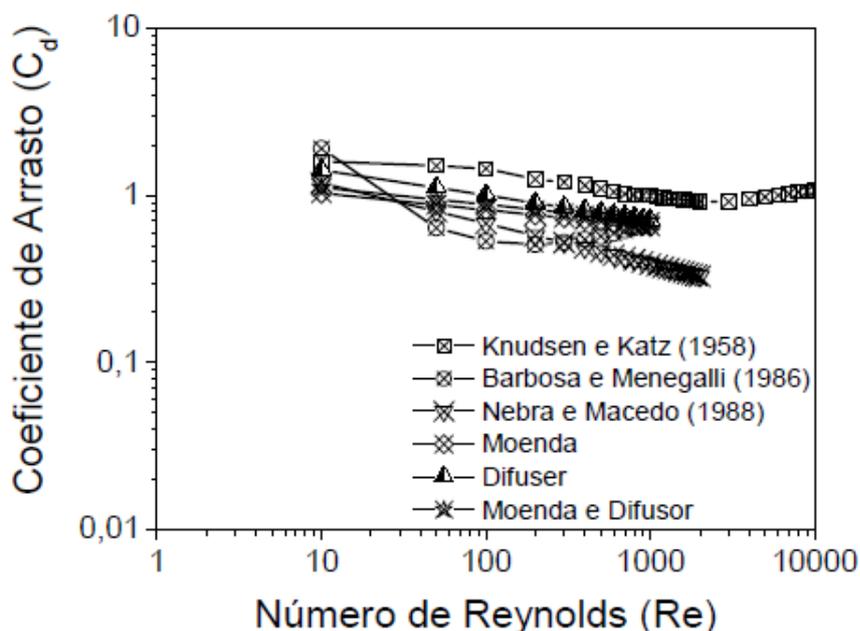


Figura 25: Coeficientes de arraste em função do número de Reynolds das partículas de bagaço. (ARNAO, 2007)

No trabalho de Arnao (2007), os coeficientes de arraste foram obtidos para as partículas de bagaço obtidos por moenda, difusor e uma mistura destes. Nos trabalhos de Barbosa e Menegalli (1986) e Nebra e Macedo (1989) os coeficientes de arraste são para as partículas de bagaço e no de Knudsen e Katz (1958) para cilindro infinito, uma forma geométrica bem representativa da partícula fibra de bagaço.

Segundo Arnao (2007), os coeficientes de arraste calculados para as partículas de bagaço do tipo fibra obtidas tanto da moenda como do difusor foram muito próximos e estavam em concordância com os valores obtidos na literatura. As pequenas variações de valores observadas provavelmente são devidas, dentre alguns parâmetros observados na correlação do coeficiente de arraste, principalmente ao diâmetro da partícula calculado, visto o bagaço de cana ser um material muito heterogêneo e, além disso, existirem diferentes técnicas para determinação de tal propriedade.

2.2.4 Velocidade terminal da partícula

Uma partícula esférica em queda livre em um meio fluido está sujeita à ação de três forças que são a gravitacional, de empuxo e arraste. A força resultante da ação das três forças descritas anteriormente é dita força de aceleração. Quando o balanço de forças é atingido, a força de aceleração se torna nula e a partícula passa a cair em velocidade constante, denominada velocidade terminal da partícula (HAIDER; LEVENSPIEL, 1989).

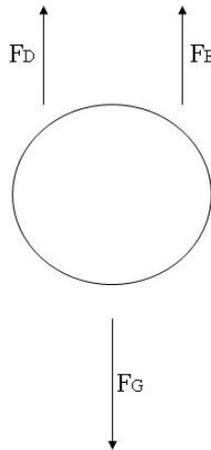


Figura 26: Balanço de forças de uma partícula em velocidade terminal.

Assim,

$$F_G - F_E - F_D = F_A \quad (17)$$

Onde, F_G é a força gravitacional [N];

F_E é a força de empuxo [N];

F_D é a força de arraste [N];

F_A é a força de aceleração [N];

Considerando $F_A = 0$ o balanço de forças fica,

$$F_G = F_E + F_D \quad (18)$$

$$\rho_p \frac{\pi d_p^3}{6} g = \rho_f \frac{\pi d_p^3}{6} g + \frac{1}{2} C_D \rho_f \frac{\pi d_p^2}{4} U_t^2 \quad (19)$$

Onde, ρ_p densidade da partícula [kg.m^{-3}];
 ρ_f densidade do fluido [kg.m^{-3}];
 d_p diâmetro da partícula [m];
 g aceleração gravitacional [m.s^{-2}];
 C_D coeficiente de arraste ;
 U_t velocidade terminal [m.s^{-1}], pois nesse caso o valor de U_t descrito na equação 13 torna-se constante e por isso passa a ser denominado de velocidade terminal;

Isolando a velocidade terminal no balanço de forças, tem-se

$$U_t = \left[\frac{4d_p(\rho_p - \rho_f)g}{3\rho_f C_D} \right]^{1/2} \quad (20)$$

Lembrando do item 2.2.3.3.1 que o coeficiente de arraste é dependente do número de Reynolds da partícula e que este depende da velocidade relativa entre a partícula e o fluido, que nesse caso é a velocidade terminal, temos então de resolver um cálculo iterativo ou utilizar algum outro método não iterativo proposto.

Klinzing et al. (2010), por exemplo, sugeriu o cálculo por meio das equações do número de Galileo e Reynolds da partícula. Nesse caso, inicialmente se calcula o número de Galileo (Ga) dado pela equação 21.

$$Ga = \frac{\rho_g(\rho_p - \rho_f)gd_p^3}{\mu_g^2} \quad (21)$$

Onde, ρ_f é a densidade do fluido [kg.m^{-3}];
 ρ_p é a densidade da partícula [kg.m^{-3}];
 g é a aceleração da gravidade [m.s^{-2}];
 d_p é o diâmetro da partícula [m];
 μ_g é a viscosidade dinâmica do fluido [$\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$];

De posse do número de Galileo, deve-se encontrar o número de Reynolds da partícula (Re_p) ou pela equação 22, que é deduzida a partir de uma análise similar àquela

realizada no início deste item a respeito do balanço de forças na partícula, ou pelo gráfico proveniente de tal equação.

$$Ga = 18Re_p(1 + 0,15Re_p^{0,687}) + 0,315Re_p^2 / (1 + 4,25 \times 10^4 Re_p^{-1,16}) \quad (22)$$

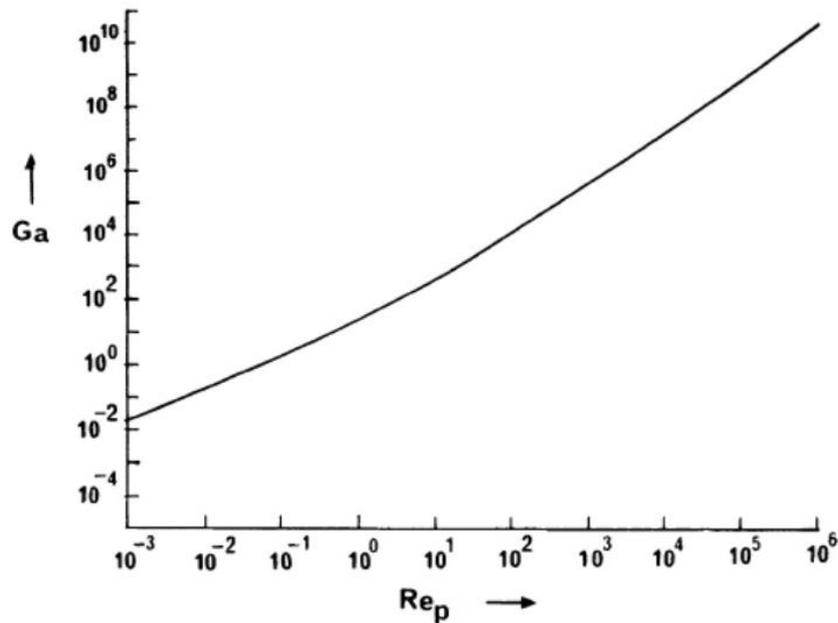


Figura 27: Solução gráfica da equação 22. (KLINZING et al., 2010)

Finalmente, de posse do número de Reynolds da partícula é possível encontrar a velocidade terminal isolando seu respectivo termo na equação 23.

$$Re_p = \left(\frac{d_p U_t \rho_p}{\mu_g} \right)^2 \quad (23)$$

Onde, Re_p é o número de Reynolds da partícula
 ρ_p é a densidade da partícula [$kg.m^{-3}$];
 U_t é a velocidade terminal da partícula [$m.s^{-1}$];
 d_p é o diâmetro da partícula [m];
 μ_g é a viscosidade dinâmica do fluido [$kg.m^{-1}.s^{-1}$];

A título de conhecimento, outros autores propuseram métodos não iterativos para encontrar a velocidade terminal como Geldart (1986) e Haider e Levenspiel (1989), estes

últimos propuseram o cálculo da velocidade terminal de partículas não esféricas a partir de números adimensionais.

Para o trabalho em questão foi considerado o cálculo de modo iterativo, variando o coeficiente de arraste de acordo com o modelo escolhido.

Ainda a respeito da velocidade terminal da partícula, é preciso enfatizar que a mesma é definida para uma partícula em meio diluído sem influências externas, isto porque se a concentração de partículas no leito for grande ou mesmo se a partícula estiver próxima da parede do tubo o balanço de forças passa a ser diferente daquele inicialmente definido devido às interações partícula-partícula e partícula-parede (KLINZING et al., 2010).

Assim, uma característica importante a ser considerada na análise de projetos envolvendo o transporte pneumático de partículas, previamente discutida no item 2.2.3.3.1, é a de que a porosidade do leito tem grande influência no arraste das mesmas. A definição básica de porosidade do leito é o volume ocupado pelo fluido de transporte em um certo elemento de volume ou seção de tubo preenchido por um dado número de partículas, ou seja, uma suspensão com porosidade próxima de 1 será extremamente diluída conforme a equação 24 (KLINZING et al., 2010).

$$\varepsilon = 1 - \frac{V_s}{V} = 1 - \frac{\rho}{\rho_{\text{real}}} \quad (24)$$

Onde, V_s é o volume de partículas [m^3];
 V é o volume do elemento de tubo [m^3];
 ρ é a densidade aparente [kg.m^3];
 ρ_{real} é a densidade real das partículas [kg.m^3];

Assim, o gás transportando os sólidos deve fluir através de um sistema de partículas suspensas, sendo que a diminuição da porosidade do leito acarreta num aumento da velocidade do gás nas partes vazias do tubo (KLINZING et al., 2010).

Deste modo, considerando uma velocidade, v , do fluido baseada na sua vazão em um tubo de diâmetro conhecido, a velocidade desse mesmo fluido através das partículas passa a ser aquela dada pela equação 25 (KLINZING et al., 2010).

$$v_\varepsilon = \frac{v}{\varepsilon} \quad (25)$$

Onde, v_ε é a velocidade do fluido nos poros [m.s^{-1}];
 v é a velocidade do fluido no tubo sem partículas [m.s^{-1}];
 ε é a porosidade do leito;

A diferença entre a velocidade do gás passando entre os poros do leito e a velocidade média da partícula no mesmo fornece a velocidade de deslizamento, que é devida justamente à interação partícula-partícula e partícula-parede. A velocidade de deslizamento pode ser calculada pela equação 26 (KLINZING et al., 2010).

$$v_s = v_\varepsilon - v_p \quad (26)$$

Onde, v_s é a velocidade de deslizamento [m.s^{-1}];
 v_ε é a velocidade do fluido nos poros [m.s^{-1}];
 v_p é a velocidade da partícula no leito [m.s^{-1}];

Logo, para um fluxo de partículas finas muito diluído pode-se considerar que quando as partículas se encontram em equilíbrio estático no leito a diferença entre as velocidades da partícula e do gás passa a ser a própria velocidade terminal, conforme equação 27 (KLINZING et al., 2010).

$$U_t = v_\varepsilon - v_p \quad (27)$$

Onde, U_t é a velocidade terminal da partícula [m.s^{-1}];
 v_ε é a velocidade do fluido nos poros [m.s^{-1}];
 v_p é a velocidade da partícula no leito [m.s^{-1}];

Avaliando do ponto de vista físico do fenômeno, em condições onde o transporte de partículas é muito diluído as mesmas estão livres para se moverem sem serem afetadas por outras partículas ou as paredes. Porém, à medida que se aumenta o número de partículas no leito passam a existir mais colisões entre as mesmas tal que o movimento é impedido, causando aumento da velocidade de deslizamento (KLINZING et al., 2010).

Tratando do bagaço de cana, no trabalho de Arnao (2007) foram comparados os valores das velocidades terminais das partículas de bagaço de acordo o diâmetro da partícula.

A Figura 28 permite a comparação das velocidades terminais obtidas dos trabalhos de Arnao (2007), que calculou as velocidades terminais para o bagaço obtido por moendas, difusores e mistura destes, além dos trabalhos de Barbosa e Menegalli (1986) e Aralde et al. (1991).

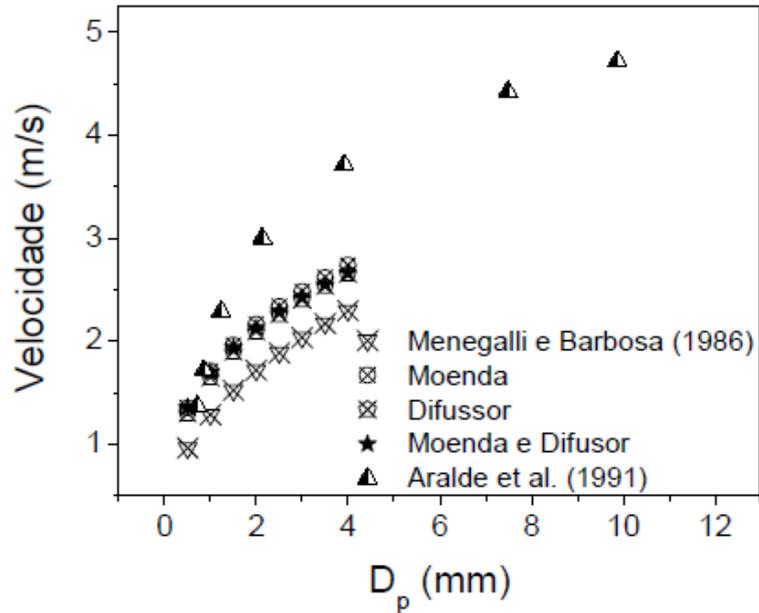


Figura 28: Velocidades terminais do bagaço para diferentes diâmetros de partículas. (ARNAO, 2007)

2.2.5 Características fluidodinâmicas das partículas

A identificação de característica de fluidização de sólidos foi pela primeira vez realizada por Geldart (1973), quando o mesmo propôs um diagrama relacionando características físicas das partículas, seu diâmetro e densidade, com a densidade do fluido e os seus regimes de fluidização, conforme a Figura 29.

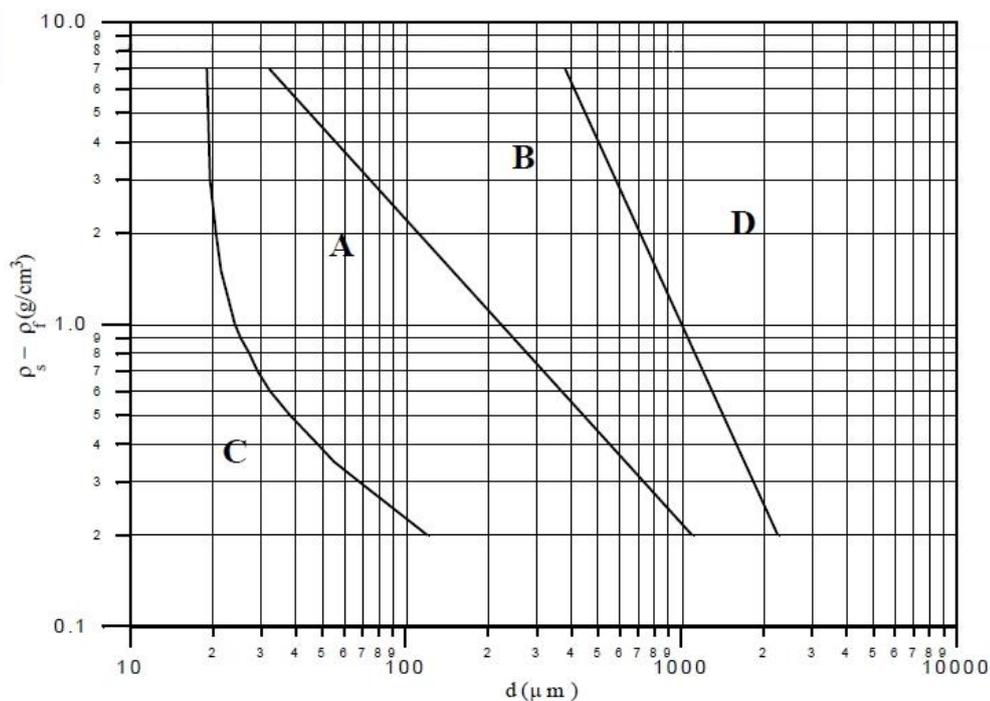


Figura 29: Diagrama de Geldart para caracterização de partículas fluidizadas por ar em condições ambiente. (GELDART, 1973)

De acordo com o diagrama é possível identificar quatro tipos de regimes fluidodinâmicos identificado pelas letras A, B, C e D.

Partículas do grupo A são partículas finas cuja principal característica é o leito composto pelas mesmas se expandir consideravelmente e uniformemente entre a velocidade de mínima fluidização e a velocidade até o surgimento das primeiras bolhas. São também denominadas partículas aeráveis e um exemplo clássico das mesmas são as partículas utilizadas no craqueamento catalítico de petróleo.

Quando as partículas são mais densas e grossas que as partículas do grupo A, estas apresentam características fluidodinâmicas diferentes, nesse caso o leito tende a colapsar logo que o gás é abruptamente desligado. Além disso, bolhas começam a se formar no leito imediatamente após a velocidade de mínima fluidização é estabelecida e crescem rapidamente com a altura do leito. Esse grupo de partículas são classificadas como sendo do grupo B e a areia de construção é um exemplo típico do mesmo.

Já as partículas grandes e densas, que não são adequadas para leitos fluidizados, mas para leitos de jorro, são classificadas como sendo do grupo D, tendo como exemplos grãos de produtos agrícolas.

Finalmente, o grupo C abrange as partículas com diâmetro médio menor que 30 μ m. Tais partículas costumam demonstrar efeitos coesivos devido às forças interpartículas. As fortes forças interpartículas podem ser causadas pela força de Van der Waals, de carga de eletrostática e às vezes devido à presença de líquido. Essas partículas são quase incapazes de fluidizar, levando à formação de canais preferenciais, sendo um exemplo de partículas desse grupo aquelas presentes na farinha de trigo.

Após Geldart, outros pesquisadores, baseando-se em seus fundamentos, sugeriram outras formas de classificação e diagramas de regime de fluidização, citando Grace (1986), Kunii e Levenspiel (1991) e Wang e Li (1995).

Como exemplo, Wang e Li (1995) utilizaram a área superficial específica equivalente das partículas, S_e , para a classificação, calculada pela equação 28.

$$S_e = \frac{1}{(\rho_p - \rho_f)d_p} \quad (28)$$

Onde, ρ_p é a densidade da partícula [kg.m^{-3}];
 ρ_f é a densidade do gás [kg.m^{-3}];
 d_p é o diâmetro da partícula [m];

Assim, as partículas são classificadas como segue:

- Grupo A: $5 < S_e \leq 25$
- Grupo B: $1 < S_e \leq 5$
- Grupo C: $S_e > 25$
- Grupo D: $S_e \leq 1$

2.2.6 Ângulo de repouso

A inclinação da pilha de material depende de uma série de características das partículas, tais como, densidade, área, formato e coeficiente de atrito do material. Além disso, caso o material esteja úmido, ocorre a atração eletrostática entre a água e a superfície das partículas de modo a aumentar o ângulo de repouso (SCHULZE, 2008).

Existem dois tipos principais de ângulos de repouso, os ditos estáticos e os dinâmicos. O ângulo de repouso estático pode ser definido como a inclinação de uma pilha que

se aproxima do formato cônico formada por sólidos dispersos e não compactados, sendo tal pilha originada depois que os sólidos escoaram de um funil acima de uma superfície plana.

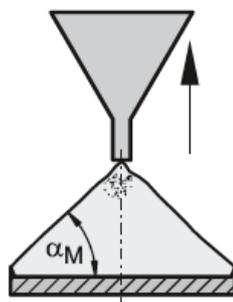


Figura 30: Ângulo de repouso α_M formado após os sólidos escorrerem pelo funil (SCHULZE, 2008).

Alguns pesquisadores relacionam o ângulo de repouso do material com a sua capacidade de fluidização, assim, para ângulos menores de 30° indica boa fluidez; entre 30° e 45° alguma coesão; de 45° a 55° coesão considerável e acima de 55° coesão elevada e fluidez muito limitada (GELDART et. al., 2006).

Não foi encontrada na literatura a medição do ângulo de repouso do bagaço de cana úmido, porém, o ângulo de repouso de outras biomassas semelhantes ao bagaço, como as partículas de palha de milho, foi determinado em laboratório. Logo, este trabalho utilizará o valor do ângulo de repouso estático determinado em base livre por meio da pilha formada por palha de milho úmida, com diâmetro médio geométrico de partícula de 3,2mm, cujo valor é de 45° , considerando que o bagaço úmido apresenta ângulo de repouso de valor semelhante (ILELEJI; ZHOU, 2008).

2.3 Modelagem matemática e simulação numérica de sistemas multifásicos

Antes de entrar no assunto modelagem propriamente dito é importante que se faça a introdução de alguns conceitos fluidodinâmicos básicos para um melhor entendimento dos termos utilizados.

Quando se estuda sistemas fluidodinâmicos, uma das primeiras observações a ser feita para o entendimento do problema em questão refere-se à determinação do número de fases que o mesmo apresenta.

É denominada fase cada um dos diferentes estados da matéria, ou seja, sólido, líquido e gasoso, que se diferenciam devido à intensidade das suas forças intermoleculares. Por outro lado, um componente se refere a uma espécie química, citando-se como exemplo o hidrogênio, oxigênio, nitrogênio, entre outros.

Assim, como exemplo, um sistema fluidodinâmico composto somente por ar no seu estado gasoso é dito como sendo de fase simples, apesar do ar se tratar de uma substância multicomponente.

Logo, ao se observar a presença de uma mistura de fases no sistema o denominamos de escoamento multifásico, portanto, bolhas de gás atravessando um líquido, gotas de líquido num gás, partículas sólidas em um gás, são alguns exemplos de fluxos multifásicos.

Num sistema multifásico um termo recorrente que é utilizado como indicador das concentrações de fases é a fração volumétrica. Define-se fração volumétrica como a razão de volume ocupada por cada fase, ou seja, a soma das frações volumétricas de todas as fases do escoamento deve ser igual à unidade.

Considerando agora a fluidização de partículas sólidas devido à interação com um gás, também denominado escoamento gás-sólido, o mesmo trata-se de um fluxo multifásico que inclui desde leitos fluidizados até sistemas de transporte pneumático, sendo este último o objeto de estudo do presente trabalho.

Assim, para um escoamento gás-sólido, a fase de transporte, ou contínuo, é a fase dominante em tal fluxo. A fase dispersa é a fase carregada pelo contínuo, sendo influenciada pelo comportamento da fase gasosa. Em suma, num fluxo gás-sólido a fase gasosa é a fase de transporte e as partículas em suspensão a fase dispersa.

Dependendo da escala em que o sistema fluido-partícula é analisado pode-se sugerir diferentes combinações de modelos. Tais modelos foram definidos por Tsuji (2007) como micro-, meso- e macro escala.

No modelo dito microescala, as trajetórias das partículas individuais são calculadas por meio do equacionamento do movimento destas, sendo a escala de comprimento do fluido a mesma da partícula ou até mesmo menor. Costuma-se utilizar tal abordagem para os casos em que a força inercial das partículas é relativamente pequena, por exemplo, no fluxo de partículas em meio líquido, ou no caso do efeito lubrificante do fluido sobre as partículas ser bastante significativa.

No modelo dito meso escala tanto as fases sólida como fluido são consideradas como contínuo interpenetrante. Tal modelo é o mais presente na maioria dos pacotes de

softwares comerciais de simulação fluidodinâmica computacional, sendo utilizado com sucesso para obtenção do comportamento do fluxo multifásico, com ou sem reação, em escalas de laboratório, piloto e industrial.

No modelo macro escala, a escala de comprimento do fluido está na ordem do campo de fluxo, significando que os movimentos do fluido e do conjunto de partículas são tratados em uma dimensão. A principal saída de tal modelo é a queda de pressão, que é a soma das quedas de pressões devido ao fluxo de fluido e partículas. Em geral, utiliza-se para essa abordagem uma única equação para o fluxo de fase única, como a de Darcy-Weisbach, usada para a queda de pressão do fluido tal que as partículas sejam balanceadas com a equação de arraste do fluido no balanço de momento. Este modelo costuma ser utilizado para modelar leitos fluidizados onde as equações de conservação são escritas para bolhas e emulsões, ambas com a escala de comprimento do sistema (MOSTOUFI et al., 2016).

Existe ainda a possibilidade de desenvolvimento de alguns modelos intermediários em que a escala de tamanho do fluido e da fase sólida são diferentes. Como exemplo, pode-se ter um modelo que aborda a fase sólida em microescala e a fase fluido em macro ou meso escala. Nestas condições as interações que afetam a escala maior são calculadas pela média das informações obtidas na escala menor (MOSTOUFI et al., 2016).

O foco deste estudo foi a abordagem meso-micro, ou seja, o fluido em meso escala e a partícula em microescala. Tal abordagem é também conhecida como CFD-DEM (*Computational Fluid Dynamics – Discrete Element Method*), onde o campo de fluxo é dividido em volumes de controle de tamanho maior que a partícula, mas ainda menor que tal campo. O efeito de movimento das partículas no fluxo de fluido é considerado por meio da avaliação da fração volumétrica de cada fase e pela mudança de momento devido à força de arraste (MOSTOUFI et al., 2016).

A Figura 31 fornece uma visão geral das diversas possibilidades de modelar um sistema sólido-fluido variando a escala de análise.

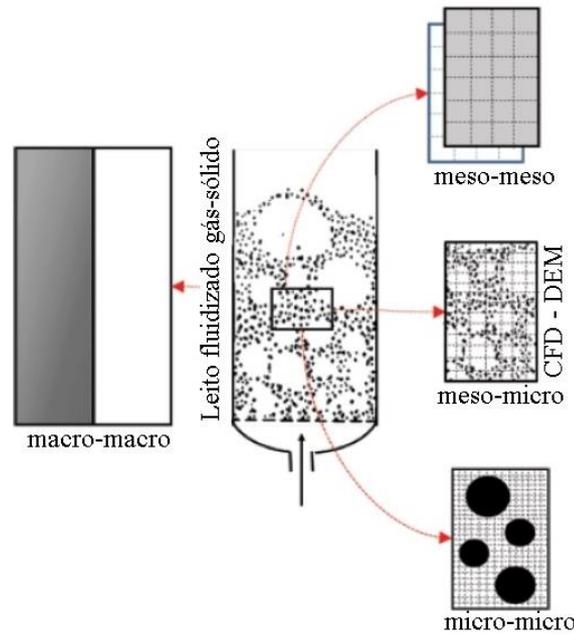


Figura 31: Diferentes escalas de modelagem para um sistema gás-sólido. (adaptado de MOSTOUFI et al., 2016)

Simplificadamente, são utilizadas basicamente duas abordagens para a simulação de sistemas multifásicos, ditas contínua e discreta. Na abordagem contínua aceitam-se os modelos Euleriano misto e Euleriano-Euleriano. Já na abordagem discreta é utilizado o modelo Euleriano-Lagrangiano (MANNINEN et al., 1996).

O modelo Euleriano misto considera que as duas fases atuam como um fluido misto com um único conjunto de propriedades fluidas com base na mistura multifásica. A vantagem dessa modelagem é que se reduz o conjunto de equações que descrevem o escoamento como se o mesmo fosse um fluxo monofásico (MANNINEN et al., 1996).

As desvantagens, no entanto, quando se trata de um sistema gás-sólido, são devido ao fato de que se deve atribuir propriedades de fluido ao sólido e o modelo é somente preditivo no caso das características do fluxo permanecerem uniformes, por exemplo, se houver separação insignificante das fases no fluxo. Quando a separação de partículas é importante o uso do modelo Euleriano misto é insuficiente para predição do fenômeno (GENT, 2009).

Já o modelo Euleriano-Euleriano assume que tanto a fase de transporte como a fase dispersa são escoamentos contínuos. Como exemplo do uso desta abordagem, a mesma foi empregada na simulação de secagem pneumática, conforme o trabalho de Silva (1991).

O modelo Euleriano-Lagrangeano trata a fase gasosa como um fluido Euleriano e a fase dispersa é modelada por meio de uma abordagem Lagrangeana, ou seja, acompanhando a trajetória de cada partícula (TSUJI et al., 1992).

Até poucos anos a abordagem contínua era a mais indicada para aplicações industriais que utilizam uma grande quantidade de sólidos no processo pelo fato de que o modelo discreto, que é mais acurado que o modelo contínuo, era restrito a um número relativamente pequeno de partículas devido a limitações computacionais para os cálculos. Na atualidade tais limitações vêm sendo superadas com o passar dos anos com o desenvolvimento do poderio computacional (GENT, 2009).

Em suma, os diferentes modelos para predição do fluxo gás-sólido podem ter várias abordagens que se diferenciam principalmente na maneira como tratam a interação partícula-partícula e o método numérico para resolução das equações. Cada modelo tem suas vantagens e limitações e devem ser escolhidos de acordo com os fatores que são priorizados (MOSTOUFI et al., 2016).

O modelo Euleriano-Euleriano para fluxos granulares é também denominado modelo de dois fluidos (TFM- *Two Fluid Model*). Já o modelo Euleriano-Lagrangeano pode ser dividido em: *Discrete Phase Model* (DPM); *Dense Discrete Phase Model* incorporado com *Kinetic Theory of Granular Flow* (DDPM-KTGF); *Computational Fluid Dynamics* acoplado ao *Discrete Element Method* (CFD-DEM); esquema numérico de fluidodinâmica computacional incorporado a *Multiphase - Particle in Cell* (MP-PIC).

A Figura 32 apresenta um diagrama resumindo os modelos que podem ser utilizados para simular um fluxo granular multifásico (MOSTOUFI et al., 2016).

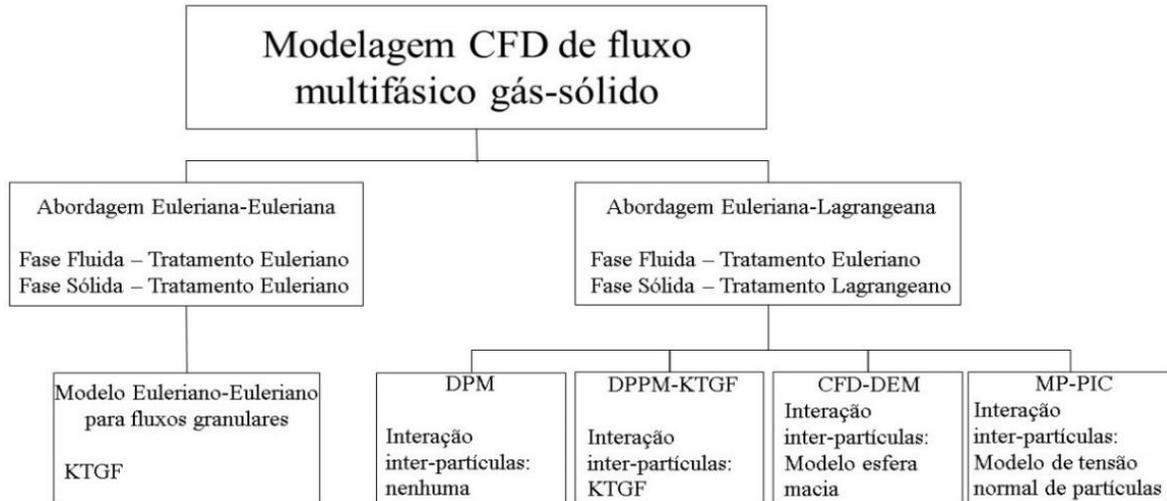


Figura 32: Possibilidades de modelos para descrição de fluxos gás-sólido no transporte pneumático. (adaptado de MANJULA et al., 2017)

A seguir serão descritos com maiores detalhes os modelos Euleriano-Euleriano e Euleriano-Lagrangeano, com ênfase para o modelo CFD-DEM.

2.3.1 Abordagem Euleriana-Euleriana

Nessa abordagem, o modelo costuma ser obtido através da utilização do procedimento das médias de Euler, constituindo uma das principais formulações das equações de campo macroscópicas para um sistema bifásico (BLAZEK, 2001). Os primeiros autores a apresentarem um equacionamento para um sistema fluido-particulado foram Anderson e Jackson (1967).

Nesse tipo de modelo, a fase particulada é tratada como contínua e interage com a fase gasosa, também tratada como contínuo. O problema dessa abordagem reside na sua difícil aplicação, uma vez que, o escoamento gás-sólido apresenta interfaces que separam as fases. Existindo, portanto, a interação entre as fases, surgem nas equações de campo termos referentes a essa interação, que especificam o transporte de massa, quantidade de movimento e energia através da interface (BLAZEK, 2001).

Ainda com relação à interação entre fases, na simulação multifásica utilizando a abordagem Euleriana-Euleriana dentre as diversas forças interfaciais que podem ocorrer no modelo, tais como, força de arraste, força de sustentação, força de massa virtual, entre outras, apenas a força de arraste costuma ser considerada. Isto porque nas equações de escoamentos de

duas fases a diferença de densidades entre as fases é muito grande, o que torna as demais forças interfaciais insignificantes.

Pode-se representar a força de arraste atuando sobre uma partícula num escoamento gás-fluido como sendo o produto do coeficiente de transferência da quantidade de movimento pela velocidade de deslizamento entre as fases.

Diversos trabalhos foram realizados ao longo dos anos com o intuito de estudar as correlações existentes para determinação do coeficiente de arraste na interface, citando alguns como Gidaspow (1994), Almstedt et al. (1996) e Ishii e Hibiki (2011).

As equações de Navier-Stokes que serão apresentadas na sequência tratam tanto a fase dispersa como a fase transportadora por meio de uma abordagem Euleriana-Euleriana clássica. Reiterando, tais equações apresentam alguns termos que são devidos à interação entre fases, relacionados com o transporte de massa, quantidade de movimento e energia através da interface. Além disso, na simulação computacional o conjunto das equações de continuidade e momento são acoplados de tal forma que a soma das frações volumétricas de todas as fases seja igual à unidade para cada célula computacional.

A conservação de massa da fase gasosa é dada pela equação 29.

$$\frac{\partial f_g \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (f_g \rho_f v_g) = 0 \quad (29)$$

Onde, f_g representa a fração volumétrica da fase gasosa;

ρ_f é a densidade da fase gasosa [kg.m^{-3}];

v_g é a velocidade média local da fase gasosa [m/s];

Para a fase sólida, a mesma pode ser formada por diversos grupos de partículas, cada um com uma massa m , sendo que a soma das massas de todos os grupos da fase sólida fornece a massa total M no escoamento. Deste modo, para cada massa m tem-se a conservação de massa descrita na equação 30.

$$\frac{\partial f_{pm} \rho_{pm}}{\partial t} + \nabla \cdot (f_{pm} \rho_{pm} v_{pm}) = 0 \quad (30)$$

Onde, f_{pm} representa a fração volumétrica da fase sólida de massa m ;

ρ_{pm} é a densidade das partículas de massa m [kg.m^{-3}];

v_{pm} é velocidade média local da fase sólida de massa m [m.s⁻¹];

A quantidade de momento da fase gasosa é dada pela equação 31.

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_g \rho_f v_g) + \nabla(f_g \rho_f v_g v_g) = \nabla \bar{\sigma}_g + f_g \rho_f g - F^{g-p} \quad (31)$$

Onde, f_g representa a fração volumétrica da fase gasosa;

ρ_f é a densidade da fase gasosa [kg.m⁻³];

v_g é a velocidade média local da fase gasosa [m.s⁻¹];

$\bar{\sigma}_g$ tensor de tensões para a fase gasosa [Pa];

g é a aceleração da gravidade [m.s⁻²];

F^{g-p} é a força de interação entre a fase sólida e gasosa [N.m⁻³];

O tensor de tensões da fase gasosa pode ser escrito conforme a equação 32.

$$\bar{\sigma}_g = -P_g \bar{U} + \bar{\tau}_g \quad (32)$$

Onde, $\bar{\sigma}_g$ tensor de tensões para a fase gasosa [Pa];

P_g é a pressão hidrostática da fase gasosa [Pa];

\bar{U} é o tensor unitário;

$\bar{\tau}_g$ é o tensor das tensões de cisalhamento do gás [Pa];

Para um fluido Newtoniano, o tensor de tensões viscosas pode ser modelado seguindo a relação tensão/deformação conforme a hipótese de Stokes:

$$\bar{\tau}_g = 2f_g \mu_g \bar{D}_g + f_g \lambda_g \text{tr}(\bar{D}_g) \bar{Q} \quad (33)$$

Onde, $\bar{\tau}_g$ é o tensor das tensões de cisalhamento do gás [Pa];

f_g representa a fração volumétrica de da fase gasosa;

μ_g é a viscosidade dinâmica do gás [kg.m⁻¹.s⁻¹];

\bar{D}_g é o tensor taxa de deformação [s⁻¹];

λ_g é a viscosidade volumétrica do gás [kg.m⁻¹.s⁻¹];

tr é o operador traço da matriz;

$\bar{\bar{U}}$ é o tensor unitário;

O tensor taxa de deformação, $\bar{\bar{D}}_g$, pode ser escrito conforme a equação 34.

$$\bar{\bar{D}}_g = \frac{1}{2} [\nabla v_g + (\nabla v_g)^T] \quad (34)$$

Onde, $\bar{\bar{D}}_g$ é o tensor taxa de deformação [s^{-1}];

v_g é a velocidade média local da fase gasosa [m/s];

T é a transposta do tensor;

Para o termo F^{g-p} , referente à força de interação entre as fases gasosa e sólida, presente na equação da quantidade de movimento da fase gasosa pode-se simplificá-lo considerando apenas o arrasto como força relevante.

Dessa forma, o termo F^{g-p} pode ser escrito conforme a equação 35.

$$F^{g-p} = -\beta_{gm} (v_{pm} - v_g) \quad (35)$$

Onde, F^{g-p} é a força de interação entre a fase sólida e gasosa [$N.m^{-3}$];

β_{gm} é o termo de arraste na interface;

v_{pm} é a velocidade média local da fase sólida [$m.s^{-1}$];

v_g é a velocidade média local da fase gasosa [$m.s^{-1}$];

Existem algumas correlações na literatura para a determinação do termo β_{gm} como, por exemplo, aquelas propostas por Wen e Yu (1966) e O'Brien et al. (1993). No entanto, tratando-se de um escoamento diluído, a mudança mais significativa nas correlações diz respeito ao coeficiente de arraste (C_d) presente nas mesmas. Diversos autores propuseram correlações para determinação do coeficiente de arraste (C_d) e que podem ser testadas para verificação da validade do modelo, citando alguns, tais como, Clift et al. (1978), Haider e Levenspiel (1989), Yang (2003) e Agarwal e Chhabra (2007).

Por fim, a equação de momento para os sólidos dispersos é aplicada a todo domínio fluido conforme a equação 36.

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_{pm} \rho_{pm} v_{pm}) + \nabla (f_{pm} \rho_{pm} v_{pm} v_{pm}) = \nabla \bar{\sigma}_{pm} + f_{pm} \rho_{pm} g - F^{g-p} - \sum_{m=1, l \neq m}^M Q_{ml} \quad (36)$$

Onde, f_{pm} representa a fração volumétrica da fase sólida de massa m ;
 ρ_{pm} é a densidade da fase sólida de massa m [kg.m^{-3}];
 v_{pm} é a velocidade média local da fase sólida de massa m [m/s];
 $\bar{\sigma}_{pm}$ tensor de tensões para a fase sólida [Pa];
 g é a aceleração da gravidade [m.s^{-2}];
 F^{g-p} é a força de interação entre a fase sólida e gasosa [N.m^{-3}];
 Q_{ml} é a transferência de quantidade de movimento entre as fases sólidas [N.m^{-3}];

Neste caso o termo do tensor de tensões da fase sólida é representado pela combinação de duas relações constitutivas, onde uma delas é utilizada quando ocorre escoamento denso e a outra para o escoamento diluído. O ponto crítico que define a utilização de uma ou outra é a fração volumétrica de vazios na mínima fluidização (O'BRIEN et al., 1993).

$$\bar{\sigma}_{pm} = \begin{cases} -P_{pm}^{pl} \bar{U} + \bar{\tau}_{pm}^{pl} & \text{se } f_g \leq f_g^* \\ -P_{pm}^v \bar{U} + \bar{\tau}_{pm}^v & \text{se } f_g > f_g^* \end{cases} \quad (37)$$

Onde, $\bar{\sigma}_{pm}$ tensor de tensões para a fase sólida [Pa];
 P_{pm} é a pressão da fase sólida [Pa];
 \bar{U} é o tensor unitário;
 $\bar{\tau}_{pm}$ é o tensor das tensões viscosas para a fase sólida [Pa];
 f_g é a fração volumétrica da fase gasosa;
 f_g^* é a fração de vazio na mínima fluidização;
 pl é o sobrescrito usado no regime plástico;
 v é o sobrescrito usado no regime viscoso;

Nos trabalhos de Lun et al. (1984), Jenike (1987), Schaeffer (1987) e O'Brien et al. (1993) podem ser encontradas as formulações necessárias para os cálculos das pressões e tensões, tanto no regime plástico como viscoso, da fase sólida.

Com relação ao termo da transferência de quantidade de movimento entre as fases sólidas, Q_{ml} , o mesmo pode ser escrito segundo a equação 38.

$$Q_{ml} = -\beta_{pml}(v_{pl} - v_{pm}) \quad (38)$$

Onde, Q_{ml} é a transferência de quantidade de movimento entre as fases sólidas [N.m⁻³]

β_{pml} é o termo referente ao arraste entre partículas [kg.m⁻³.s⁻¹];

v_{pl} é a velocidade média local da l-ésima fase sólida [m.s⁻¹];

v_{pm} é a velocidade média local da m-ésima fase sólida [m.s⁻¹];

Neste caso pode ser utilizada uma versão simplificada da teoria cinética utilizada por Syamlal (1987) para representar o termo β_{pml} conforme a equação 39.

$$\beta_{pml} = \frac{3(1+e_{ml})(\pi/2 + C_{fml}\pi^2/8)f_{pl}\rho_{pl}f_{pm}\rho_{pm}(d_{pl}+d_{pm})^2 g_{0ml}|v_{pl}-v_{pm}|}{2\pi(\rho_{pl}d_{pl}^3 + \rho_{pm}d_{pm}^3)} \quad (39)$$

Onde, β_{pml} é o termo referente ao arraste entre partículas [kg.m⁻³.s⁻¹];

e_{ml} é o coeficiente de restituição para colisão entre partículas sólidas;

C_{fml} é o coeficiente de fricção entre as fases sólidas;

f_p representa a fração volumétrica da fase sólida;

ρ_p é a densidade da fase sólida [kg.m⁻³];

g_{0ml} é a função de distribuição radial;

v_p é a velocidade média local da fase sólida [m.s⁻¹];

d_p é o diâmetro da partícula [m];

Segundo Lebowitz (1964), a função de distribuição radial pode ser representada pela equação 40.

$$g_{0ml} = \frac{1}{f_g} + \frac{3d_{pl}d_{pm}}{f_g^2(d_{pl}+d_{pm})} \sum_{j=1}^M \frac{f_{pj}}{d_{pj}} \quad (40)$$

Onde, g_{0ml} é a função de distribuição radial;

f_g representa a fração volumétrica da fase gasosa;

f_p representa a fração volumétrica da fase sólida;

d_p é o diâmetro da partícula [m];

Apesar dos modelos de fluidodinâmica computacional conseguirem resolver muitos problemas envolvendo fluxos multifásicos, sua capacidade é limitada, sendo que problemas com fases particuladas densas ou com múltiplas fases, em que o tamanho das partículas seja da ordem de milímetros, passa a não serem preditivos quando simulados por tal técnica. Para estes casos o ideal é adotar uma abordagem Euleriana-Lagrangeana.

2.3.1.1 Método numérico de resolução do modelo Euleriano

Os principais métodos numéricos são o método dos volumes finitos, das diferenças finitas e dos elementos finitos. A escolha do método numérico apropriado é muito importante uma vez que dependendo do método utilizado pode-se obter resultados não físicos e não preditivos quando comparados aos resultados experimentais.

Dentre os métodos citados, o dos volumes finitos apresenta algumas vantagens destacando que a discretização espacial é realizada diretamente no espaço físico sendo um método muito flexível, podendo ser aplicado a malhas estruturadas ou não estruturadas. Denomina-se malha ao conjunto de volumes de controle presentes em um sistema, onde as malhas estruturadas possuem uma numeração sequencial fixa para cada volume em relação ao seu vizinho, sendo que na malha não-estruturada tal numeração é aleatória (FERZIGER; PERIC', 2002).

O método dos volumes finitos foi aplicado pela primeira vez por McDonald (1971) para a simulação em duas dimensões de fluidos invíscidos. No caso da resolução de problemas multifásicos, o método dos volumes finitos, proposto por Patankar (1980), é adequado devido ao seu caráter conservativo.

O primeiro passo para utilização do método dos volumes finitos é dividir o domínio de interesse em diversos volumes de controle. As células, ou volumes de controle, devem ser pequenas o suficiente para a captura das principais características do fluxo, e grandes o suficiente, de preferência maiores que o tamanho da maior partícula individual, que permita o cálculo das propriedades médias, tais como porosidade, interações, etc, em cada célula.

Tal método discretiza as equações governantes, dividindo o espaço físico em vários volumes de controle poliédricos arbitrários.

Para um melhor entendimento do método dos volumes finitos, os termos da equação de transporte serão definidos por unidade de volume e tempo como:

- ϕ a propriedade específica (grandeza/unidade de massa);
- $\rho\phi$ a grandeza por unidade de volume;
- $\frac{\partial}{\partial t}\rho\phi$ a taxa de variação da grandeza por unidade de volume;
- \vec{J} representa o escoamento da grandeza devido à convecção e condução;

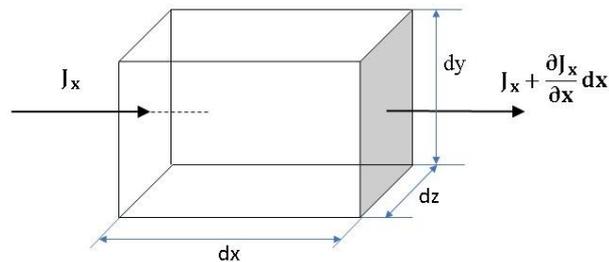


Figura 33: Balanço de fluxos em um volume de controle.

No volume de controle representado na Figura 33 tem-se:

- Taxa de variação de grandeza por unidade de volume: $\frac{\partial}{\partial t}\rho\phi$;
- Fluxo líquido através da área $dx dy = \frac{\partial J_x}{\partial x} dx dy dz$;
- Fluxo líquido através do volume: $\frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z} = \text{div} \vec{J} \equiv (\nabla \cdot \vec{J})$
- Taxa de geração/distrução por unidade de volume: S_ϕ ;

Assim, de acordo com o princípio da conservação tem-se a expressão:

$$\text{Acúmulo} + \text{Efluxo líquido} = \text{Geração / Distrução} \quad (41)$$

Reescrevendo, a expressão 41 fica:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \text{div} \vec{J} = S_\phi \quad (42)$$

O fluxo total pode ser escrito como:

$$\vec{J} = \underbrace{(\rho \vec{v})\phi}_{\text{convecção}} + \underbrace{[-\Gamma \text{grad}\phi]}_{\text{difusão}} \quad (43)$$

Substituindo a equação 43 na equação 42 obtém-se:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)}_{\text{acúmulo}} + \underbrace{\text{div}(\rho\vec{v})\phi}_{\text{convecção}} = \underbrace{\text{div}([- \Gamma \text{grad}\phi])}_{\text{difusão}} + \underbrace{S_\phi}_{\text{geração/destruição}} \quad (44)$$

Por meio da aproximação das somas dos fluxos que cruzam as faces individuais do volume de controle as equações vão sendo resolvidas, provenientes do balanço infinitesimal de uma propriedade ϕ , como por exemplo, massa, quantidade de movimento, energia, etc, representando o princípio físico da conservação da propriedade em questão. A acurácia da discretização espacial depende do esquema particular com que os fluxos são avaliados (MALISKA, 2004).

Em suma, as equações discretizadas são as integrais das equações de conservação sobre os volumes de controle. As fases, sólida e gás, são consideradas como contínuos interpenetrantes que compartilham espaço em cada volume de controle. As equações discretizadas em conjunto com as condições iniciais e de contorno são resolvidas simultaneamente para que se obtenha a solução convergida. O acoplamento das equações governantes para cada fase se dá pela mudança de momento na interface e pela condição de fração volumétrica, a qual requer que o somatório das frações volumétricas de cada fase seja igual à unidade (MALISKA, 2004).

Porém, a resolução das equações governantes em problemas que envolvam o escoamento de fluidos não é trivial devido principalmente à não linearidade das equações de conservação de quantidade de movimento. Assim, de modo a linearizar a equação discretizada para contornar tal problema são propostos alguns métodos, sendo um dos mais aceitos aquele em que são combinadas as equações de continuidade e de quantidade de movimento com o intuito de obter uma equação para a pressão do escoamento (MALISKA, 2004).

Dentre alguns métodos que se valem do princípio do acoplamento velocidade-pressão, aquele que costumeiramente se aplica é o dito método SIMPLE, introduzido por Patankar (1980).

O método SIMPLE foi inicialmente desenvolvido para escoamentos monofásicos, logo, sua utilização em escoamentos multifásicos causa dificuldades de convergência do processo iterativo. Dessa maneira, faz-se necessário a realização de algumas modificações do mesmo quando utilizado em escoamentos multifásicos. (O'BRIEN et al., 1993)

Uma opção para acelerar a taxa de convergência em escoamento multifásico é corrigir a fração volumétrica da fase sólida por meio da utilização de uma nova equação. Já para a fase fluida utiliza-se uma equação de correção da pressão, de tal modo que a compressibilidade do fluido possa ser calculada diretamente, permitindo assim, a melhora considerável da convergência do algoritmo (van der HOEF et al., 2006).

O algoritmo simplificado do método SIMPLE para resolução de um problema de escoamento multifásico pode ser resumido na sequência de passos apresentada:

- Passo 1: São calculadas as propriedades físicas, os coeficientes de transferência e as taxas de reações;
- Passo 2: São calculados campos de velocidades estimados, baseados nos campos de pressão atual (P_g^*);
- Passo 3: A pressão da fase fluida é corrigida (p_g')
- Passo 4: O campo de pressão da fase fluida é atualizado por meio da equação $p_g = p_g^* + \gamma_{pg} p_g'$. O termo γ_{pg} representa um fator de sub-relaxação.
- Passo 5: São calculadas as correções dos campos de velocidade da fase fluida a partir da correção de pressão calculada no passo 3, e os campos de velocidade são atualizados, $v_g = v_g^* + \gamma_{vg} v_g'$;
- Passo 6: São calculados os gradientes de pressão que serão utilizados na equação de correção da fração volumétrica da fase sólida;
- Passo 7: É calculada a correção da fração volumétrica da fase sólida, f_p' .
- Passo 8: As frações volumétricas da fase sólido são atualizadas, $f_p = f_p^* + \gamma_{fp} f_p'$;
- Passo 9: As velocidades das fases sólidas são corrigidas e atualizadas, $v_p = v_p^* + \gamma_{vp} v_p'$;
- Passo 10: São calculadas as frações de vazios, $f_g = 1 - \sum_{m=1}^M f_{pm}$;
- Passo 11: É calculada a pressão da fase sólida;
- Passo 12: São calculados os campos de temperatura e de fração mássica das espécies químicas, quando se aplica;
- Passo 13: Nessa etapa é analisada a convergência do procedimento, por meio da avaliação dos resíduos calculados nos passos 2, 3, 5 e 9. Caso o critério de convergência não tenha sido estabelecido as iterações continuam a partir do passo 2. No caso de ter havido a convergência, para o próximo passo de tempo o procedimento é repetido a partir do passo 1.

Os coeficientes de sub-relaxação (γ_{pg} , γ_{vg} , γ_{fp} , γ_{vp}), utilizados nas atualizações das grandezas, se fazem necessários para que sejam evitadas divergências durante o procedimento iterativo (PATANKAR, 1980).

Detalhes do algoritmo da resolução utilizando o método SIMPLE, bem como das equações de discretização em escoamento multifásico e aquelas de correções do método podem ser consultados nos trabalhos de Patankar (1980), Darteville (2005), Versteeg e Malalasekera (2007) e Jakobsen (2008).

2.3.2 Abordagem Euleriana-Lagrangeana

Com o crescente desenvolvimento de poderosas máquinas e técnicas de simulação têm-se difundido a utilização de modelos Eulerianos-Lagrangeanos para modelagem de sistemas particulados.

Os pioneiros na abordagem discreta de sistemas particulados, através da introdução do método da dinâmica molecular como uma metodologia de estudo do comportamento macroscópico de partículas, foram Alder e Waingwright (1957). Quando as técnicas de dinâmica molecular são adaptadas para modelos discretos de partículas incluindo as interações partícula-partícula tal abordagem passa a se chamar método dos elementos discretos, sendo que o trabalho de Cundall e Strack (1979) foi um dos pioneiros a apresentar o desenvolvimento de tal método considerando o modelo esfera-macia que será abordado em detalhes na sequência. Com o passar do tempo surgiram trabalhos que combinavam o método dos elementos discretos com modelos de simulação da fase fluida, como os trabalhos de Ormancey e Martinon (1984), Berlemont et al. (1990) e Tsuji (1992). Destacando o estudo de Tsuji (1992), o mesmo utilizou uma modificação do modelo de Cundall e Strack (1979) para simular o fluxo pistonado, sem coesão, de partículas esféricas em um duto horizontal. Nesse caso, foi levada em consideração no modelo a influência da fase fluida sobre as partículas e pode-se afirmar que foi um dos estudos do acoplamento CFD-DEM mais relevantes reportados na literatura por permitir a partir deste que outros autores desenvolvessem diversos outros estudos utilizando metodologia similar.

A seguir são apresentados os fundamentos básicos do método dos elementos discretos, bem como, considerações sobre seu acoplamento com modelos de fluidodinâmica computacional.

2.3.2.1 Método dos Elementos Discretos (DEM)

Uma definição para o Método dos Elementos Discretos seria uma ferramenta de modelagem que permite o estudo da dinâmica de um grande número de corpos distintos e com formas arbitrárias.

O Método dos Elementos Discretos modela a força total experimentada por partículas individuais ou grão de um sistema granular e em seguida lista suas acelerações, velocidades e posições em um período de tempo. A força total é a soma das forças de contato (partícula-partícula e partícula-paredes) e das forças de não contato (tais como as forças gravitacional, magnetismo e eletrostática) (LAÍN; SOMMERFELD, 2013). A interação entre partículas pode ocorrer através de suas áreas de contato ou efeitos interpartícula.

Na modelagem DEM as partículas podem ser consideradas como sendo rígidas ou deformáveis, duas formulações quanto ao tipo de colisão, ditos modelos de esfera-rígida e de esfera-macia, embora tais formulações não sejam restritas apenas a esferas (MOSTOUFI et al., 2016).

A escolha do modelo apropriado vai depender das condições operacionais e dos recursos computacionais disponíveis.

O uso do modelo esfera-rígida é principalmente aplicado em um sistema diluído por ser eficaz em termos computacionais, mesmo que a modelagem utilizando esfera-macia também seja aplicável a tal situação. O fato do modelo esfera-rígida ser mais eficaz em termos computacionais para sistemas diluídos é devido ao tempo de contato entre cada corpo ser muito menor que o tempo médio entre colisões sucessivas, e, portanto, cada contato pode ser considerado instantâneo e em par (MOSTOUFI et al., 2016).

No caso de sistemas densos, devido aos longos tempos de contato e múltiplos contatos existentes entre partículas o modelo esfera-macia é mais adequado. Na sequência serão apresentadas algumas características principais de cada modelo (MOSTOUFI et al., 2016).

2.3.2.1.1 Modelo esfera rígida

O modelo esfera-rígida é aplicado a sistemas em que as colisões entre corpos não são muito longas e frequentes. Em tais sistemas os corpos trafegam livremente até que a próxima colisão ocorra. Assim, os novos estados, tais como posição e velocidade dos corpos não são avaliados até que ocorra a próxima colisão. As velocidades dos corpos são calculadas

baseadas nas velocidades pré-colisão através do estabelecimento da lei de conservação do momento (MOSTOUFI et al., 2016).

O equacionamento deste tipo de modelo considera que o tempo médio com que cada corpo trafega livremente é muito maior que a duração do contato. Assume-se também para este caso que os contatos são aos pares e não há múltiplos contatos, ou seja, ocorrem colisões binárias e instantâneas. Nesse caso, se verifica um ganho de velocidade de cálculos devido majoritariamente à eliminação de cálculos redundantes referentes ao estado do sistema, como aqueles da velocidade e da posição dos corpos, entre os sucessivos eventos (MOSTOUFI et al., 2016).

Os primeiros autores a utilizarem esse tipo de modelo foram Campbell e Brennen (1985) na simulação de sistemas granulares e a partir daí diversos outros trabalhos foram desenvolvidos utilizando modelos similares.

Para maiores detalhes de aspectos teóricos bem como da implementação desse tipo de modelo, pode-se consultar os trabalhos de Schwager e Poschel (2005), Link et al. (2007) e Nandakumar et al. (2010).

Em resumo, o modelo esfera-rígida é preditivo apenas para sistemas de fase diluída, assim, considerando que o modelo esfera-macia é também aplicável a tais sistemas e, além destes, aos sistemas fase densa e aos fluxos multifásicos em geral, um melhor detalhamento do mesmo será realizado nos próximos itens.

2.3.2.1.2 Modelo esfera-macia

Diferente do modelo de esfera rígida, as partículas nesse caso podem se sobrepor e seu contato permanece por um certo intervalo de tempo. Essa característica do modelo admite que ocorra o contato entre mais de uma partícula simultaneamente. O modelo esfera-macia também permite que se inclua outras forças na equação de movimento além das forças de contato partícula-partícula, tais como, forças interpartícula e de interação com o fluido, por meio da introdução de termos apropriados na equação de movimento (MOSTOUFI et al., 2016).

O equacionamento do modelo é realizado baseando-se em algumas considerações que são descritas a seguir (MOSTOUFI et al., 2016):

- Os corpos são deformáveis, porém, tal deformação é reversível uma vez que os mesmos retornam ao seu formato original após o contato;

- A interação entre corpos em contato ocorre via área de contato. A sobreposição entre corpos é muito pequena se comparada ao tamanho dos corpos;
- A sobreposição muda progressivamente com o tempo durante o contato, sendo uma função das propriedades físicas e velocidades de impacto dos corpos;
- A magnitude da força de contato entre partículas colidindo é obtida das leis de força-deslocamento. A força-deslocamento é uma função da sobreposição.

A obtenção da posição e velocidade das partículas se dá por meio de uma integração iterativa no tempo das equações do movimento para cada partícula individual. A princípio é assumido que as velocidades e acelerações, linear e angular, são constantes no passo de tempo. As novas posições e velocidades das partículas, e, portanto, as suas sobreposições, são calculadas pela integração da equação do movimento. Baseada nas novas sobreposições e no histórico de colisões de partículas, são calculadas as forças de colisão que atuam nas partículas. Em seguida, são calculadas as acelerações angular e linear das partículas e inicia-se uma nova iteração repetindo o processo (MOSTOUFI et al., 2016).

Sendo um processo iterativo, o passo de tempo da integração deve ser pequeno o suficiente para que uma onda de choque, gerada a partir da colisão, não se propague a uma distância muito longe das proximidades da partícula. Deste modo está garantido que as forças atuantes em uma partícula são devidas apenas à interação entre aquelas que estão em contato (MOSTOUFI et al., 2016).

O que define a velocidade de uma onda de choque propagando entre grupos de corpos sólidos são as propriedades físicas das partículas. Dessa forma é possível calcular o tempo que uma onda de choque passará pela vizinhança de um corpo conhecendo certas propriedades como o tamanho da partícula e a velocidade de propagação. Logo, a escolha de um passo de tempo menor que o tempo de propagação de uma onda de choque garantirá uma boa acurácia do modelo (MOSTOUFI et al., 2016).

A seguir são apresentadas as equações gerais do movimento para o modelo esfericidade.

A equação 45 refere-se à segunda Lei de Newton aplicada ao centro de massa de cada partícula (MOSTOUFI et al., 2016).

$$m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = m_i \frac{d^2\vec{x}_i}{dt^2} = \sum_{j \in LC_i} \vec{F}_{ij}^{p-p} + \vec{F}_i^{g-p} + \vec{F}_i^{ext} \quad (45)$$

Onde, m_i é a massa da partícula i [kg];

v_i é a velocidade da partícula i [m.s⁻¹];

x_i é o vetor posição da partícula i [m];

O termo $\sum_{j \in LC_i} \vec{F}_{ij}^{p-p}$ representa a soma das forças de interação partícula-partícula agindo na partícula i . Essas forças podem ser de colisão ou interpartícula, como as forças eletrostática e de van der Waals. A soma é realizada entre todas as forças que estão numa lista de contato da partícula i , LC_i . O termo \vec{F}_i^{g-p} refere-se à força de interação fluido-partícula. Tal termo é muito aplicado a fluxos multifásicos, em que as forças que atuam na partícula devido ao fluido, estão na mesma magnitude de outras forças de interação. Por fim o termo \vec{F}_i^{ext} representa todas as forças externas atuando na partícula i devido a campos externos uniformes ou não. Por exemplo, a força gravitacional devida ao campo gravitacional da Terra atuando sobre a partícula i (MOSTOUFI et al., 2016).

Também faz parte do modelo esfera-macia a segunda Lei de Euler do movimento para mudança de momento angular, dada pela equação 46 (MOSTOUFI et al., 2016).

$$I_i \frac{d\vec{\omega}_i}{dt} = I_i \frac{d^2\vec{\varphi}_i}{dt^2} = \sum_{j \in LC_i} \left(\vec{M}_{ij}^{tang} + \vec{M}_{ij}^{rot} \right) \quad (46)$$

Onde, I é o momento de inércia da partícula i [kg.m²];

ω_i é a velocidade rotacional da partícula i [rad/s];

$\vec{\varphi}_i$ é a posição angular da partícula i [rad];

Nesse caso, o termo \vec{M}_{ij}^{tang} é o torque tangencial produzido pela colisão partícula-partícula. A força de colisão partícula-partícula atuando no ponto de contato é a causadora de tal torque. Já o termo \vec{M}_{ij}^{rot} é referido como atrito de rolamento, que também é outro tipo de torque agindo na partícula i . Uma vez que tal torque se opõe ao rolamento da partícula, o mesmo também é conhecido como torque de resistência ao rolamento (MOSTOUFI et al., 2016).

Conclui-se da equação 46 que a velocidade angular da partícula i não se altera caso a mesma não esteja em contato com nenhuma outra partícula.

2.3.2.1.3 Expressões de torque

As partículas em contato também sofrem ação do torque, que pode ser decomposto em duas contribuições: o torque rotacional, que é causado pelos contatos interpartícula na direção tangencial, e o torque resistente ao rolamento, que aparece devido à desigualdade da distribuição da pressão de controle na área de contato (AI et al., 2011).

O torque rotacional causa a rotação da partícula, uma vez que a força de contato é transformada do ponto de contato para o centro de massa da partícula. Desse modo, o torque rotacional é definido conforme a equação 47 (AI et al., 2011).

$$\vec{M}_{ij}^t = r_i \vec{n}_{ij} \times \vec{F}_{ij}^c \quad (47)$$

Onde, \vec{M}_{ij}^t torque tangencial sobre a partícula i devido contato com a partícula j [N.m];

r_i raio da partícula i [m];

\vec{n}_{ij} vetor unitário que aponta da partícula i para a partícula j ;

\vec{F}_{ij}^c força de contato entre as partículas i e j [N];

Já o torque resistente ao rolamento costuma ser utilizado em situações onde é modelado um sistema pseudo-estático tal como camadas de cisalhamento, compressão confinada e penetração, tendo um papel de igual importância na simulação da formação de pilhas estáveis de partículas com um ângulo finito de repouso (AI et al., 2011).

Como o próprio nome sugere este torque resiste à rotação das partículas, sendo originado por diversas fontes, onde as mais importantes são a deformação plástica e a histerese viscosa (AI et al., 2011).

Exemplificando a importância da inclusão do torque resistente ao rolamento na modelagem de sistemas partículas é que, caso uma esfera fosse posta a rolar em uma superfície plana, sem considerar tal torque, a mesma continuaria em movimento rotacional interminavelmente.

Existem diversos modelos disponíveis na literatura para representação de tal torque, porém, aqueles que produzem efeitos realísticos mais efetivos são definidos pelas letras A, B e C, apresentados de forma sucinta na sequência (AI et al., 2011).

2.3.2.1.3.1 Modelo A: modelo de torque constante

Nessa categoria de modelos aplica-se um torque constante sobre a partícula para representar o atrito no rolamento. O torque é aplicado aos pares em cada partícula em contato, sendo a sua direção sempre contrária à rotação relativa entre os corpos em contato.

No modelo proposto por Zhou et al. (1999), para um caso bidimensional, o torque entre dois discos i e j em contato pode ser expresso pela Equação 48.

$$\vec{M}_{ij}^r = -\mu_r R_{eff} \left| \vec{F}_{ij}^n \right| \hat{\omega}_{ij} \quad (48)$$

Onde, \vec{M}_{ij}^r é o torque de resistência ao rolamento na partícula i devido ao contato com a partícula j [N.m];

μ_r é o coeficiente de resistência ao rolamento do modelo A;

R_{eff} é o raio efetivo [m];

\vec{F}_{ij}^n é a força de contato normal entre as partículas i e j [N];

$\hat{\omega}_{ij}$ é o vetor unitário da velocidade angular das partículas i e j ;

O vetor velocidade angular relativa é definido como na Equação 49.

$$\hat{\omega}_{ij} = \frac{\vec{\omega}_i - \vec{\omega}_j}{|\vec{\omega}_i - \vec{\omega}_j|} \quad (49)$$

Onde, $\hat{\omega}_{ij}$ é o vetor unitário da velocidade angular das partículas i e j ;

$\vec{\omega}_i$ é a velocidade rotacional da partícula i [rad.s⁻¹];

$\vec{\omega}_j$ é a velocidade rotacional da partícula j [rad.s⁻¹];

Neste modelo, não havendo mudança na força normal de contato, equação 48, um torque constante é aplicado sobre as partículas em colisão. O sinal negativo enfatiza que o torque se opõe ao movimento de rotação relativa da partícula.

2.3.2.1.3.2 Modelo B: modelo viscoso

Nos modelos tipo B, a velocidade angular é que determina a magnitude de resistência ao rolamento, segundo o modelo proposto por Zhuo et al. (1999), o torque resistente ao rolamento pode ser definido conforme a Equação 50.

$$\vec{M}_{ij}^r = -\mu_r' R_{\text{eff}} \left| \vec{F}_{ij}^n \right| \vec{V}_w |\hat{w}_{ij} \quad (50)$$

Onde, \vec{M}_{ij}^r é o torque de resistência ao rolamento na partícula i devido ao contato com a partícula j [N.m];

μ_r' é o coeficiente de resistência ao rolamento do modelo B [s.m⁻¹];

R_{eff} é o raio efetivo [m];

\vec{F}_{ij}^n é a força de contato normal entre as partículas i e j [N];

\vec{V}_w é a velocidade rotacional relativa no ponto de contato [m.s⁻¹];

\hat{w}_{ij} é o vetor unitário da velocidade angular das partículas i e j ;

A velocidade rotacional relativa entre partículas é definida como 51.

$$\vec{V}_w = (\vec{\omega}_i \times r_i \vec{n}_{ij} - \vec{\omega}_j \times r_j \vec{n}_{ji}) \quad (51)$$

Onde, \vec{V}_w é a velocidade rotacional relativa no ponto de contato [m.s⁻¹];

$\vec{\omega}_i$ é a velocidade rotacional da partícula i [rad.s⁻¹];

r_i é o raio da partícula i [m];

$\vec{\omega}_j$ é a velocidade rotacional da partícula j [rad.s⁻¹];

r_j é o raio da partícula j [m];

\vec{n}_{ij} é o vetor unitário apontando da partícula i para a partícula j ;

\vec{n}_{ji} é o vetor unitário apontando da partícula j para a partícula i ;

Esse tipo de modelo é mais realístico que os modelos tipo A pois, o mesmo leva em consideração o termo \vec{V}_w , que torna o torque igual a zero caso não haja rolamento entre partículas.

2.3.2.1.3.3 Modelo C: modelo elasto-plástico mola-amortecedor

Para este tipo de modelo, o torque de resistência ao rolamento é decomposto em dois componentes, que são: o torque mecânico da mola e o torque viscoso do amortecedor. Assim, o torque de resistência total ao rolamento é expresso conforme 52 (AI et al., 2011).

$$\vec{M}_{ij}^r = \vec{M}_{el}^r + \vec{M}_{diss}^r \quad (52)$$

Onde, \vec{M}_{ij}^r é o torque de resistência ao rolamento na partícula i devido ao contato com a partícula j [N.m];

\vec{M}_{el}^r é o torque de rolamento elástico [N.m];

\vec{M}_{diss}^r é o torque de rolamento viscoso [N.m];

O torque devido à mola é definido segundo um modelo de histerese, sendo que os cálculos para sua obtenção seguem um procedimento iterativo onde cada passo de tempo é calculado conforme a equação 53 (AI et al., 2011).

$$\vec{M}_{el,new}^r = \vec{M}_{el,old}^r + \Delta \vec{M}_{el}^r \hat{\omega}_{ij} \quad (53)$$

Onde, $\vec{M}_{el,new}^r$ é o torque de rolamento elástico no passo de tempo atual [N.m];

$\vec{M}_{el,old}^r$ é o torque de rolamento elástico no passo de tempo anterior [N.m];

$\Delta \vec{M}_{el}^r$ é a mudança incremental no torque de rolamento elástico [N.m];

$\hat{\omega}_{ij}$ é o vetor unitário da velocidade angular das partículas i e j ;

$\Delta \vec{M}_{el}^r$ é definido conforme a equação 54.

$$\Delta \vec{M}_{el}^r = -k_r \Delta \theta_r \quad (54)$$

Em que $\Delta \theta_r$ é a rotação relativa incremental entre duas partículas e k_r é a rigidez do rolamento.

Existe, no entanto, uma limitação no torque da mola, quando $|\vec{M}_{el,new}^r| > M_r^m$ ocorre a completa mobilização e o torque elástico é calculado segundo a equação 55 (AI et al., 2011).

$$|\vec{M}_{el,new}^r| = M_r^m \quad (55)$$

Onde, M_r^m é o torque de mobilização, sendo definido como a equação 56.

$$M_r^m = \mu_r'' R_{eff} |\vec{F}_{ij}^n| \quad (56)$$

Onde, μ_r'' é o coeficiente de resistência ao rolamento do modelo C;
 R_{eff} é o raio efetivo [m];
 \vec{F}_{ij}^n é a força de contato normal entre as partículas i e j [N];

Com relação ao torque de amortecimento viscoso o mesmo é dependente da taxa de mudança na rotação relativa entre duas partículas em contato, $d\theta_r/dt$, e da constante de amortecimento viscoso, C_r :

$$\vec{M}_{diss}^r = \begin{cases} - \left(C_r \frac{d\theta_r}{dt} \right) \hat{\omega}_{ij} & p/ \quad |\vec{M}_{el,new}^r| < M_r^m \\ - \left(\xi C_r \frac{d\theta_r}{dt} \right) \hat{\omega}_{ij} & p/ \quad |\vec{M}_{el}^r| = M_r^m \end{cases} \quad (57)$$

O termo ξ é uma constante utilizada para descrever o quanto de energia é dissipada devido ao amortecimento durante a completa mobilização da partícula. Quando ξ assume o valor zero significa que nenhuma energia é dissipada. No caso de assumir o valor unitário, a energia é dissipada durante o período de rolamento completo. A constante de amortecimento, C_r , é definida como a equação 58 (AI et al., 2011).

$$C_r = \eta_r (2\sqrt{I_r k_r}) \quad (58)$$

Onde, η_r é a relação de amortecimento viscosa do torque de rolamento;
 I_r é o momento de inércia equivalente [kg.m²];

k_r é a rigidez da mola resistente ao rolamento [N.m];

I_r é calculado segundo a equação 59.

$$I_r = \left(\frac{1}{I_i + m_i r_i^2} + \frac{1}{I_j + m_j r_j^2} \right) \quad (59)$$

Onde, I_i e I_j são os momentos de inércia das partículas i e j , respectivamente [kg.m²];

m_i e m_j são as massas das partículas i e j , respectivamente [kg];

r_i e r_j são os raios das partículas i e j , respectivamente [m];

O modelo do tipo C é o mais realístico quando comparado com os modelos do tipo A e B sendo, em geral, o modelo de torque resistente ao rolamento mais aplicado a fluxos quase-estático e granular dinâmico (AI et al., 2011).

2.3.2.1.4 Leis da força-deslocamento

As leis da força-deslocamento são modelos utilizados para calcular as propriedades de colisão entre partículas em função das sobreposições normal e tangencial, propriedades físicas e histórico de colisões (MOSTOUFI et al., 2016).

Um modelo detalhado para a descrição da colisão entre partículas é muito difícil de ser implementado, além disso, o mesmo se torna impraticável considerando sistemas com milhares de partículas interagindo (MOSTOUFI et al., 2016).

Desse modo, são assumidas algumas simplificações no modelo de modo que os esforços computacionais de cálculos sejam reduzidos, mas ainda assim mantendo a acurácia a níveis aceitáveis (MOSTOUFI et al., 2016).

Atualmente existem muitas leis de força-deslocamento que foram desenvolvidas para serem aplicadas em dinâmica molecular e no método dos elementos discretos. De modo geral, tais leis podem ser classificadas em duas categorias que são os modelos de força-deslocamento potencial contínuo e de força-deslocamento não contínuo (MOSTOUFI et al., 2016).

O modelo força-deslocamento potencial contínuo é principalmente aplicado em dinâmica molecular e sua característica é apresentar força zero tanto no início como no final da colisão, o que é fisicamente não realístico para fluxos granulares (MOSTOUFI et al., 2016).

Já o modelo não contínuo apresenta força repulsiva igual a zero somente caso não esteja havendo contato físico entre as partículas, sendo que tal condição aproxima o modelo para a realidade de materiais granulares (MOSTOUFI et al., 2016).

Os modelos não contínuos podem ser categorizados em muitos outros grupos, destacando os modelos viscoelástico linear, viscoelástico não-linear, elastoplástico, entre outros (MOSTOUFI et al., 2016).

Previamente à descrição do modelo se faz necessário uma breve descrição das principais forças que atuam na colisão entre partículas considerando a sobreposição. Para facilitar o entendimento será utilizada a Figura 34. Em tal figura, as posições dos centros das partículas i e j são representadas pelos termos \vec{x}_i e \vec{x}_j respectivamente, e sabendo-se que as partículas apresentam como dimensões os respectivos raios r_i e r_j , a sobreposição normal das partículas, δ_n , é definida como pela equação 60 (MOSTOUFI et al., 2016).

$$\delta_n = r_i + r_j - |\vec{x}_i - \vec{x}_j| \quad (60)$$

Logo, deduz-se que sempre que $\delta_n > 0$ existe o contato físico entre as partículas.

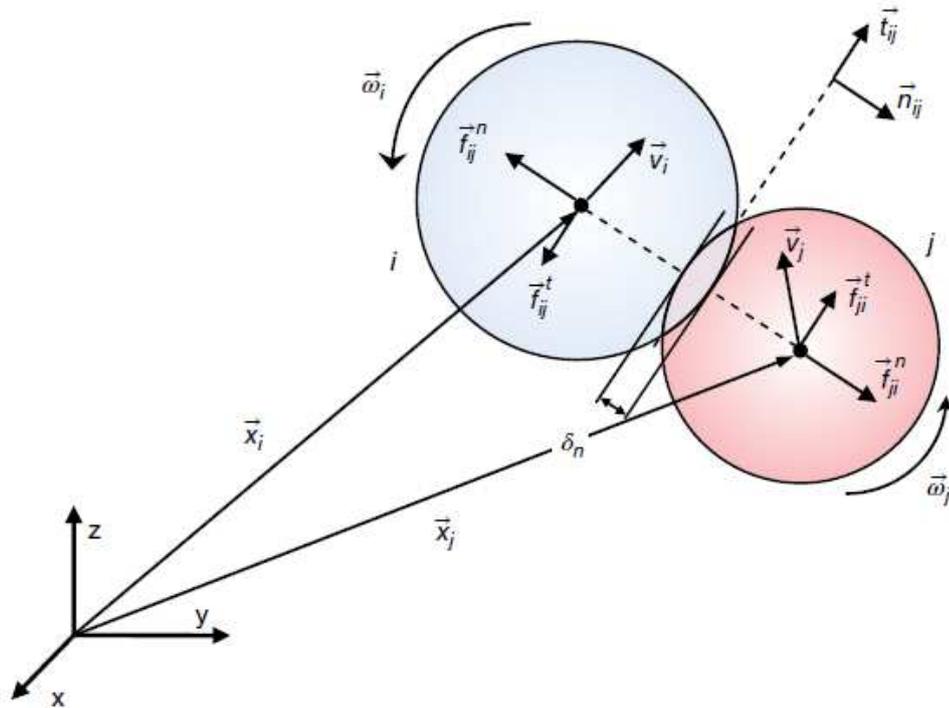


Figura 34: Ilustração esquemática das forças e velocidades atuantes nas partículas i e j durante sua colisão. (MOSTOUFI et al., 2016)

Com relação à velocidade relativa entre as partículas em colisão, a mesma pode ser definida segundo a equação 61 (MOSTOUFI et al., 2016).

$$\vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j + (r_i \vec{\omega}_i + r_j \vec{\omega}_j) \times \vec{n}_{ij} \quad (61)$$

Onde, \vec{v}_i é o vetor velocidade da partícula i [m.s⁻¹];
 \vec{v}_j é o vetor velocidade da partícula j [m.s⁻¹];
 r_i é o raio da partícula i [m];
 r_j é o raio da partícula j [m];
 $\vec{\omega}_i$ é o vetor velocidade angular da partícula i [rad.s⁻¹];
 $\vec{\omega}_j$ é o vetor velocidade angular da partícula j [rad.s⁻¹];
 \vec{n}_{ij} é o vetor normal;

O vetor normal está localizado entre os pontos do centro da partícula i até o centro da partícula j , dado pela equação 62 (MOSTOUFI et al., 2016).

$$\vec{n}_{ij} = \frac{\vec{x}_i - \vec{x}_j}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|} \quad (62)$$

Assim, a velocidade relativa pode ser decomposta em componentes normal e tangencial.

O vetor velocidade relativa normal é dada pela equação 63 (MOSTOUFI et al., 2016).

$$\vec{v}_{ij}^n = (\vec{v}_{ij} \cdot \vec{n}_{ij}) \vec{n}_{ij} \quad (63)$$

E o vetor velocidade relativa tangencial é expressa segundo a equação 64 (MOSTOUFI et al., 2016).

$$\vec{v}_{ij}^t = \vec{v}_{ij} - \vec{v}_{ij}^n \quad (64)$$

O vetor velocidade relativa tangencial também pode ser reescrito de acordo com o vetor tangencial \vec{t}_{ij} no ponto de contato segundo a equação 65 (MOSTOUFI et al., 2016).

$$\vec{v}_{ij}^t = |\vec{v}_{ij}^t| \vec{t}_{ij} \quad (65)$$

Desse modo, a expressão para a velocidade relativa tangencial é dada pela equação 66 (MOSTOUFI et al., 2016).

$$v_{rt} = |\vec{v}_{ij}^t| \quad (66)$$

A sobreposição tangencial pode então ser calculada uma vez que foi verificada a ocorrência de velocidade tangencial no ponto de contato da colisão. Para tanto, a sobreposição tangencial, δ_t , pode ser calculada segundo a equação 67 (MOSTOUFI et al., 2016).

$$\delta_t = \int_{t_0}^t v_{rt} dt \quad (67)$$

Para a resolução da equação 67, deve-se utilizar um método iterativo onde, para cada passo de tempo, a sobreposição tangencial calculada em um instante é somada à sobreposição tangencial do passo anterior, conforme a equação 68 (MOSTOUFI et al., 2016).

$$\delta_t \cong \delta_{t,0} + v_{rt} \Delta t_p \quad (68)$$

Tal abordagem serve como uma boa estimativa da integração analítica da equação 67.

Já a força de colisão das partículas no ponto de contato \vec{f}_{ij}^c , pode ser decomposta nas forças normal, \vec{f}_{ij}^n , e tangencial, \vec{f}_{ij}^t , de acordo com a equação 69 (MOSTOUFI et al., 2016).

$$\vec{F}_{ij}^c = \vec{F}_{ij}^n + \vec{F}_{ij}^t \quad (69)$$

Maiores detalhes dos modelos adotados no presente trabalho são fornecidos no Capítulo 4 (MATERIAIS E MÉTODOS).

2.3.2.2 Acoplamento CFD-DEM

Como já apresentado neste capítulo, no acoplamento CFD-DEM o movimento da fase fluida é descrito pelas equações de Navier-Stokes, enquanto que os movimentos translacional e rotacional das partículas são descritos pelas leis de movimento de Newton e segunda lei de Euler, respectivamente.

Apesar das equações governantes utilizadas para a descrição de cada fase serem bem colocadas, o acoplamento pode apresentar variações dependendo das considerações adotadas em tais equações e também da escala de resolução de tamanho dos volumes de controle, que são utilizados para os cálculos das propriedades da fase fluida (MOSTOUFI et al., 2016).

Com relação à escala das células fluidas, dependendo do tamanho das partículas com relação aos volumes de controle utilizados nos cálculos da fase fluida pode-se ter duas abordagens diferentes de acoplamento, que são: o acoplamento CFD-DEM *superfície resolvida* e o CFD-DEM *superfície não-resolvida* (MOSTOUFI et al., 2016).

Na figura 35 são apresentadas as diferenças entre os dois tipos de tratamento no acoplamento.

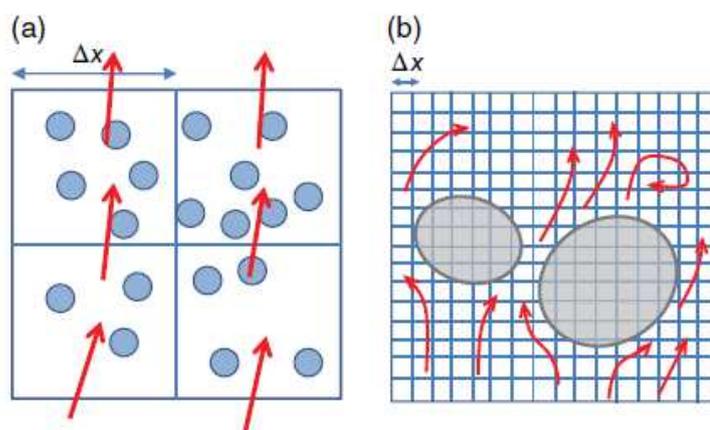


Figura 35: Diferentes abordagens do tratamento das partículas a) método superfície não resolvida e b) método superfície resolvida. (MOSTOUFI et al., 2016)

Pelo lado CFD, as propriedades do fluido são definidas dentro das células de dimensões Δx , bidimensionais neste exemplo, que em conjunto preenchem todo o domínio do sistema. Assim, no acoplamento CFD-DEM *superfície resolvida*, ilustração (b) da Figura 35, em que o tamanho do volume de controle é muito menor que o tamanho da partícula, são obtidos perfis detalhados de campos fluidos em torno de todas partículas (MOSTOUFI et al., 2016).

Tais perfis são integrados para que sejam obtidas as forças hidrodinâmicas totais e as forças que atuam sobre partículas individuais. Tal tratamento é custoso em termos computacionais, isto porque é preciso resolver as equações da fase fluida para todos volumes de controle, e considerando sistemas onde domínio da fase fluida é muito extenso, com muitas partículas em análise, tal abordagem se torna inviável (MOSTOUFI et al., 2016).

Já no acoplamento CFD-DEM *superfície não-resolvida*, ilustração (a) da Figura 35, os tamanhos das células são muito maiores que o tamanho das partículas, possibilitando o estudo de sistemas com milhares ou até milhões de partículas (MOSTOUFI et al., 2016).

Com relação às considerações adotadas nas equações governamentais, três conjuntos de formulações têm sido frequentemente utilizados para descrever tais equações, chamados modelos original, A e B.

O modelo original apresenta a mesma metodologia adotada para a resolução de problemas multifásicos onde ambas fases são consideradas contínuas, obviamente utilizando outras equações para descrição da parte sólido no caso DEM. O modelo A é uma variação do modelo original e apresenta como principal característica o compartilhamento da pressão entre

as fases fluida e s33lida. J33 no caso do modelo B a press33o 33 considerada somente para a fase fluida (MOSTOUFI et al., 2016).

Diversos estudos testando os modelos, como os realizados por Feng e Yu (2004), Zhou et al. (2010) e Di Renzo e Di Maio (2007), permitiram a conclus33o de que o modelo A 33 aplic33vel a todos tipos de fluxos g33s-s33lido. J33 o modelo B 33 preferencialmente aplic33vel a fluxos g33s-s33lido simples, sendo que sua validade 33 desconhecida para solu333es complexas como em sistemas polidispersos, hidrociclones e fluidiza333es turbulenta e r33pida.

Desse modo, a partir deste ponto ser33 enfatizado o acoplamento CFD-DEM *superf33cie n33o-resolvida*, modelo original e modelo A.

Baseado no modelo esfera-macia, descrito no item 2.3.2.1.2, nota-se na sua equa333o de movimento proposta (Eq. 45) que um dos termos 33 a for33a de intera333o fluido-part33cula, \vec{F}_i^{g-p} . Tal termo representa a for33a exercida pelo fluido sobre a superf33cie de uma part33cula, sendo determinado na abordagem CFD-DEM *superf33cie n33o resolvida* por express33es anal33ticas ou emp33ricas de propriedades do fluido na vizinhan33a da part33cula. Em tal abordagem a for33a superficial 33 decomposta linearmente em for33as independentes conforme a equa333o 70 (MOSTOUFI et al., 2016).

$$\vec{F}_i^{g-p} = \vec{F}_i^d + \vec{F}_i^u + \vec{F}_i^{\nabla p} + \vec{F}_i^{\nabla \tau} + \vec{F}_i^l \quad (70)$$

Descrevendo cada for33a tem-se:

- \vec{F}_i^d 33 a for33a de arraste constante;
- \vec{F}_i^u 33 a for33a inst33vel e inclui a for33a de arraste inst33vel, \vec{F}_i^{ud} , e a for33a de massa adicionada, \vec{F}_i^a , de modo que $\vec{F}_i^u = \vec{F}_i^{ud} + \vec{F}_i^a$;
- $\vec{F}_i^{\nabla p}$ 33 a for33a de gradiente de press33o e pode ser obtida por $\vec{F}_i^{\nabla p} = V_i \nabla p$, onde V_i 33 o volume da part33cula i e p 33 a press33o;
- $\vec{F}_i^{\nabla \tau}$ 33 a for33a viscosa devido ao esfor33o de cisalhamento do fluido, sendo calculada como $\vec{F}_i^{\nabla \tau} = -V_i (\nabla \vec{\tau}_f)$, onde V_i 33 o volume da part33cula i e $\vec{\tau}_f$ 33 a tens33o de cisalhamento do fluido;
- \vec{F}_i^l 33 a for33a de levita333o que inclui as for33as de Saffman e Magnus, $\vec{F}_i^l = \vec{F}_i^{Saffman} + \vec{F}_i^{Magnus}$;

A força \vec{F}_i^{g-p} é estimada na escala das partículas enquanto que seu termo análogo, presente na equação de momento da fase fluida, que representa a força de interação volumétrica partícula-fluido agindo sobre o fluido, deve ser calculado para cada volume de controle. Devido a essa diferença de escalas das forças de interação entre as fases fluida e sólida foram desenvolvidos diferentes esquemas, revisados por Feng e Yu (2004).

Dentre os esquemas, existe um em que o cálculo da força de interação fluido-partícula não apresenta tantas dificuldades de aplicação. Neste, a força de interação fluido-partícula agindo sobre as partículas individuais é primeiramente estimada em uma célula, então essa força é somada em todas partículas presentes na célula para estimar a força de interação fluido-partícula (MOSTOUFI et al., 2016).

As formulações para o cálculo do termo força de interação que serão apresentadas na sequência são baseadas nesse esquema.

No item 2.3.1 foram apresentadas as equações governantes no caso de uma abordagem Euleriana-Euleriana para um problema multifásico. Nas Equações (31) e (36) surgiram o termo F^{g-p} que é o valor médio volumétrico de forças agindo nas partículas devido ao fluido ao redor. Tais equações mostram que o acoplamento pode ser obtido quando os mesmos termos fonte são utilizados para as fases fluida e sólida. A força F^{g-p} pode ser decomposta em duas partes:

- Variação macroscópica no tensor de tensão do fluido, $\bar{\sigma}_g$, que inclui a pressão do fluido e o tensor de tensão viscoso;
- Variações detalhadas no tensor de tensão do ponto em torno de um partícula, que é a força de arraste exercida sobre as partículas;

Usando metodologia similar ao algoritmo desenvolvido por Patankar (1980) é possível estabelecer relações de acoplamento no caso CFD-DEM. Para tanto, consideremos um primeiro modelo, denominado modelo original, em que a equação de conservação de momento da fase fluida é a mesma daquela da equação 31, repetida aqui na equação 71.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{f}_g \rho_g v_g) + \nabla \cdot (\bar{f}_g \rho_g v_g v_g) = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau}_f + \bar{f}_g \rho_g g - F^{g-p} \quad (71)$$

Na equação 71 o termo F^{g-p} é a média volumétrica de todas forças de interação agindo na fase sólida devido ao movimento do fluido em cada volume de controle. Sendo a fase sólida considerada discreta no modelo CFD-DEM, tal média volumétrica pode ser obtida conforme a equação 72.

$$\vec{F}^{g-p} = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{i=1}^{k_v} \vec{F}_i^{g-p} = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{i=1}^{k_v} \left(\vec{F}_i^d + \vec{F}_i^u + \vec{F}_i^{\nabla p} + \vec{F}_i^{\nabla \tau} + \vec{F}_i^l \right) \quad (72)$$

Onde, k_v é o número de partículas em cada volume de controle, V_{cell} , sendo que a somatória é realizada para todas as partículas dentro da célula.

Considerado uma variação do modelo original, o modelo A se caracteriza por apresentar a força \vec{F}^{g-p} decomposta em duas partes. A primeira parte é o tensor de tensão do fluido e a segunda parte é a força de arraste e outras forças remanescentes, de acordo com a equação 73.

$$\vec{F}^{g-p} = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{i=1}^{k_v} \left(\vec{F}_i^{\nabla p} + \vec{F}_i^{\nabla \tau} \right) + \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{i=1}^{k_v} \left(\vec{F}_i^d + \vec{F}_i^u + \vec{F}_i^l \right) \quad (73)$$

A primeira soma do lado direito pode ser reescrita como a equação 74.

$$\frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{i=1}^{k_v} \left(\vec{F}_i^{\nabla p} + \vec{F}_i^{\nabla \tau} \right) = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{i=1}^{k_v} (V_i \nabla p - V_i \nabla \tau_f) = f_p \nabla p - f_p \nabla \tau_f \quad (74)$$

Onde, f_p é a fração volumétrica da fase sólida;

Já a segunda soma é definida como a força volumétrica de interação fluido-partícula, denominada agora \vec{F}^A , e a equação 73 pode ser então reescrita como a equação 75.

$$\vec{F}^{g-p} = f_p \nabla p - f_p \nabla \tau_f + \vec{F}^A \quad (75)$$

$$\text{Onde, } \vec{F}^A = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{i=1}^{k_v} \left(\vec{F}_i^d + \vec{F}_i^u + \vec{F}_i^l \right);$$

A equação do momento da fase fluida neste caso é dada pela equação 76, que é a equação principal do modelo A.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(f_g \rho_g v_g \right) + \nabla \left(f_g \rho_g v_g v_g \right) = -f_p \nabla p + f_p \nabla \tau_f - \vec{F}^A + f_g \rho_g g \quad (76)$$

Nota-se que apesar de serem nomeados de modo diferente, tanto o modelo original como o modelo A são fisicamente os mesmos. A diferença no modelo A é devido à força de interação do tensor de tensão do fluido sobre partículas ser separada da força de interação fluido-partícula.

Para o cálculo das forças de interação fluido-partícula é necessário o conhecimento dos valores lagrangeanos da velocidade do fluido ou da fração volumétrica do fluido em um volume de controle na posição da partícula. Desse modo os valores lagrangeanos das variáveis eulerianas podem ser estimados com base na sua distribuição espacial conforme a equação 77 (WU et al., 2009).

$$\phi_p = \phi_c + (x_p - x_c) \frac{\sum_{i=1}^{n_f} \phi_{f,i} A_{f,i}}{V_{cell}} \quad (77)$$

- ϕ_p e ϕ_c são as variáveis de fluido armazenadas na posição da partícula e no centro da célula, respectivamente;
- x_p e x_c são as posições das partículas e o centroide da célula, respectivamente;
- $\phi_{f,i}$ é o valor da propriedade do fluido interpolado na face da célula seguindo um determinado esquema numérico, tal como o *second-order upwind*, por exemplo;
- $A_{f,i}$ é área da face da célula;
- i e n_f são os números de faces da célula;

A Figura 36 mostra em linhas gerais a sequência de cálculos utilizada pelo modelo de acoplamento CFD-DEM *superfície não-resolvida*.

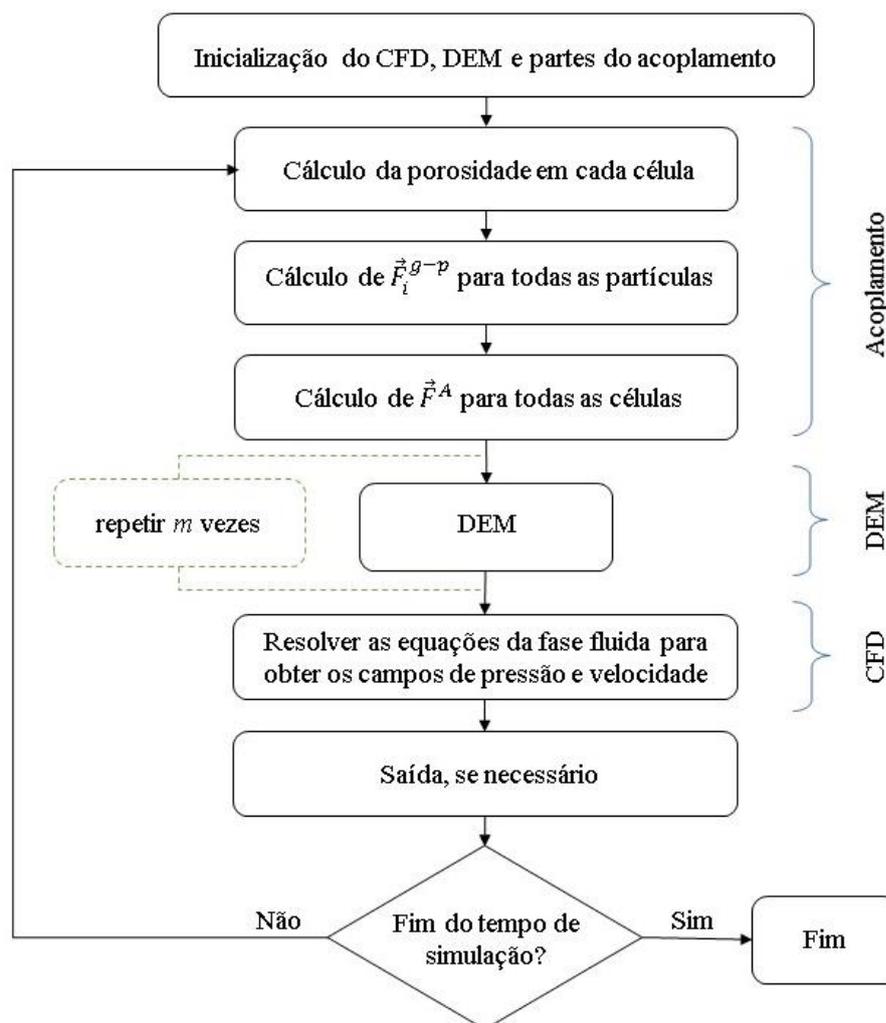


Figura 36: Estrutura do acoplamento explícito no modelo CFD-DEM *superfície não-resolvida*. (Adaptado de MOSTOUFI et al., 2016)

Inicialmente, todos os componentes da simulação, CFD, DEM e o acoplamento são inicializados. O acoplamento começa calculando a porosidade em cada célula baseado em informações da malha e posição das partículas.

A porosidade, ou fração volumétrica do fluido, ou ainda fração de vazios, é definida como a fração de volume fluido presente dentro de uma célula de volume V_{cell} . Tal parâmetro afeta significativamente o resultado da simulação CFD-DEM por estar presente nas equações de conservação de massa e momento e também ser utilizado no cálculo da força de interação fluido-partícula.

A porosidade pode ser calculada, basicamente, por duas abordagens: os métodos analíticos exatos e os métodos não-analíticos aproximados.

A abordagem analítica utiliza métodos geométricos exatos para calcular o real volume de cada partícula na célula. Por exemplo, a equação de Hoomans et al. (1996), calcula a exata fração volumétrica de fluido em uma célula computacional:

$$f_g = 1 - \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{i=1}^{k_v} \varphi_i V_i \quad (78)$$

Onde, k_v é o número de partículas parcialmente localizadas dentro da célula fluida e $\varphi_i \in [0,1]$ denota a fração volumétrica da partícula i que pertence à célula estimada através de técnicas geométricas. A eficiência deste método depende de quão acurada é a estimativa de φ_i . A Figura 37 dá um exemplo da aplicação de tal método.

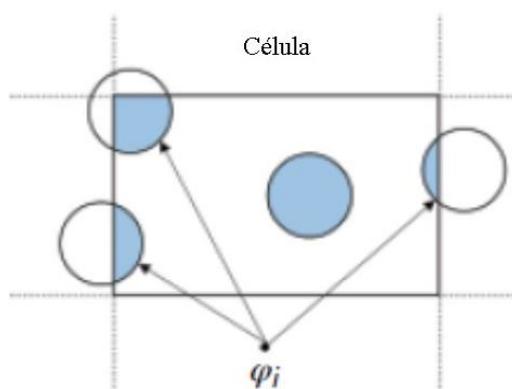


Figura 37: Método analítico de determinação da porosidade no volume de controle. (MOSTOUFI et al., 2016)

Embora o método analítico seja acurado, o mesmo é muito difícil de ser aplicado em malhas irregulares e/ou quando as partículas apresentam formatos irregulares.

Por outro lado, os métodos não-analíticos são mais simples e podem ser aplicados a qualquer tipo de malha e formato de partícula.

Como exemplo de método não-analítico pode ser citado o método do centro da partícula (PCM- *Particle Center Method*), que assume que se o centro da partícula está localizado dentro da célula computacional, todo o volume da partícula é assumido estar dentro da célula, conforme ilustra a Figura 38 (MOSTOUFI et al., 2016).

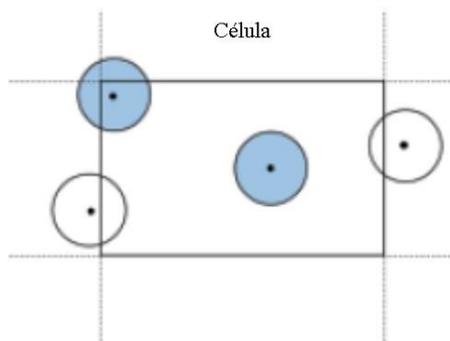


Figura 38: Método PCM para a determinação da porosidade no volume de controle. (MOSTOUFI et al., 2016)

De acordo com Xu e Yu (1997), a fração volumétrica da célula pode ser calculada pelo método PCM conforme a equação 79.

$$f_g = 1 - \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{i=1}^{k_c} V_i \quad (79)$$

Onde, k_c é o número de partículas dentro da célula se seus centros estiverem localizados dentro dos seus limites.

Tal método funciona satisfatoriamente quando o volume de controle é muito maior do que o volume das partículas. Porém, pode apresentar erros relativos de até 50% na estimativa da fração volumétrica no caso dos centros das partículas estarem próximos dos limites das células (MOSTOUFI et al., 2016).

Outro método que procura melhorar a acurácia do método PCM é o dito método da compensação do PCM. Neste método o volume de controle é ajustado em todas as direções Δx , Δy , $\Delta z \in [-d_i/2, 0, d_i/2]$, onde d_i é o diâmetro da partícula i , conforme apresentado na Figura 39 (MOSTOUFI et al., 2016).

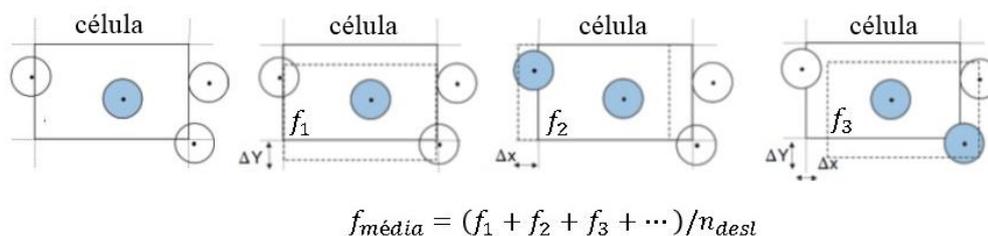


Figura 39: Método PCM com compensação para a determinação da porosidade no volume de controle (MOSTOUFI et al., 2016).

Neste caso, a fração volumétrica do fluido é estimada pela média, $f_{\text{média}}$, de todas as frações volumétricas de fluido em relação ao número de deslocamentos, n_{desl} . Testes da acurácia dos métodos PCM e PCM compensado mostraram que para ambos métodos há um aumento do erro médio à medida que os volumes de controle têm suas dimensões encurtadas em relação ao tamanho da partícula analisada. Mesmo assim, o método da compensação pode melhorar a precisão da determinação da porosidade em até uma ordem de grandeza (MOSTOUFI et al., 2016).

Uma outra abordagem parecida com os métodos PCM e PCM compensado foi desenvolvida para melhorar ainda mais a precisão da determinação fração volumétrica na célula, denominada método do sub-elemento. Neste método a partícula é sub-dividida em N_e partes iguais com os pontos centrais de tais partes definidos como $C_{i,j}$. Assim, se o centro de um sub-elemento de uma partícula está dentro de uma determinada célula é assumido que todo o volume de tal sub-elemento faz parte da referida célula (MOSTOUFI et al., 2016).

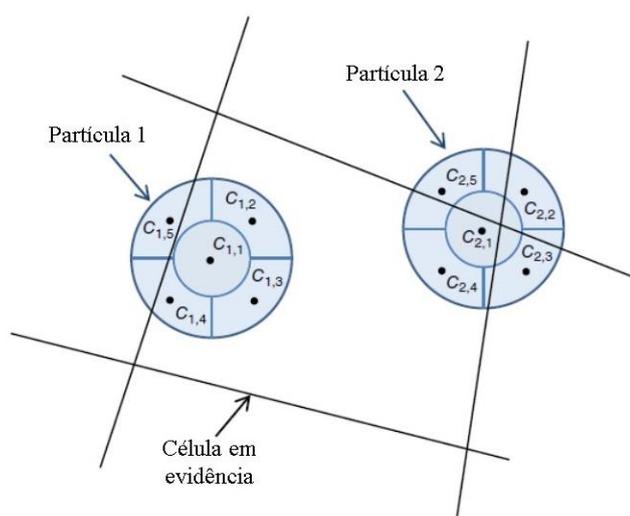


Figura 40: Método do sub-elemento para a determinação da porosidade no volume de controle. (Adaptado de MOSTOUFI et al., 2016)

A Figura 40 apresenta um exemplo de utilização do método do sub-elemento. Como pode ser notado a partícula 1 foi dividida em 5 sub-elementos e desses, o elemento 5 está com seu centro fora da célula em evidência, logo, o volume de tal sub-elemento é computado na célula adjacente. De modo similar a partícula 2 foi também dividida em 5 elementos, mas nesse caso são computados na célula em evidência apenas os volumes referentes aos sub-elementos 1 e 4.

O método do sub-elemento é tão simples de ser calculado quanto aos apresentados anteriormente, porém permite uma maior precisão na determinação da porosidade quando aplicado em malhas irregulares e/ou partículas não-esféricas. A precisão de tal método aumenta com o aumento de N_e às custas de um aumento nos custos computacionais.

Além dos métodos apresentados, pode-se consultar na literatura diversos outros mais complexos e aptos a calcular a porosidade com maior precisão, destacando os métodos dos cubos porosos (DEEN et al., 2004), abordagens estatísticas (XIAO; SUN, 2011) e o método do volume de controle esférico (KUANG et al., 2008).

Retomando os passos de resolução do algoritmo da Figura 36, após o cálculo da porosidade, são utilizadas a velocidade das partículas, velocidade do fluido, assim como a pressão e o tensor de tensões do fluido, no passo de tempo atual do fluido, para calcular a força de interação fluido-partícula agindo em cada partícula i , \vec{F}_i^{g-p} .

Na próxima etapa é calculada a força volumétrica de interação fluido-partícula em cada célula, \vec{F}^A . O passo seguinte é o loop de iterações DEM. O passo tempo para integração da equação de movimento das partículas é Δt_p e o loop de interação DEM é repetido m vezes.

Depois que o loop DEM se completou, são obtidas as novas posições e velocidades, translacional e rotacional, de todas as partículas no próximo passo de tempo fluido para integração, Δt_f .

Na maioria das simulações o passo de tempo DEM é muito menor que aquele utilizado para CFD. A razão de tais passos de tempo pode ser definida como a equação 80 (MOSTOUFI et al., 2016).

$$m = \frac{\Delta t_f}{\Delta t_p} \quad (80)$$

Logo, considerando um exemplo em que o passo de tempo DEM é $\Delta t_p = 10^{-5}$ s e o passo de tempo CFD é $\Delta t_f = 10^{-4}$ s, tem-se que $m = 10$. Tal resultado representa que o algoritmo realizará 10 iterações na parte DEM e 1 iteração CFD em cada passo do acoplamento.

A porosidade calculada e a interação volumétrica fluido-partícula são usadas para resolver as equações de conservação de massa e momento da fase fluida. Para tanto, pode se valer de qualquer método numérico, padrão ou avançado, para resolução de tais equações, tal como o método SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equation*) (MOSTOUFI et al., 2016).

Ressaltando que esta sequência de cálculos apresentada assume um esquema de acoplamento totalmente explícito, o que significa que os termos de acoplamento são calculados utilizando as informações obtidas no passo de tempo atual. A sequência de cálculos, no entanto, pode ser escolhida arbitrariamente o que leva ao desenvolvimento de diversas variantes que podem ser encontradas na literatura.

Recentemente, com o desenvolvimento crescente das Graphical Processing Units (GPUs), as mesmas estão cada vez mais sendo utilizadas como ferramentas de auxílio na solução dos modelos discretos e acoplamentos CFD-DEM. Estudos como os conduzidos por Gan et al. (2016) mostraram que resolvendo modelos com cerca de 300.000 partículas pode-se reduzir o tempo de simulação de 40 a 75 vezes caso o método dos elementos discretos seja resolvido com auxílio de uma GPU e o modelo contínuo resolvido por uma CPU (Central Processing Unit), dependendo da complexidade do algoritmo usado.

2.3.3 Softwares aptos a simular fluxos multifásicos

Existem vários pacotes de softwares que simulam CFD com capacidade para simular fluxos multifásicos, e que estão disponíveis no mercado.

Praticamente todos softwares com pacote CFD tem a capacidade de resolver casos envolvendo fluxos fluido de fase simples. Porém, existem alguns que são capacitados a resolver alguns fluxos multifásicos. Destacando os três softwares mais populares com tal aptidão tem-se o Fluent[®], CFX[®] e o STAR-CD[™].

O Fluent[®] tem a capacidade de resolver problemas com fluxos multifásicos por meio de modelos Eulerianos mistos, Euleriano-Euleriano ou Euleriano-Lagrangeano. Porém, o modelo Euleriano-Lagrangeano neste caso assume que a fase dispersa ocupa uma fração volumétrica baixa, mesmo aceitando elevado carregamento de massa, o que torna o uso desse modelo inapropriado em qualquer aplicação onde a fração volumétrica da fase dispersa não pode ser negligenciada. O software permite a incorporação de funções definidas pelo usuário (UDF) e é particularmente reconhecido pela sua competência em modelar gotículas e ciclones separadores (GENT, 2009).

O software CFX[®] tem capacidades similares ao Fluent[®]. Já o STAR-CD[™] tem a capacidade resolver fluxos multifásicos utilizando modelos Euleriano-Euleriano e Euleriano-Lagrangeano, e similarmente ao Fluent[®] tem a capacidade de modelar fluxos de gotículas e pequenas partículas sólidas (GENT, 2009).

Outros softwares CFD com capacidade para resolução de fluxo multifásico são o Flow 3D[®], especializado em modelar fluxos de superfície livre e mistura multifásica; openFOAM[™], que apresenta código aberto; além de Phoenix[™] e PORFLOW[™] (GENT, 2009).

Porém, muitos desses códigos são focados em simular sistemas que envolvam fluxos líquidos ou em meios porosos, não sendo ideais no caso da simulação envolvendo fluxos de sólidos.

Assim, com o aumento da popularidade da modelagem DEM devido à sua habilidade em modelar com precisão a dinâmica de fluxo de sólidos polidispersos em um sistema, tem surgido muitos softwares aptos a simular tal método.

No entanto, a simulação que considera o acoplamento CFD-DEM apresenta algumas dificuldades, sendo que uma das principais diz respeito à exigência de poderio computacional para a realização de todos cálculos envolvidos. De modo geral, o código numérico CFD-DEM pode ser desenvolvido para ser executado de modo sequencial ou paralelo. Um código sequencial, considerando as capacidades computacionais disponíveis atualmente, torna viável a execução em apenas poucos segundos de simulação em tempo real de um sistema gás-sólido com menos de 10^5 partículas e células (MOSTOUFI et al., 2016).

Desse modo, o sucesso das simulações envolvendo CFD-DEM depende basicamente da implementação de algoritmos numéricos eficientes e da paralelização do código. A paralelização pode ser dividida em duas categorias: paralelização de memória distribuída e paralelização de memória compartilhada (MOSTOUFI et al., 2016).

A paralelização de memória distribuída fornece um número quase ilimitado de unidades de processamento e espaço de memória, o que a torna adequada principalmente para uso em simulações CFD, porém sofre com a demora de transferência de dados entre nós e de comunicação (MOSTOUFI et al., 2016).

Já a paralelização de memória compartilhada se adequa bem aos códigos DEM, uma vez que, permite a distribuição de tarefas computacionais entre os processadores na etapa dos cálculos em *loop*. No entanto, as máquinas de memória compartilhada fornecem um número limitado de unidades de processamento e espaço de memória, restringindo o tamanho do problema em alguns casos (MOSTOUFI et al., 2016).

Consequentemente, não existe um modelo único e robusto de paralelização do código CFD-DEM. O que vem sendo feito nos dias atuais é a utilização de uma mistura de

modelos de paralelização visando aproveitar as vantagens que cada um oferece (MOSTOUFI et al., 2016).

Assim, dentre os vários pacotes de softwares disponíveis no mercado, cada um se vale de uma configuração de paralelização diferente. Citando alguns pacotes de softwares comerciais ideais para a resolução de problemas envolvendo sistemas particulados por meio de modelagem DEM tem-se o LIGGGHTS[®], PFC[™], EDEM[®], CFDEM[®], Yade, SAMADII[®], MFIX-DEM[®] e Rocky DEM[®] (MOSTOUFI et al., 2016).

Em geral, tais softwares têm a capacidade de simular sistemas que envolvam o processamento de partículas para fins farmacêuticos, químico, mineral, construção, agrícola, petróleo e gás, entre outros. Quando o software permite o acoplamento CFD-DEM é possível a realização de simulações envolvendo partículas e fluidos, incluindo mecanismos de transporte sólido-fluido, leitos fluidizados, filtração, erosão de tubulação, etc (MOSTOUFI et al., 2016).

Dentre os softwares citados anteriormente, os softwares EDEM[®] e Rocky DEM[®] se diferenciam por permitirem o acoplamento com o software ANSYS Fluent[®], um dos melhores softwares de simulação CFD disponíveis no mercado. A integração entre tais softwares proporciona a distinta capacidade de promover simulações preditivas de sistemas que envolvam desde transporte de partículas até reações químicas entre partículas e fluido (ROCKY, 2017).

2.4 Estado da arte da modelagem numérica no transporte de partículas

Além do transporte pneumático de partículas propriamente dito, outros processos que se valem dos mesmos princípios físicos desse fenômeno podem ser facilmente encontrados na indústria, tais como os separadores e classificadores de partículas, misturadores, secadores, entre outros.

Abordando especificamente os separadores pneumáticos, existem basicamente dois tipos de equipamentos que realizam essa operação. Os equipamentos estáticos que podem ser horizontais ou verticais e utilizam somente a corrente de gás para promover a separação e os equipamentos seletores centrífugos, como os ciclones (KLINZING et al., 2010).

Muitos dos estudos de projetos e operação desses equipamentos, em geral, são feitos baseados em conhecimentos e metodologias da fluidização convencional, porém, como as propriedades das partículas de biomassa são únicas, muitas vezes acabam sendo negligenciadas em muitos dos sistemas analisados. Tal fato acarreta na existência de muitos

poucos trabalhos teóricos que avaliam o quão a fluidodinâmica do leito e as propriedades relativas a este serão afetadas pelas propriedades da biomassa, tais como, os formatos variados das partículas presentes nesta, seu teor de umidade, entre outras (CUI; GRACE, 2006).

Aliado a isto, a maioria dos trabalhos que abordam a fluidização de biomassa tratam principalmente de assuntos relacionados à velocidade de mínima fluidização, modos de conseguir a fluidização, mistura e segregação, e distribuições de tempo de residência, sendo verificada a baixa incidência de trabalhos em leitos fluidizados circulantes, transporte pneumático e classificação de partículas (CUI; GRACE, 2006).

Um dos primeiros trabalhos a desenvolver um estudo teórico acerca de bagaço de cana em um leito de transporte pneumático vertical foi o de Nebra (1985), que desenvolveu um modelo de secagem de bagaço para um secador pneumático vertical. O objetivo do trabalho foi a otimização de um sistema já instalado na época, na usina Barra Grande localizada em Lençóis Paulista/SP, que operava em escala industrial com vazão em torno de 25 toneladas por hora de bagaço. Foi concluído que o modelo desenvolvido poderia contribuir para a otimização do sistema na análise das suas dimensões para diferentes condições de trabalho.

Os modelos empregados nos secadores pneumáticos passaram então a ser melhor estudados, sendo um dos trabalhos de grande relevância o de Rocha (1988) em que foi desenvolvido um modelo constituído de oito equações diferenciais que permitiam a obtenção dos perfis axiais de pressão, porosidade, temperatura, umidade e velocidades do gás e do sólido no leito de secagem pneumática. No entanto, tal modelo foi desenvolvido a partir de estudo experimentais com partículas de alumina, areia e vidro, reforçando novamente a ideia de que a aplicação de tal modelo utilizando partículas de biomassa poderia acarretar em resultados não tão preditivos.

No trabalho sobre a troca térmica entre fluido e grãos no transporte pneumático, Li e Manson (2002) realizaram a simulação de tal processo em um duto horizontal utilizando modelos com acoplamento CFD-DEM e transferência de calor entre o gás e as partículas. Os autores concluíram que tal modelagem apresentou algumas vantagens com relação aos modelos de duas fases contínuas costumeiramente utilizados, como por exemplo, a oportunidade de estudar vários fluxos e o fenômeno de transferência de calor no nível das partículas, incluindo a distribuição de sólidos, trajetória e temperatura das partículas, a temperatura do gás, além da influência do diâmetro e concentração das partículas. No entanto, tal modelo não implementou a transferência de massa e sequer foi validado com experimentos práticos, demandando ainda mais estudos até atingir um elevado patamar de predição do fenômeno.

No trabalho de Silva (1991) foi estudada a secagem da borra de café em ciclone, onde, foi desenvolvido um modelo teórico para descrição do referido fenômeno. Para este caso foi utilizado um modelo Euleriano-Euleriano em que ambas as fases foram consideradas contínuas, composto por equações de conservação da quantidade de movimento, energia e de massa. Para tanto, algumas importantes suposições foram consideradas de modo que o modelo se tornasse o mais acurado possível, destacando aquela em que as partículas se distribuem em uma camada de concentração uniforme junto à parede do ciclone e apresentavam concentração muito pequena no escoamento central, calculada com base na eficiência de separação. Concluiu-se dos resultados das simulações que o modelo se mostrou muito preditivo ao ser confrontado com os resultados obtidos em experimentos reais.

Procedendo análise similar, Corrêa (2003) estudou teórica e experimentalmente a secagem de bagaço de cana em ciclones. Neste estudo foi utilizado um modelo Euleriano-Lagrangeano para a descrição do fenômeno. Tal modelo não considerou a influência da fase particulada na fase gasosa, nem a interação partícula-partícula. Neste caso o autor concluiu que o modelo não se mostrou tão preditivo em relação ao tempo de residência das partículas no ciclone quando comparado com dados experimentais. No entanto, foi um modelo importante para a avaliação da trajetória das partículas e no desenvolvimento do equipamento.

De fato, o método utilizado por Corrêa (2003) também conhecido como Rastreamento de Partículas Lagrangeano (LPT – *Lagrangian Particle Track*), foi e ainda é muito utilizado para descrever o fluxo de sólidos em ciclones, conforme verificado nos trabalhos de Yoshida (1996) de Yu et al. (2006). Porém, assim como foi verificado por Corrêa (2003), tal método apresenta a problema de ser pouco preditivo em casos que envolvam alta concentração de sólidos, por justamente negligenciar as interações partícula-partícula e gás-partícula.

De modo a tornar a simulação mais preditiva em ciclones, o trabalho de Chu e Yu (2008) utilizou a técnica de acoplamento CFD-DEM, por meio do desenvolvimento de um código apto a ser utilizado junto do software ANSYS Fluent[®], obtendo com isso um modelo capaz de capturar os efeitos relacionados à variação da concentração de sólidos no ciclone. Cabe ressaltar que neste caso o objetivo não era a secagem do material e, portanto, o modelo não dispunha das equações que descrevessem tal fenômeno. Para se aprofundar o conhecimento na modelagem de processos envolvendo secagem pode-se consultar os trabalhos de Brosh e Levy (2010), Jamaledine e Ray (2010) e Defraeye (2014). Retomando o trabalho de Chu e Yu (2008), o modelo proposto pelos autores incluía os cálculos das forças normais e tangenciais,

torque de rolamento e atrito, atuação da força de campo gravitacional e força de arraste para as partículas. Já o campo fluido foi calculado a partir das equações de Navier-Stokes da continuidade com base nas variáveis médias locais sobre cada célula. Os autores observaram em suas simulações que a maioria das partículas se chocavam na parede do ciclone logo na entrada e em seguida desciam por esta, conforme é observado em experimentos práticos, também notando o acúmulo de partículas na região onde havia maior intensidade de interação entre as mesmas. Os autores também avaliaram a influência das partículas no fluxo de gás e observaram que a velocidade tangencial é notoriamente reduzida quando maior carga de partículas é alimentada. Com relação à velocidade axial, quando as partículas são carregadas, as regiões com maiores velocidades axiais se movem em direção ao centro do ciclone e a tradicional estrutura de vórtice observada no fluxo de gás puro é destruída. Os autores comprovaram desse modo o quão significantes são as considerações a respeito das interações partícula-partícula e gás-partícula.

Nesse mesmo trabalho, Chu e Yu (2008) utilizaram o mesmo modelo das simulações em ciclone para simular um leito fluidizado circulante. A simulação continha 20.000 partículas esféricas com 3 diâmetros diferentes, 0,500 mm, 0,375 mm e 0,250 mm, todas com densidade igual a 2.500 kg/m^3 . A velocidade superficial do ar injetado uniformemente pelo fundo do leito era de 5 m/s. Os autores verificaram na simulação que as mesmas conseguiram capturar três características clássicas observadas em trabalhos experimentais com leito fluidizado circulante. A primeira delas foi a segregação axial de sólidos, onde as partículas maiores ficaram principalmente no fundo do leito e as menores no topo. A segunda foi a distribuição axial dos sólidos no leito num formato de “S”, em que a concentração de sólidos varia significativamente, em geral, sendo alta no fundo e baixa no topo do leito. A terceira característica observada diz respeito à estrutura de fluxo anular-central, responsável por causar o retorno e promover a mistura de partículas no leito. É sabido que no escoamento contendo apenas fluido a velocidade próxima na parede é menor que no centro do leito devido ao atrito fluido-parede (condição de não deslizamento). Por conta dessa característica observa-se o fenômeno em que as concentrações de partículas são mais altas próximas da parede do que no centro, resultando que na região central do leito as partículas sempre se movem na direção do fluxo fluido, mas podem se mover tanto na mesma direção quanto na contrária quando estão próximas das paredes.

Na Figura 41 é possível notar algumas das características observadas pelos autores por meio das simulações.

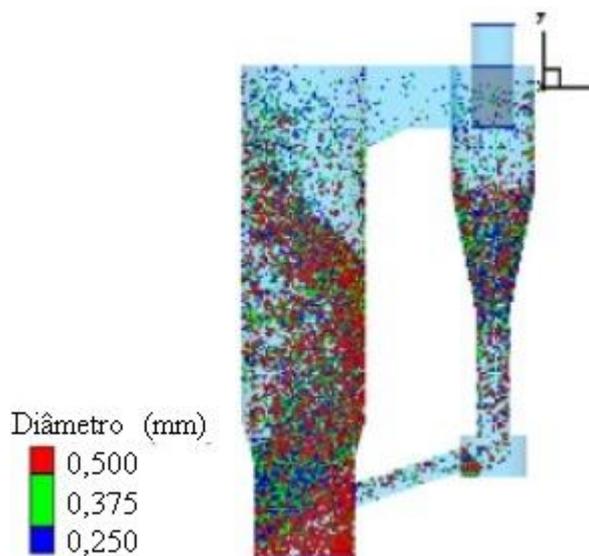


Figura 41: Configuração das partículas no leito fluidizado circulante após 0,7s de simulação. (CHU e YU, 2008)

Zou et al. (2009) realizaram experimentos em transporte pneumático vertical utilizando uma abordagem CFD-DEM muito similar à de Chu e Yu (2008), porém neste caso os autores estavam interessados em analisar os diferentes regimes de fluxo observados no transporte vertical quando era variada a velocidade do gás. Não foi utilizado nenhum software comercial, o modelo foi desenvolvido em um código elaborado pelos próprios pesquisadores. As partículas simuladas nesse caso eram esféricas, com diâmetro de 3 mm e densidade de 1000 kg.m^{-3} . O tubo vertical possuía comprimento de 5 m e diâmetro de 4 cm. O modelo foi validado pela comparação com dados encontrados na literatura. Os autores concluíram que o modelo foi capaz de capturar o comportamento do fluxo quando variada a velocidade do gás, conseguindo reproduzir a variação do fluxo pistonado até o transporte diluído de partículas. Além disso, foi observado que a diminuição da queda de pressão no fluxo da fase densa resultou na diminuição da força de arraste fluida e na força de gradiente de pressão, já o aumento da queda de pressão no fluxo da fase diluída pode ser atribuído ao aumento da força de arraste fluida e à força de atrito entre o gás e a parede. Desse modo os autores recriaram novos diagramas de regimes de fluxo para identificar as fases densa e diluída, destacando que a ocorrência de tais regimes depende, além da velocidade do gás, de propriedades dos materiais, taxa de alimentação de sólidos e geometria da tubulação.

A Figura 42 apresenta os padrões de fluxos obtidos para as diferentes velocidades do gás no transporte pneumático vertical, avaliando das alturas de 4,20 até 4,70 m do tubo, com os seus respectivos tempos de simulação.

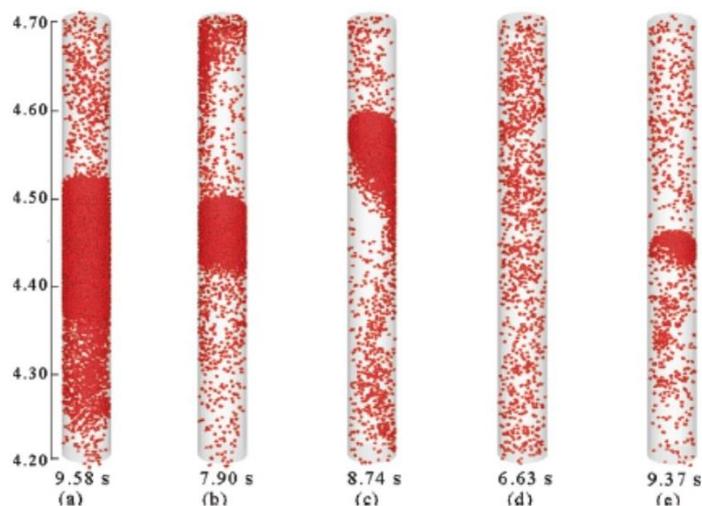


Figura 42: Padrões de fluxo das partículas para as velocidades a) 10 b) 13 c) 18,5 d) 30,5 e e) 30,5 m/s. (ZOU et al., 2009)

No trabalho de Sturm et al. (2010) foram realizadas simulações do transporte pneumático vertical denso de partículas e do transporte pneumático diluído em uma curva de transição da direção vertical para horizontal. Para a modelagem foi utilizado o acoplamento CFD-DEM, sendo que para o modelo DEM os autores dispunham de um código esfera macia que foi agregado ao software ANSYS Fluent[®] por meio de uma função definida pelo usuário (UDF). A conexão matemática entre as fases foi representada pela queda de pressão, que ocorre devido as partículas sólidas serem aceleradas pelo fluxo fluido. Para a simulação do transporte denso as partículas possuíam diâmetro de 3 mm e densidade de 889 kg/m³. Já para o transporte diluído as partículas possuíam diâmetro de 5 mm e densidade de 860 kg/m³. Em ambos os casos o formato das partículas era esférico. A tubulação tinha dimensões de escala industrial com comprimento de 2,0 m e diâmetro interno de 5 cm no transporte denso e comprimento de 2,85 m e diâmetro interno de 3 cm no transporte diluído. Para validação do modelo foram comparados somente os resultados da simulação do transporte denso com dados obtidos na literatura. No caso do transporte diluído, a velocidade superficial do fluido utilizada foi de 29,8 m/s. Os autores observaram neste caso a formação de um cordão de partículas logo no início da curva, isto porque, o movimento ascendente das partículas a fazem colidir com a parede do tubo

quando este começa a se curvar. Durante a curva as partículas continuam com sua trajetória junto à parede devido a força centrífuga.

A Figura 43 apresenta diversos perfis de porosidade observados em diferentes comprimentos da tubulação. Também foi observada uma redução da velocidade das partículas na curva devido o choque e atrito entre as partículas e a parede, sendo a velocidade inicial retomada quando o tubo se torna horizontal. Foi concluído que tal modelo pode ser uma opção para a avaliação do transporte de partículas em equipamentos de escala industrial.

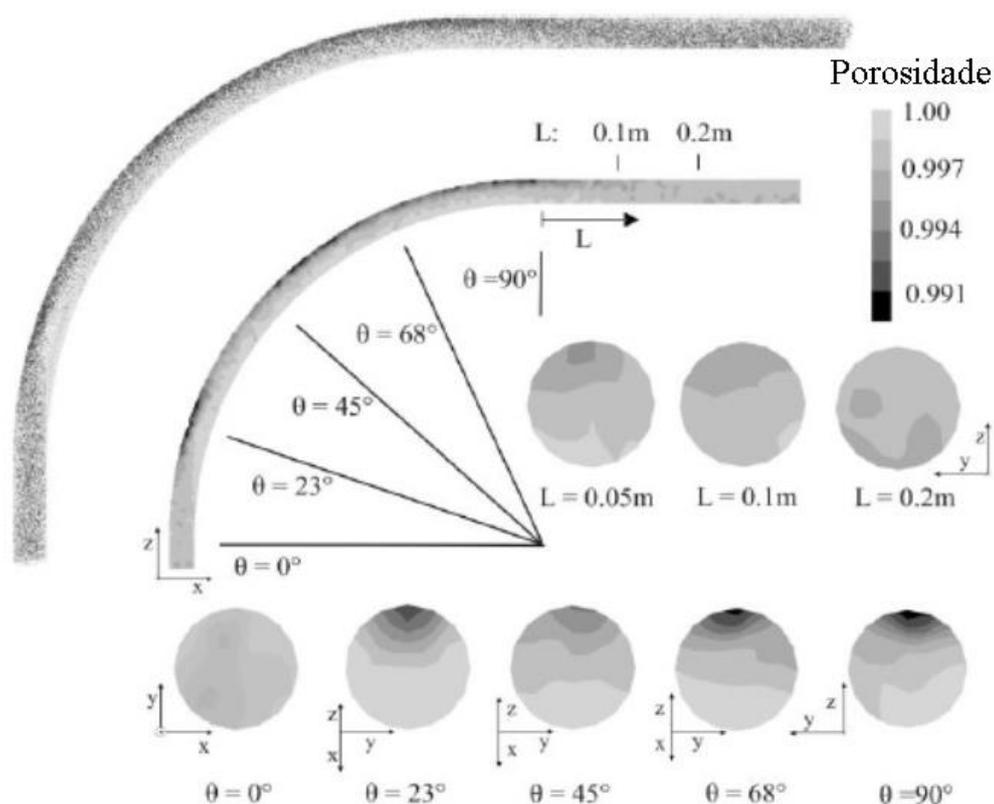


Figura 43: Perfis de porosidade na tubulação do transporte pneumático diluído de partículas. (adaptado de STURM et al., 2010)

Em um trabalho similar, Gui et al. (2015) simularam o transporte diluído de partículas em dutos que apresentavam as configurações horizontal-vertical, vertical-horizontal e horizontal-horizontal, todos com uma curvatura que alterava o sentido do fluxo em 90° . Neste caso foi utilizado um modelo CFD-DEM dito simplificado, em que apenas a mudança de momento mútua entre as fases sólidas e gás eram consideradas, sendo negligenciado o efeito da fração volumétrica na fase gasosa. O diâmetro das partículas esféricas utilizado foi de 4 mm com as mesmas apresentando densidade de 1123 kg/m^3 . A velocidade do gás utilizada foi de

11,9 m/s no caso horizontal-vertical e 16 m/s nos demais casos. Os comprimentos dos tubos de entrada e saída de partículas eram de 0,5 m e 1 m, respectivamente, com diâmetro interno de 5 cm. Os resultados foram comparados com simulações que utilizaram os modelos tradicionais, que consideram o efeito da fração volumétrica na fase gasosa. Os autores concluíram que com exceção do caso horizontal-horizontal, os demais casos apresentaram concordância entre os modelos para a taxa de dispersão do cordão de partículas formado e a velocidade das partículas, assim, a adoção do modelo simplificado significaria em redução de tempos de simulação. Os autores não especificaram claramente se utilizaram algum software comercial, porém, em um trecho do artigo citam uma equação do modelo presente no software EDEM[®], o que leva a entender que tal software foi utilizado no trabalho.

A Figura 44 apresenta o perfil de velocidades das partículas após dois segundos de simulação para os diferentes casos.

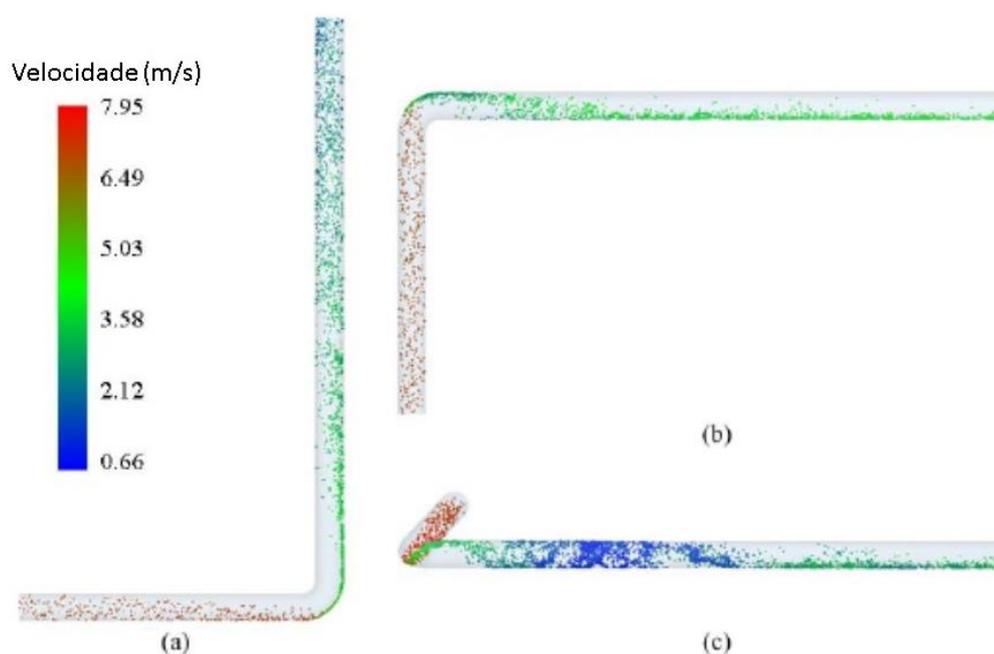


Figura 44: Perfis de velocidades das partículas após 2s de simulação para os casos com o tubo a) horizontal-vertical b) vertical-horizontal e c) horizontal-horizontal. (adaptado de GUI et al., 2015)

No estudo de Almeida et al. (2015) foi modelada a operação de um equipamento *windshifter*, muito utilizado pela indústria de processamento de lixo para separar as partículas mais leves das pesadas. O objetivo do trabalho foi a comparação dos resultados quando utilizado na simulação diferentes leis de arraste, sendo que tais resultados não foram validados

com resultados experimentais reais. As partículas escolhidas para serem simuladas no equipamento foram:

- Papel, com formato achatado, dimensões das peneiras com tamanhos de 20, 50 e 80 mm e densidade de 800 kg/m^3 ;
- Pedra, com formato esférico, dimensões das peneiras com tamanhos de 20, 50 e 80 mm e densidade de 3000 kg/m^3 ;
- Metal, com formato cilíndrico, dimensões das peneiras com tamanhos de 20, 50 e 80 mm e densidade de 8000 kg/m^3 ;
- Madeira, com formato de briquete, dimensões da peneira com tamanho de 50 mm e densidade de 900 kg/m^3 ;

Almeida et al. (2015) utilizaram o acoplamento CFD-DEM disponível no software Rocky DEM[®] em conjunto com o software ANSYS Fluent[®], sendo que tal acoplamento foi considerado de uma via, ou seja, apenas o fluido afetou o movimento da partícula. Ainda a respeito do acoplamento, somente as forças de arraste e de gradiente de pressão foram consideradas na equação do movimento da partícula devido à interferência da fase fluida. Variando as leis de arraste definidas por Schiller & Naumann e a de Ganser, em simulações com a mesma velocidade do ar passando pelo equipamento, 20 m/s, os autores puderam constatar que quando utilizaram a lei de Schiller & Naumann a maioria das partículas não foi arrastada, sendo coletadas no fundo do equipamento. Tal observação se deve ao fato da lei de Schiller & Naumann não levar em consideração o fato das partículas não serem esféricas, acarretando na predição de velocidades terminais muito maiores que aquelas computadas quando utilizada a lei de arraste de Ganser. Assim, os autores concluíram que a correlação de Ganser é a mais apropriada no caso em estudo por justamente levar em consideração o formato das partículas, que tem importante influência no cálculo da força de arraste.

A Figura 45 resume os resultados obtidos por Almeida et al. (2015). Além do estudo no equipamento *windshifter* os autores fizeram no mesmo trabalho a avaliação de um leito fluidizado denso, neste caso utilizando o acoplamento duas vias em que o fluido afetou o movimento da partícula e vice-versa.

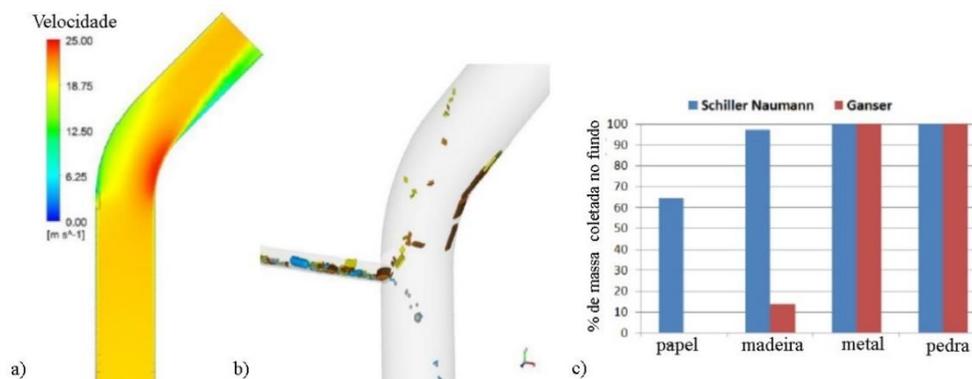


Figura 45: Resultados da simulação a) velocidade do gás b) lei de arraste de Ganser c) comparação entre leis de arraste. (adaptado de ALMEIDA et al.,2015)

Existem muitos outros trabalhos envolvendo o transporte pneumático vertical de partículas e simulações deste, como sugestões, os trabalhos de revisão de Cui e Grace (2006), Anandhkrishnan e Sarkar (2011), e Manjula et al. (2017) servem de aprofundamento no assunto.

Os trabalhos aqui revisados foram escolhidos por terem sido estudos que envolviam o acoplamento CFD-DEM, em três dimensões, na simulação do transporte pneumático vertical fase dispersa, sendo constatado que tal assunto é pouco explorado por pesquisadores e é ainda mais raro quando envolve partículas de biomassa. Isto porque, as partículas de biomassa, diferente de materiais granulares minerais ou plásticos, são geralmente higroscópicos e têm suas propriedades mecânicas alteradas de acordo com o teor de umidade (HORABIK;MOLEND, 2016).

Sendo assim, muitas informações disponíveis na literatura a respeito de materiais granulares de origem biológica são insuficientes, incertas e dispersas entre vários artigos (HORABIK;MOLEND, 2016).

Um dos parâmetros mais importantes a ser considerado para uma acurada predição do comportamento dos materiais biológicos simulados diz respeito aos formatos irregulares de suas partículas. A representação das partículas e o algoritmo de detecção de contato entre estas ainda são, até o presente momento, condições inseparáveis.

Assim, um dos principais desafios no método dos elementos discretos tem sido justamente encontrar uma descrição flexível que consiga não só construir partículas com formatos arbitrários, mas também fornecer um método de detecção de contato que seja robusto e eficiente.

Embora existam diversas abordagens para representação de objetos, dois grupos de métodos são encontrados com maior frequência na literatura, sendo os denominados métodos da partícula-simples e da partícula-composta (MOSTOUFI et al., 2016).

O método da partícula simples se subdivide em método do formato poliédrico, método da representação da função discreta, método da representação da função contínua, método do espaço virtual e método dos elementos geométricos combinados (MOSTOUFI et al., 2016).

No método dos elementos geométrico combinados, a superfície de uma partícula arbitrária pode ser representada por um grupo de elementos geométricos, tais como, segmentos superficiais planos ou curvos, com bordas e/ou vértices nas posições onde a superfície não é contínua. Tal método é adequado para construir partículas regulares com superfícies lisas e bordas arredondadas, sendo que o cilindro com extremidades esféricas, um dos formatos que podem ser criados pela combinação de elementos geométricos (MOSTOUFI et al., 2016).

O principal gargalo deste método diz respeito ao algoritmo de detecção de contato entre partículas. Este consome uma quantidade relativamente alta de recursos computacionais devido à necessidade de armazenamento e atualização de muitas informações, relativas ao formato das partículas e ao julgamento do tipo de contato possível entre as mesmas como, por exemplo, extremidade-face, face-face, entre outros (MOSTOUFI et al., 2016).

Como exemplos de alguns trabalhos que simularam materiais biológicos com partículas não esféricas pode-se citar Markowski et al. (2007) que simulou grãos de cevada, Ren et al. (2012) que simulou partículas de milho e Jittanit et al. (2013) que simulou sementes de arroz e trigo.

Outro desafio da simulação envolvendo partículas de materiais biológicos é a representação das forças de adesão que variam de acordo com o teor de umidade destas. A adesão entre partículas tem sua origem de diversas fontes, incluindo forças de van der Waals, forças eletrostáticas e forças de ponte líquida (MOSTOUFI et al., 2016).

Em muitos dos fluxos gás-sólido as partículas apresentam líquido livre em sua superfície, o que faz a força de ponte líquida dominante quando comparada a outras forças. Este tipo de fluxo gás-sólido pode ser encontrado em processos como recobrimento, secagem, reações químicas, transporte pneumático, entre outros. Porém, a modelagem destes fenômenos é uma tarefa difícil visto que para que o mesmo seja representado do modo mais realístico possível são envolvidos muitos parâmetros, os quais se forem todos considerados inviabilizam a simulação (MOSTOUFI et al., 2016).

Dessa forma, algumas simplificações podem ser adotadas de modo a ter um menor custo computacional como, por exemplo, a consideração de que a força ponte líquida é formada pela somatória das forças capilares e viscosas. Maiores detalhes do equacionamento desse tipo de modelagem podem ser encontrados nos trabalhos de Mikami et al. (1998) e Li et al. (2011).

Outra maneira de avaliar as forças interpartículas é através de alguns índices obtidos empiricamente, como razão de Hausner, tensão de cisalhamento e ângulo de repouso. Avaliando o ângulo de repouso, parte-se do princípio que os efeitos advindos da competição entre as forças interpartícula e inerciais determinam o comportamento do material polidisperso. Logo, à medida que aumenta a razão da força interpartícula para força inercial o material se torna mais coeso e o ângulo de repouso aumenta (TEGZES et al., 1999).

No trabalho de Tegzes et al. (1999) foram medidos os ângulos de repouso de partículas esféricas de vidro, com diâmetro de 0,9 mm, variando as dimensões do sistema de medição e o teor de umidade. Os autores observaram um aumento linear do ângulo de repouso com o aumento do teor de umidade do material, sendo tal comportamento observado no regime denominado por estes de granular.

São encontrados vários trabalhos na literatura que se valem da modelagem CFD-DEM para simular leitos fluidizados contendo partículas úmidas, ou seja, modelando as forças interpartículas entre estas, citando Zhu et al. (2011) e Lim et al. (2013) e He et al. (2014).

Como trabalhos mais recentes pode-se citar Watano et al. (2016), onde os autores estudaram a adesão partícula-partícula por uma ponte líquida dinâmica através de simulação numérica direta. Assim, foi simulada a adesão entre duas partículas em colisão mediada por uma gota líquida aglutinante. Neste caso o modelo implementado considerava o movimento das fases líquida, sólida e gasosa.

Foram investigados os efeitos da molhabilidade das partículas em uma velocidade crítica para a adesão destas, ou seja, um estudo sobre a adesão entre partículas colidindo. Os autores (Watano et al., 2016) reportaram que a velocidade crítica exibiu um valor máximo local com um aumento no ângulo de contato, enquanto a força da ponte líquida estática diminuiu monotonicamente com o aumento do ângulo de contato. Logo, concluíram que houve um efeito combinado da força instantânea e da deformação dinâmica da ponte líquida, resultando na dependência não monotônica da velocidade crítica para a adesão das partículas no ângulo de contato.

No trabalho de Song et al. (2017) foi simulado um leito fluidizado denso, em duas dimensões, utilizando modelagem CFD-DEM para avaliar as características de fluidização de

partículas úmidas. Para simular a colisão das partículas úmidas foi utilizado um modelo de contato com histerese. Tal modelo de colisão era apto a prever os comportamentos de rebote e aderência das partículas sob influência da velocidade de colisão, teor de umidade, viscosidade líquida e tensão superficial. Foi observado nos resultados da simulação que as partículas úmidas se aglomeraram com a passagem do gás, sendo que as bolhas que estavam se formando no leito tornaram-se canais preferenciais de gás. Também foi verificado que com o aumento da coesão entre partículas a recirculação interna destas foi restringida e os canais de gás tornaram-se estáveis.

Ainda são raros trabalhos que abordem a simulação de partículas úmidas em leito fluidizado rápido. Um destaque fica para o trabalho de Wang et al. (2014), neste foram estudados o comportamento dos fluxos para partículas sob diferentes teores de umidade e também uma análise quantitativa de aglomerados de partículas úmidas sendo arrastadas num *riser*.

Neste caso os autores desenvolveram um código FORTRAN para simular o fluxo gás-sólido no *riser*. Além disso, o *riser* foi simulado em duas dimensões, com medidas de 0,5 m de altura e 0,04 m de largura, com velocidade do gás de 2,5 m/s. As partículas usadas eram esferas de vidro com dimensões de 0,02 mm, não sendo especificada sua densidade, porém, no trabalho que foi comparado pelos autores para validação dos resultados o valor da densidade das esferas era de 2400 kg/m^3 , sendo provavelmente este o valor utilizado.

Para gerar o efeito de fluxo circulante as partículas que eram arrastadas para fora do *riser*, na parte superior, eram imediatamente inseridas na parte inferior, em uma posição aleatória e com velocidade zero.

As principais observações a partir dos resultados das simulações foram que tanto para partículas secas como úmidas o fluxo gás-partícula seguiu um padrão “*core-annulus*” em que as velocidades são menores nas paredes e maiores no centro do *riser*. Devido a tal fenômeno, Wang et al. (2014) observaram que havia uma diferença de velocidade próximo das paredes que propiciava o retorno e mistura das partículas nesta região. Para as partículas secas a estrutura do fluxo vertical observado foi a divisão em duas regiões sendo uma densa na parte inferior e uma diluída na superior. No caso das partículas úmidas o comportamento foi justamente o contrário, com maiores aglomerados de partículas na parte superior e uma região mais diluída na parte inferior.

A Figura 46 apresenta o resultado de uma das simulações de Wang et al. (2014) com partículas úmidas. Segundo os autores, tal comportamento é devido às partículas secas se

unirem de maneira soltas próximas das paredes, sendo que os aglomerados vão se dispersando com a evolução do fluxo. Já no caso das partículas úmidas estas começam a se aglomerar nas partes mais altas do *riser* devido ao aumento de choques entre as mesmas, com atuação da força ponte líquida.

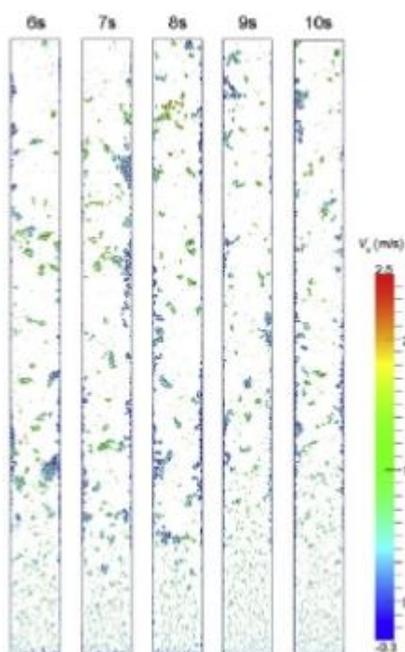


Figura 46: Simulação do movimento das partículas úmidas no riser. (Wang et al., 2014)

Novamente, é reforçado o fato que simulações avaliando especificamente biomassas, incluindo bagaço de cana, em transporte pneumático ou leito fluidizado rápidos são raras, destacando a inovação do presente estudo para diversas utilizações na indústria.

CAPÍTULO 3

SOFTWARE ROCKY DEM®

Neste trabalho foram utilizados os softwares ANSYS Fluent® e Rocky DEM® nas simulações. A seguir apresenta-se um detalhamento do software Rocky DEM®.

O software Rocky DEM®, pertencente às empresas GDI e ESSS, foi desenvolvido com o intuito de melhorar a solução de problemas que envolvem a modelagem de elementos discretos, sendo um poderoso software 3D que simula de forma rápida e precisa o comportamento do fluxo granular de partículas com diferentes formas e tamanhos dentro de um tubo de transporte, em moinhos ou em outros equipamentos de manipulação de materiais (ROCKY, 2017).

Algumas capacidades diferenciais que destacam o software Rocky DEM® de outros códigos para resolução de modelos DEM incluem a sua capacidade de processamento em Multi-GPU, discretização de partículas não arredondadas, aptidão para simulação de quebras de partículas sem a perda de massa ou volume, visualização do desgaste de superfícies, entre outras (ROCKY, 2017).

Além disso, a conexão entre os softwares ANSYS Fluent® e Rocky DEM® foi especialmente desenvolvida de modo que a tarefa de configurar o acoplamento CFD-DEM fosse fácil, menos propensa a erros e garantindo a consistência entre as físicas envolvidas (ROCKY, 2017).

O software Rocky DEM® simula fluxos de partículas por meio do método dos elementos discretos e, portanto, não necessita da criação de malhas para tal. Assim, não é necessária nenhuma lei constitutiva de tensão-deformação do material, ao invés disso, uma relação de tensão-deformação pode ser obtida como resultado do modelo DEM. A malha, contendo os volumes de controle do domínio fluido, é utilizada apenas pelo software ANSYS Fluent® para a resolução do meio contínuo (ROCKY, 2017).

Com relação à análise do algoritmo de uma simulação no software Rocky DEM®, tal simulação começa com a importação da geometria a ser avaliada, seguida da configuração dos grupos de partículas, escolhendo seus formatos, dimensões, densidades, entre outras propriedades. O software Rocky DEM® apresenta alguns formatos padrão de partículas simples que podem ser editados, Figura 47, mas também permite que o usuário crie seu próprio formato e o exporte para utilização.

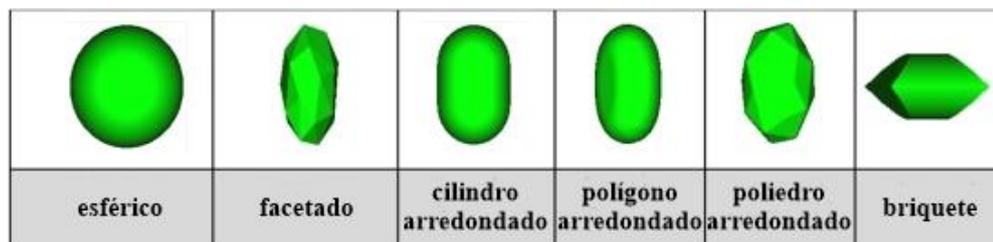


Figura 47: Formatos padrões de partículas disponíveis no software Rocky DEM® aptos a edição. (ROCKY, 2017)

Os diferentes formatos de partículas disponíveis no software Rocky DEM® permitem a criação de variados tipos de elementos a serem simulados como grãos, rochas, medicamentos, entre outros, conforme apresentado na Figura 48.

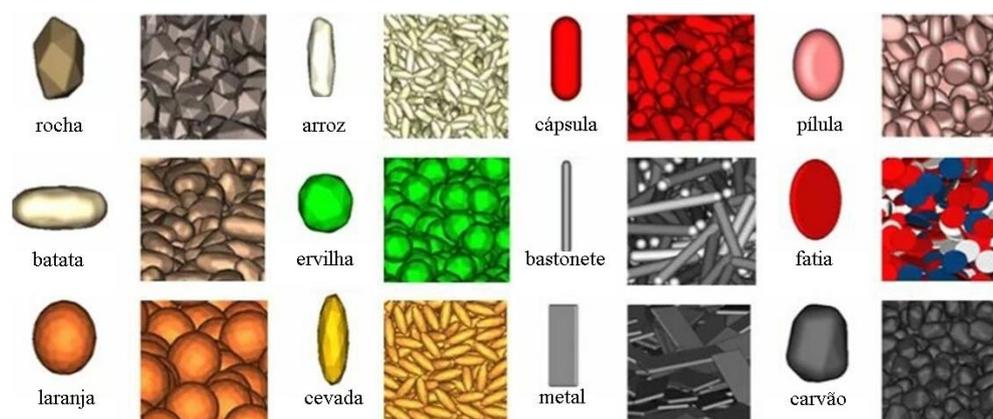


Figura 48: Alguns exemplos de elementos que podem ser simulados. (ROCKY, 2017)

Esse modo de representação das partículas tem mais aspectos favoráveis do que contrários quando comparado com o modelo de multi-esferas, presente na maioria dos pacotes softwares comerciais, tais como, PFCTM, STAR-CDTM, EDEM®, entre outros. A Tabela 4 resume a comparação de alguns pontos.

Tabela 4: Comparação entre os modelos de esferas unidas e de formatos poliédricos (Rocky DEM[®]) para representação de partículas

Parâmetro comparado	Modelo multi-esferas	Modelo partícula simples
Detecção do contato	Fácil	Difícil
Acurácia	Pobre	Muito acurado
Atrito	Superfícies irregulares causam atritos maiores que a realidade	Não há indução de atrito na simulação
Razão de Aspecto	Grandes relações de aspecto, bordas afiadas e cantos são limitações	Grandes relações de aspecto, bordas afiadas e cantos são representados com acurácia
Ruptura	Não permite a quebra a não ser que uma cadeia de esferas ligadas seja usada	Podem quebrar e passar a ter diferentes formatos

Fonte: ROCKY, 2017

Antes do início da simulação também são definidos as leis e os parâmetros das interações partícula-partícula e partícula-contorno, bem como, o tipo de acoplamento.

O software Rocky DEM[®] permite dois tipos de acoplamentos, denominados: acoplamento uma via e acoplamento duas vias. No acoplamento uma via nenhuma informação é transferida do software Rocky DEM[®] para a solução CFD, ou seja, apesar da presença das partículas no sistema estas não afetam o campo de fluxo.

Dessa forma, não há recomendações especiais ou limitações adicionais que devem ser consideradas na solução CFD devido ao esquema de acoplamento. O importante neste caso é que a simulação CFD, realizada antes do acoplamento com o software Rocky DEM[®], forneça o melhor resultado possível. Assim, as costumeiras recomendações para geração da malha para

simulações CFD devem ser seguidas, tais como, evitar células de baixa qualidade e variações de volumes entre células adjacentes, aumentar a densidade da malha em regiões de forte gradiente de pressão, entre outras.

São exportadas do ANSYS Fluent® derivadas de pressão, extraídas das soluções CFD, que são utilizadas pelo software Rocky DEM® para o cálculo das forças de ascensão e gradiente de pressão adicional. É recomendado, mesmo para o caso da simulação da fase simples com propriedades constantes, que a magnitude e direção da aceleração gravitacional, além da densidade de referência bem como a localização da pressão sejam definidas manualmente, assumindo não existirem condições de contorno que definem referências de pressão.

Na equação de momento resolvida pelo ANSYS Fluent®, equação 81, a solução do campo de pressão modificada (p') representa a variação da pressão estática devido ao fluxo e à pressão hidrostática na densidade de referência, dada pela equação 82.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g v_g) + \nabla(\rho_g v_g v_g) = -\nabla p' + \nabla \tau_g + \rho_g g \quad (81)$$

$$p' = p - \rho_0 \vec{g} \vec{r} \quad (82)$$

Onde, ρ_0 é a densidade de referência [kg/m³];
 \vec{g} é o vetor gravidade (constante) [m/s²];
 \vec{r} é o vetor posição [m];

Configurando a densidade de referência para 0 kg/m³ todas as contribuições hidrostáticas serão explicitamente contabilizadas dentro da solução de pressão e serão transferidas para o Rocky quando os dados forem exportados.

Caso a simulação seja estável, também é possível ajustar a pressão de referência para 0 Pa. Embora não seja necessário, ela permite que se obtenha a pressão absoluta, incluindo a pressão hidrostática para pós-processamento no ANSYS Fluent® e também no software Rocky DEM®, após importação dos dados.

A gravidade, pressão de referência, localização da pressão de referência e a densidade de referência podem ser configuradas no ANSYS Fluent® dentro da caixa de diálogo *Operating Conditions* no painel *Cell Zone Conditions*.

Como limitação ao acoplamento uma via o mesmo se adequa melhor a situações em que a carga de partículas é baixa e os parâmetros de acoplamento são quase nulos. Além dessa, algumas outras limitações de tal acoplamento podem ser listadas, tais como:

No ANSYS Fluent[®] só podem ser utilizadas simulações 3D no modo de precisão dupla;

Do Fluent só devem ser exportadas as soluções CFD se o último passo de tempo ou o estado estacionário do campo de fluxo tiverem sido atingidos;

No Fluent devem ser utilizados apenas domínios fluidos na simulação CFD (sem domínios sólidos);

No Fluent o caso deve estar assegurado que foi configurado para fase simples ou Volume of Fluid (VOF) multifásico.

O outro tipo de acoplamento permitido pelo software Rocky DEM[®] é denominado duas vias, neste caso as partículas fazem parte do fluxo fluido e seu movimento é afetado pela interação com outras partículas e pelo fluido ao seu redor enquanto que o fluxo fluido também é afetado pela presença das partículas.

Assim, o software Rocky DEM[®] fica responsável pelos cálculos das forças exercidas pelo fluxo sobre as partículas, incluindo a força devido ao gradiente de pressão, força de arraste e força de massa virtual. Já o software ANSYS Fluent[®] calcula o efeito da reação de tais forças aplicado sobre a fase fluida.

Para a resolução dos casos com acoplamento duas vias, é utilizado um módulo de acoplamento que permite ambos os softwares realizarem os cálculos em paralelo, significando uma redução do tempo de simulação para este tipo de acoplamento visto que os softwares não competem por recursos computacionais.

Dessa forma, como o software Rocky DEM[®] consegue processar os cálculos utilizando unidades de processamento gráfico (GPU), é possível configurar a simulação para que os cálculos CFD sejam realizados em núcleos CPU e os cálculos DEM em cartões GPU de modo a melhorar o desempenho do acoplamento.

Neste tipo de acoplamento o software Rocky DEM[®] determina a porosidade de cada volume de controle por um procedimento de médias similar àquele apresentado no item 2.3.2.2, distribuindo o volume das partículas que estão posicionadas no limite da célula entre as células adjacentes.

Tal procedimento permite avaliar muitas partículas dentro de uma mesma célula, portanto, os volumes de controle para realização dos cálculos CFD devem ser maiores que o

volume da maior partícula do sistema. Obviamente pode ocorrer de alguns volumes de controle gerados serem menores que as dimensões da partícula devido a detalhes da geometria ou a presença de fortes gradientes na região, mesmo assim os cálculos continuam sendo realizados pelo software, porém, os resultados do acoplamento nestas regiões são menos acurados. Logo, as tradicionais recomendações para geração de dimensões de malha CFD para captura precisa de efeitos na camada limite podem ser ignoradas neste caso.

Para a configuração de um acoplamento CFD-DEM duas vias o software ANSYS Fluent[®] deve ser configurado com o modelo Euleriano multifásico, onde uma das fases deve ser definida como sendo fase partículas. Tal procedimento considera que o número de fases deve ser o número de fases fluidas +1, uma vez que as partículas serão representadas pela fase adicional.

A fase partícula deve ser configurada como fase secundária e os termos da mudança de momento entre os fluidos e partículas são calculados pelo software Rocky DEM[®], portanto, os coeficientes de transferência de momento entre as fases partícula e fluida não necessitam ser configurados, a menos que exista mais de uma fase fluida e, neste caso, a interação entre as fases fluidas deve ser devidamente configurada. Características das partículas, coeficientes de transferências entre fases e propriedades do material da fase particulada são definidos no software Rocky DEM[®].

Como o software Rocky DEM[®] é responsável pela solução da fase particulada, informações da fração volumétrica e velocidades das partículas devem vir do solucionador DEM, assim, as frações volumétricas e velocidades da fase particulada devem ser configuradas com o valor zero na inicialização e nos contornos. No software ANSYS Fluent[®], na inicialização do campo de fluxo, a fração volumétrica da fase particulada também deve ser configurada como zero no domínio. As frações volumétricas das partículas vão sendo atualizadas com o decorrer do processo de acoplamento.

No software ANSYS Fluent[®], deve ser utilizado o método SIMPLE fase acoplada (PC-SIMPLE) como método de acoplamento pressão-velocidade, bem como, um esquema transiente de primeira ordem. Também é recomendado a definição de um passo de tempo razoável, uma vez que este será atualizado logo que o acoplamento se inicia, de modo a ser um múltiplo inteiro do passo de tempo utilizado no software Rocky DEM[®].

Citando algumas limitações do acoplamento duas vias, têm-se:

No ANSYS Fluent[®] só podem ser utilizadas simulações 3D no modo de precisão dupla;

O software ANSYS Fluent[®] pode ser executado apenas nos modos serial ou paralelo local; o número de processadores é definido na interface de acoplamento do Rocky DEM[®];

No ANSYS Fluent[®] apenas o acoplamento do momento é permitido com o acoplamento multifásico Euleriano. Modelos de transferência de energia, transporte de espécies e transferência de massa não são permitidos;

No ANSYS Fluent[®] não são suportadas malhas móveis ou adaptáveis. Também não sendo permitida a inclusão de termos fontes adicionais, funções definidas pelo usuário (UDF) e escalares definidos pelo usuário.

Retomando a análise do algoritmo de resolução utilizado pelo software Rocky DEM[®], em suma, após a definição das principais propriedades e leis de interação entre partículas e fluido pelo usuário, o algoritmo primeiramente localiza todos os contornos e as partículas na vizinhança com as quais a partícula entrará em contato. Em seguida são calculadas as somas de todas as forças e momentos que agem nas partículas, podendo incluir junto desta etapa os cálculos referentes a um dos dois tipos de acoplamento com CFD previamente descritos.

Posteriormente, a simulação DEM utiliza as informações a respeito das posições e velocidades atuais de cada partícula para movê-las a suas novas localizações na simulação. A partir daí o processo é retomado ao início e assim, continua sucessivamente, até que o tempo de simulação seja atingido.

Uma descrição mais detalhada do algoritmo de acoplamento CFD-DEM foi apresentada no item 2.3.2.2. Com relação aos modelos de forças de contato utilizados pelo software Rocky DEM[®], os mesmos são: modelo elasto-plástico para determinação da força de contato; modelos adesivos de força normal e força linear, para determinação da força de adesão entre partículas e contornos; modelo elástico com atrito, para determinação da força de contato tangencial. Tais modelos são descritos em detalhes no capítulo 4.

O código do software Rocky DEM[®] foi escrito de modo a possibilitar a utilização da plataforma CUDA (*Compute Unified Device Architecture*), que a grosso modo é uma extensão para a linguagem de programação C, que permite a utilização da computação paralela. Com isso, é possível acelerar a carga de trabalho computacional usando unidades de processamento gráfico (GPU), também conhecidas como placas de vídeo. Desse modo, a GPU passa a atuar como se fosse mais uma CPU executando os cálculos dentro da máquina. A

unidade de processamento gráfico (GPU- *Graphical Processor Unit*) é um processador paralelo que pode executar bilhões de operações aritméticas.

O fluxo de processamento da plataforma CUDA, de modo simplista, se inicia com a cópia de dados da memória principal para a GPU. Em seguida, o processador aloca o processo para a GPU, que executará os cálculos simultaneamente em seus núcleos. Assim que obtidos os resultados os mesmos seguem caminho inverso, ou seja, são copiados da memória da GPU para a memória principal.

Todo o processamento na GPU é realizado pelos denominados núcleos CUDA, que podem ser comparados a núcleos de um processador comum, logo, quanto mais núcleos a placa de vídeo possuir, mais rápida se torna a simulação.

Para se ter uma dimensão do quão rápida a simulação utilizando GPU se torna quando comparada com o uso de CPU, a empresa Engissoft forneceu o gráfico, Figura 49, que compara os tempos de simulação utilizando CPU e diferentes placas de vídeo. A simulação avaliada nos testes era de um sistema de transferência de partículas por calhas, com aproximadamente um milhão destas, com tempo de simulação de 10s e passo de tempo de 10-4s.

Os hardwares testados para comparação foram: Processador Intel Core E5-2690 com 16 núcleos; GPU NVIDIA Tesla K40 e GPU NVIDIA Titan Black.

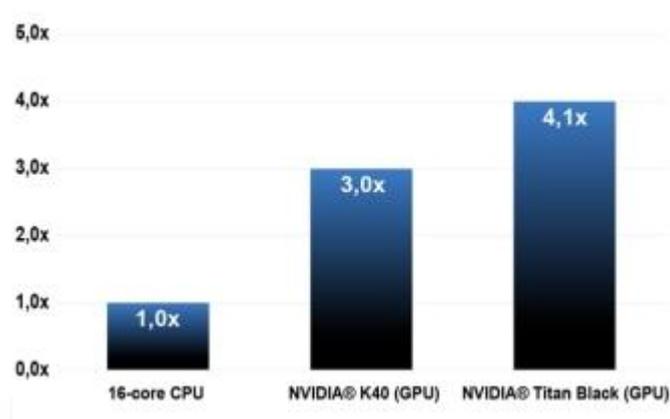


Figura 49: Incremento de velocidade de simulação no software Rocky DEM® possibilitado pelo uso de GPU. (ENGISOFT, 2017)

Considerando como referência o tempo de execução de 26 horas da CPU fica evidente o aumento de velocidade de simulação apresentado pelas GPUs.

Com respeito ao pós-processamento, o software Rocky DEM® fornece ao usuário uma interface repleta de recursos integrada a seu pacote para análise de resultados, muitos destes raramente encontrada nos softwares mais populares disponíveis no mercado, variando desde a criação de gráficos, geração de tabelas, até a avaliação por meio de vídeos.

Portanto, devido às características positivas do software Rocky DEM® em simulações envolvendo a resolução de modelos Eulerianos-Lagrangeanos, optou-se pelo seu uso em conjunto com o software ANSYS Fluent® para o desenvolvimento do presente trabalho.

CAPÍTULO 4

MATERIAIS E MÉTODOS

No presente trabalho foi realizado o estudo teórico da separação de partículas de bagaço de cana em um tubo elutriador por meio de simulação computacional utilizando, para tanto, uma abordagem Euleriana-Lagrangeana.

Utilizou-se os dados presentes na tese de Lenço (2010) em que o autor caracteriza as frações do bagaço de cana separadas em um equipamento elutriador, cujo princípio de funcionamento é o mesmo do classificador pneumático de bagaço (Almeida, 2012) alterando o formato do riser, que neste caso é um tubo circular de 1,5m de altura e diâmetro fixo de 0,1m, como apresentado na Figura 50.

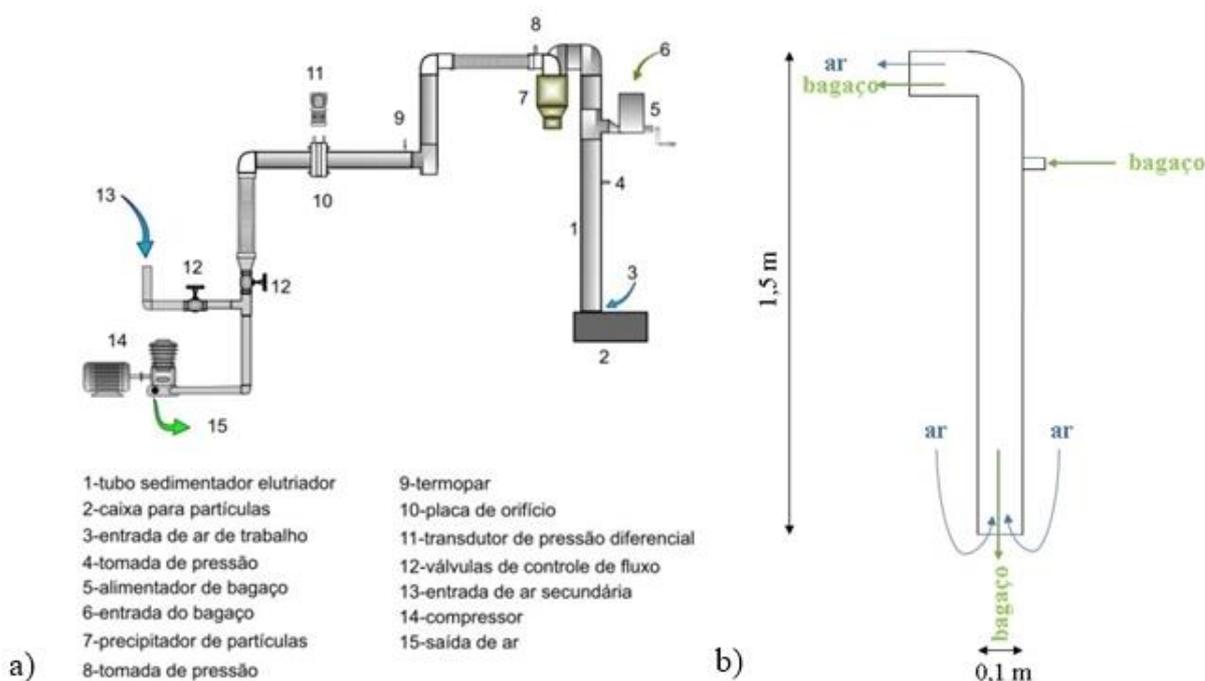


Figura 50: a) Esquema do equipamento elutriador utilizado nos experimentos de caracterização (LENÇO, 2010) b) zoom no tubo sedimentador elutriador com suas respectivas medidas.

No experimento real conduzido nesse equipamento o autor decidiu, baseado em testes preliminares, por utilizar sete velocidades de separação de partículas, assim, tratava-se

de um único experimento com sete rodadas, sendo as velocidades escolhidas: $0,501 \text{ m.s}^{-1}$; $0,710 \text{ m.s}^{-1}$; $1,062 \text{ m.s}^{-1}$; $1,578 \text{ m.s}^{-1}$; $1,963 \text{ m.s}^{-1}$; $2,277 \text{ m.s}^{-1}$; $> 2,277 \text{ m.s}^{-1}$.

Basicamente o bagaço integral, estando à umidade de equilíbrio de aproximadamente 7%, base úmida, era alimentado e parte dele era elutriado e coletado no precipitador de partículas, enquanto outra parte era coletada por baixo, na caixa de partículas.

A velocidade de passagem do ar era então aumentada e as partículas que foram coletadas pelo fundo, na caixa, eram alimentadas novamente, separando outro grupo de partículas no precipitador, e assim sucessivamente até que todas partículas fossem arrastadas. Os grupos de partículas separados foram então caracterizados, sendo tais informações aquelas utilizadas nas simulações.

Cabe destacar que no trabalho de Lenço (2010) o bagaço foi alimentado manualmente utilizando uma rosca alimentadora de 0,02 m de passo e 0,05 m de diâmetro. No caso deste trabalho, como o objetivo foi a avaliação teórica da separação das partículas de bagaço, optou-se por utilizar como alimentação um funil simples, sendo os diâmetros da abertura maior de 0,2 m e da menor de 0,05 m. As partículas eram então geradas na parte superior do funil e por ação da gravidade desciam pelo mesmo até alcançarem o tubo elutriador. Para estudos futuros do dimensionamento de equipamentos seria interessante uma avaliação teórica a respeito dos possíveis sistemas de alimentação.

A respeito das propriedades do bagaço necessárias para a simulação, algumas foram obtidas diretamente da tese de Lenço (2010), como as densidades e dimensões das partículas, além dessas, outras propriedades de igual importância para o entendimento teórico do processo também foram calculadas a partir de dados obtidos da mesma tese, como a velocidade terminal das partículas. Os resultados experimentais de separação, obtidos por Lenço (2010), foram aqueles utilizados para validar os resultados da simulação realizada no presente trabalho.

A seguir são apresentados os modelos matemáticos e de simulação numérica propostos para descrever o fenômeno de separação de partículas de bagaço, as propriedades do bagaço e do ar utilizadas e os métodos de solução estudados.

4.1 Modelo matemático e simulação numérica

A abordagem Euleriana-Lagrangeana é a mais acurada para descrever o fenômeno de separação pneumática de partículas, visto que tal abordagem leva em consideração a modelagem do contínuo, fluido de escoamento, interagindo com o modelo discreto, que

descreve o movimento das partículas por meio das leis de movimento de Newton, permitindo a obtenção de resultados realísticos.

Por tal abordagem se realiza separadamente a modelagem do fluido, modelo Euleriano, e do movimento de partículas, modelo Lagrangeano, acoplando-os para que seja obtido o resultado final.

4.1.1 Modelagem Euleriana

As equações diferenciais resolvidas e que descrevem a passagem de ar no tubo eluriador foram as equações de Navier-Stokes de conservação de massa e momento como descritas a seguir.

Equação de conservação de massa da fase gasosa:

$$\frac{\partial f_g \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (f_g \rho_g v_g) = 0 \quad (83)$$

Onde, f_g representa a fração volumétrica da fase gasosa;
 ρ_g é a densidade da fase gasosa [kg.m^{-3}];
 v_g é a velocidade média local da fase gasosa [m.s^{-1}];

Equação da quantidade de movimento da fase gasosa:

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_g \rho_g v_g) + \nabla \cdot (f_g \rho_g v_g v_g) = -\nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau}_g + f_g \rho_g g - F^{g-p} \quad (84)$$

Onde, f_g representa a fração volumétrica da fase gasosa;
 ρ_g é a densidade da fase gasosa [kg.m^{-3}];
 v_g é a velocidade média local da fase gasosa [m.s^{-1}];
 p é a pressão [Pa];
 $\vec{\tau}_g$ é o tensor das tensões de cisalhamento do gás [Pa];
 g é a aceleração da gravidade [m.s^{-2}];
 F^{g-p} é a força de interação entre a fase sólida e gasosa [N.m^{-3}];

A condição de contorno imposta ao fluido é a sua velocidade uniforme na entrada do tubo, assim, considerando as suas paredes, inicia-se o desenvolvimento de uma camada limite laminar nas proximidades destas, sendo o escoamento nesta região muito preditivo pelas equações de Navier-Stokes. No entanto, após o fluido percorrer uma distância maior passam a surgir pequenas oscilações caóticas na camada limite, apesar do fato da taxa de escoamento de entrada permanecer constante, e o escoamento inicia a sua transição para turbulento, eventualmente tornando-se completamente turbulento.

A transição dos regimes laminar para turbulento pode ser mensurada pelo número de Reynolds, assim, à medida que o número de Reynolds aumenta, o campo de escoamento passa a apresentar pequenos vórtices e as escalas espacial e temporal das oscilações se tornam tão pequenas que é computacionalmente inviável resolvê-las utilizando apenas as equações de Navier-Stokes.

Desse modo, para tal regime do escoamento é possível utilizar uma formulação denominada *Reynolds-averaged Navier-Stokes* (RANS), que se vale da observação de que com o passar do tempo o campo de escoamento apresenta oscilações pequenas e locais podendo ser caracterizado em termos dos valores médios das propriedades do escoamento e de algumas propriedades estatísticas de suas flutuações.

No presente trabalho, o modelo de turbulência RANS utilizado foi o modelo k-ε, o qual resolve duas equações de transporte separadas obtendo a energia cinética turbulenta, k, e a dissipação de energia cinética, ε. O modelo k-ε utiliza funções de parede, ou seja, ignora o campo de escoamento na camada onde as tensões turbulentas começam a predominar sobre as tensões viscosas e computa analiticamente a velocidade do fluido na parede. Assim, ao utilizar a função de parede é assumida uma solução analítica para o escoamento na camada viscosa resultando em uma significativa diminuição de recursos computacionais para os cálculos. Portanto, as principais vantagens do modelo k-ε são os requisitos de memória relativamente baixos e a sua boa taxa de convergência.

No modelo k-ε padrão, a energia cinética turbulenta, k, e sua taxa de dissipação, ε, são obtidas pelas seguintes equações de transporte (LAUNDER; SPALDING, 1974):

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_g \rho_g k) + \nabla \cdot (f_g \rho_g \bar{v}_g k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu_{g+} + \frac{\mu_{g,t}}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - f_g \rho_g \varepsilon \quad (85)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_g \rho_g \varepsilon) + \nabla \cdot (f_g \rho_g \bar{v}_g \varepsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\mu_{g+} + \frac{\mu_{g,t}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} f_g \rho_g \varepsilon) \quad (86)$$

Em que as constantes tomam os valores: $C_{\varepsilon 1} = 1,44$; $C_{\varepsilon 2} = 1,92$; $\sigma_k = 1,0$ e $\sigma_\varepsilon = 1,3$. P_k é o produto turbulento devido às forças viscosas e de empuxo, expresso por:

$$P_k = \mu_{g,t} \nabla_{V_g} \cdot (\nabla \bar{v}_g + \nabla \bar{v}_g^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \bar{v}_g (3\mu_{g,t} \nabla \cdot \bar{v}_g + f_g \rho_g k) + P_{kb} \quad (87)$$

Considerando o termo de produção de empuxo, P_{kb} , nulo já que não ocorre a geração de turbulência pelo mesmo.

Maiores detalhes sobre o modelo k- ε podem ser consultados no trabalho de Launder e Spalding (1974).

Para que seja obtida a solução particular de um problema envolvendo um sistema de equações diferenciais parciais, como as descritas anteriormente, é necessário que sejam conhecidas as condições iniciais e de contorno do problema.

Assim, para o escoamento do fluido pelo tubo adotou-se como condição inicial que tal escoamento estava em repouso, ou seja, as velocidades e a pressão no tubo foram consideradas inicialmente nulas.

Como condições de contorno adotou-se que nas paredes do tubo a condição era de não deslizamento, a entrada de ar do tubo foi governada pela magnitude da velocidade de entrada, variando seu valor para cada simulação, e na saída do ar foi imposta uma condição de pressão igual a zero, com o objetivo de promover um gradiente de pressão que provoque o escoamento através do tubo.

4.1.2 Modelagem Lagrangeana

As forças de contato usadas pelo Método dos Elementos Discretos (DEM) consistem de duas partes, contato normal ao plano e contato tangencial ao plano. O plano de contato é um plano perpendicular em uma linha que conecta os pontos mais próximos entre partículas e paredes.

Assim, os algoritmos para determinação do plano de contato para partículas não esféricas, como as simuladas nesse estudo, levam em consideração os cálculos para uma das seguintes opções: o ponto mais próximo entre duas partículas; ou os pontos mais próximos de uma partícula e um triângulo; ou os dois pontos com a distância máxima de sobreposição no caso de um contato físico.

Um modelo que prediz com boa acurácia a força normal de contato é o dito modelo elástico-plástico. O modelo elástico-plástico segue dois requerimentos principais, que são: a força tem de ser repulsiva; e a força de contato normal tem de permitir significativa dissipação de energia, uma vez que um meio granular é um sistema extremamente dissipativo.

Neste trabalho foi utilizada uma combinação entre o modelo elasto-plástico com histerese, aplicado na direção normal da colisão, e o modelo viscoelástico linear com atrito, aplicado na direção tangencial da colisão.

Nos itens seguintes são apresentadas algumas características dos modelos adotados na realização desse trabalho para a determinação das forças normal e tangencial durante a colisão das partículas.

4.1.2.1 Modelo elasto-plástico

Na colisão de duas partículas compostas de material elástico, na direção normal, ocorre a dissipação de energia cinética devido a uma onda de tensão que se propaga através das partículas. A quantidade de energia dissipada vai depender de propriedades do material, bem como da magnitude da velocidade do impacto.

Assim, ocorrendo altas velocidades de impacto, a energia cinética de colisão pode ser convertida em três formas, que são: energia de deformação elástica, energia de deformação plástica e ondas de propagação através da partícula.

A energia de deformação elástica fica armazenada nas partículas em colisão, já a plástica causa a deformação da partícula. Uma vez que a deformação plástica é irreversível, a energia de deformação plástica não se conserva após o desprendimento do contato das partículas, diferentemente da energia de deformação elástica que é convertida em energia cinética no rebote.

Alguns trabalhos, como o de Zhang e Vu-Quoc (2002), demonstraram que a deformação plástica é a principal responsável pela dissipação de energia cinética durante a colisão se comparada à onda de propagação.

Desse modo, o modelo de colisão pode ser dividido em duas fases: a fase de carregamento, em que ocorre a compressão entre as partículas, e a fase de descarga, onde ocorre a restituição das partículas.

Segundo Mostoufi et al. (2016), a fase de carregamento obedece ao modelo de Hertz (1882), que foi o primeiro a descrever a colisão entre partículas esféricas na direção normal.

Porém, a fase de descarga, devido à perda de energia na colisão, diverge do modelo de Hertz deixando de seguir a curva de carregamento.

Assim, a inclinação da curva de carregamento é a mesma independente da velocidade de impacto, já a curva de descarga apresenta maiores inclinações quanto maiores forem as velocidades de choque. Isto significa que na curva de descarga a fração de energia cinética dissipada aumenta com o aumento da velocidade de impacto.

Uma ilustração de uma curva que relaciona a força normal de colisão, F^n , com a sobreposição normal, δ_n , de uma partícula colidindo contra uma superfície plana é apresentada na figura 51.

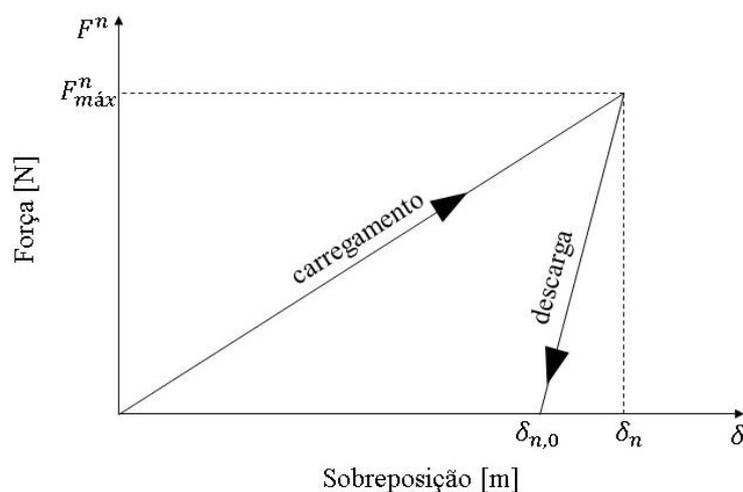


Figura 51: Típica curva de carregamento e descarga em uma colisão elasto-plástica normal.

Da figura 51 se nota que a fase de descarga se inicia quando a máxima sobreposição normal é atingida na colisão, sendo a área entre as curvas de carregamento e descarga representativa da energia cinética dissipada.

O modelo que foi utilizado no presente trabalho foi aquele desenvolvido por Walton e Braun (1986) que se trata de um modelo força normal com histerese. Tal modelo apresenta uma curva linear no carregamento, representada pela rigidez de uma mola, e uma curva também linear, porém mais íngreme, na fase de descarga, representada por uma mola com rigidez maior que aquela do carregamento.

A figura 52 ilustra a representação das forças normais atuando durante a colisão de partículas nas fases de carregamento e descarga segundo o modelo de Walton e Braun (1986), contendo duas molas com rigidezes diferentes.

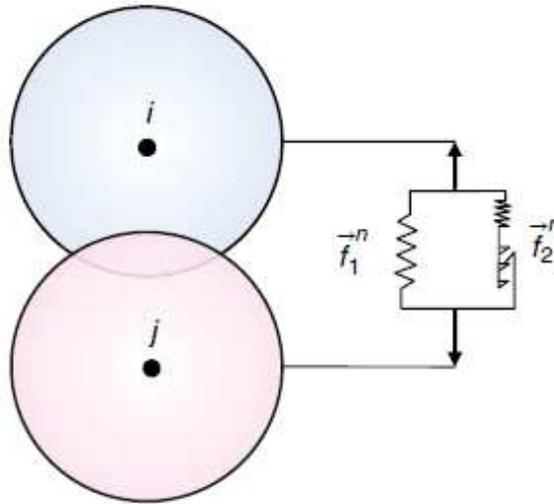


Figura 52: Modelo elasto-plástico esfera macia. (MOSTOUFI et al., 2016)

Assim, na fase de carregamento a mola com menor rigidez é ativada, enquanto que na fase de descarga a mola com maior rigidez governa a força de interação entre as partículas colidindo.

A força normal pode então ser calculada segundo equação 88.

$$\vec{F}_{ij}^n = \begin{cases} -(k_l \delta_n) \vec{n}_{ij} & v_m \geq 0 \\ -k_{ul} (\delta_n - \delta_{n,0}) & v_m < 0 \end{cases} \quad (88)$$

Onde, \vec{f}_{ij}^n é a força normal na colisão [N];

k_l é a rigidez da mola no carregamento [N.m⁻¹];

k_{ul} é a rigidez da mola na descarga [N.m⁻¹];

δ_n é a sobreposição normal [m];

$\delta_{n,0}$ é a sobreposição normal residual após completada a fase de descarga [m];

\vec{n}_{ij} é o vetor unitário apontando da partícula i para j;

v_{rn} a velocidade relativa no ponto de contato na direção normal [m.s⁻¹];

O coeficiente de restituição normal, e_n , é definido pela equação 89.

$$e_n = \sqrt{\frac{k_l}{k_{ul}}} \quad (89)$$

Sendo os valores de k_l e k_{ul} constantes no modelo, por consequência o coeficiente de restituição, e_n , também é constante.

Com relação ao tempo de duração da colisão, t_{col} , o mesmo é uma função das propriedades da partícula e não se altera com a velocidade de impacto, conforme a equação 90.

$$t_{col} = \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{m_{eff}}{k_l}} (1 + e_n) \quad (90)$$

Onde, t_{col} é o tempo de duração da colisão [s];
 m_{eff} é a massa efetiva [kg];
 k_l é a rigidez da mola no carregamento [$N.m^{-1}$];
 e_n é o coeficiente de restituição na direção normal;

Para calcular a sobreposição normal residual é proposta a equação 91, que relaciona os termos da velocidade de impacto, massa efetiva e rigidezes de carregamento e descarga.

$$\delta_{n,0} = \frac{v_{rn,imp} \sqrt{m_{eff}} (k_{ul} - k_l)}{k_{ul} \sqrt{k_l}} \quad (91)$$

Onde, $\delta_{n,0}$ é a sobreposição normal residual [m];
 $v_{rn,imp}$ é a velocidade relativa normal de impacto [$m.s^{-1}$];
 m_{eff} é a massa efetiva [kg];
 k_{ul} é a rigidez da mola na descarga [$N.m^{-1}$];
 k_l é a rigidez da mola no carregamento [$N.m^{-1}$];

4.1.2.2 Modelo elástico com atrito

Para a determinação da força tangencial de contato na colisão foi utilizado neste trabalho um modelo elástico linear com atrito. A característica desse modelo é comportar-se como um modelo elástico simples no início do atrito e obedecer a lei de Coulomb do atrito quando o mesmo se inicia, podendo reproduzir tanto o atrito estático quanto o dinâmico.

Desse modo, caso não haja deslizamento no contato, pode-se calcular a força tangencial conforme a equação 92.

$$\vec{F}_{ij}^t = \mu_s \vec{F}_{ij}^n \quad (92)$$

Onde, \vec{F}_{ij}^t é força tangencial no contato [N];

μ_s é o coeficiente de atrito estático;

\vec{F}_{ij}^n é a força normal no contato [N];

No caso de ocorrer o deslizamento no contato passa a valer a equação 93.

$$\vec{F}_{ij}^t = \mu_d \vec{F}_{ij}^n \quad (93)$$

Onde, \vec{F}_{ij}^t é força tangencial no contato [N];

μ_d é o coeficiente de atrito dinâmico;

\vec{F}_{ij}^n é a força normal no contato [N];

O critério que define se ocorre deslizamento no contato é quando a força tangencial excedo o limite de $\mu_s F_{ij}^n$. No caso de a força tangencial passar a apresentar valores menores que $\mu_d F_{ij}^n$ o contato é considerado sem deslizamento novamente.

4.1.2.3 Modelos adesivos de força normal

A adesão de partículas está relacionada a forças interpartículas, sendo que as forças interpartículas mais comuns são a de van der Waals, pontes líquidas, eletrostáticas e magnéticas. A presença de tais forças pode afetar propriedades de empacotamento das partículas, seu comportamento na fluidização e seu fluxo granular em geral.

Tais forças interpartícula formam ligações atrativas fracas causando a formação de aglomerados de partículas.

Em muitos escoamentos gás-sólido, as partículas apresentam líquido livre em sua superfície, que é o caso de uma das situações estudadas neste trabalho, sendo que nesses casos a força de ponte líquida é dominante em comparação a outras forças.

No entanto, o comportamento real de um filme líquido sobre uma superfície rugosa de uma partícula é um fenômeno muito complexo de ser simulado, pois necessita de um modelo com muitos parâmetros para se tornar preciso.

Assim, têm sido propostos diversos modelos, como aqueles desenvolvidos por Mikami et al. (1998) e Li et al. (2011), que de forma simplificada procuram descrever o fenômeno obtendo-se resultados razoáveis.

O modelo utilizado neste trabalho foi um modelo adesivo de força constante. Tal modelo é simples e inclui apenas dois parâmetros que são:

- Uma distância mínima entre partículas ou superfícies para ativação da força adesiva;
- O valor da força adesiva é expresso como uma fração da força gravitacional sobre a partícula;

Logo, se a fração de força é igual a 1, significa que a força adesiva será igual à força da gravidade aplicada à partícula. No caso do contato entre duas partículas de massa diferentes, a menor dentre as duas é considerada nos cálculos de força da gravidade.

$$F_{n,adh}^t = 0 \quad \text{se } s_n \geq \delta_{adh} \quad (94)$$

$$F_{n,adh}^t = f_{adh} \cdot \min(m_1, m_2) \cdot g \quad \text{se } s_n < \delta_{adh} \quad (95)$$

Onde, $F_{n,adh}^t$ é a força de contato normal adesiva no atual tempo, t [N];

s_n é o overlap normal de contato durante o tempo atual, t (é assumido ser positivo quando as partículas se aproximam umas das outras e negativo quando se separam)

m_1 e m_2 são as massas das partículas em contato [kg];

g é a aceleração da gravidade [$m \cdot s^{-2}$];

f_{adh} é a fração de força;

É importante ressaltar que tal modelo necessita de uma calibração adequada, como por exemplo, a medição de testes de ângulo de repouso do material, de modo que os efeitos adesivos de aglomeração, como aqueles devido à presença de forças de ponte líquida, sejam preditivos.

Para a determinação do valor da constante da fração de força que representa o bagaço úmido procedeu-se à simulação do experimento para determinação do ângulo de repouso do mesmo. Isto porque quando a adesão entre partículas está presente no contato da

interface, a energia se dissipa ao quebrar a ligação adesiva no ponto de separação durante o movimento de rolamento. Assim, quando a adesão está presente, a resistência ao movimento pode ser significativa mesmo na ausência de pressão imposta externamente, com o material formando pilhas com ângulos de repouso maiores do que o material que não apresenta adesão entre partículas (KIM et al., 1998; DOMINIK; TIELENS, 1995).

Pela falta de experimentos na literatura que determinassem o ângulo de repouso do bagaço em específico, optou-se por simular o experimento conduzido por Ileleji e Zhou (2008) em que os autores determinaram o ângulo de repouso da palha de milho preparada, moída em diferentes diâmetros médios de partículas e variando os teores de umidade.

Os pesquisadores utilizaram vários métodos de medição do ângulo de repouso, sendo o escolhido a ser simulado nesse trabalho o método do ângulo de repouso da pilha em base solta. Para tanto, os autores posicionaram a uma altura de 0,23 m da base um funil de ângulo $31,8^\circ$ com relação ao eixo vertical e abertura de 0,032 m (Figura 53).

O material era então despejado no funil que estava com sua abertura inferior inicialmente bloqueada, quando a mesma era liberada o material caía por gravidade e formava a pilha de onde seria medido o ângulo de repouso. Os autores não informaram o número de repetições realizadas, mas reportaram o desvio padrão dos ângulos de repouso mensurados. Os testes foram realizados com o material do modo como obtido do campo e também com três variações dos diâmetros médios de partículas de 6,4 mm, 3,2 mm, e 1,6 mm, sendo que para determinação de tais diâmetros o material foi previamente moído e peneirado. Com relação à umidade, foram feitos testes com o material seco, aproximadamente 6%, base úmida, e úmido, com umidade de aproximadamente 62%, base úmida.

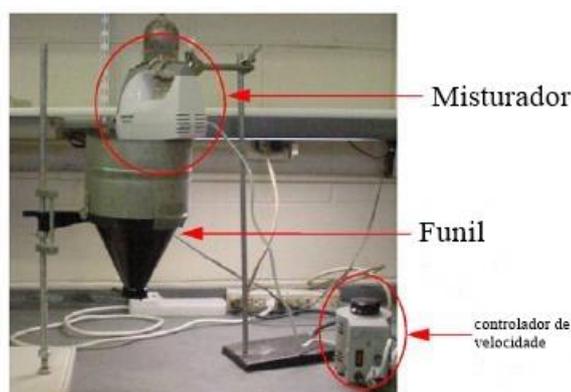


Figura 53: Aparato utilizado para medição experimental do ângulo de repouso da palha de milho. (Adaptado de ILELEJI; ZHOU, 2008)

Após o experimento os autores mediram o ângulo de repouso conforme o esquema apresentado na Figura 54, por meio da equação 96.

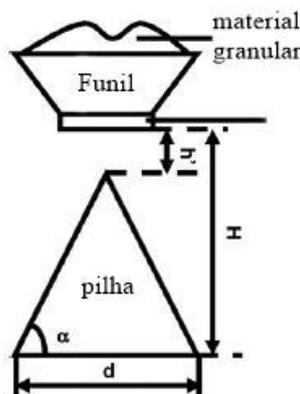


Figura 54: Variáveis utilizadas na medição do ângulo de repouso. (Adptado de ILELEJI; ZHOU, 2008)

Equação utilizada para medição do ângulo de repouso:

$$\alpha^{\circ} = \frac{180}{\pi} \text{ATAN}[2(H-h')/d] \quad (96)$$

Onde, α° é o ângulo de repouso

H é a altura do orifício do funil até o plano abaixo deste

h' é a distância do orifício do funil até o pico da pilha formada

d é o diâmetro da base do cone formado pela pilha

Desse trabalho, os autores obtiveram como resultados que para a palha úmida os valores do ângulo de repouso em graus foram de $49,3 \pm 0,5$, $49,2 \pm 0,5$, $45,0 \pm 0,5$, $45,9 \pm 0,5$, para o material assim que obtido do campo e também após ter sido moído e ficarem retidos nas peneiras de diâmetros 6,4 mm, 3,2 mm, e 1,6 mm, respectivamente.

Cabe ressaltar que devido à manipulação do material e também devido ao aumento da área superficial, à medida que o material foi sendo moído, os autores verificaram que os teores de umidade das amostras úmidas diminuíram devido à secagem natural que ocorreu. Assim, para a amostra logo que obtida do campo a umidade mensurada e usada nos experimentos foi de 63,2%, para a amostra moída e retida na peneira de 6,4 mm o teor de

umidade foi de 57,0%, aquela retida na peneira de 3,2mm o teor de umidade foi de 27,4% e aquela retida na peneira de 1,6mm apresentou teor de umidade de 19,8 %.

Como para o bagaço de cana o teor de umidade costuma ser em torno de 50% logo que obtido da sua moagem na usina e, além disso, nos experimentos conduzidos por Lenço (2010) o diâmetro médio do conjunto de partículas variou nos diferentes grupos de 1,2 mm até 4,4 mm, foi considerado para este trabalho que a obtenção de um ângulo de repouso próximo dos valores entre 45° e 49° seria satisfatória para representar o bagaço úmido.

Assim, foram conduzidas simulações específicas no software Rocky DEM® para determinação do ângulo de repouso, utilizando as dimensões exatas do funil e a distância entre a sua abertura inferior e o anteparo onde era formada a pilha de bagaço, conforme o trabalho de Zhou e Iileji (2008). Desse modo, as simulações foram conduzidas variando-se a fração de força entre as partículas, f_{adh} na equação 95, presente no modelo adesivo de força normal avaliado.

Conforme a fração de força testada era aumentada a força adesiva entre as partículas também aumentava, assim, as partículas que caíam do funil formavam pilhas com ângulos de repouso cada vez maiores. Tal procedimento foi realizado variando a força adesiva até o limite em que as partículas ficaram presas na abertura inferior do funil devido ao fato de serem formados aglomerados de partículas com dimensões maiores que tal abertura.

Ao final das simulações no software Rocky DEM® da descarga das partículas pelo funil foram medidos os ângulos de repouso das pilhas de partículas obtidas. O valor da força adesiva entre partículas que foi adotado nas posteriores simulações de separação, visando representação do bagaço úmido, foi aquele que permitiu a formação de um ângulo de repouso o mais próximo possível ao ângulo de repouso da palha de milho determinado no trabalho de Iileji e Zhou (2008).

4.1.3 Acoplamento entre os modelos Euleriano e Lagrangeano

O acoplamento entre as fases fluido e partícula se dá pela força \vec{F}_i^{g-p} , tal força é estimada na escala das partículas enquanto que seu termo análogo está presente na equação de momento da fase fluida.

Assim, a força \vec{F}_i^{g-p} está presente na segunda Lei de Newton aplicada ao centro de massa de cada partícula, conforme a equação 97.

$$m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = m_i \frac{d^2\vec{x}_i}{dt^2} = \sum_{j \in LC_i} \vec{F}_{ij}^{p-p} + \vec{F}_i^{g-p} + \vec{F}_i^{ext} \quad (97)$$

Onde, m_i é a massa da partícula i [kg];

v_i é a velocidade da partícula i [m.s⁻¹];

x_i é o vetor posição da partícula i [m];

\vec{F}_{ij}^{p-p} representa as forças de interação partícula-partícula agindo na partícula i . A soma é realizada entre todas as forças que estão numa lista de contato da partícula i , LC_i [N];

\vec{F}_i^{g-p} forças de interação fluido-partícula [N];

\vec{F}_i^{ext} representa todas as forças externas atuando na partícula i devido a campos externos uniformes ou não. [N];

Neste trabalho as forças de interação partícula-partícula consideradas foram a de contato normal, tangencial e adesão como descritas nos itens 4.1.2.1, 4.1.2.2 e 4.1.2.3. A única força de campo externo considerada foi a força gravitacional, dada por $F_G = m_i \cdot g$

Já as forças de interação fluido-partículas consideradas foram as forças de arraste e de gradiente de pressão, sendo decomposta linearmente conforme (98).

$$\vec{F}_i^{g-p} = \vec{F}_i^d + \vec{F}_i^{\nabla p} \quad (98)$$

Onde, \vec{F}_i^d é a força de arraste constante [N];

$\vec{F}_i^{\nabla p}$ é a força de gradiente de pressão e pode ser obtida por $\vec{F}_i^{\nabla p} = V_i \nabla p$, onde V_i é o volume da partícula i e p é a pressão [N];

Como mencionado anteriormente, a força F^{g-p} também está presente na equação da variação da quantidade de movimento da fase fluida e representa a força de interação volumétrica partícula-fluido agindo sobre o fluido, devendo ser calculada para cada volume de controle.

Quantidade de movimento na fase fluida:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{f}_g \rho_g v_g) + \nabla \cdot (\bar{f}_g \rho_g v_g v_g) = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau}_f + \bar{f}_g \rho_g g - F^{g-p} \quad (99)$$

Logo, na equação 99 o termo \vec{F}^{g-p} pode ser decomposto conforme (100).

$$\vec{F}^{g-p} = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{i=1}^{k_v} \left(\vec{F}_i^{\nabla p} \right) + \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{i=1}^{k_v} \left(\vec{F}_i^d \right) \quad (100)$$

A primeira soma do lado direito pode ser reescrita como (101).

$$\frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{i=1}^{k_v} \left(\vec{F}_i^{\nabla p} \right) = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{i=1}^{k_v} (V_i \nabla p) = f_p \nabla p \quad (101)$$

Onde, f_p é a fração volumétrica da fase sólida;

p é a pressão [Pa];

k_v é o número de partículas em cada volume de controle;

V_{cell} volume da célula [m^3];

V_i é o volume da partícula [m^3];

Já a segunda soma é definida agora como \vec{F}^A , e a equação 100 pode ser então reescrita como (102).

$$\vec{F}^{g-p} = f_p \nabla p + \vec{F}^A \quad (102)$$

Onde, $\vec{F}^A = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{i=1}^{k_v} \left(\vec{F}_i^d \right)$ [$\text{N} \cdot \text{m}^{-3}$];

A força de arrasto exercida sobre uma única partícula isolada difere daquela que atua sobre uma partícula cercada por outras ao seu redor, sendo necessária a adoção de um coeficiente que corrija tal deficiência.

Assim, para esta condição em específico pode-se reescrever \vec{F}^A conforme a equação 103.

$$\vec{F}^A = \beta (v_g - v_p) \quad (103)$$

Onde, β é o coeficiente que depende da fração de volume da célula onde o arrasto é calculado [$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$];

v_g é a velocidade do fluido [$m.s^{-1}$];

v_p é a velocidade da partícula [$m.s^{-1}$];

O coeficiente β pode ser determinado segundo (104).

$$\beta = \frac{3(1-f_g)\rho_g C_D}{4 d_p} |v_p - v_g| \quad (104)$$

Onde, f_g é a fração volumétrica do fluido;

ρ_g é a densidade do fluido [$kg.m^{-3}$];

C_D é o coeficiente de arraste;

d_p é o diâmetro da partícula [m];

v_p é a velocidade da partícula [$m.s^{-1}$];

v_g é a velocidade do fluido [$m.s^{-1}$];

Na sequência são apresentadas algumas considerações acerca das expressões do coeficiente de arraste, C_D , adotadas neste trabalho. Maiores detalhes a respeito do acoplamento CFD-DEM, como o algoritmo utilizado para a resolução da sequência de cálculos, podem ser consultados no item 2.3.2.2 do Capítulo 2.

No presente trabalho foram simuladas duas situações, a primeira considerou a simulação da fase fluida contínua, no caso o ar, que resolveu o modelo de passagem de tal fluido no tubo pelo método dos elementos finitos, sendo os resultados acoplados com o modelo discreto.

Neste caso apenas os resultados da simulação euleriana são utilizados para prover informações para a simulação discreta acarretando no fato de que apenas o fluido modifica a trajetória das partículas e não o contrário, uma vez que, nenhuma informação da simulação DEM é transferida para a simulação euleriana.

Tal acoplamento é dito Acoplamento Uma Via e sua principal característica é fornecer resultados preditivos quando se trabalha com baixos carregamentos de partículas.

Tratando-se de um escoamento diluído de partículas sendo transportadas pneumáticamente foi escolhido o coeficiente de arraste definido por Ganser (1993) para o cálculo da força de arraste da partícula pelo fluido.

Tal correlação implementa dois fatores de forma, k_1 e k_2 , aplicáveis ao regime de Stokes e de Newton, respectivamente. O primeiro, chamado fator de forma de Stokes (k_1), é definido como a razão entre o coeficiente de arraste de uma partícula esférica e uma partícula de formato genérico, ambos no regime de Stokes ($Re_p < 0,2$). O segundo, dito fator de forma de Newton (k_2), é definido com a razão entre o coeficiente de arraste de uma partícula com um formato arbitrário e o coeficiente de arraste de uma partícula esférica, ambos com $Re_p > 1000$. Logo, a correlação de Ganser é dada pelas equações (105), (106) e (107) (GANSER, 1993).

$$\frac{C_D}{k_2} = \frac{24}{Re_p k_1 k_2} \left[1 + 0,1118 (Re_p k_1 k_2)^{0,6567} \right] + \frac{0,4305}{1 + \frac{3305}{Re_p k_1 k_2}} \quad (105)$$

$$k_1 = \left(\frac{1}{3} \frac{d_n}{d_v} + \frac{2}{3} \phi^{-\frac{1}{2}} \right)^{-1} - 2,25 \frac{d_v}{D} \quad (106)$$

$$k_2 = 10^{1,8148(-\log_{10} \phi)^{0,5743}} \quad (107)$$

Onde, C_D é o coeficiente de arraste;
 k_1 é o fator de forma de Stokes;
 k_2 é o fator de forma de Newton;
 d_n é o diâmetro de uma partícula esférica com a mesma área projetada da partícula real na direção do fluxo [m];
 d_v é o diâmetro de uma partícula esférica com o mesmo volume de uma partícula real [m];
 ϕ é a esfericidade;
 D é o diâmetro do tubo [m];

No outro modo de acoplamento dito Acoplamento Duas Vias, as partículas fazem parte do escoamento de fluido e interagem com o mesmo, ou seja, o movimento das partículas é afetado pela presença de outras partículas, paredes, e o fluido em volta, enquanto o fluido também é afetado pela presença das partículas.

Para esse caso, ocorrendo a aglomeração de partículas, por exemplo, devido à presença de umidade o que provoca a adesão entre essas, o leito passa a ser denso e outras correlações de coeficiente de arraste devem ser utilizadas para prever esse fenômeno.

Para este trabalho o coeficiente de arraste escolhido foi o proposto por Di Felice (1994). Nesse caso, trata-se de uma correlação de coeficiente de arraste baseada em dados experimentais de arraste de partículas simples adaptada para o caso do escoamento denso de partículas.

A correlação em questão é dada por:

$$C_D = C_{D0} f_g^{2-\gamma} \quad (108)$$

Onde, C_D é o coeficiente de arraste;

C_{D0} é a correlação de DallaValle (1948) para o cálculo do coeficiente de arraste de uma partícula esférica simples;

f_g é a fração volumétrica do fluido;

γ é o índice calculado de acordo com o número de Reynolds da partícula baseado na velocidade superficial relativa, dada por $f_g \cdot Re$;

Sendo,

$$C_{D0} = \left(0,63 + \frac{4,8}{Re^{0,5}} \right)^2 \quad (109)$$

e,

$$\gamma = 3,7 - 0,65 \exp \left\{ \frac{-[1,5 - \log_{10}(f_g Re)]^2}{2} \right\} \quad (110)$$

A correlação utilizada para calcular o torque exercido pelo fluido sobre a partícula foi o Modelo C, descrito no item 2.3.2.1.3.3 do capítulo 2.

4.2 Propriedades do bagaço utilizada nas simulações

Os principais dados necessários para a realização dos setups das simulações foram obtidos de experimentos reais realizados por LENÇO (2010) e/ou calculados a partir destes.

A Tabela 5 a seguir apresenta os dados determinados por Lenço (2010).

Tabela 5: Principais dados utilizados na simulação pneumática de bagaço de cana

Grupo	Velocidade de separação (m/s)	massa de bagaço de cana (kg)	D_p (mm)	L (mm)	Densidade do bagaço seco (kg/m^3)
1	0,501	0,00924	0,28	0,61	545,3
2	0,710	0,00579	0,91	2,86	143,2
3	1,062	0,01091	1,64	5,87	164,3
4	1,578	0,01301	1,91	7,36	287,0
5	1,963	0,00609	3,17	12,79	248,0
6	2,277	0,00337	3,18	13,17	273,7
7	>2.277	0,01174	3,29	13,18	471,5

Nessa tabela é possível verificar os grupos de partículas de bagaço separadas no trabalho de Lenço (2010), bem como as respectivas velocidades experimentais observadas para sua separação e a massa de bagaço separada.

Optou-se por não simular o grupo 1 de partículas, cerca de 450.000, número estimado a partir da massa de uma partícula com relação à quantidade de massa total de partículas de tal grupo, isto porque quase todas as partículas desse grupo certamente seriam arrastadas pelo ar devido às velocidades escolhidas, apresentadas mais à frente. Assim, o tempo de simulação aumentaria muito considerando o poder computacional disponível tornando, as simulações inviáveis. No entanto, a simulação com os outros grupos de partículas, representando 82% da massa de bagaço verdadeira, pode ser considerada significativa e representar de modo confiável os dados reais.

O diagrama com a distribuição do tamanho de partículas, baseado nos dados obtidos por Lenço (2010), é apresentado na Figura 55. Assim, a massa de bagaço utilizada na simulação apresentou essa mesma distribuição de tamanho de partícula.

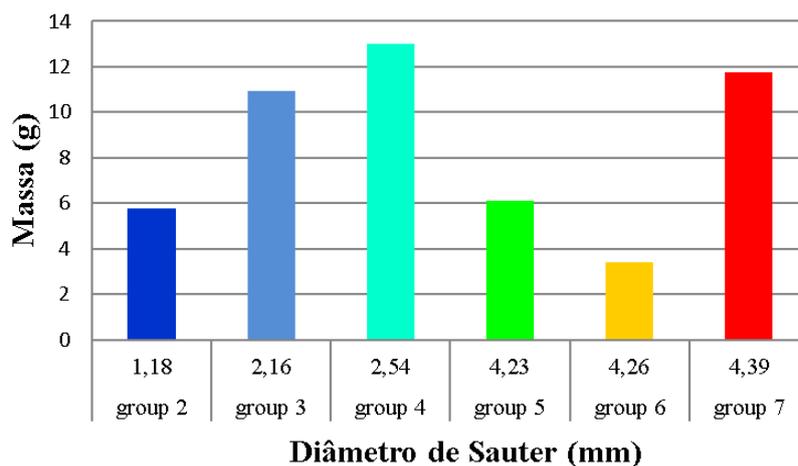


Figura 55: Distribuição de massas de partículas usadas na simulação.

Ainda na Tabela 5, os comprimentos D_p e L referem-se às dimensões das partículas avaliadas por Lenço (2010), conforme Figura 56.

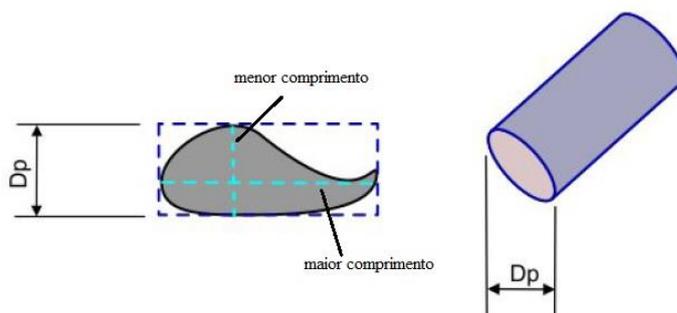


Figura 56: Aproximação para as dimensões das partículas de bagaço. (LENÇO, 2010)

Como o formato da partícula de bagaço pode ser aproximado a um cilindro, optou-se pela escolha na simulação do formato de um cilindro de extremidades arredondadas conforme a Figura 57.

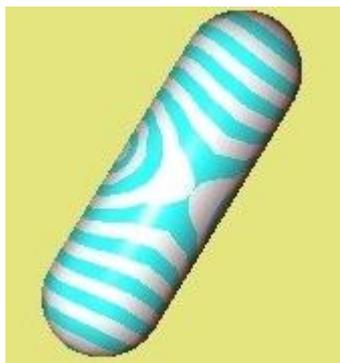


Figura 57: Formato da partícula escolhido no software Rocky DEM.

Para a resolução dos modelos propostos também foi necessário determinar algumas propriedades que foram calculadas a partir dos dados experimentais de Lenço (2010), conforme apresentado na Tabela 6.

Tabela 6: Propriedades determinadas para serem utilizadas nas simulações.

Grupo	Volume da partícula (m ³)	Razão de aspecto (L/D _p)	Diâmetro de Sauter (m)	Esfericidade	Geldart
1	3,76E-11	2,18	0,000342	0,82	A
2	1,86E-09	3,14	0,001178	0,77	B
3	1,24E-08	3,58	0,002158	0,75	B
4	2,11E-08	3,85	0,002536	0,74	B
5	1,01E-07	4,03	0,004231	0,73	D
6	1,05E-07	4,14	0,004256	0,73	D
7	1,12E-07	4,01	0,004387	0,73	D

O critério para determinação das velocidades do ar simuladas foi o de escolher velocidades intermediárias dentre as velocidades terminais das partículas individuais previamente determinadas por meio de um cálculo iterativo utilizando o software Excel.

Nas tabelas seguintes são apresentadas as velocidades terminais, calculadas por método iterativo, para os diversos grupos de partículas representativos da amostra de bagaço simulada utilizando os coeficientes de arraste propostos por Ganser (1993) e Di Felice (1994).

Tabela 7: Velocidades terminais para os grupos de partículas, com C_D calculado utilizando a correlação de Ganser (1993)

Grupo	Velocidade terminal (m/s)	Reynolds da partícula	C_D (Ganser,1993)
2	0,99	80	1,83
3	1,64	243	1,39
4	2,39	414	1,36
5	2,81	815	1,41
6	2,94	856	1,43
7	3,90	1171	1,45

Tabela 8: Velocidades terminais para os grupos de partículas, com C_D calculado utilizando a correlação de Di Felice (1994)

Grupo	Velocidade terminal (m/s)	Reynolds da partícula	C_D (Di Felice,1994)*
2	1,15	93	1,35
3	2,07	306	0,87
4	3,22	559	0,75
5	4,18	1212	0,59
6	4,43	1291	0,58
7	6,07	1825	0,60

*para o cálculo de C_D considerou-se $\alpha f = 0,95$

A Tabela 9 resume os valores das velocidades terminais, calculadas para as partículas individuais, levando em consideração suas características físicas dos seis grupos de partículas simulados bem como as velocidades do ar escolhidas na simulação a partir de tais velocidades terminais. Como o objetivo era a separação dos grupos de partículas para validação dos modelos adotados optou-se por simular a passagem do ar com velocidades intermediárias em relação às velocidades terminais das partículas.

Tabela 9: Velocidades terminais das partículas e do ar utilizadas nos casos simulados e realizado nos experimentos de Lenço (2010)

Grupos	Velocidades 1 Via		Velocidades 2 Vias		Exp. (Lenço 2010)
	Vel. Terminal (m/s)	Vel. do ar (m/s)	Vel. Terminal (m/s)	Vel. do ar (m/s)	Vel. do ar (m/s)
2	0,99	1,50	1,15	1,70	0,710
3	1,64	1,70	2,07	2,80	1,062
4	2,39	2,00	3,22	3,90	1,578
5	2,81	3,00	4,18	4,25	1,963
6	2,94	3,50	4,43	5,00	2,277
7	3,90	4,50	6,07	6,40	>2,277

4.3 Métodos de resolução dos modelos

Utilizou-se para a resolução dos modelos propostos o Método dos Volumes Finitos para resolver o caso da passagem de ar através do riser no software ANSYS Fluent e o Método dos Elementos Discretos (DEM) para resolver a interação gás-sólido pelo software ROCKY.

O software ANSYS Fluent valendo-se da fluidodinâmica computacional (CFD), auxilia a análise de sistemas que envolvem fluxo de fluidos, transferência de calor, combustão, etc, por meio de simulação computacional baseada nos volumes finitos para a solução das equações da continuidade. No caso desse trabalho foi utilizado o algoritmo SIMPLE.

Tal algoritmo utiliza a relação entre velocidades e correções de pressão para forçar a conservação de massa e obter o campo de pressão.

Assim, para a resolução do problema de passagem do ar no tubo utilizado nas simulações gerou-se uma malha no software ICEM 14.0, contendo os volumes de controle no interior do mesmo, nos quais o software Fluent aplicou seu algoritmo para resolução do modelo proposto.

Para o caso da simulação 1 via a malha projetada no tubo foi desenvolvida de modo a ter um bom grau de refinamento, uma vez que apenas os resultados relativos à passagem de ar serão utilizados para posterior acoplamento com a avaliação discreta das partículas.

A seguir, são apresentadas as Figuras 58 em que se detalha a malha utilizada na resolução do modelo com acoplamento 1 via, sendo a mesma não-estruturada, composta por elementos hexaédricos, contendo um total de 98.383 destes e 93.800 nós.

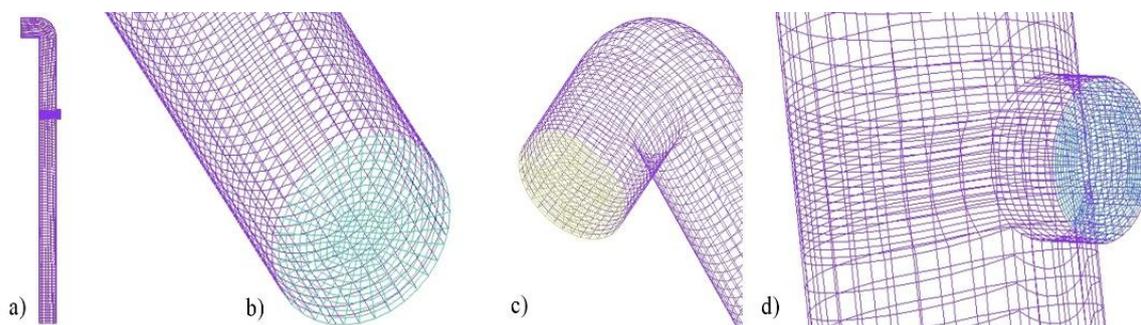


Figura 58: Malha utilizada na simulação 1 via a) malha inteira b) detalha saída inferior c) detalhe da saída superior d) detalhe da alimentação.

Já para o caso do acoplamento 2 vias, as tradicionais recomendações de CFD a respeito do refinamento da malha para a captura precisa de limites pode ser ignorada. Isso porque esse tipo de acoplamento usa um procedimento de médias de células vizinhas com o objetivo de evitar frações de alto volume em uma determinada célula do domínio CFD, distribuindo o volume das partículas que estão posicionadas nos limites celulares entre as células adjacentes.

Assim, esta metodologia é proposta para lidar com um grande número de partículas dentro de uma célula da malha e não para lidar com partículas maiores que esta. Portanto, é recomendado que o tamanho da malha seja maior do que o maior tamanho de partícula em todo o domínio da simulação.

Algumas regiões com geometria detalhada e gradientes fortes podem ter células menores, mas os resultados do acoplamento 2 vias nessas regiões serão menos precisos.

A malha projetada para a simulação do acoplamento 2 vias pode ser vista em detalhes nas Figuras 59. Assim como a malha gerada para ser utilizada no acoplamento 1 via, a malha é não estruturada e composta por elementos hexaédricos, só que nesse caso num total de 10.790 e 9.843 nós, com a maioria dos elementos com dimensões na ordem de centímetros.

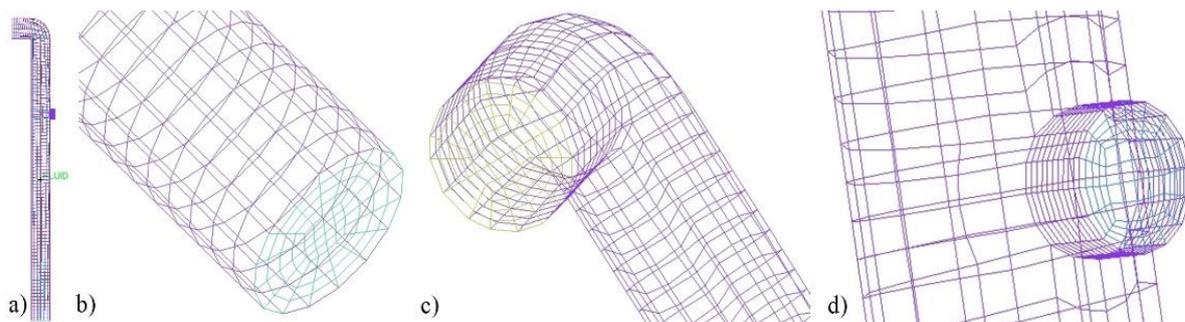


Figura 59: Malha utilizada na simulação 2 vias a) malha inteira b) detalha saída inferior c) detalhe na saída superior d) detalhe na alimentação.

Assim, os resultados da passagem de ar pelo tubo foram importados para o software ROCKY que resolveu as equações dos modelos de movimento das partículas levando em consideração a interação dessas com o fluido. Reiterando, no caso 1 via apenas o fluido influenciou no movimento das partículas, já no caso 2 vias o movimento das partículas pode causar mudanças no comportamento do fluido.

Os softwares utilizados para a resolução dos modelos propostos neste trabalho foram o ANSYS Fluent (<http://www.ansys.com/Products/Fluids/ANSYS-Fluent>), versão 16.2, e o Rocky DEM (<http://www.rocky-dem.com/>), versão 3.11. .

Os hardwares utilizados foram:

- 1 Microcomputador com processador Intel Core i5-4400 (3M cache 3,7Ghz) com 8Gb de memória DDR3 1600MHz

- 1 Placa de vídeo GeForce GTX TITAN X, cujas especificações do fabricante podem ser consultadas em: <http://www.nvidia.com.br/object/geforce-gtx-titan-x-br.html#pdpContent=0>

As simulações 1 via duraram cerca de 10 dias cada, as 2 vias aproximadamente o dobro, em torno de 20 dias cada.

CAPÍTULO 5

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Antes de apresentar os resultados da simulação, é importante mostrar a caracterização das partículas simuladas. Avaliando as partículas que compõe as diferentes frações para formar o bagaço integral, notou-se que a fração considerada medula apresenta uma relação comprimento/largura unitária podendo ser modelada por esferas, já as fibras e a casca com valores mais altos das relações de comprimento/largura podem ser modeladas por cilindros (RASUL et al, 1998). A relação de aspecto, definida como a proporção do comprimento projetado no eixo de simetria para o diâmetro máximo normal ao eixo, apresentado na Tabela 6, item 4.2, permite classificar o grupo 1 de partículas separadas como medula, grupos 2, 3 e 4 como fibra e grupos 5, 6 e 7 como casca (CLIFT et al., 1978).

Classificando as partículas como proposto por Geldart, Tabela 6, item 4.2, foi possível identificar três grupos diferentes, o grupo A é constituído por partículas finas que podem apresentar comportamento homogêneo, o grupo B apresenta tamanhos intermediários de partículas e fluxo heterogêneo e o grupo D constituído por partículas grosseiras que apresentam fluidização com formação de canais preferenciais normalmente encontrados em leitos de jorro. Assim, conclui-se que a medula pertence ao grupo A, a fibra ao grupo B e casca ao grupo D (GELDART, 1973). A classificação das partículas é importante para entender que tipo de partícula foi separada em experimentos de simulação e também nas considerações da construção de equipamentos reais para separar as frações específicas do bagaço.

A seguir são apresentados os resultados das simulações considerando a simulação 1 via com o bagaço a umidade de equilíbrio e as simulações 2 vias com o bagaço a umidade de equilíbrio e também úmido.

5.1. Simulação 1 via do bagaço em umidade de equilíbrio

Nestes casos simulados foi considerado que o bagaço estava na umidade de equilíbrio de aproximadamente 7,5%, base úmida. A seguir são apresentados os histogramas e imagens obtidos da simulação com Acoplamento 1 Via e realizada uma análise de tais resultados.

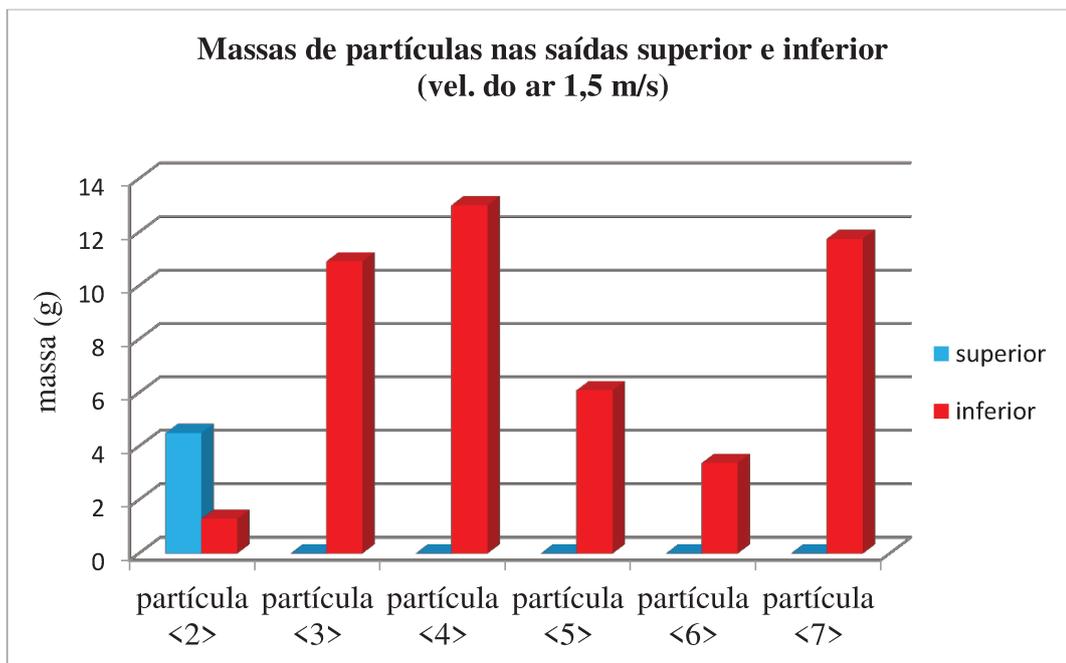


Figura 60: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 1 via, unidade de equilíbrio, velocidade do ar de $1,5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.

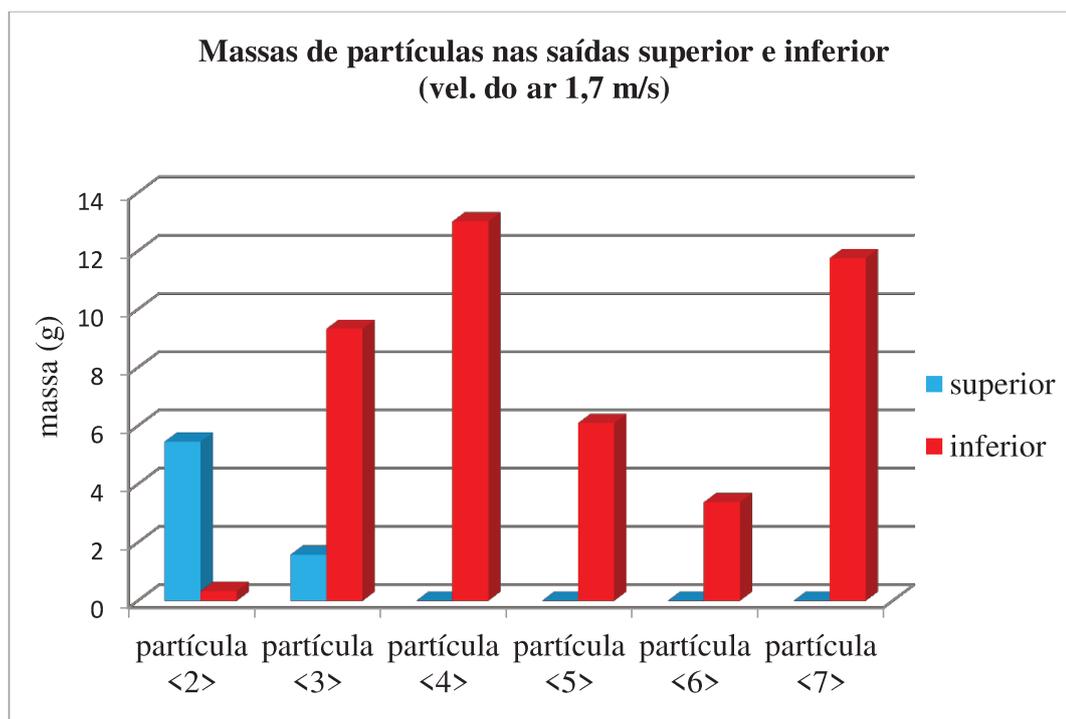


Figura 61: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 1 via, unidade de equilíbrio, velocidade do ar de $1,7 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.

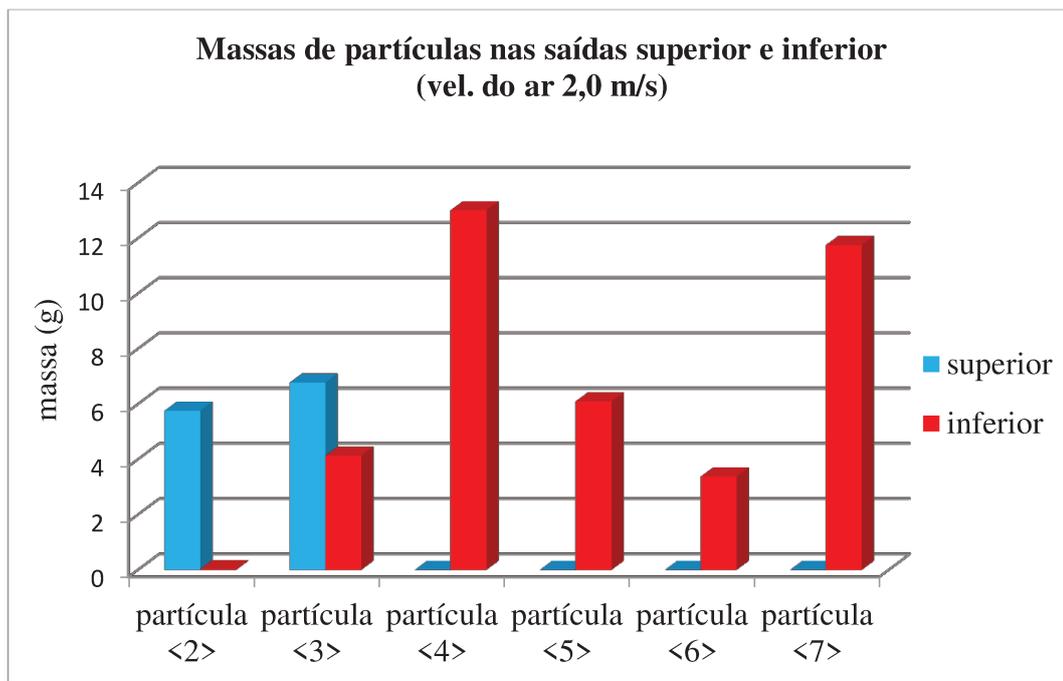


Figura 62: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 1 via, unidade de equilíbrio, velocidade do ar de $2,0 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.

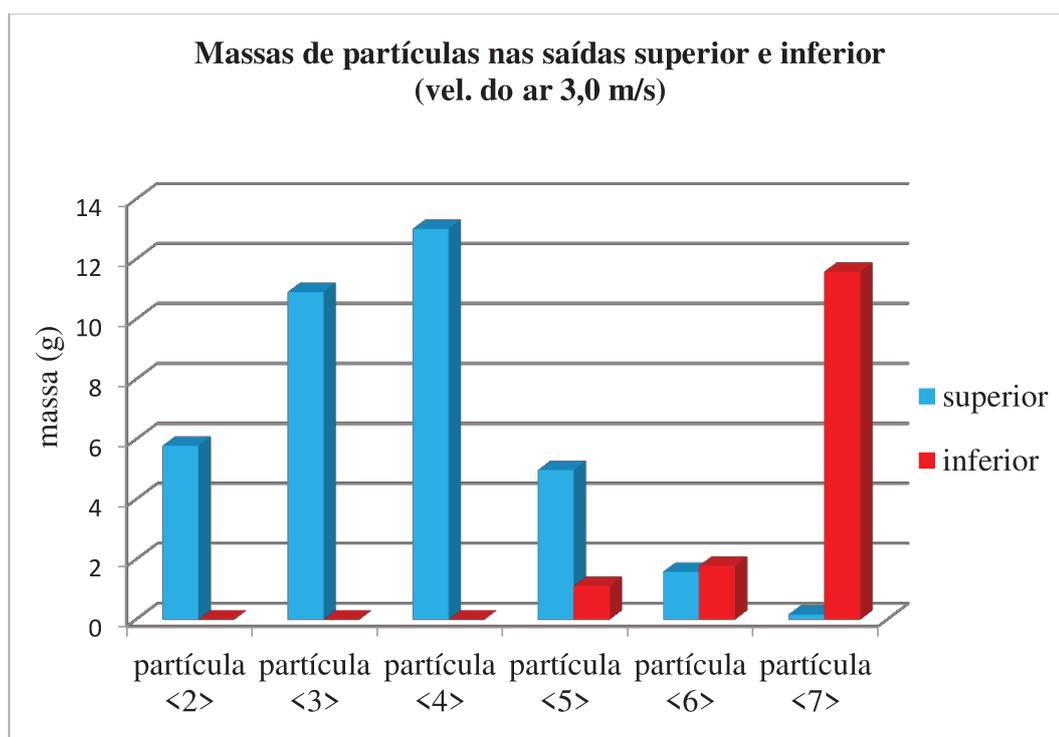


Figura 63: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 1 via, unidade de equilíbrio, velocidade do ar de $3,0 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.

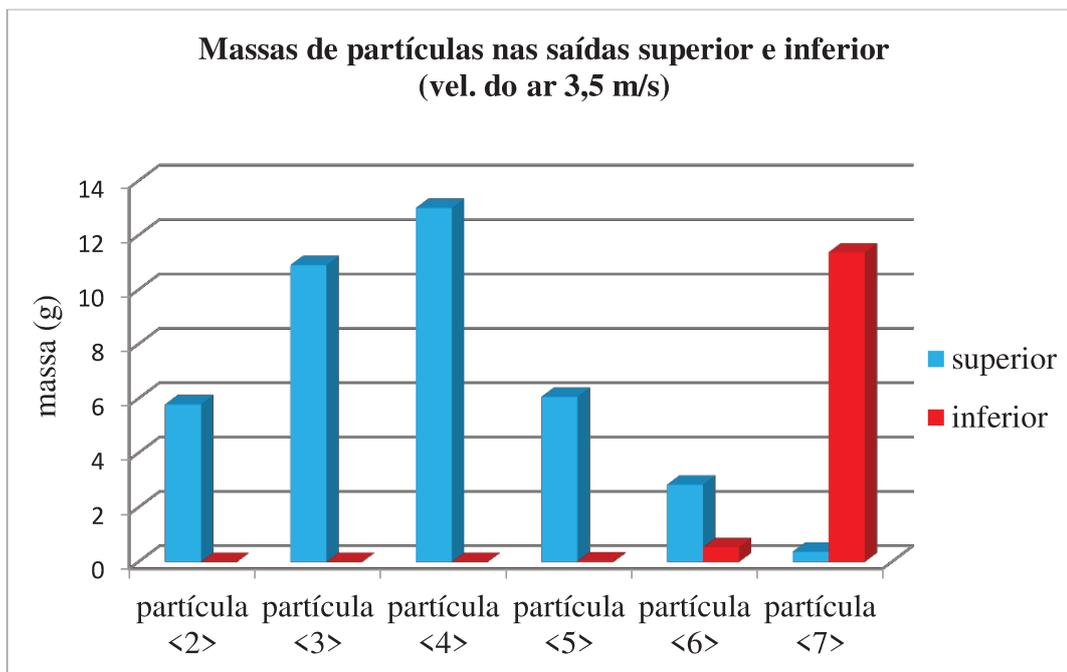


Figura 64: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 1 via, unidade de equilíbrio, velocidade do ar de $3,5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.

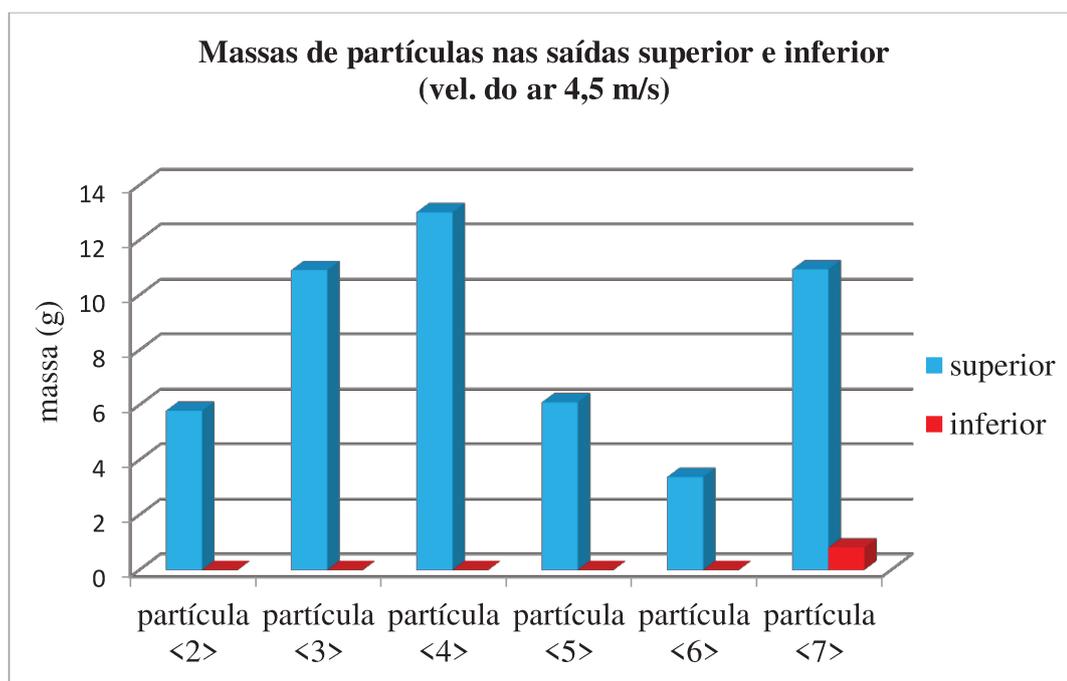


Figura 65: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 1 via, unidade de equilíbrio, velocidade do ar de $4,5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.

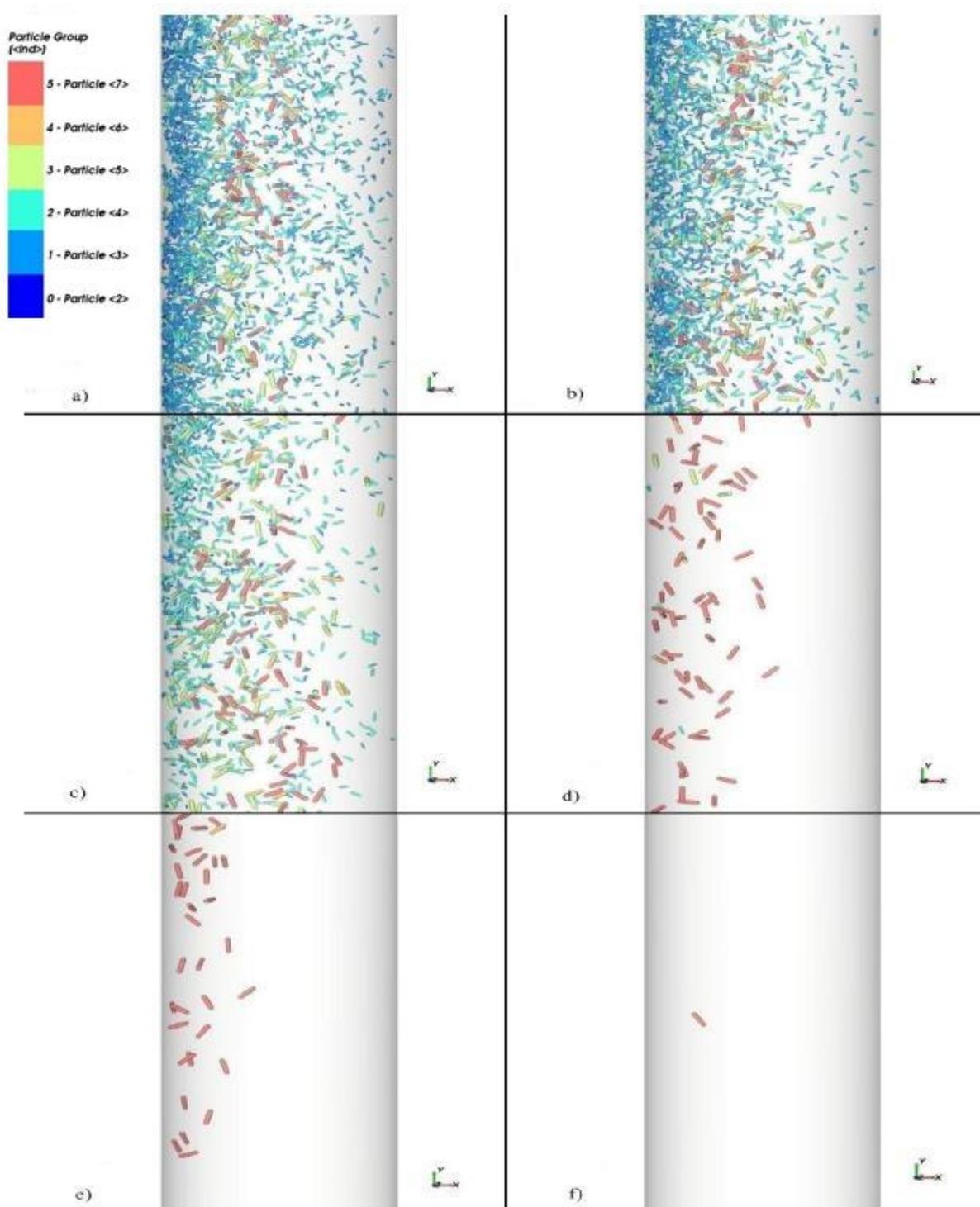


Figura 66: Zoom da separação de bagaço próximo da saída inferior na simulação 1 via do bagaço em umidade de equilíbrio variando as velocidades do ar de a) $1,5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ b) $1,7 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ c) $2,0 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ d) $3,0 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ e) $3,5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ f) $4,5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$

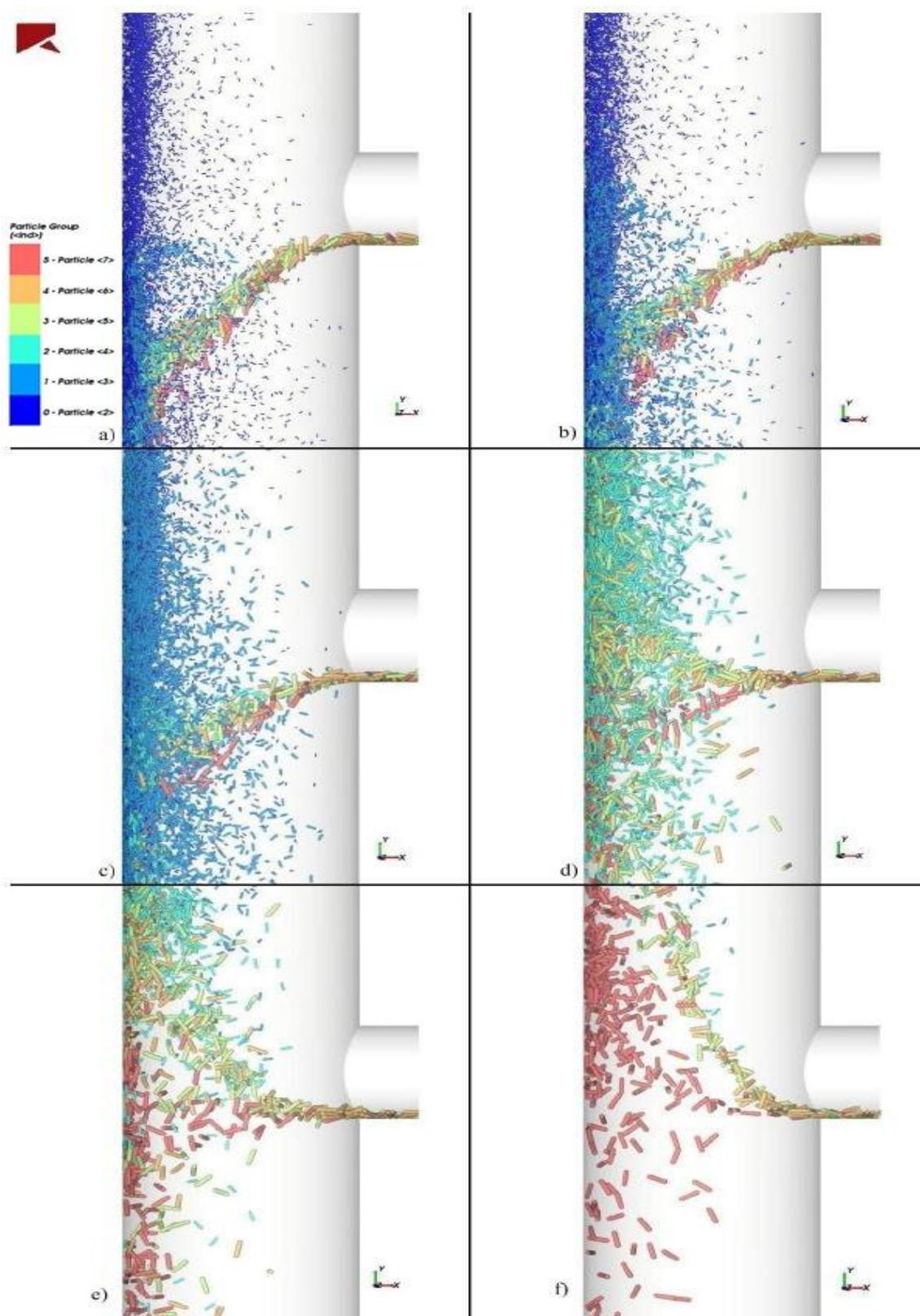


Figura 67: Zoom da separação de bagaço próximo da saída superior e alimentação na simulação 1 via do bagaço em unidade de equilíbrio variando as velocidades do ar de a) 1,5 m.s⁻¹ b) 1,7 m.s⁻¹ c) 2,0 m.s⁻¹ d) 3,0 m.s⁻¹ e) 3,5 m.s⁻¹ f) 4,5 m.s⁻¹.

A Figura 60 mostra que a velocidade de $1,5 \text{ m.s}^{-1}$ é ideal para separação das partículas do grupo 2, arrastando quase todas partículas de tal grupo e uma pequena porcentagem de partículas do grupo 3.

Já no caso das Figuras 61, 62 e 63, cujas velocidades do ar adotadas foram respectivamente $1,7 \text{ m.s}^{-1}$, $2,0 \text{ m.s}^{-1}$ e $3,0 \text{ m.s}^{-1}$, notou-se uma dificuldade maior para separação de grupos específicos de partículas, não conseguindo separar apenas partículas do grupo pretendido e inferiores.

Uma das possibilidades para explicar tal observação é o fato das velocidades terminais das partículas serem próximas umas das outras, conforme Tabela 7 do Capítulo 4, em que se nota que a velocidade terminal das partículas do grupo 4 é 1,5 vezes maior que a velocidade terminal das partículas do grupo 3 e a velocidade terminal das partículas do grupo 5 é 1,2 vezes maior que velocidade terminal das partículas do grupo 4.

Outra explicação para a dificuldade em separar partículas dos grupos 3 a 5 em específico pode ser obtida da observação das Figuras 66 e 67, de onde é possível notar que, quando as velocidades do ar adotadas são mais baixas, partículas que deveriam ser arrastadas para a saída superior ainda são coletadas pelo fundo. Isto devido possivelmente ao fato de que quanto mais baixas as velocidades do ar, ocorre a maior concentração de partículas no leito, sendo reconhecido que em concentrações mais altas as partículas são mais restritas pelas partículas vizinhas, e os sólidos e o gás atuam de maneira mais fluida, como para reduzir a velocidade do deslizamento (KLINZING et al., 2010).

Assim, o contato entre partículas e com as paredes do tubo acarreta na predominância da força gravitacional no equilíbrio das forças, fazendo com que as partículas caiam e, além disso, as partículas maiores em queda também podem arrastar as menores para o fundo devido ao contato durante a separação.

Por outro lado, usando a velocidade média do ar de $3,5 \text{ m.s}^{-1}$ no tubo, quase todas as partículas foram arrastadas para o topo, apenas separando o grupo 7, como esperado quando comparado a velocidade do ar com as velocidades terminal das partículas. Por fim, simulando a velocidade do ar $4,5 \text{ m.s}^{-1}$, quase todas as partículas foram completamente arrastadas separando apenas alguns gramas de partículas do grupo 7 na saída inferior, devido justamente à menor concentração de partículas nesta situação.

5.2 Simulação 2 vias do bagaço em umidade de equilíbrio

A seguir são apresentados os resultados das massas separadas de bagaço na parte inferior e superior da simulação 2 vias considerando o bagaço em umidade de equilíbrio. Pode-se notar que ao variar a velocidade do ar em valores superiores àqueles da velocidade terminal individual do grupo de partículas foi possível uma separação muito eficiente dos grupos.

A grande vantagem da simulação 2 vias é o fato de levar-se em consideração os efeitos causados nas partículas devido o fluxo de ar e vice-versa, ou seja, existe uma interação entre sólidos e partículas que se aproxima muito mais da realidade do fenômeno. O problema, no entanto, é que este tipo de simulação demanda muito mais tempo computacional se comparado com a simulação 1 via, assim, cabe ao tomador de decisão avaliar se para o seu problema uma simplificação do modelo não atenderá sua necessidade mantendo um bom grau de predição da realidade.

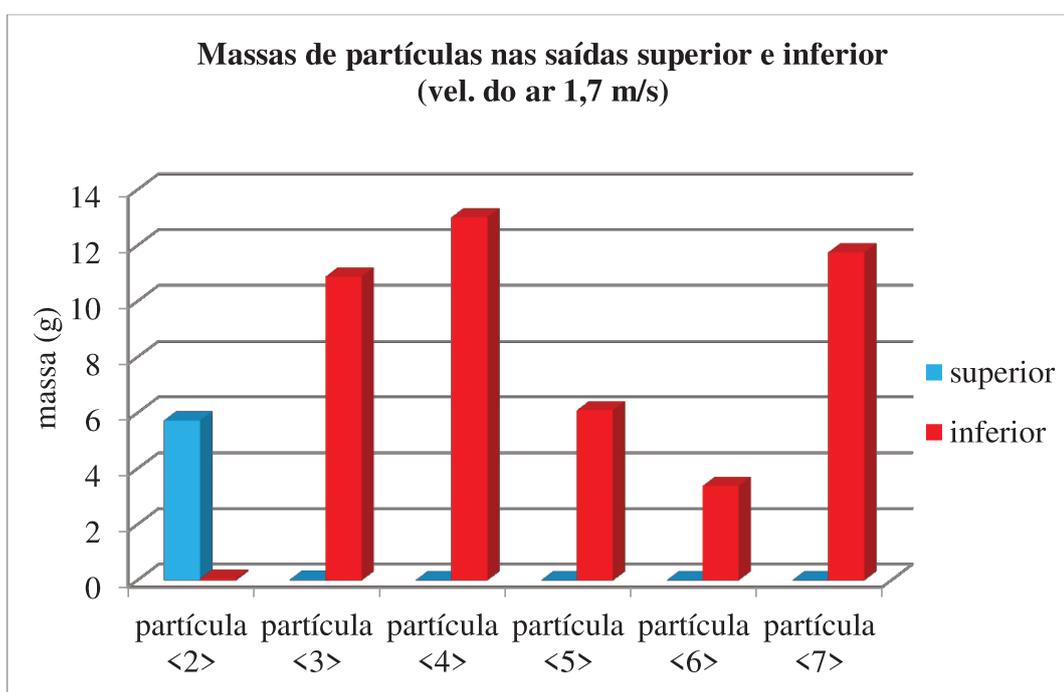


Figura 68: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, umidade de equilíbrio, velocidade do ar de $1,7 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.

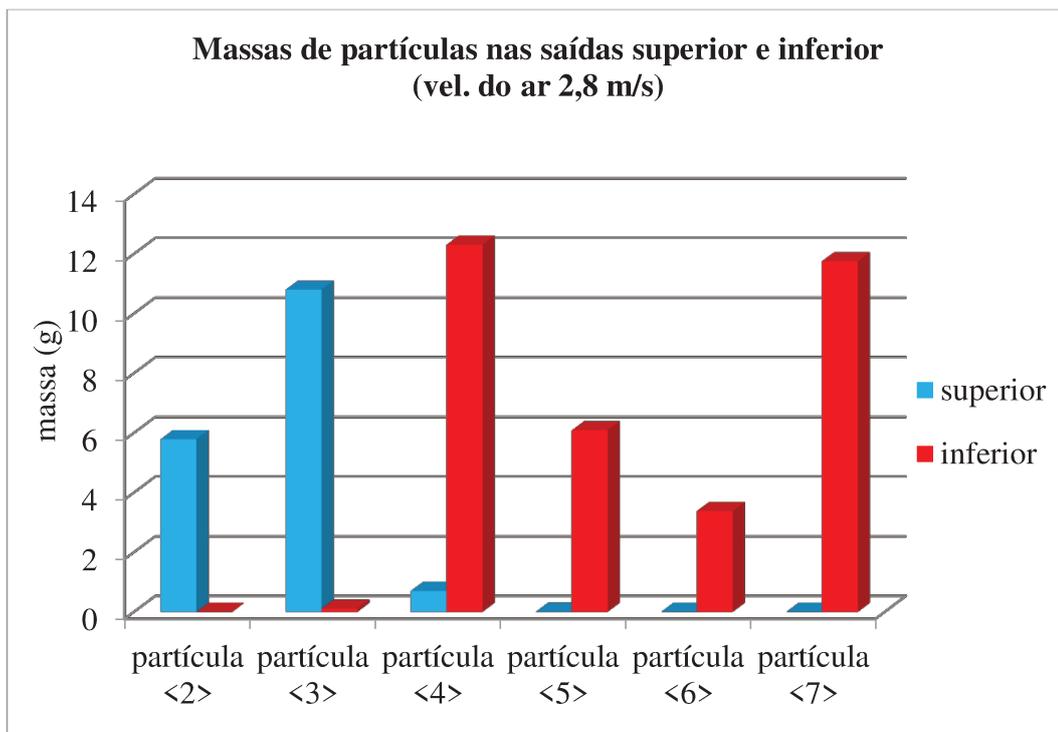


Figura 69: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, unidade de equilíbrio, velocidade do ar de $2,8 \text{ m.s}^{-1}$.

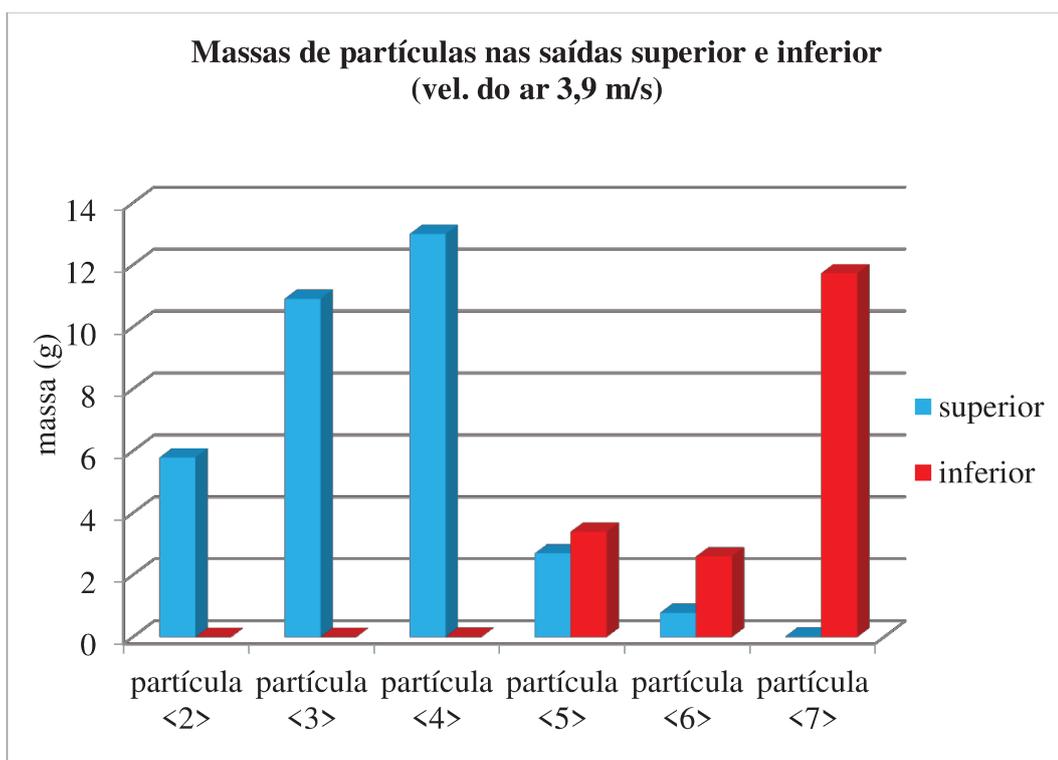


Figura 70: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, unidade de equilíbrio, velocidade do ar de $3,9 \text{ m.s}^{-1}$.

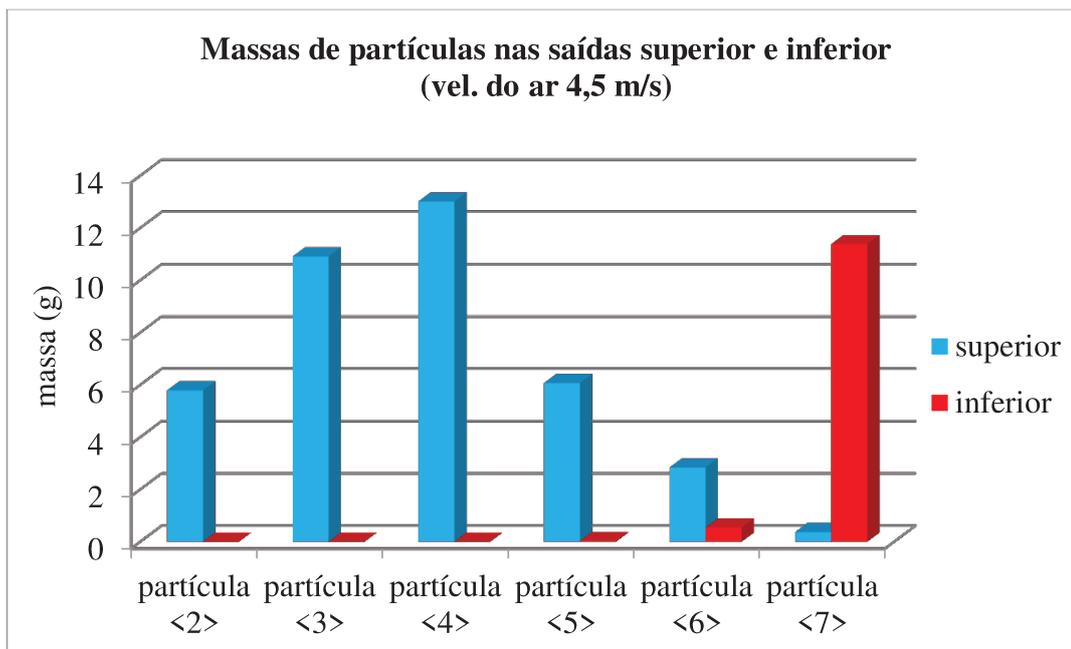


Figura 71: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, unidade de equilíbrio, velocidade do ar de $4,5 \text{ m.s}^{-1}$.

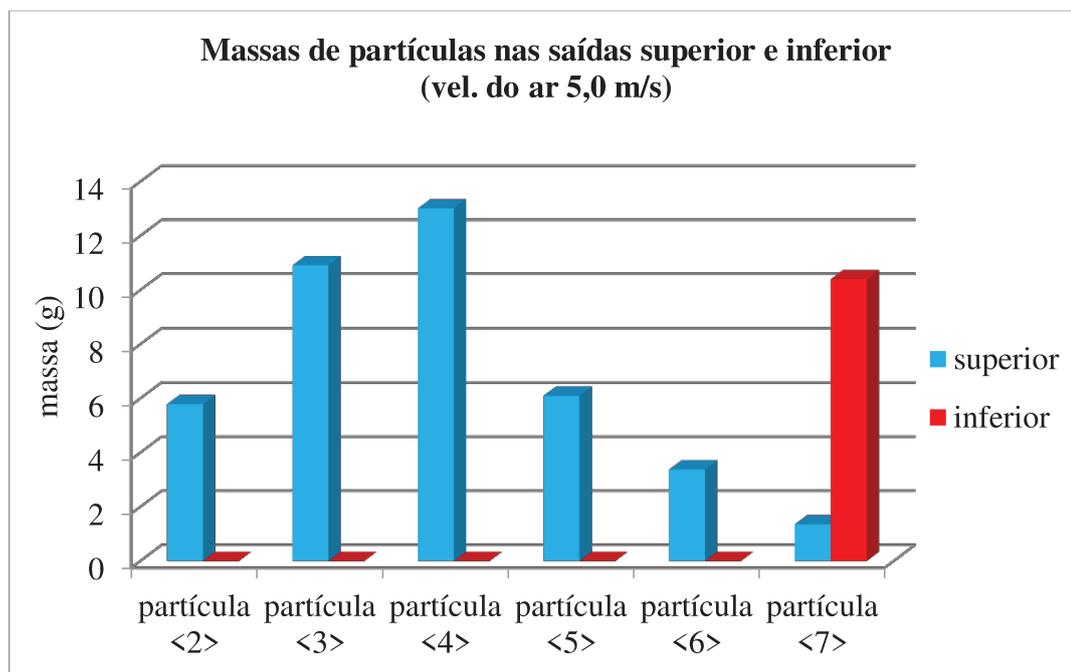


Figura 72: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, unidade de equilíbrio, velocidade do ar de $5,0 \text{ m.s}^{-1}$.

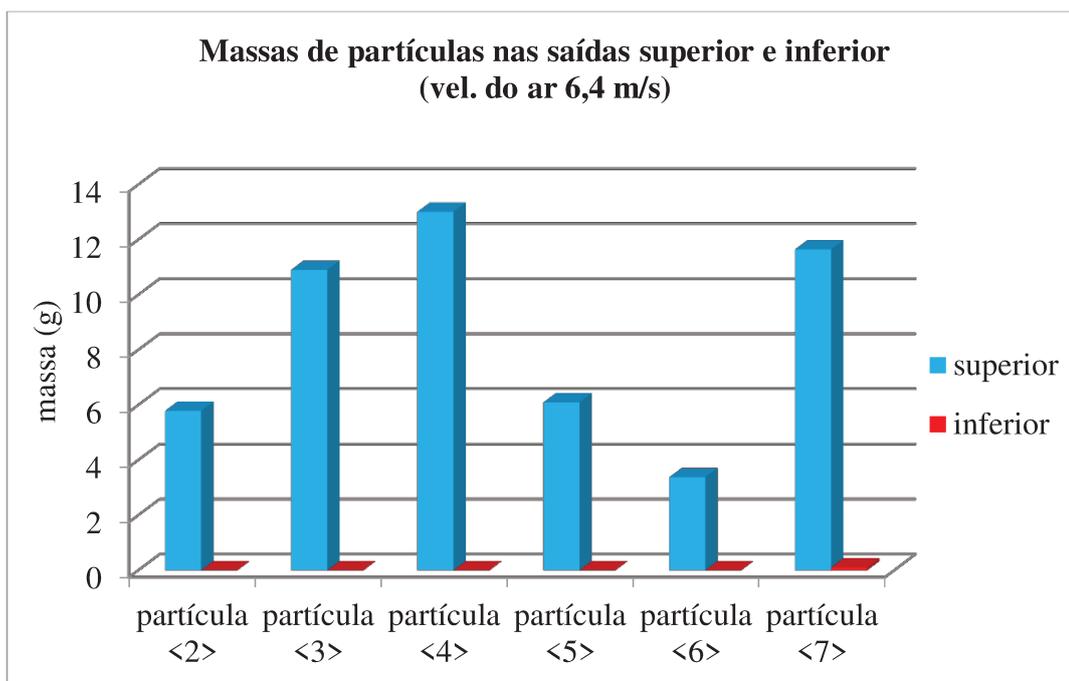


Figura 73: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, unidade de equilíbrio, velocidade do ar de $6,4 \text{ m.s}^{-1}$.

Analisando as Figuras 68 e 69 é possível notar que as velocidades do ar adotadas cumpriram muito bem seu papel de separar partículas dos grupos 2 e 3, conforme esperado.

No caso das Figura 70 e 71, observou-se que as velocidades do ar estipulada, pretendendo arrastar partículas menores ou iguais àquelas dos grupos 4 e 5 respectivamente, culminou com o arraste considerável de partículas de grupos maiores. Tal observação pode ser explicada pelo fato das velocidades do ar adotadas serem muito próximas ou ligeiramente superiores às velocidades terminais das partículas dos grupos imediatamente superiores daqueles que se pretendia separar.

Já a observação da Figura 72 permite notar que o arraste do grupo 6 de partículas e menores foi alcançado com sucesso, sendo uma pequena quantidade de partículas do grupo 7 arrastadas junto, em torno de 9% da massa de tal grupo de partículas, que pode ser considerado como aceitável para fins práticos de separação.

Quando a velocidade do ar adotada foi de $6,4 \text{ m.s}^{-1}$, notou-se pela Figura 73 que todas as partículas foram arrastadas, como esperado.

Comparando os resultados das simulações 1 Via, item 5.1, e 2 Vias, no caso do bagaço em umidade de equilíbrio simulado, quando o objetivo foi separar ou arrastar todas as partículas maiores, pertencentes aos grupos 6 e 7, pode-se considerar que a simulação 1 Via

apresenta uma aproximação razoável da realidade, sendo que tal método economiza muito tempo computacional, cerca de 1 semana simulando cada caso.

Já para o caso da separação dos grupos menores de partículas, grupos 2, 3, 4 e 5, a simulação 2 Vias se apresentou mais preditiva do fenômeno, valendo a pena despende mais tempo, porém, obtendo resultados muito próximos daqueles obtidos em experimentos reais, cabendo a realização de alguns ajustes das velocidades do ar adotadas para refinamento dos resultados.

5.3 Simulação 2 vias do bagaço úmido

Para a simulação do bagaço úmido, inicialmente necessitou-se obter os novos valores das densidades das partículas. Nos testes anteriores, as mesmas estavam em umidade de equilíbrio igual a 7,5%, nessa nova etapa as partículas apresentavam umidade de 46,14%, conforme medições obtidas por LENÇO (2010).

Os novos valores de densidade (base úmida) passaram então a ser aqueles apresentados na Tabela 10.

Tabela 10: Valores das densidades das partículas em umidade de equilíbrio e úmidas

Grupo	Densidade (kg.m ⁻³)	Densidade (kg.m ⁻³)
	Umidade 7,5%	Umidade 46,14%
2	143,19	245,92
3	164,26	282,10
4	287,01	492,92
5	248,00	425,92
6	273,65	469,97
7	471,45	809,68

Além da mudança nas densidades, as partículas de bagaço também apresentam um fator de coesão devido à água presente. Para determinação do valor desse fator, procedeu-se à avaliação do ângulo de repouso das partículas, seguindo os experimentos conduzidos por Ileleji & Zhou (2008) para determinação do ângulo de repouso de palha de milho úmida, descrito no item 4.1.2.3. Assim, várias simulações para determinação do ângulo de repouso das partículas

de bagaço foram conduzidas, alterando-se o fator de coesão entre as partículas até que o mesmo se aproximasse do ângulo da palha de milho. No presente estudo, obteve-se o ângulo de 43° quando utilizado o fator de coesão entre partículas igual a 3 no software ROCKY[®].

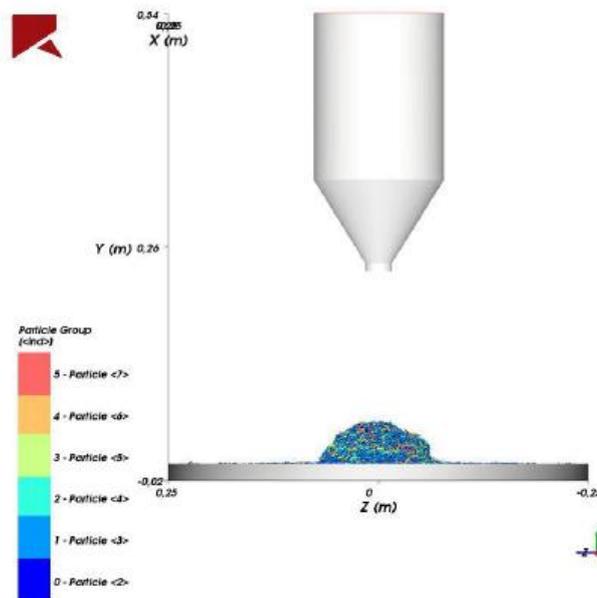


Figura 74: Partículas formando uma pilha após serem despejadas do funil.

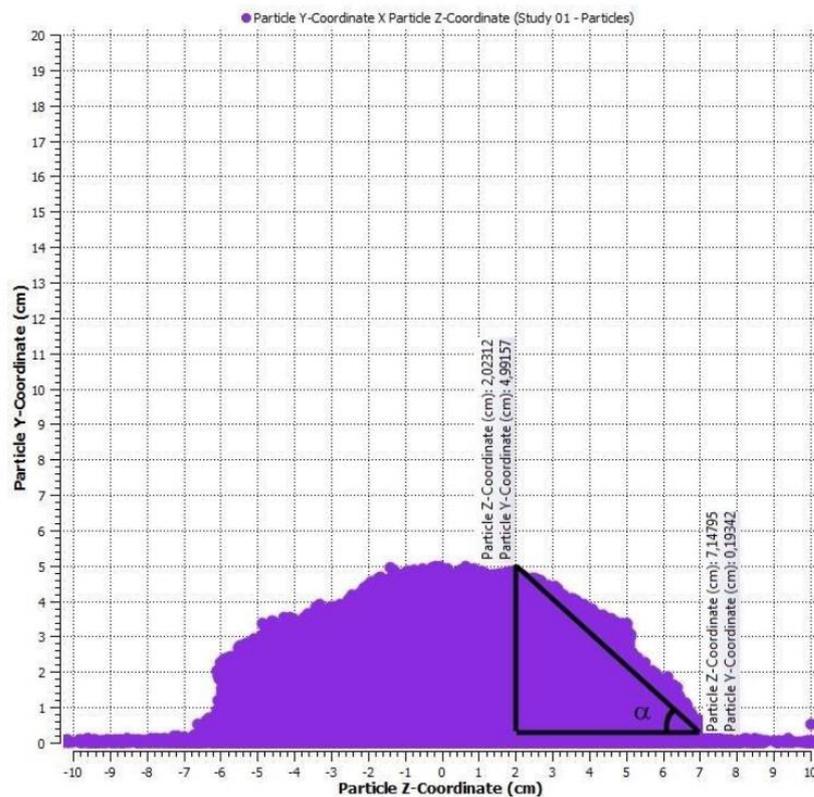


Figura 75: Resultado da simulação do ângulo de repouso do bagaço úmido.

Tendo os dados necessários para o bagaço úmido, procedeu-se então às simulações em 2 Vias, do mesmo modo que aquelas conduzidas com o bagaço em umidade de equilíbrio. Os resultados são apresentados a seguir, Figuras 76 a 81.

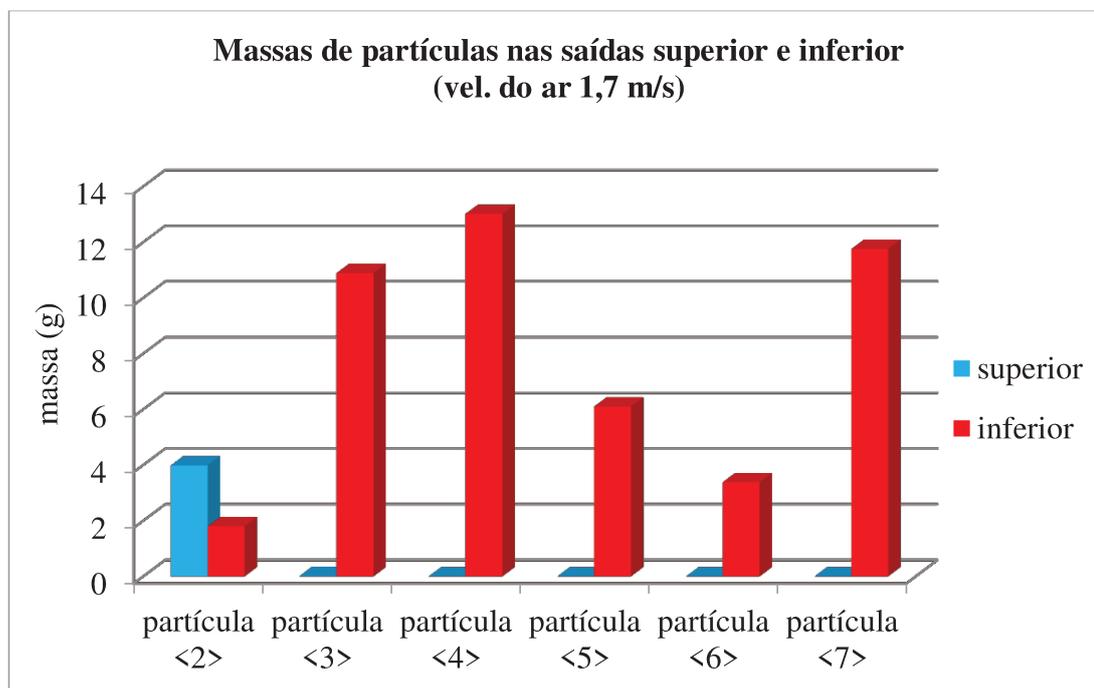


Figura 76: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, bagaço úmido, velocidade do ar de $1,7 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.

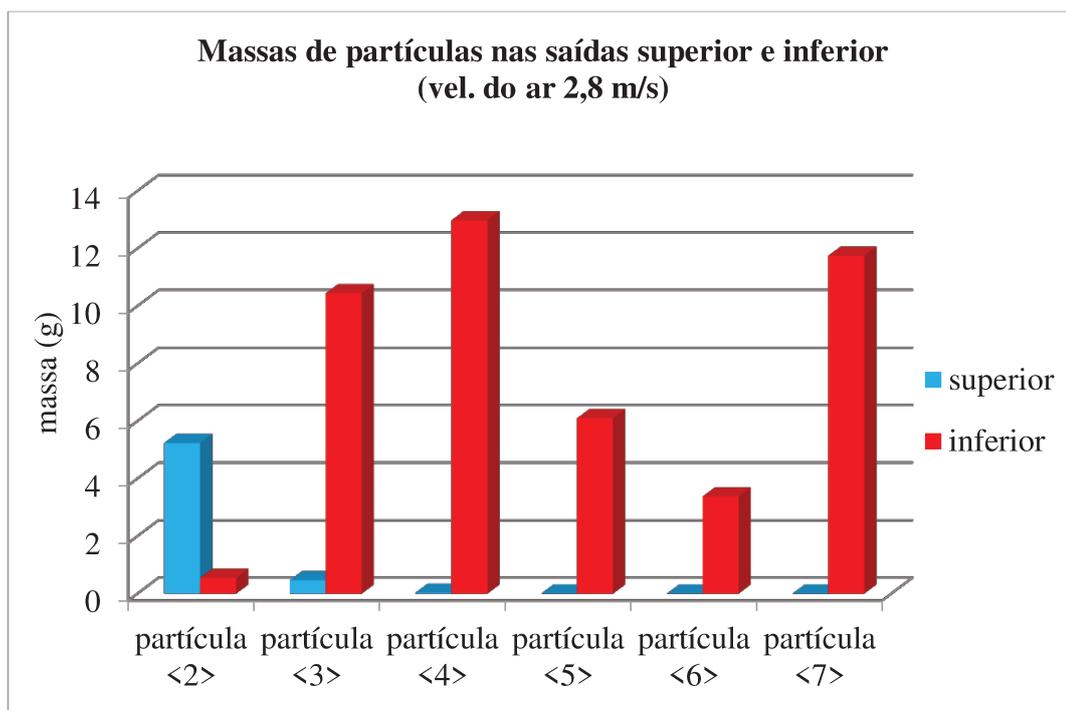


Figura 77: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, bagaço úmido, velocidade do ar de $2,8 \text{ m.s}^{-1}$.

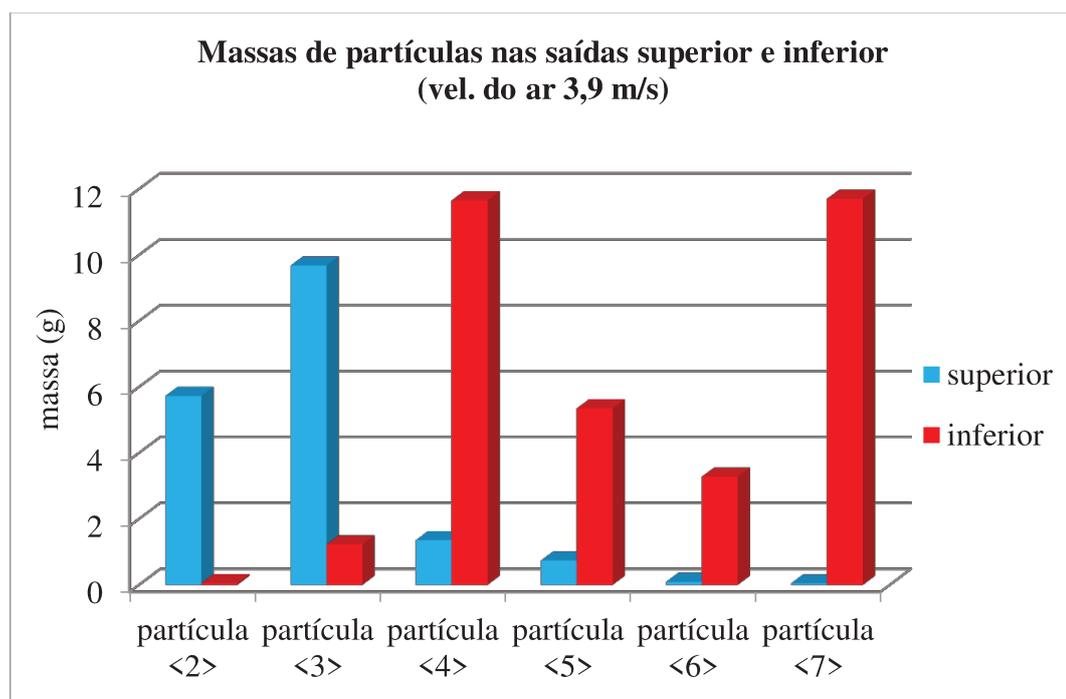


Figura 78: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, bagaço úmido, velocidade do ar de $3,9 \text{ m.s}^{-1}$.

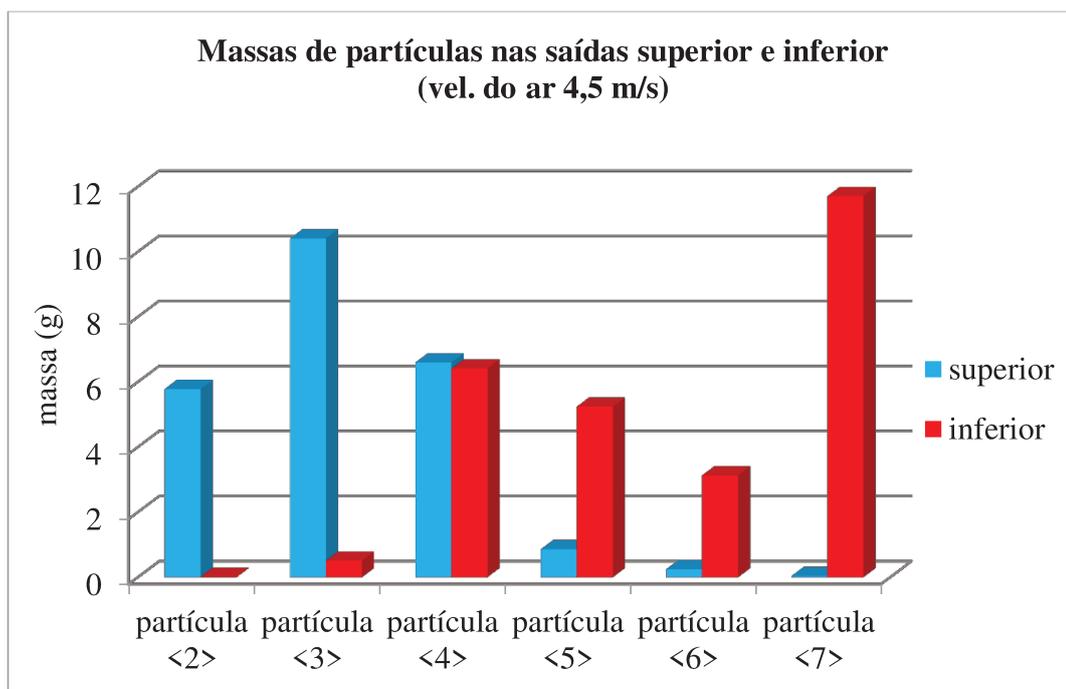


Figura 79: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, bagaço úmido, velocidade do ar de 4,5 m.s⁻¹.

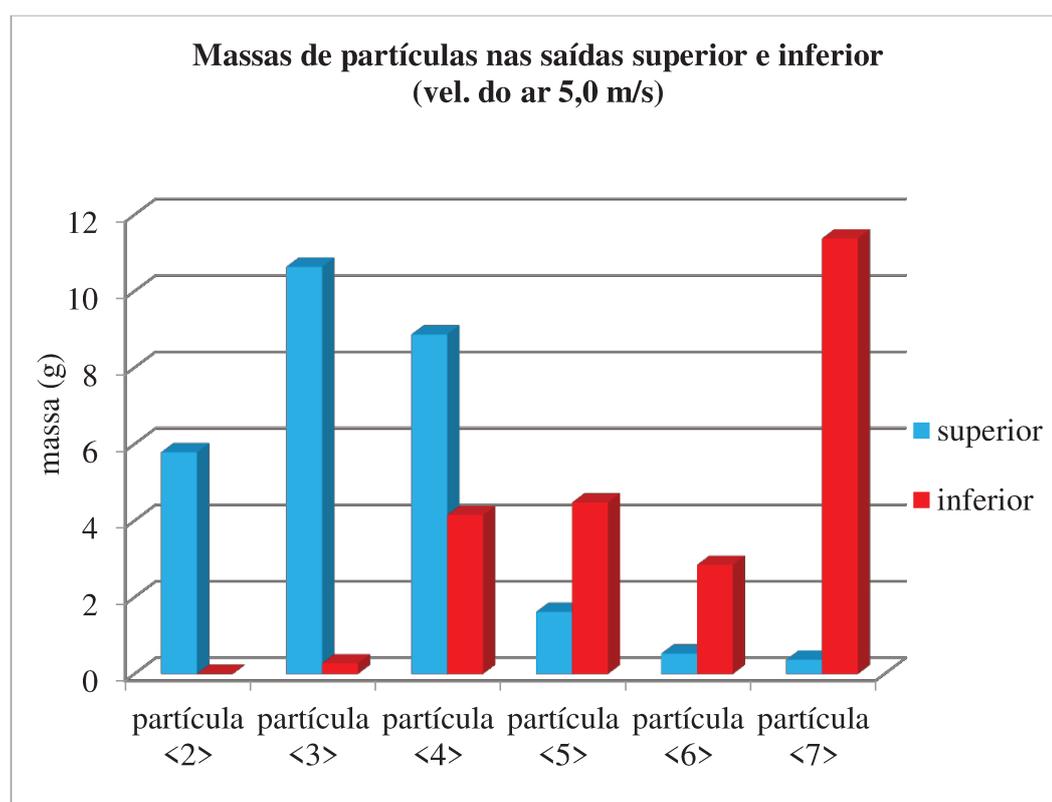


Figura 80: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, bagaço úmido, velocidade do ar de 5,0 m.s⁻¹.

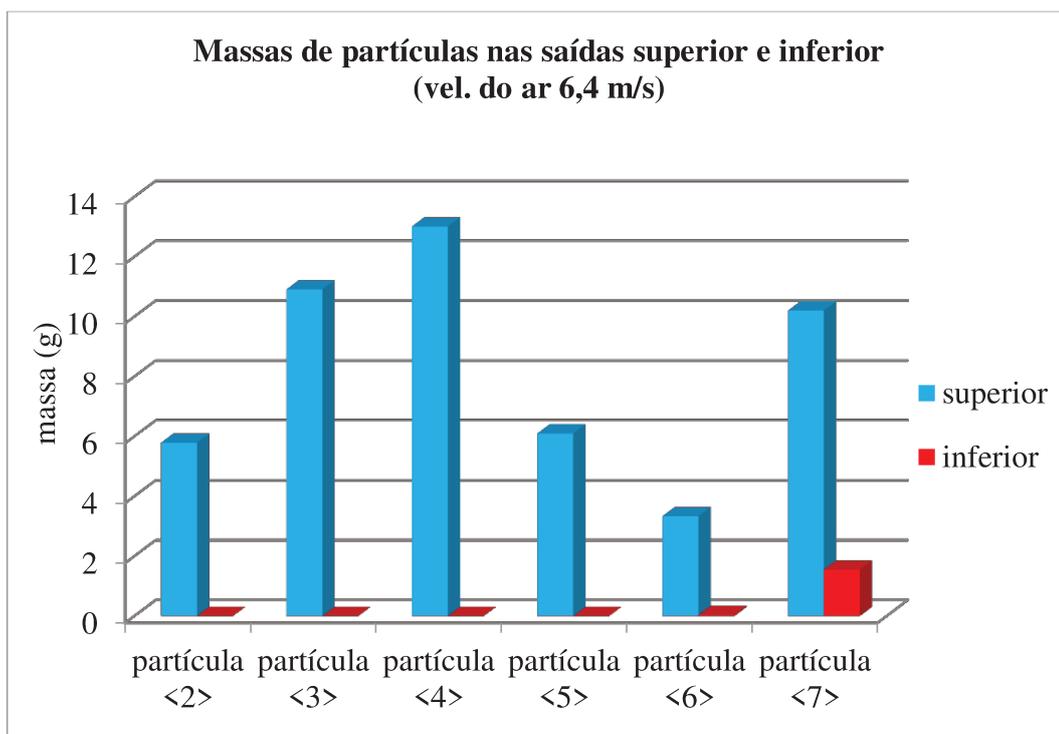


Figura 81: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, bagaço úmido, velocidade do ar de $6,4 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.

A observação dos histogramas das Figuras 76 a 81 anteriores permite a avaliação de que se mantendo as velocidades de separação impostas ao bagaço em umidade de equilíbrio, o arraste dos grupos de partículas de bagaço úmido é dificultado como esperado, visto que a densidade das partículas neste caso aumentou. Por exemplo, utilizando a velocidade do ar de $5,0 \text{ m/s}$, que é capaz de arrastar partículas dos grupos 2, 3, 4, 5 e 6 do bagaço em umidade de equilíbrio, com o bagaço úmido foram arrastados apenas partículas dos grupos 2, 3, grande parte do grupo 4 e uma pequena parte de partículas do grupo 5.

Já a velocidade do ar de $6,4 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ foi uma velocidade que conseguiu arrastar boa parte de todos os grupos simulados do bagaço úmido assim como ocorre com o bagaço em umidade de equilíbrio. A vantagem em conhecer os histogramas da separação do bagaço úmido utilizando a mesma velocidade do ar quando se separa o bagaço em umidade de equilíbrio é permitir avaliar a diferenças destes de modo a entender como o perfil de separação deve se alterar no caso de um processo de secagem.

Essas alterações do perfil devido à secagem ficam mais evidentes quando comparados os histogramas de massa acumulada entre os experimentos simulados e os experimentos reais conduzidos por Lenço (2010). Em tais histogramas, Figuras 81 e 82, fica mais fácil a comparação entre os dados reais e simulados.

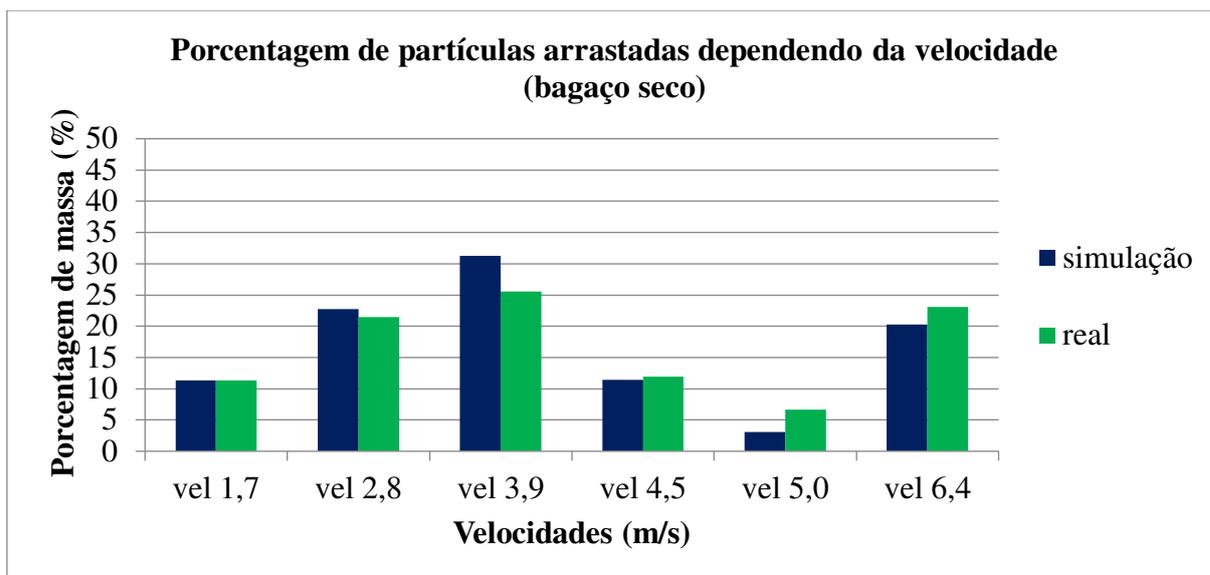


Figura 82: Porcentagens de massa acumuladas do bagaço em unidade de equilíbrio separadas variando as velocidades do ar.

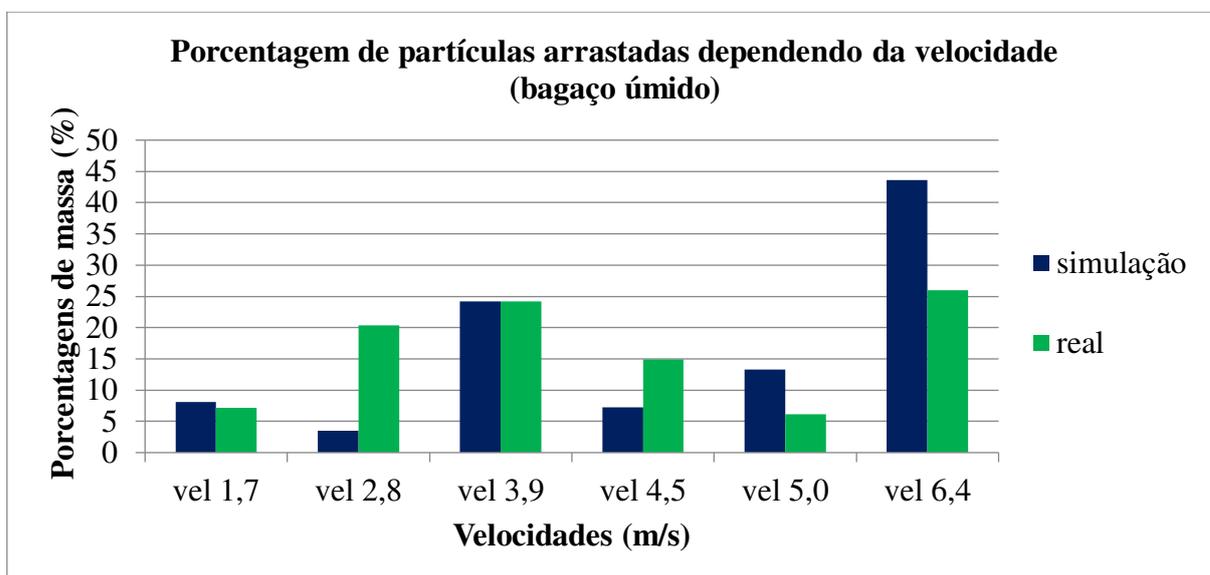


Figura 83: Porcentagens de massa acumuladas do bagaço úmido separadas variando as velocidades do ar.

No caso dos dados simulados, todos os experimentos foram conduzidos variando-se apenas a velocidade do ar, ou seja, as frações de bagaço eram sempre as mesmas utilizadas. Já no experimento real, a cada rodada, a fração de bagaço arrastada era descartada e aumentava-se a velocidade do ar no teste seguinte com o bagaço restante, que havia sido coletado na parte inferior do equipamento, até que todo bagaço tivesse sido arrastado.

Logo, para comparação de ambos os resultados nos histogramas, a quantidade de massa de bagaço que havia sido arrastada no primeiro teste simulado era subtraída da massa total arrastada no teste seguinte e assim por diante.

Foi possível observar então que no caso em que o material estava em umidade de equilíbrio os resultados simulados são muito preditivos, ou seja, os resultados da simulação se assemelham quase exatamente àqueles obtidos no equipamento real.

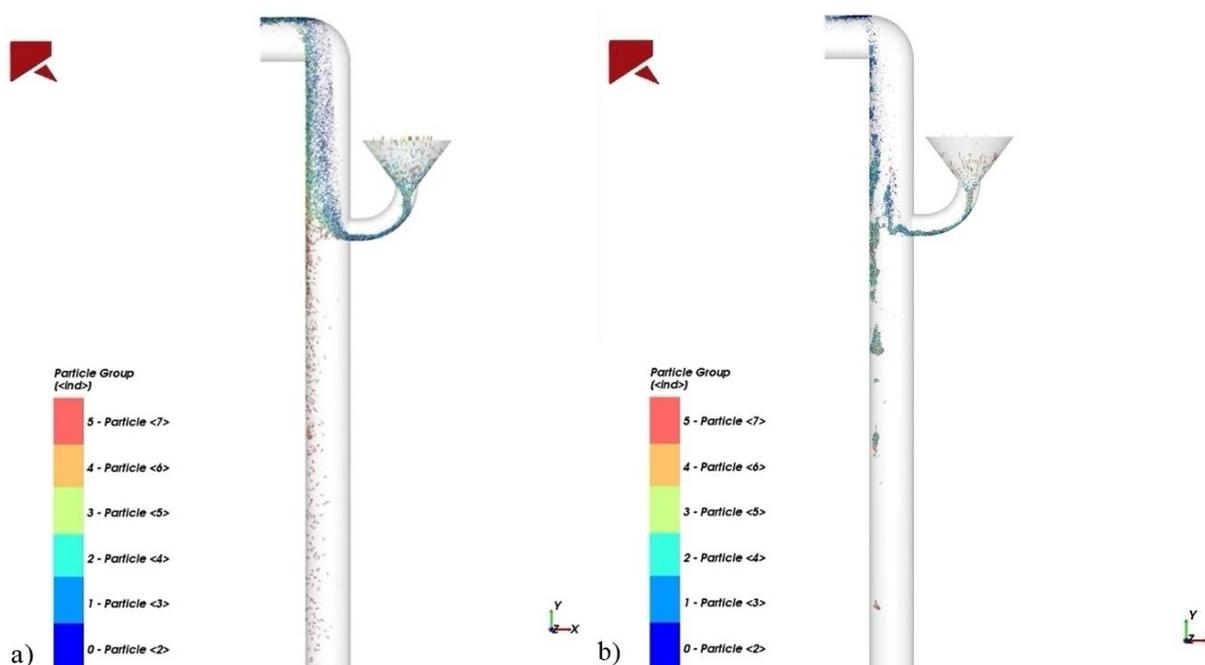


Figura 84: Comparação da separação do bagaço com velocidade do ar a 4,5 m.s-1 a) seco 2 Vias e b) úmido 2 Vias.

Pela Figura 84 é possível, pela avaliação visual, verificar a diferença na simulação entre partículas considerando o bagaço à umidade de equilíbrio e úmido, estando no primeiro caso as partículas muito mais dispersas que no segundo, como era esperado e foi comprovado.

Outra questão relevante a ser destacada é que as velocidades impostas na simulação, que haviam sido escolhidas após a determinação do valor da velocidade terminal das partículas isoladas de cada grupo, por meio de um cálculo interativo utilizando-se a equação de Haider; Levenspiel (1989), foram muito maiores que aquelas medidas no experimento real. Tal diferença pode ser atribuída em grande parte ao fato de que as equações dos coeficientes de arraste de Ganser (1993), utilizada na simulação 1 via, e Di Felice (1994), utilizada na simulação 2 vias, se distanciam do coeficiente de arraste que ocorre na realidade.

Mesmo assim, foi possível notar que a velocidade simulada seguiu uma proporção quase exata em relação a real, ou seja, se a velocidade adotada na simulação para separação de

um grupo específico de partículas for dividida por um fator médio, obtém-se valores próximos das velocidades do ar observada nos experimentos reais.

Desse modo, no caso das simulações 1 Via, se as velocidades adotadas nas simulações forem divididas por um fator de valor 1,64, os valores observados serão próximos dos valores reais do ar adotadas por Lenço (2010), descritos na Tabela 9. De modo análogo para o caso 2 vias, se as velocidades simuladas forem divididas pelo valor 2,44 os resultados encontrados também se aproximam das velocidades observadas nos experimentos reais. Logo, na construção de equipamentos reais deve-se levar em consideração tais fatores para correção das velocidades, lembrando que tais correções são válidas quando as configurações das partículas que formam o bagaço simulado estejam próximas daquelas utilizadas neste trabalho.

Para o caso em que o bagaço estava úmido, a avaliação do histograma acumulativo de massa já apresenta uma discrepância grande entre o experimento real e o simulado. Essa diferença se deve ao fato de que no experimento real, a cada rodada de separação, o material vinha sendo inevitavelmente seco aos poucos e no caso simulado a umidade foi mantida constante. Dessa maneira, se comparado o perfil de ambos os experimentos reais, com o bagaço em umidade de equilíbrio e com o bagaço úmido, nota-se que os mesmos são muito similares e seguem a mesma tendência.

Já no caso simulado é garantido que o bagaço considerado úmido não tem suas características físicas alteradas nos experimentos e, portanto, pode servir como um parâmetro muito interessante quando deseja-se compreender melhor certo fenômeno de transporte pneumático do bagaço com tais características., apesar de ser um caso irreal, visto que o bagaço em contato com o ar vai perder umidade, modificando suas propriedades. Devendo tal caso ser tratado como um caso limite ideal.

Para pesquisas futuras do desenvolvimento de um modelo envolvendo a secagem do material deverá ser estudada uma correlação que descreva, além da transferência de massa, o fenômeno da diminuição da força de adesão entre as mesmas, sendo os principais parâmetros a serem considerados em tal relação o tempo de residência da partícula no classificador e as propriedades do fluido de transporte.

De modo a demonstrar que tal correlação deverá estar em boa concordância com o fenômeno real foi realizada a simulação de um caso em que a densidade do bagaço é a mesma daquele em umidade de equilíbrio, porém com a força de adesão constante como se o material estivesse úmido. Os resultados serão apresentados nas Figuras 85 a 88.

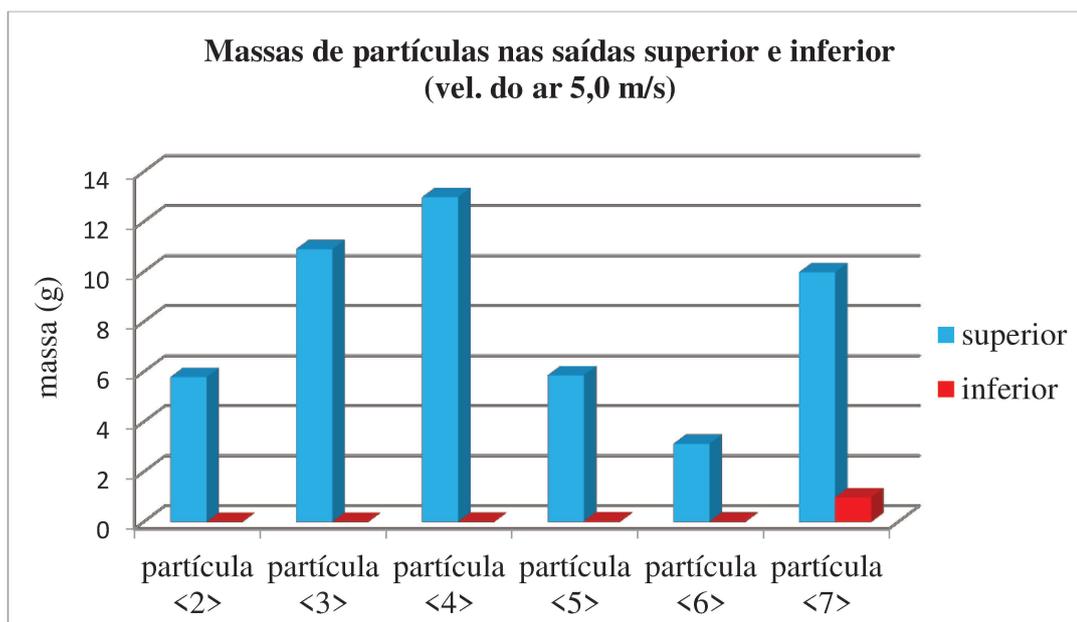


Figura 85: Massas das partículas obtidas nas saídas superior e inferior da simulação 2 vias, unidade de equilíbrio, considerando a força de adesão, velocidade do ar de $5,0 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.



Figura 86: Aglomerado de partículas que ficou estável após 11 segundos da simulação até o seu final, vista x-y.

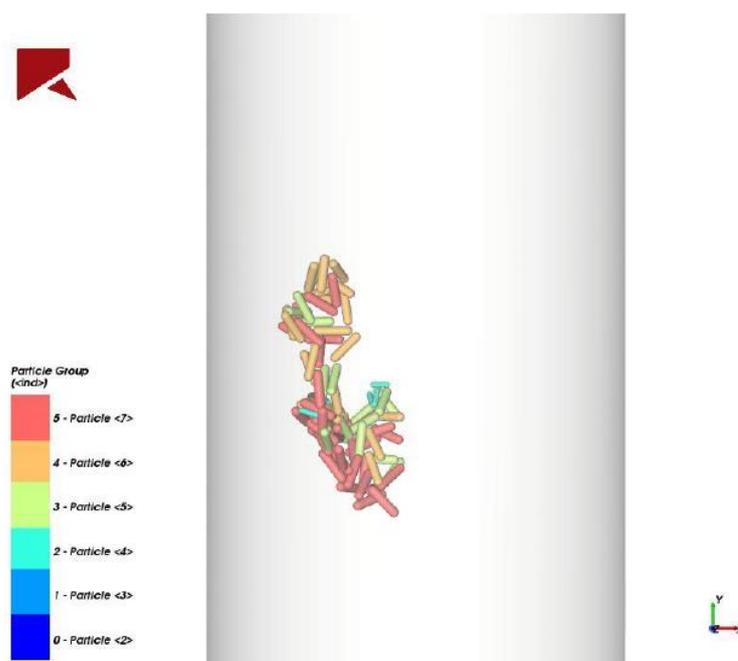


Figura 87: Zoom do aglomerado de partículas que ficou estável após 11 segundos da simulação até o seu final, vista x-y.

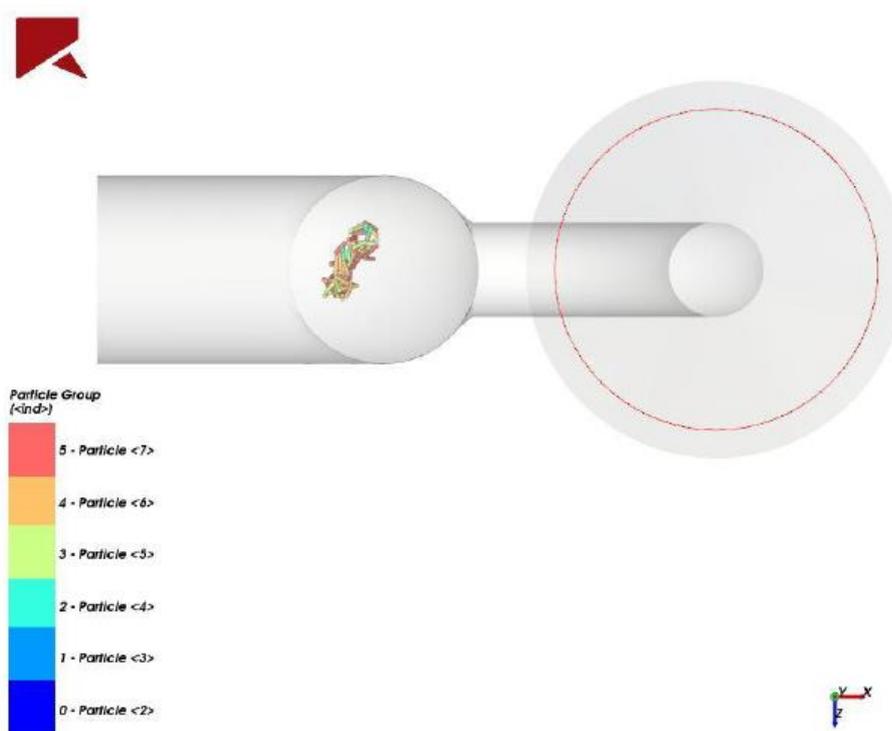


Figura 88: Aglomerado de partículas que ficou estável após 11 segundos da simulação até o seu final, vista x-z.

Como é possível observar, a distribuição de partículas da Figura 85 foi diferente daquela apresentada para a mesma velocidade do ar e as mesmas densidades das partículas, porém sem força de adesão considerada, conforme a Figura 72.

No caso que considerou a força de adesão praticamente todas as partículas foram arrastadas, sendo que o esperado era que as partículas do grupo 7 não fossem arrastadas. A explicação para tal fato pode ser obtida por meio da observação das Figuras 86, 87 e 88. Tais figuras apresentam um aglomerado de partículas formadas por partículas de quase todos grupos unidas, sendo que tal aglomerado pode ser considerado com uma nova partícula com velocidade terminal igual à velocidade do ar passando pelo classificador, permanecendo estável próximo do centro do tubo.

Assim, se observou que a união de partículas que seriam arrastadas com aquelas que não seriam, caso não fosse considerada a força de adesão entre partículas, favorece o arraste das novas estruturas de partículas formadas. Deste modo, fica comprovado a necessidade de um estudo detalhado de quão fraca a força de adesão entre partículas passa a ser à medida que é diminuída a densidade destas, como ocorreria num processo de secagem, visando obter a melhor acurácia possível entre os resultados simulados daqueles obtidos no equipamento real.

5.4 Observações finais a respeito do estudo teórico da classificação de partículas de bagaço

Foi apresentado ao longo deste trabalho diversos conceitos envolvendo o fenômeno da fluidização das partículas de bagaço de cana. O objetivo de tal estudo foi fornecer informações básicas para o início do desenvolvimento de equipamentos pneumáticos que possam auxiliar diversos processos, tais como, na produção de etanol, xilitol, proteína microbiana, aromas, bio-plásticos, papel, entre outros.

Para todos os processos, o fato do bagaço apresentar uma distribuição de partículas mais homogênea já facilitaria sua manipulação, mas em certos casos, como na produção de papel, é demonstrado que a classificação e separação de determinados grupos de partículas torna o processo ainda mais eficiente (O'HARA; MUNDREE, 2016).

Nesta mesma linha, considerando um estudo em específico da hidrólise enzimática sem prévio pré-tratamento, apenas com as partículas do bagaço sendo separadas pneumáticamente em equipamento classificador em dois grupos, fibra e medula, ficou demonstrado que a conversão de celulose em glicose após 72 horas da fração medula chegou a ser o dobro da fração fibra (ALMEIDA, 2012).

Logo, a continuidade em estudos de equipamentos classificadores pneumáticos mais eficientes pode representar um grande avanço para a indústria, principalmente no que diz respeito à viabilização de uma série de processos que ainda nos presentes dias se apresentam muito dispendiosos.

Desse modo, pode-se considerar que os equipamentos pneumáticos classificadores de partículas de bagaço são uma alternativa interessante para homogeneização e seleção de grupos de partículas de maneira rápida, a custos viáveis e com reduzidas paradas para manutenção e trocas de peças, além de poderem ser adaptados para trabalharem como secadores, melhorando o desempenho do bagaço na combustão em caldeiras, por exemplo.

A Tabela 11 resume os principais dados a serem considerados para o início de um projeto teórico exploratório de um classificador pneumático de bagaço.

Tabela 11: Informações úteis para o projeto de um classificador pneumático de bagaço

Fração de bagaço	Velocidade de separação (m.s ⁻¹) (a)	Classificação de Geldart (b)	Densidade (kg.m ⁻³) (a)	% de massa do total da amostra (a)	Diâmetro de Sauter (mm) (b)	Razão de aspecto (b)
Medula	0,7	A	545,3	15	0,3	2,2
Fibra	0,7 < x < 2,0	B	198,2	49	2,0	3,5
Casca	≥ 2,0	D	331,1	36	≥ 4,0	4,1

(a) Valores médios obtidos da tese de Lenço (2010);

(b) Valores médios calculados no presente estudo;

A principal consequência dos avanços nesta linha de pesquisa é o impulsionamento econômico dos países que dispõem do bagaço de cana como um subproduto ainda pouco utilizado perante seu promissor potencial, sendo, portanto, os dados apresentados no presente trabalho uma diretriz para os subsequentes estudos, principalmente aqueles fundamentados em simulações.

Tratando especificamente das simulações, as mesmas são uma alternativa importante para realização de testes que propiciem uma boa expectativa dos resultados esperados no equipamento a ser construído. Assim, o modelo escolhido e apresentado para classificação das partículas de bagaço neste trabalho mostrou-se bastante preditivo, servindo de base para futuras pesquisas que utilizem a fluidização de tal biomassa.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES

Neste trabalho, foram realizadas simulações envolvendo o bagaço de cana-de-açúcar, tal como composto por diferentes grupos de partículas com propriedades semelhantes, auxiliando na visualização e no entendimento do fenômeno de separação de partículas. O processo de separação é muito utilizado na engenharia de processo para permitir, por exemplo, a obtenção de frações mais homogêneas de material, em tamanho ou mesmo em características químicas.

Foi utilizada a técnica CFD/DEM para simular a separação das partículas de bagaço e a mesma mostrou ser uma ferramenta muito poderosa, uma vez que o modelo adotado descreveu com boa exatidão os movimentos das partículas e suas interações com outras partículas e paredes.

Quando a velocidade do ar foi suficiente para separar o grupo intermediário de partículas do bagaço estando em umidade de equilíbrio, observou-se que os contatos partículas/partículas e partículas/paredes eram maiores do que quando as altas velocidades do ar foram adotadas, de modo que a separação foi mais eficiente quando o objetivo era separar as partículas mais grossas.

Nos casos simulados do bagaço em umidade de equilíbrio com o ambiente, utilizando a simulação 1 Via, observou-se que quanto mais altas as velocidades do ar utilizadas, visando a separação de partículas maiores, grupos 6 e 7, os resultados mostraram ser mais eficientes. Isto porque com velocidades menores do ar foi observado o aumento de concentração das partículas no tubo, acarretando em diferenças na força de arraste do que seria esperado para partículas individuais.

Já na simulação 2 Vias, a comparação com o experimento real mostrou que o modelo estudado apresentou um grau de predição elevado para este caso, devendo-se em muito ao fato da interação fluido partícula ter sido incluída e, assim, ser uma situação mais próxima do que ocorre na realidade, com o fluido influenciando no arraste das partículas e vice-versa.

Já no caso do bagaço úmido, devido à adesão entre partículas formando grandes aglomerados destas, a simulação confiável é a dita 2 Vias. Nessa situação, devido à umidade do bagaço ser muito maior que do ambiente é inevitável que em seguidos testes de transporte pneumático reais haja a secagem natural do material, porém quando se procede à simulação é

garantido que as características do material não são alteradas, com isso tal ferramenta se mostrou muito importante quando se pretende avaliar processos que utilizem o bagaço úmido.

No caso de um estudo futuro da secagem do material durante o transporte das partículas pode-se considerar uma nova correlação que faça parte do modelo de modo que, dependendo do tempo de residência das partículas no leito e de características do fluido, haja a transferência de massa das partículas, com a perda da umidade e conseqüente redução das densidades, acompanhada da diminuição da força de adesão entre as mesmas.

Por fim, foi destacada a importância do estudo teórico de classificação pneumática de partículas de bagaço, principalmente quando o objetivo é a separação de frações bem definidas de tal biomassa, como a fibra e a medula. Sendo que em determinados processos, como a produção de papel, a medula é indesejável, uma vez que é responsável por dificultar a drenagem de água durante o processo. Por outro lado, considerando a hidrólise enzimática, tal fração apresenta rendimentos de conversão de celulose em açúcares fermentáveis superiores aos das demais frações quando nenhum pré-tratamento do material é realizado, o que auxilia na redução de custos de tal processo.

Logo, sabendo que com velocidades do ar de até $0,7 \text{ m.s}^{-1}$ pode ser separada a fração medula, com velocidades intermediárias entre $0,7$ e $2,0 \text{ m.s}^{-1}$ separa-se a fibra e velocidades superiores a $2,0 \text{ m.s}^{-1}$ separa-se a casca, poderão ser feitos testes e simulações da classificação pneumática de bagaço em equipamentos separadores visando o desenvolvimento destes para serem utilizados nos referidos processos.

Além disso, os parâmetros de simulação apresentados no presente trabalho também podem ser estendidos a diversos outros processos que utilizam a fluidização do bagaço de cana-de-açúcar como a pirólise, gaseificação, secagem pneumática e outros, permitindo o estudo e desenvolvimento de tais equipamentos perto de uma configuração ideal, economizando tempo e reduzindo custos para tanto.

6.1 Sugestões para trabalhos futuros

1. Simular a classificação de partículas em outros equipamentos, como naquele estudado por Almeida (2012), e realizar testes reais nas mesmas condições da simulação de modo a verificar a validade do modelo para equipamentos com designs diferentes aos utilizados neste estudo;
2. Estudar e simular novos equipamentos pneumáticos que possam substituir os atuais desmeduladores utilizados na indústria de papel, representando uma

alternativa mais econômica e eficiente de separação da fração medula, auxiliando a impulsionar ainda mais tal setor;

3. Estudar teoricamente a secagem do bagaço por meio da implementação da equação de transferência de massa ao modelo, sendo que esta deverá estar correlacionada à intensidade da força de adesão entre partículas, realizando experimentos reais em laboratório para validação dos resultados;
4. Expandir o estudo teórico do transporte pneumático de partículas para outras biomassas como as palhas de cana, milho, cevada, casca de arroz, entre outras;
5. Aproximar as partículas simuladas ainda mais da realidade, uma vez que o software ROCKY[®] permite que o usuário defina o formato das partículas estudadas não somente pela escolha daqueles presentes em sua biblioteca, mas que também importe geometrias de sua escolha, sendo que a seleção e escaneamento de algumas partículas que representassem a biomassa como um todo poderiam ser utilizadas em simulações futuras;

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AGARWAL, N., CHHABRA, R.P. Settling velocity of cubes in Newtonian and power law liquids. **Powder Technology**, v. 178, p.17–21, 2007.

AI, J., CHEN, J-F., ROTTER, J.M., OOI, J.H. Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations. **Powder Technology**, v. 206, p. 269-282, 2011.

ALDER, J.B., WAINWRIGHT, T.E.J., Phase transition for a hard sphere system. **The Journal of Chemical Physics**, v. 27, n. 5, p.1208-1209,1957.

ALMEIDA, E. **Estudo da separação pneumática de frações de bagaço de cana e sua influência na hidrólise enzimática**. 2012. 109f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, São Paulo.2012.

ALMEIDA, E., CORTEZ, L.A.B., SILVA, M.A. Sugarcane bagasse pneumatic classification as a technology for reducing costs on enzymatic hydrolysis process. In: INTERNATIONAL SOCIETY OF SUGAR CANE TECHNOLOGISTS, 28., 2013, São Paulo. **Anais...**São Paulo: ISSCT, 2013. p. 1320-1326.

ALMEIDA, L. C., FONTE, C. B., OLIVEIRA, J. A. A. DEM-CFD coupling: mathematical modelling and case studies using ROCKY-DEM[®] and ANSYS Fluent[®]. In: ELEVENTH INTERNATIONAL CONFERENCE ON CFD IN THE MINERALS AND PROCESS INDUSTRIES, 11., 2015, Melbourne. **Anais eletrônicos...**Melbourne: CSIRO, 2015. Disponível em <http://www.cfd.com.au/cfd_conf15/PDFs/139FON.pdf>.

ALMSTEDT, A. -E., ENWALD, H., PEIRANO, E. Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. **International Journal of Multiphase Flow**. v. 22, p. 21-66, 1996.

ANANDHAKRISHNAN, R., SARKAR, J.P. A critical review on vertical pneumatic conveying: some perspectives. **Canadian Journal on Chemical Engineering & Technology**. v. 2, n. 4, 2011.

ANDERSON, T. B., JACKSON, R. Fluid mechanical description of fluidized beds. Equations of motion. **Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals**. v. 6, n. 4, p. 527-539, 1967.

ARALDE, L. E., TOSI, E., TAPIZ, L., PAZ, D., CÁRDENAZ, G. J. Determinação da velocidade de transporte pneumático do bagaço de cana de açúcar. **Revista Industrial y Agrícola de Tucumán**, v. 69, p. 15-22, 1991.

ARNAO, J.H.S. **Caldeiras aquatubulares de bagaço – Estudo do sistema de recuperação de energia**. 2007.233f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, São Paulo. 2007.

BAKKER, H. **Sugar cane cultivation and management**. New York: Springer. 1999. 679 p.

Balanço Energético Nacional (BEN). <<https://ben.epe.gov.br/default.aspx?anoColeta=2017>> Acesso em 28 de abril de 2017.

BANDROWSKI, J., KACMARZYK, G. Some aspects of the operation and design of vertical pneumatic conveying, **Powder Technology**. v. 28, p. 25 -33, 1981.

BARBOSA, R. D., MENEGALLI, F. C. Estudo da velocidade terminal e coeficiente de arraste para bagaço de cana. In: XIV ENCONTRO SOBRE ESCOAMENTO EM MEIOS POROSOS, 14., 1986. **Anais...**Campinas: ENEMP, 1986, p. 291-301.

BERLEMONT, A., DESJONQUERES, P., GOUESBET, G. Particle lagrangian simulation in turbulent flows. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 16, n. 1, p. 19-34, 1990.

BI, H.T. GRACE, J.R., ZHU, J-X. Types of choking in vertical pneumatic systems. **International Journal of Multiphase Flow**. v.19, p.1077- 1092, 1993.

BLAZEK, J. **Computational fluid dynamics: principles and applications**. London: Elsevier. 2001. 440 p.

BROSH, T., LEVY, A. Modeling of heat transfer in pneumatic conveyer using a combined DEM-CFD numerical code. **Drying Technology**, v. 28, n. 2, p. 155-164, 2010.

CAMPBELL, C. S., BRENNEN, C. E. Computer simulations of granular shear flows. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 151, p. 167–188, 1985.

CENTRO DE TECNOLOGIA CANAVIEIRA (CTC). Bagaço e Palha de Cana Para Fins Energéticos. Disponível em: <http://www.ctcanavieira.com.br/index.php?option=com_content&view=article&id=431&Itemid=1380>. Acesso em: 03 Maio 2012.

CGEE, **Bioetanol combustível: uma oportunidade para o Brasil**. Brasília, DF: Centro de Gestão e Estudos Estratégicos. 2009.

CHU, K.W., YU, A.B. Numerical simulation of complex particle–fluid flows. **Powder Technology**, v. 179, p.104–114, 2008.

CLIFT, R., GRACE, J.R., WEBER, M.E. **Bubbles, drops, and particles**. New York: Academic Press. 1978. 351 p.

CONAB. Companhia Nacional de Abastecimento: Acompanhamento da safra brasileira: cana-de-açúcar.

http://www.conab.gov.br/OlalaCMS/uploads/arquivos/16_08_18_12_03_30_boletim_cana_portugues_-_2o_lev_-_16-17.pdf . Acesso 06 de janeiro (2017).

CORRÊA, J.L. G. **Discussão de parâmetros de projetos de secadores ciclônicos**. 2003, 189f. Tese (Doutorado) – Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2003.

CORTEZ, L. A. B.(Org.); LORA, E. E. S.; GÓMEZ, E. O. **Biomassa para energia**. Campinas: Editora da Unicamp, 2008.733p.

CREMASCO, M. A. **Operações unitárias em sistemas particulados e fluidodinâmicos**. São Paulo: Blucher, 2012. 423 p.

CUI, H. GRACE, J.R. Pneumatic conveying of biomass particles: a review. **China Particuology**, v. 4, n. 3-4, p. 183-188, 2006.

CUNDALL, P. A.; STRACK, O. D. A discrete numerical model for granular assemblies. **Geotechnique**, v. 29, n. 1, p. 47-65, 1979.

DALLAVALLE, J.M. **Micromeritics: the technology of fine particles**. 2. ed. New York: Pitman Publishing Crop. 1948. 555 p..

DARTEVELLE, S. **Hydrodynamic and thermodynamic models, and numerical techniques**. Los Alamos, Novo México, U.S. Los Alamos National Laboratory. 2005. 62 p.

DEEN, N.G., van SINT ANNALAND, M., KUIPERS, J.A.M. Multi-scale modeling of dispersed gas-liquid two-phase flow. **Chemical Engineering Science**, v. 59, n. 8-9, p. 1853-1861, 2004.

DEFRAEYE, T. Advanced computational modelling for drying processes – A review. **Applied Energy**, v. 131, p. 323-344, 2014.

DI FELICE, R. The Voidage function for fluid-particle interaction systems. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 20, n. 1, p.153, 1994.

DI RENZO, A., DI MAIO, F.P. Homogeneous and bubbling fluidization regimes in DEM-CFD simulations: hydrodynamic stability of gas and liquid fluidized beds. **Chemical Engineering Science**, v. 62, p. 116-130, 2007.

DOMINIK, C., TIELENS, A. G. G. M. Resistance to sliding on atomic scales in the adhesive contact of two elastic spheres. **Philosophical Magazine A**, v. 73, n. 5, p. 1279-1302, 1995.

DRIEMEIER, C., OLIVEIRA, M.M., MENDES, F.M., GÓMEZ, E.O. Characterization of sugarcane bagasse powders. **Powder Technology**, v. 214, p. 111-116, 2011.

ENGISOFT. Rocky – GPU processing
<<http://www.enginsoft.com/nordic/rocky/>> Acesso em 15 de agosto de 2017.

FAOSTAT: Food And Agriculture Organization Of The United Nations - Statistics Division. <http://faostat3.fao.org/browse/Q/QC/E> (2014) Acesso em 28 de abril de 2017.

FENG, Y.Q., YU, A.B. Assessment of model formulations in the discrete particle simulation of gas-solid flow. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 43, p. 8378-8390, 2004.

FERNANDES, A. J. **Manual da cana-de-açúcar**. Piracicaba: Livroceres. 1984. 196 p.

FERZIGER, J. H., PERIC', M. **Computational methods for fluid dynamics**. 3. ed. New York: Springer. 2002.

GAN, J. Q., ZHOU, Z. Y., YU, A. B. A GPU-based DEM approach for modelling of particulate systems. *Powder Technology*, v.301, p.1172–1182, 2016.

GANSER, G.H. A rational approach to drag prediction of spherical and non-spherical particles. *Powder Technology*, v. 77, p. 143-152, 1993.

GELDART, D. **Gas fluidization technology**. New York: John Wiley & Sons. 1986. 476 p.

GELDART, D., ABDULLAH, E.C., HASSANPOUR, A., NWOKES, L. C., WOUTERS, I. Characterization of powder flowability using measurement of angle of repose. *China Particuology*, v. 4, n. 3-4, p. 104-107, 2006.

GELDART, D., Types of gas fluidization, *Powder Technology*, vol. 7, p. 285-292, 1973.

GENT, S. P. **Computational modeling of multiphase fibrous flows for simulation based engineering design**. 2009, 183f. Tese (Doutorado) – Iowa State University, Ames, 2009.

GIDASPOW, D. **Multiphase flow and fluidization – continuum and kinetic theory descriptions**. 1. ed. San Diego: Academic Press. 1994. 467 p.

GOLDSTEIN, I.S. **Organic Chemicals from Biomass**. Boca Raton, Florida: CRC Press. 1981. 310 p.

GÓMEZ, E.O., ROCHA, G.J.M., ROSSELL, C.E.V., NASCIMENTO, V.M., CORTEZ, L.A.B. Enzymatic hydrolysis of pith fractions of sugarcane bagasse obtained by several methods of particulate classification. In: INTERNATIONAL SOCIETY OF SUGAR CANE TECHNOLOGISTS, 28., 2013, São Paulo. **Anais...**São Paulo: ISSCT, 2013. p. 349-350.

GRACE, J.R. Contacting modes and behavior classification of gas-solid and other two-phase suspension. **Canadian Journal on Chemical Engineering & Technology**. vol. 64, p. 353-363, 1986.

GUI, W., DU, J., HU, G., FANG, Z. Accelerating CFD-DEM simulation of dilute pneumatic conveying with bends. **International Journal of Fluid Machinery and Systems**, v. 8, n. 2, 2015.

HAIDER, A., LEVENSPIEL, O. Drag coefficient and terminal Velocity of spherical and nonspherical particles. **Powder Technology**, v. 58, p. 63 - 70, 1989.

HE, Y., PENG, W., WANG, T., YAN, S. DEM study of wet cohesive particles in the presence of liquid bridges in a gas fluidized bed. **Mathematical Problems in Engineering**. 14 p., 2014. Disponível em <<https://www.hindawi.com/journals/mpe/2014/316568/>>.

HERTZ, H. Ueber die Berührung fester elastischer Körper (On contact between elastic bodies). **Journal für die reine und angewandte Mathematik**, v. 92, p. 156-171, 1882.

HOOMANS, B.P.B., KUIPERS, J.A.M., BRIELS, W.J., AND VAN SWAAIJ, W.P.M. Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidised bed: a hard-sphere approach. **Chemical Engineering Science**, v. 51(1), p. 99-118, 1996.

HORABIK, J., MOLENDAA, M. Parameters and contact models for DEM simulations of agricultural granular materials: A review. **Biosystems Engineering**, v. 147, p. 206-225, 2016.

IBGE. Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística. Levantamento sistemático da produção agrícola (LSPA). Disponível em <<http://www.sidra.ibge.gov.br/bda/agric/default.asp?t=5&z=t&o=11&u1=1&u2=1&u3=1&u4=1&u5=1&u6=1>>. Acesso em : 03 Maio 2017.

ILELEJI, K.E., ZHOU, B. The angle of repose of bulk corn stover particles. **Powder Technology**. v.187, p. 110–118, 2008.

ISHII, M., HIBIKI, T. **Thermo-fluid dynamics of two-phase flow**. New York: Springer. 2011. 518 p.

JAKOBSEN; H.A. **Chemical reactor modelling – multiphase reactive flows**. Berlin, Alemanha: Springer. 2008. 1296 p.

JAMALEDDINE, T.J., RAY, M.B. Application of computational fluid dynamics for simulation of drying processes: A review. **Drying Technology**, v. 28, p. 120-154, 2010.

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

JITTANIT, W., SRZEDNICKI, G., DRISCOLL, R.H. Comparison between fluidized bed and spouted bed drying for seeds. **Dry. Technology**, v. 31, p. 52-56, 2013.

KIM, K.S., MCMEEKING, R.M, JOHNSON, K.L. Adhesion, slip, cohesive zones and energy fluxes for elastic spheres in contact. **Journal of Mechanics and Physics of Solids**. v. 46, p.243–266, 1998.

KLINZING, G. E., RIZK, F., MARCUS, R., LEUNG, L. S. **Pneumatic conveying of solids. a theoretical and practical approach**. 3. ed. New York: Springer. 2010. 568 p.

KNUDSEN, J. G., KATZ, D. L. **Fluid dynamics and heat transfer**. New York: McGraw-Hill Book Company. 1958. 576 p.

KUANG, S.B., CHU, K.W., YU, A.B., ZOU, Z.S., FENG, Y.Q. Computational investigation of horizontal slug flow in pneumatic conveying. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 47, n. 2, p. 470-480, 2008.

KUNII, D.; LEVENSPIEL, O. **Fluidization engineering**. Butterworth-Heinemann, USA, 2nd ed., 1991, 491p.

LAÍN, S., SOMMERFELD, M. Characterisation of pneumatic conveying systems using the Euler/Lagrange approach. **Powder Technology**, v. 235, p. 764-782, 2013.

LAUNDER, B.E., SPALDING, D.B. The numerical computation of turbulent flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 3, n. 2, p. 269-289, 1974.

LEAL, M.R.L.V. Evolução tecnológica do processamento da cana-de-açúcar para etanol e energia elétrica. In: CORTEZ, L. A. B.(Org.). **Bioetanol de cana-de-açúcar: P&D para produtividade e sustentabilidade**. Campinas, SP: Editora Blucher. 2010. p.561-576.

LEBOWITZ, J. L. Exact solution of generalized percus-yevick equation for a mixture of hard spheres. **Physical Review**, v. 133, n. 4, p. 895-899, 1964.

LENÇO, P.A. **Caracterização do bagaço de cana-de-açúcar para geração de energia**. 2010, 161f. Tese (Doutorado) – Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2010.

LEUNG, L. S. WILES, R. J., NICKLIN, D. J. Correlation for predicting choking flowrate in vertical pneumatic conveying, **Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development**. v. 10, p.183- 189, 1971.

LEUNG, L.S. Vertical pneumatic conveying: a flow regime diagram and a review of choking versus non-choking systems. **Powder Technology**. v. 25, p. 185- 190, 1980.

LI, J., MANSON, D. J. Application of the discrete element modelling in air drying of particulate solids. **Drying Technology**, v. 20, n. 2, p. 255-282, 2002.

LI, S., MARSHALL, J.S., LIU, G., YAO, Q. Adhesive particulate flow: the discrete element method and its application in energy and environmental engineering. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 37, p. 633-668, 2011.

LIM, E.W.C., TAN, R. B. H., XIAO, Z. Mixing behaviors of wet granular materials in gas fluidized bed systems. **AIChE Journal**, v. 59, n. 11, p. 4058-4067, 2013.

LINK, J.M., GODLIEB, W., DEEN, N.G., KUIPERS, J.A.M. Discrete element study of granulation in a spout - fluidized bed. **Chemical Engineering Science**, v. 62, p. 195-207, 2007.

LUN, C.K.K., SAVAGE, S.B., JEFFREY, D.J., CHEPURNIY, N. Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in couette flow and slightly inelastic particles in a general flow field. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 140, p. 223-256, 1984.

MACRELLI, S., MOGENSEN, J., ZACCHI, G. Techno-economic evaluation of 2nd generation bioethanol production from sugar cane bagasse and leaves integrated with the sugar-based ethanol process. **Biotechnology for Biofuels**, v.5, n. 22, 2012.

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos. 2004. 453 p.

MANJULA, E.V.P.J., ARIYARATNE, W.K.H. RATNAYAKE, C., MELAAENA, M. C. A review of CFD modelling studies on pneumatic conveying and challenges in modelling offshore drill cuttings transport. **Powder Technology**, v. 305, p. 782-793, 2017.

MANNINEN, M., TAIVASSALO, V., KALLIO, S. **On the mixture model for multiphase flow**. Technical Research Centre of Finland: VTT Publications 288. 1996. 67 p.

MARKOWSKI, M., SOBIESKI, W., KONOPKA, I., TANSKA, M., BIALOBRZEWSKI, I. Drying characteristics of barley grain dried in a spouted-bed and combined IR-convection dryers. **Drying Technology**, v. 25, p.1621-1632, 2007.

MATSEN, J.M. Mechanics of choking and entrainment, **Powder Technology**. vol 32, p. 21-33, 1982.

McDONALD, P. W. The computation of transonic flow through two-dimensional gas turbine cascades. In: GAS TURBINE CONFERENCE & PRODUCTS SHOW, 1971, Houston. **Anais...**Houston: ASME, 1971. 7 p.

MIKAMI, T., KAMIYA, H., HORIO, M. Numerical simulation of cohesive powder behavior in a fluidized bed. **Chemical Engineering Science**, v. 53, p. 1927-1940, 1998.

MINISTÉRIO DA AGRICULTURA, PECUÁRIA E ABASTECIMENTO (MAPA). Agência de Informação Embrapa – Cana-de-Açúcar. Disponível em: <<http://www.agencia.cnptia.embrapa.br/gestor/cana-de-acucar/Abertura.html>>. Acesso em: 02 Agosto 2011.

MOSTOUFI, N., NOROUZI, H.R., ZARGHAMI, R., SOTUDEH-GHAREBAGH, R. **Coupled CFD-DEM modeling – formulation, implementation and application to multiphase flows**. 1. ed. Chichester, UK; Hoboken, NJ: John Wiley & Sons. 2016. 432 p.

NANDAKUMAR, K., WU, C.L., BERROUK, A.S. An efficient chained-hash-table strategy for collision handling in hard-sphere discrete particle modeling. **Powder Technology**, v. 197, n. 1-2, p. 58-67, 2010.

NEBRA, S.A. **Secagem pneumática de bagaço de cana**. 1985, 121f. Tese (Doutorado) – Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1985.

NEBRA, S.A., MACEDO, I.C.M. Pneumatic drying of bagasse. **International Sugar Journal**, 91 (1081), p. 3-8, 1989.

O'BRIEN, T. J., SYAMLAL, M., WILLIAM, R. **MFIX documentation – theory guide**. Morgantown, West Virginia: U.S. Department of Energy. 1993. 52 p. Disponível em <
https://mfix.netl.doe.gov/download/mfix/mfix_legacy_manual/Theory.pdf>. Acesso em 22 setembro 2017.

O'HARA; I. M., MUNDREE, S. G. **Sugarcane-based biofuels and bioproducts**. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons. 2016. 385 p.

OLSSON, L.; JORGENSEN, H.; KROGH, K.B.R.; ROCA, C. Bioethanol production from Lignocellulosic Material. In: DUMITRIU, S.(ed.). **Polysaccharides – Structural diversity and functional versatility**. New York, NY: Marcel Dekker, 2. ed., 2005. p. 957-993.

ORMANCEY, A., MARTINON, A. Prediction of particle dispersion in turbulent flows. **PhysicoChemical Hydrodynamics**. v. 5, n. 3-4, p. 229-240, 1984.

PATANKAR, S. V. **Numerical heat transfer and fluid flow**. Hemisphere Publishing Corporation. 1980, 197 p.

PÉREZ, N. P., DENTELLO, R.O., MACHIN, E. B., PEDROSO, D. T., ANTUNES, J. S., SILVEIRA, J. L. Physical characterization of bagasse for use in fluidized bed gasifiers associated with gas turbines in sugar cane industry. In: XI LATIN-AMERICAN CONGRESS ELECTRICITY GENERATION AND

TRANSMISSION, 11., 2015, São José dos Campos. **Anais...** São José dos Campos: CLAGTEE, 2015. 7p.

PETTYJOHN, E. S., CHRISTIANSEN, E. B. Effect of particle shape on free-settling rates of isometric particles. **Chemical Engineering Progress**, v. 44, n. 2, p. 157-172, 1948.

QUINTERO-RAMIREZ, R. Hidrólise da biomassa lignocelulósica. In: CORTEZ, L. A. B.(Org.). **Bioetanol de cana-de-açúcar: P&D para produtividade e sustentabilidade**. Campinas, SP: Editora Blucher, 2010. p.717-731.

RABINOVICH, E., KALM, H. Flow regime diagram for vertical pneumatic conveying and fluidized bed systems. **Powder Technology**, v. 207, p. 119-133, 2011.

RASUL, M. G. Fluidization characteristics of bagasse in a gas-fluidized bed. **Particle & Particle Systems Characterization**, v.15, p. 243-247, 1998.

REN, B., ZHONG, W., CHEN, YU., CHEN, XI., BAOSHENG, J., YUAN, Z., LU, Y. CFD-DEM simulation of spouting of corn-shaped particles. **Particuology**, v. 10, p. 562-572, 2012.

RIZK, F. Principles of pneumatic conveying. In: CHEREMISINOFF, N. P. **Encyclopedia of fluid mechanics**. Houston, TX: Gulf Publishing Company, Houston, 1986. p. 311-348.

ROCHA, S. C. S. **Contribuição ao estudo da secagem pneumática vertical: simulação e influência do coeficiente de transferência de calor gás-partícula**. 1988, 258f. Tese (Doutorado) – Escola Politécnica da USP, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1988.

ROCKY DEM. <http://rocky-dem.com/>. Acesso em 28 de abril de 2017.

SÁNCHEZ, O.J.; CARDONA, C.A. Trends in biotechnological production of fuel ethanol from different feedstocks. **Bioresource Technhology**, v. 99, p. 5270-5295, 2008.

SANJUÁN, R., ANZALDO, J., VARGAS, J., TURRADO, J.,PATT, R. Morphological and chemical composition of pitch and fiber from Mexican sugarcane bagasse. **European Journal of Wood and Wood Products**, v.59, p. 447-450, 2001.

SANTOS, F.(Org.), COLODETTE, J. , QUEIROZ, J.H. **Bioenergia e biorrefinaria: cana-de-açúcar e espécies florestais**. Viçosa, MG: Os Editores. 2013. 551p.

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

SCHULZE, D. **Powders and bulk solids: behavior, characterization, storage and flow**. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 2008. 516 p.

SCHWAGER, T. POSCHEL, T. **Computational granular dynamics: models and algorithms**. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 2005. 322 p.

SILVA, M. A. **Estudo da secagem em ciclone**. 1991, 146f. Tese (Doutorado) – Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1991.

SIQUEIRA, G., MILAGRES, A.M.F., CARVALHO, W., KOCH, G., FERRAZ, A. Topochemical distribution of lignin and hydroxycinnamic acids in sugar-cane cell walls and its correlation with the enzymatic hydrolysis of polysaccharides. **Biotechnology for Biofuels**. v.4, 2011.

SOCCOL, C.R., et al. Bioethanol from lignocelluloses: Status and perspectives in Brazil. **Bioresource Technology**, v. 101, n. 13, p. 4820-4825, 2010.

SONG, C., LIU, D., MA, J., CHEN, X. CFD-DEM simulation of flow pattern and particle velocity in a fluidized bed with wet particles. **Powder Technology**, v. 314, p. 346-354, 2017.

STURM, M., WIRTZ, S., SCHERER, V., DENECKE, J. Coupled DEM-CFD simulation of pneumatically conveyed granular media. **Chemical Engineering & Technology**, v. 33, n. 7, p. 1184-1192, 2010.

SUN, Y., CHENG, J. Hydrolysis of lignocellulosic material for ethanol production: a review. **Bioresource Technology**, v. 83, p. 1-11, 2002.

SYAMLAL, J. **The particle-particle drag term in a multiparticle model of fluidization**. Topical report. DOE/MC 21353-2373, NTIS/DE 87006500. 1987.

TEGZES, P., ALBERT, R., PASKVAN, M., BARABÁSI, A. -L., VICSEK, T., SCHIFFER, P. Liquid-induced transitions in granular media. **Physical Review E**, v.60, n. 5, p. 5823-5826, 1999.

TRIANA, O., LEONARD, M., SAAVEDRA, F., FERNÁNDEZ, N., GÁLVEZ, G., PEÑA, E.: **Atlas del bagazo de la caña de azúcar**. Cuba 9/GEPLACEA/PNUD/ICIDCA, México, 1990.

TSUJI, Y. Multi-scale modeling of dense phase gas-particle flow. **Chemical Engineering Science**, v. 62, n. 13, p. 3410-3418, 2007.

TSUJI, Y., TANAKA, T., ISHIDA, T. Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe. **Powder Technology**, v. 71, p. 239-250, 1992.

UNIÃO DOS PRODUTORES DE BIOENERGIA (UDOP). Fluxogramas da produção de açúcar e álcool. Disponível em: < <http://www.udop.com.br/>>. Acesso em: 29 Novembro 2016.

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

VERSTEEG, H.K., MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics**. Harlow, UK: Pearson. 503 p. 2007.

WADELL, H. Sphericity and roundness of rock particles. **Journal of Geology** v. 41, p. 310-331, 1933.

WALTON, O.R., BRAUN, R.L. Viscosity, granular temperature and stress calculations for shearing assemblies of inelastic frictional disks. *Journal of Rheology*, v. 30, p. 949-980, 1986.

WANG, M., ZHU, W., SUN, Q., ZHANG, X. A DEM simulation of dry and wet particle flow behaviors in riser. *Powder Technology*, v.267, p.221–233, 2014.

WANG, Z., LI, H. A new criterion for prejudging the fluidization behavior of powders. **Powder Technology**, v.84, p. 191-195, 1995.

WATANO, S., KAN, H., NAKAMURA, H. Effect of particle wettability on particle-particle adhesion of colliding particles through droplet. *Powder Technology*. v. 302, p. 406–413, 2016.

WEN, C.Y.; YU, Y.H. Mechanics of fluidization. **Chemical Engineering Progress Symposium Series**. v. 62, n. 62, p.100–111, 1966.

WU, C.L., BERROUK, A.S., NANDAKUMAR, K. Three-dimensional discrete particle model for gas-solid fluidized beds on unstructured mesh. **Chemical Engineering Journal**, v. 152, n. 2-3, p. 514-529, 2009.

XIAO, H., SUN, J. Algorithms in a robust hybrid CFD-DEM solver for particle-laden flows. **Communications in Computational Physics**, v. 9, n. 2, p. 297-324, 2011.

Xu, B.H. and Yu, A.B. Numerical simulation of the gas - solid flow in a fluidized bed by combining discrete particle method with computational fluid dynamics. **Chemical Engineering Science**, v. 52, p. 2785-2809, 1997.

YANG, W. C. **Handbook of fluidization and fluid-particle systems**. Yang.W.C. editor, Marcel Dekker Inc., 2003.

YANG, W.C. A Mathematical definition of choking phenomenon and a mathematical model for predicting choking velocity and choking voidage, **AIChE Journal**. v. 21, p. 1017-1025, 1975.

YERUSHALMI, J., TURNER, D., SQUIRES, A. The fast fluidized bed. **Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development**. v. 15, p. 47-52, 1976.

YOSHIDA, H. Three-dimensional simulation of air cyclone and particle separation by a revised-type cyclone. **Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects**. v. 109, p. 1-12, 1996.

YU, A.B., WANG, B., XU, D.L., CHU, K.W. Numerical study of gas-solid flow in a cyclone separator. **Applied Mathematical Modelling**, v. 30, p. 1326-1342, 2006.

ZENZ, F. A., OTHMER, D.F. **Fluidization and fluid-particle systems**, Reinhold and Publishing Corporation, New York, 1960.

ZHANG, X., VU-QUOC, L. Modeling the dependence of the coefficient of restitution on the impact velocity in elasto-plastic collisions. **International Journal of Impact Engineering**, v. 27, p. 317-341, 2002.

ZHOU, Y.C., WRIGHT, B.D., YANG, R.Y., XU, B.H., YU, A.B. Rolling friction in the dynamic simulation of sandpile formation. **Physica A**, v. 269, p. 536-553, 1999.

ZHOU, Z.Y., YU, A.B., ZULLI, P. A new computational method for studying heat transfer in fluid bed reactors. **Powder Technology**, v. 197, n. 1-2, p. 102-110, 2010.

ZHU, R. R., ZHU, W. B., XING, L. C., SUN, Q. Q. DEM simulation on particle mixing in dry and wet particles spouted bed. **Powder Technology**, v. 210, p. 73-81, 2011.

ZHUANG, J., MARCHANT, M.A., NOKES, S.E., STROBEL, H. J. Economic analysis of cellulase production methods for bio-ethanol. **Applied Engineering in Agriculture**, v. 23, n. 5, p. 679-687, 2007.

ZOU, Z. S., KUANG, S; B., YU, A. B. Computational study of flow regimes in vertical pneumatic conveying. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 48, n.14, p. 6846-6858, 2009.

APÊNDICE

TUTORIAL PARA REALIZAÇÃO DAS SIMULAÇÕES

Setup ANSYS Fluent – Acoplamento 1 Via

A primeira etapa foi abrir a malha no software ANSYS Fluent®, se nota que foi feita uma simplificação do equipamento real apresentado, utilizando obviamente apenas a parte de interesse onde acontece a separação de partículas. O desenho simula as dimensões reais do equipamento, com altura de 1,5 metros e diâmetro do tubo de 0,1 metro.

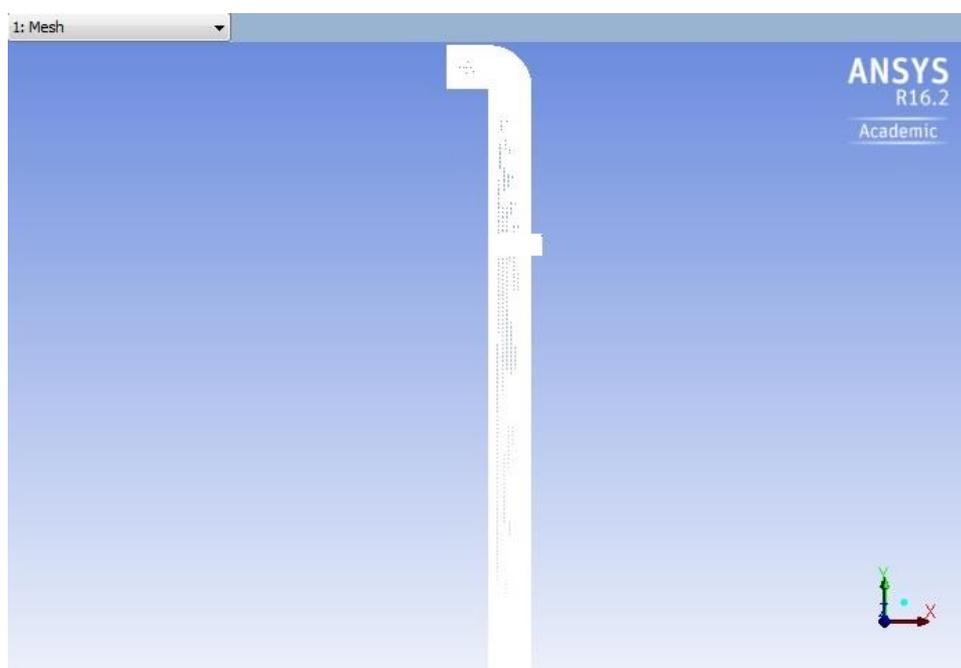


Figura 89: Malha utilizada na simulação com Acoplamento 1 Via.

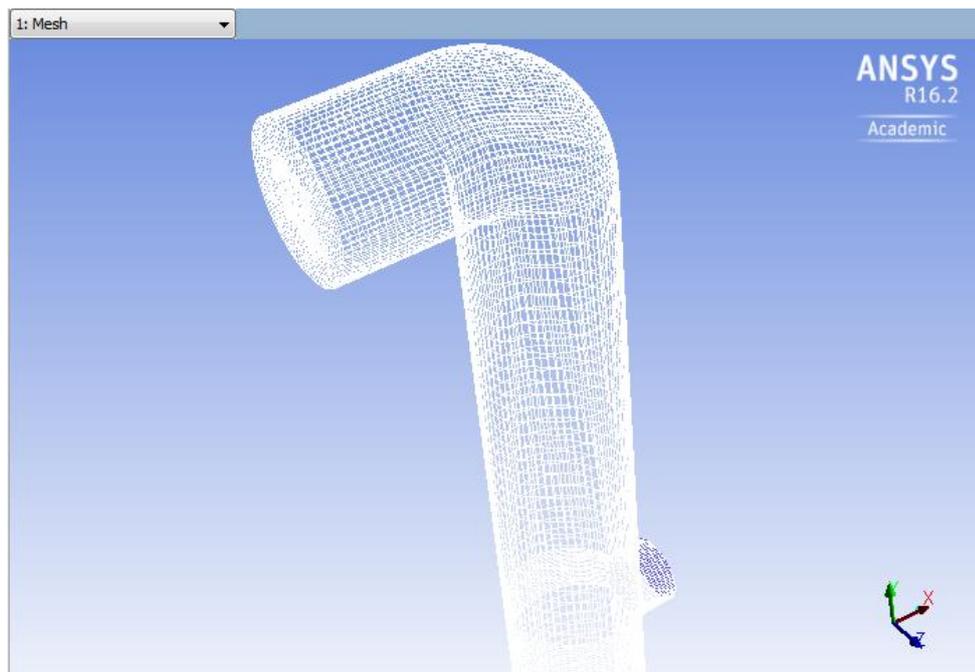


Figura 90: Zoom na parte superior do tubo sedimentador/elutriador de partículas.

No caso desse acoplamento as recomendações para geração da malha são padrões para os casos envolvendo CFD, ou seja, evitar má qualidade de células e grandes variações nos volumes entre células adjacentes, aplicar malhas mais densas em zonas com grandes variações de gradientes e assim por diante.

A etapa seguinte consiste em aplicar o modelo segundo as configurações do modelo de passagem de ar.

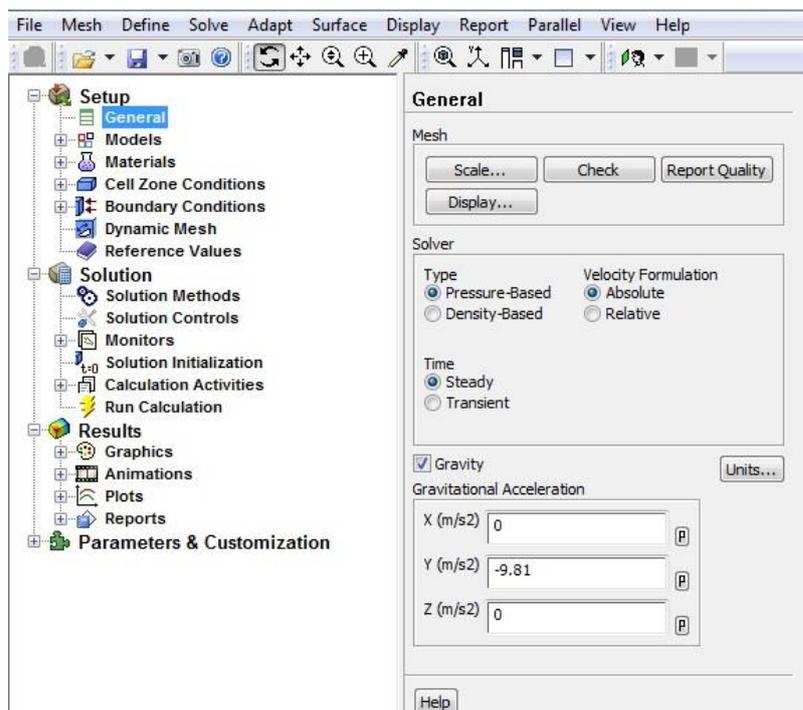


Figura 91: Parâmetros gerais no setup do ANSYS Fluent.

Nos parâmetros gerais é importante estar atento que será uma simulação em estado estacionário, uma vez que a simulação DEM não irá interferir na simulação CFD.

Nos modelos, se escolheu o modelo k- ϵ de turbulência mantendo-se os valores das constantes os mesmos que já estavam como padrão no software, conforme Figura 92.

Na aba das condições de contorno, na entrada de ar, que coincide com a saída do bagaço sedimentado, foi escolhida a velocidade pelo qual o ar passaria pelo elutriador, nesse caso $4,5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Para a saída de ar, que coincide com a saída de bagaço elutriado a condição escolhida foi “pressure-outlet” com valor 0.

A Figura 94 apresenta a edição das condições de contorno no software.

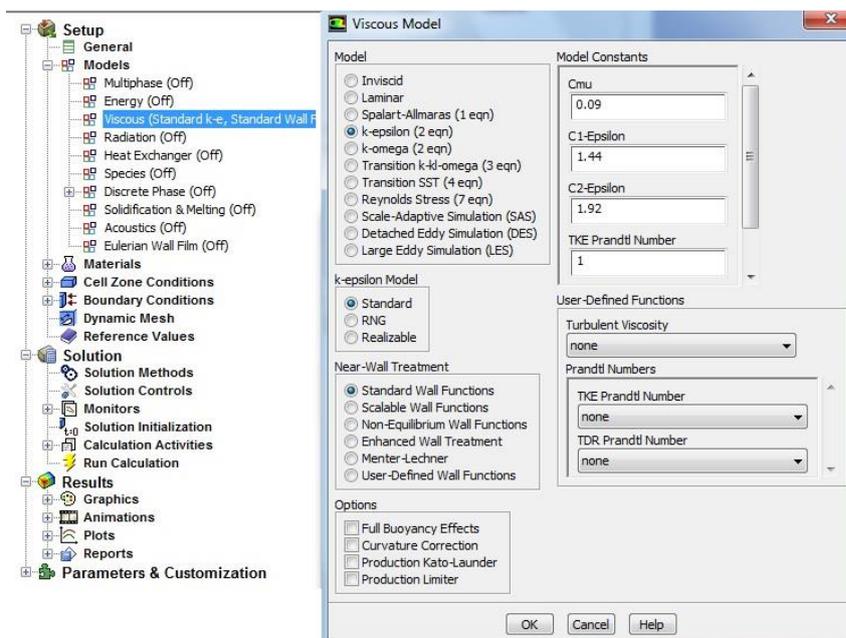


Figura 92: Modelo de turbulência escolhido.

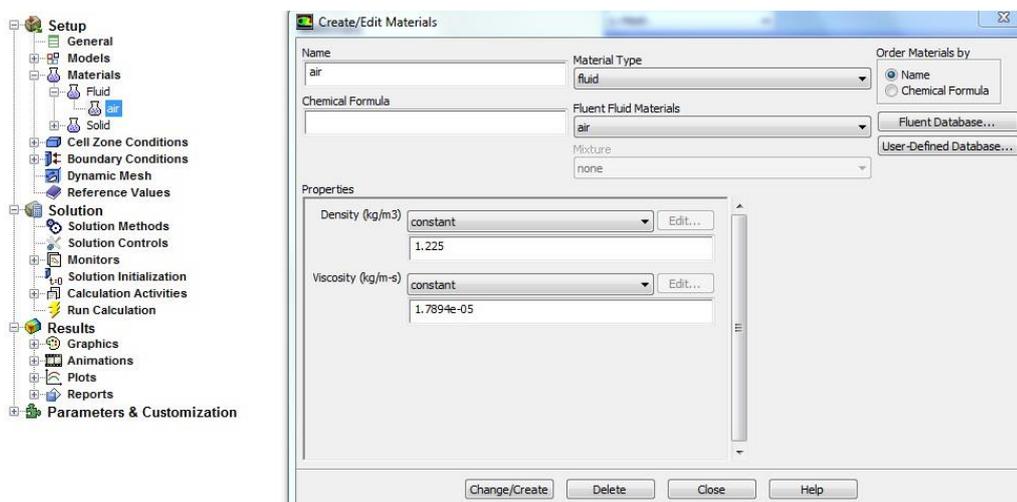


Figura 93: Propriedades do ar.

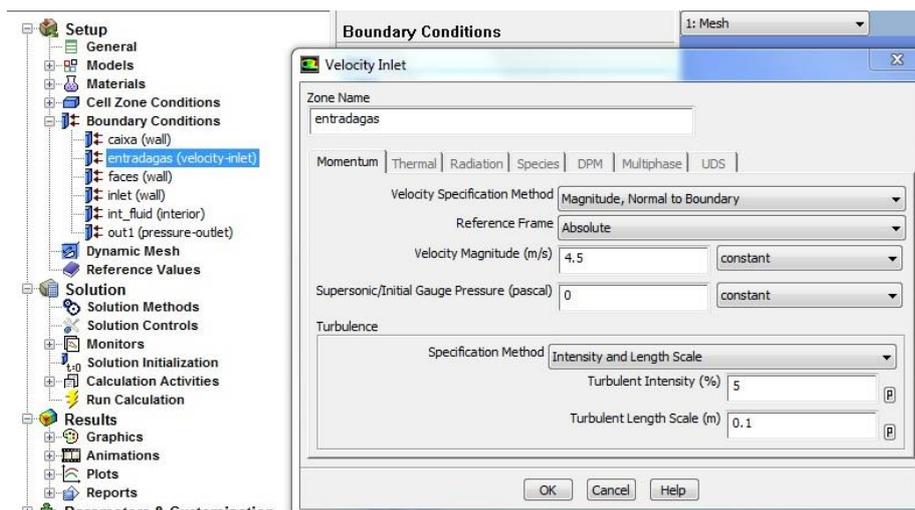


Figura 94: Condições de contorno.

O perfil de velocidade após a simulação da passagem de ar pelo tubo sedimentador/elutriador pode ser verificado no software de pós processamento CFD-Post conforme mostrado na Figura 95.

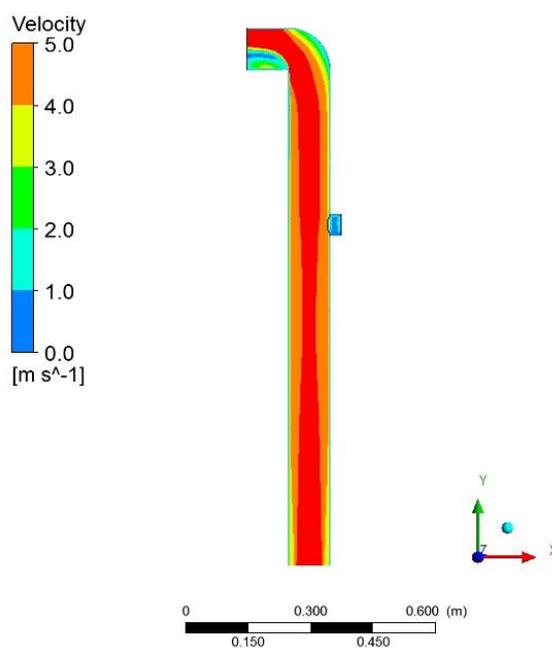


Figura 95: Perfil de velocidade após a passagem do ar.

Finalizada a simulação o software ANSYS Fluent® permite que os resultados sejam exportados para o software ROCKY® bastando clicar em *File*, em seguida *Export* e na janela estendida clicar em *Export Solution to Rocky*, verificar Figura 96.

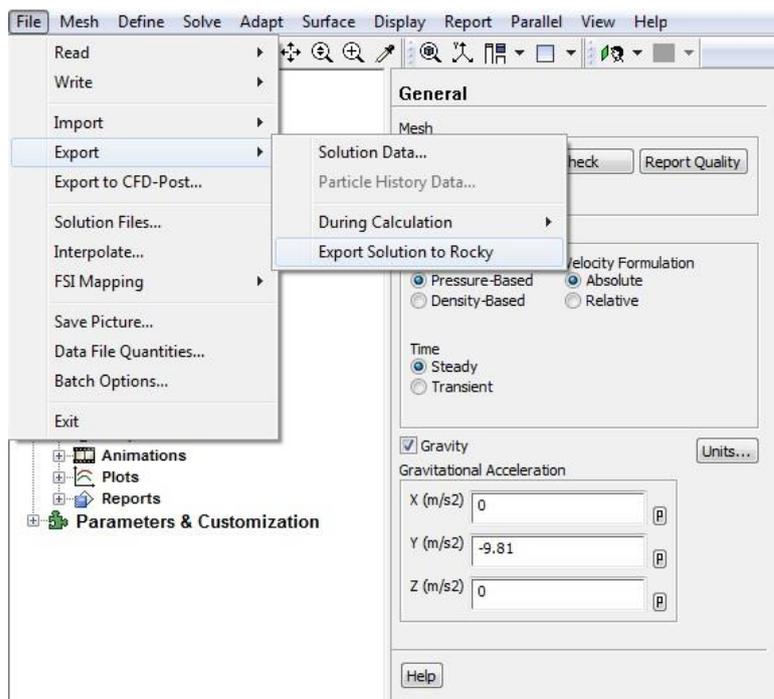


Figura 96: Exportando resultados do ANSYS Fluent® para o ROCKY®.

O primeiro passo após abrir o software ROCKY® é clicar em “File” e em seguida “New project”. Aparecerá então a área de edição, na mesma é possível importar a geometria que será usada, nesse caso com o botão direito do mouse clique sobre geometria, aparecerá a janela com os itens *Create* e *Import*, com o botão esquerdo clique em *Import* e em seguida em *Custom Geometry*, conforme Figura 97.

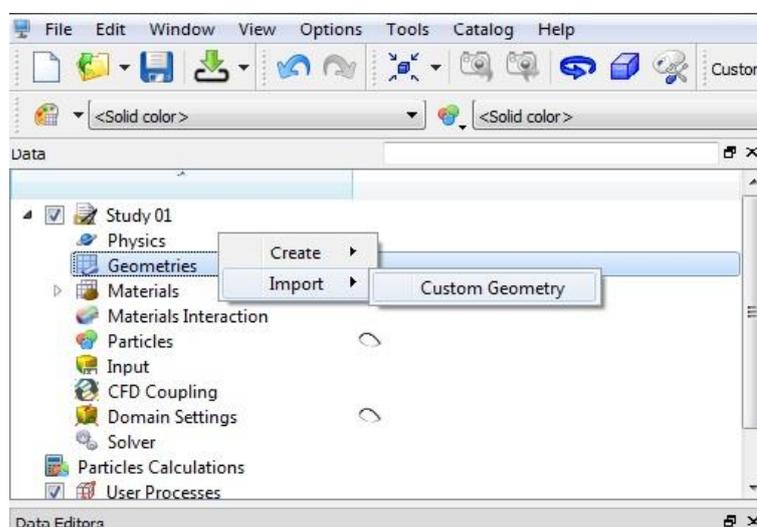


Figura 97: Importação da geometria a ser utilizada.

Após clicar em *Custom Geometry* basta procurar o arquivo com o caso simulado pelo software ANSYS Fluent® e abri-lo, aparecerá uma janela para confirmar a orientação dos eixos e as dimensões, então a geometria aparecerá e para que a mesma seja projetada na área de trabalho, basta manter pressionado o botão esquerdo do mouse sobre *Geometries* e arrastá-lo até tal área.

Nesse caso em específico a entrada de partículas do equipamento é um orifício relativamente pequeno, o que dificulta a geração de partículas, para sanar essa dificuldade decidiu-se por criar um funil por onde as partículas seriam criadas e escorreriam pra dentro do equipamento. A criação do mesmo pode ser feita com qualquer software específico para o mesmo e não é necessário se preocupar com a qualidade da malha pois, o Método dos Elementos Discretos é livre de malha. Após a criação do funil basta importar a geometria como descrito anteriormente.

A etapa seguinte foi criar o local da entrada de partículas, para tanto, ao clicar com o botão direito do mouse sobre *Geometries* aparecerá a janela de importação, mas nesse caso deverá clicar com o botão esquerdo em *Create* e em seguida em *Inlet*. No editor de dados na aba *Geometry*, deve-se nomear para entrada partículas e escolher o tipo de geometria e as coordenadas e dimensões da entrada. Ainda no editor, em *Simulation Configuration* escolher o tempo de início e final de alimentação das partículas, nesse caso foi decidido alimentar o equipamento por 2 segundos. A Figura 98 dá uma visão geral até esse ponto.

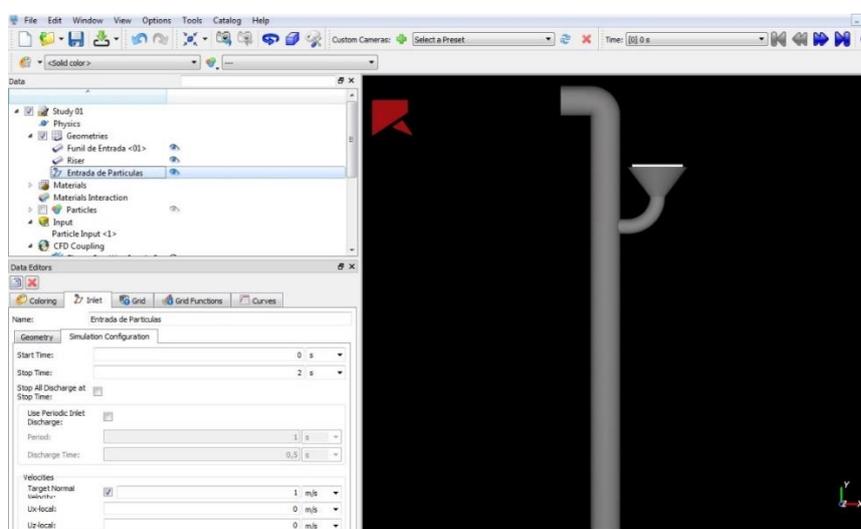


Figura 98: Visão do software ROCKY® após importação da geometria e criação da entrada de partículas.

A partir daí iniciou-se a definição dos materiais, primeiramente expandindo a aba *Materials* e alterando o nome *Default Boundary* para *Paredes*, mantendo os valores padrões, e em seguida alterou-se o nome *Default Particle* para *particle <1>* alterando o valor da densidade da partícula 1. Para criar as demais partículas clicou-se sobre *particle <1>* com o botão direito do mouse e selecionando a opção *duplicate* foi se criando as demais partículas, alterando os nomes e os valores das densidades das partículas duplicadas. O Módulo de Young nesse caso foi mantido como o padrão do software para todas partículas, verificar Figura 99.

Criado os materiais partiu-se para a criação das partículas, para tanto, clicou-se com o botão direito do mouse sobre o ícone *Particles* e escolheu-se a opção *Create Particle* e procedeu-se assim sucessivamente para a criação dos sete grupos de partículas. No editor de dados alterou-se o nome das partículas e foi escolhido o material correspondente a cada partícula. Na aba *Size Distribution* foi escolhido o parâmetro *Equivalent Diameter* em *Size Type*, sendo inserido o valor do Diâmetro de Sauter dos grupos de partículas. Na aba *Geometry* foi escolhido para *Shape Type* a forma *Rounded Cylinder* e inserido o valor da razão de aspecto vertical, que se trata da razão entre o comprimento e o diâmetro do cilindro que representa a partícula. As Figuras 100 e 101 apresentam como foram procedidas as alterações na criação das partículas.

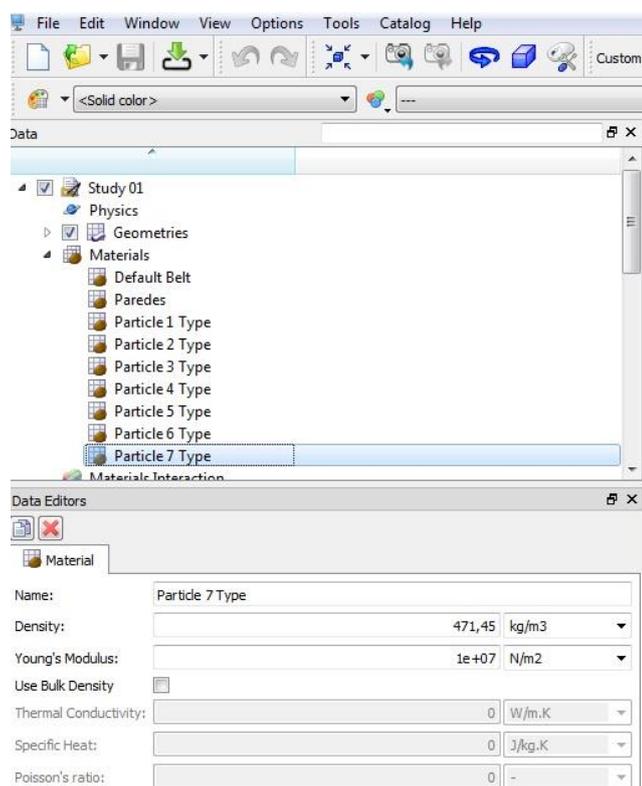


Figura 99: Adição de materiais.

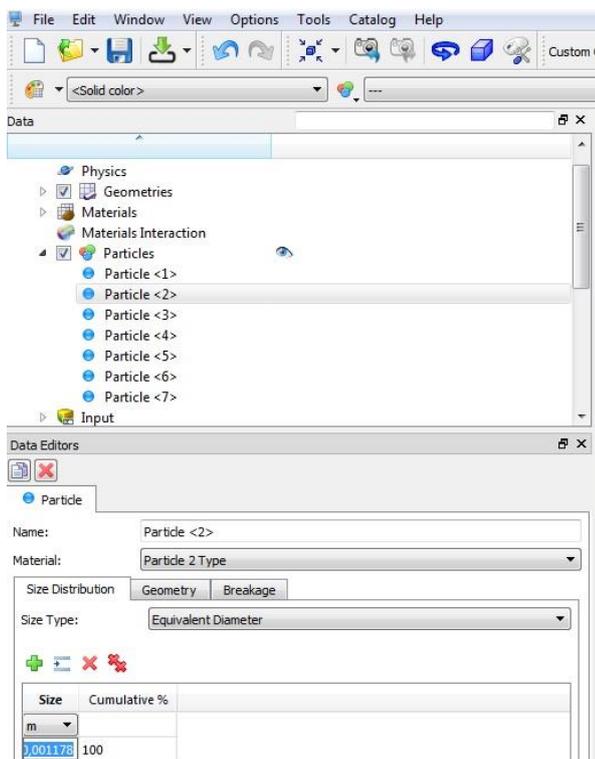


Figura 100: Definição do tamanho da partícula.

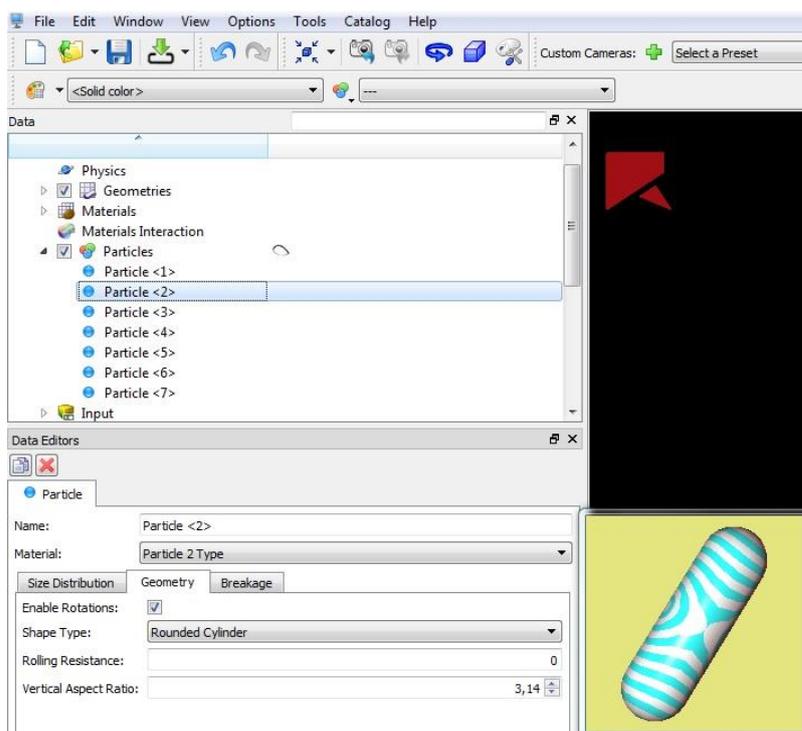


Figura 101: Definição da geometria da partícula.

Estando as partículas criadas necessita-se então inserir os valores de massa de entrada das mesmas. Assim, conhecendo os valores experimentais das massas de cada uma das frações e considerando o tempo de alimentação dessas de 2 segundos, previamente definido no *Inlet* conforme apresentado anteriormente, pode-se calcular o valor da vazão mássica pela razão da quantidade de massa pelo tempo e inserí-lo por meio do ícone Input.

Para tanto, clicou-se sobre tal ícone com o botão direito do mouse e em seguida em *Create Particle Input*. Selecionando Particle Input <1> é possível verificar na janela do editor de dados a seleção *Entry Point*, escolhe-se então a opção entrada de partículas, um pouco abaixo também se nota um símbolo positivo (+), clicando com o botão esquerdo do mouse sobre este é possível colocar o número respectivo de vazões de acordo com o número de frações de partículas.

Avaliando a fração 1 de partículas verificou-se que, devido suas dimensões muito pequenas, seriam muitas partículas a serem simuladas e essas com certeza seriam arrastadas até mesmo com velocidades pequenas de passagem do ar no equipamento. Dessa maneira, optou-se por não as colocar, ganhando com isso tempo de simulação, portanto, o input se inicia das partículas do grupo 2 em diante como apresentado na Figura 102.

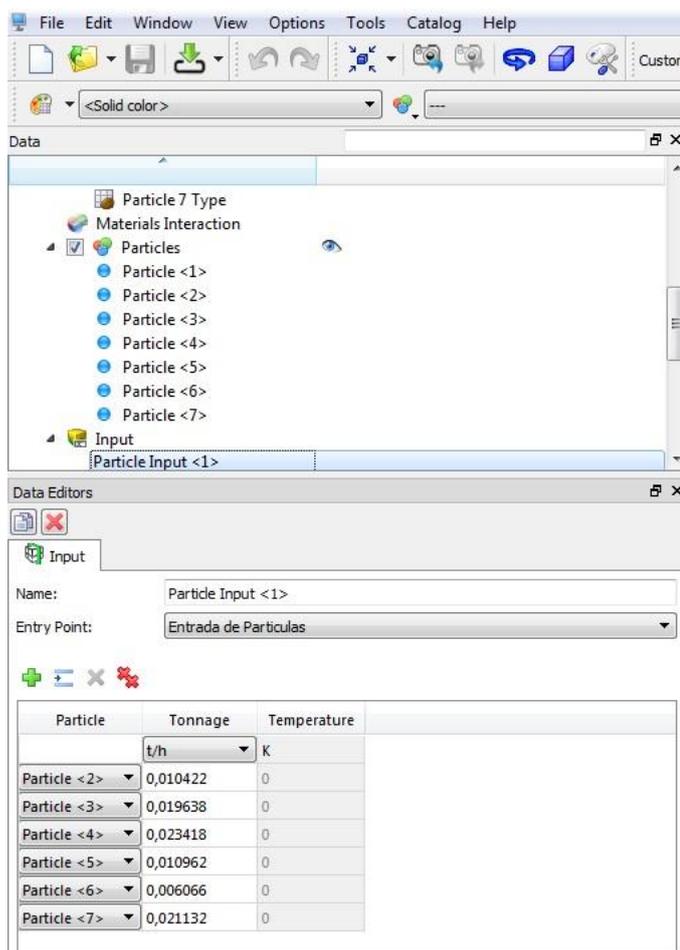


Figura 102: Vazões mássicas das partículas.

Com as partículas e suas vazões mássicas definidas o próximo passo é definir o tipo de acoplamento, que nesse caso é o de 1 Via. Assim, clicando no ícone *CFD coupling* com o botão esquerdo do mouse, no editor de dados, deve-se escolher a opção *Fluent One Way Steady State* e em seguida selecionar o arquivo de extensão “.f2r” que foi aquele exportado do ANSYS Fluent®.

Aparecerá então o ícone *Fluent One Way Steady State*, logo abaixo de *CFD coupling*, e pela seleção do primeiro, por meio do editor de dados, pode-se então definir a lei de arraste (*Drag Law*), que nesse caso foi a lei proposta por Ganser. Os demais parâmetros foram mantidos como o padrão já fornecido pelo software. A Figura 103 ilustra essa etapa.

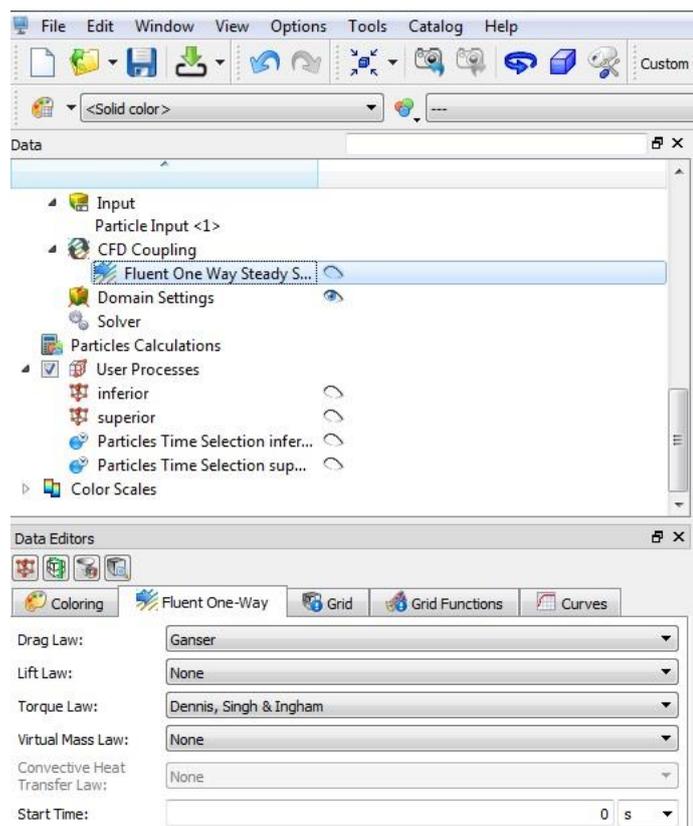


Figura 103: Definição do tipo de acoplamento e lei de arraste.

Finalizando o setup configurou-se o *Solver*, para tanto, clicando sobre o mesmo com o botão esquerdo do mouse, através da aba *Time Configuration*, definiu-se a duração da simulação e a frequência de tempo com que os resultados são atualizados (*Output Frequency*), sendo nesse caso realizada uma simulação de 20 segundos com atualização de resultados a cada 0,05 segundos.

Na aba *General Settings* é possível escolher se os cálculos da simulação serão realizados por uma GPU ou CPU, nesse caso escolhemos a GPU, sendo utilizado o modelo GeForce TITAN X.

Após a realização do setup para dar início à simulação clicou-se no ícone *Start Simulation*, o qual abre a aba *Simulation Summary*, onde pode-se verificar alguns dados como, por exemplo, o número de partículas simuladas. Clicando em OK na presente caixa a simulação é iniciada. As Figuras 104 e 105 ilustram as configurações do *Solver* descritas anteriormente.

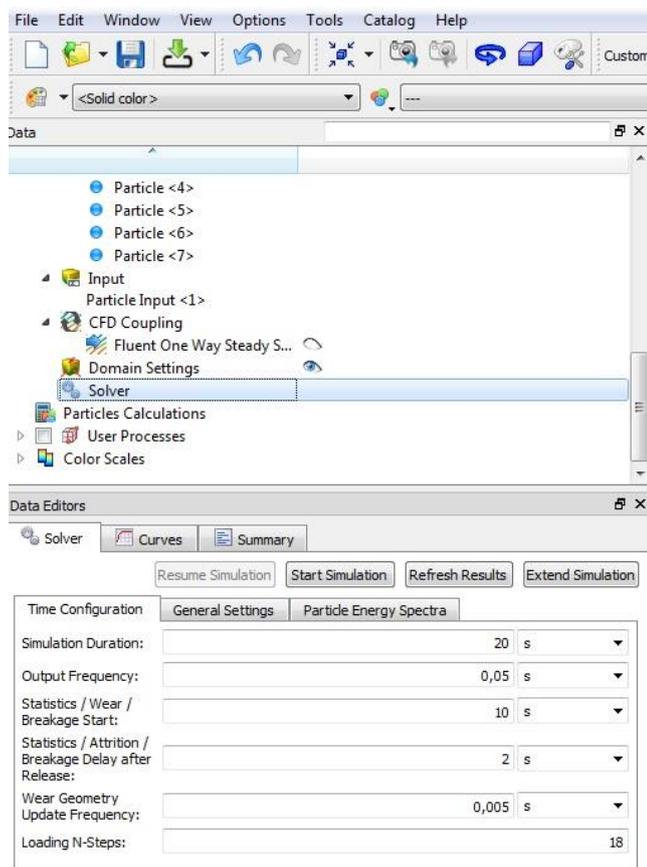


Figura 104: Configuração do tempo de simulação.

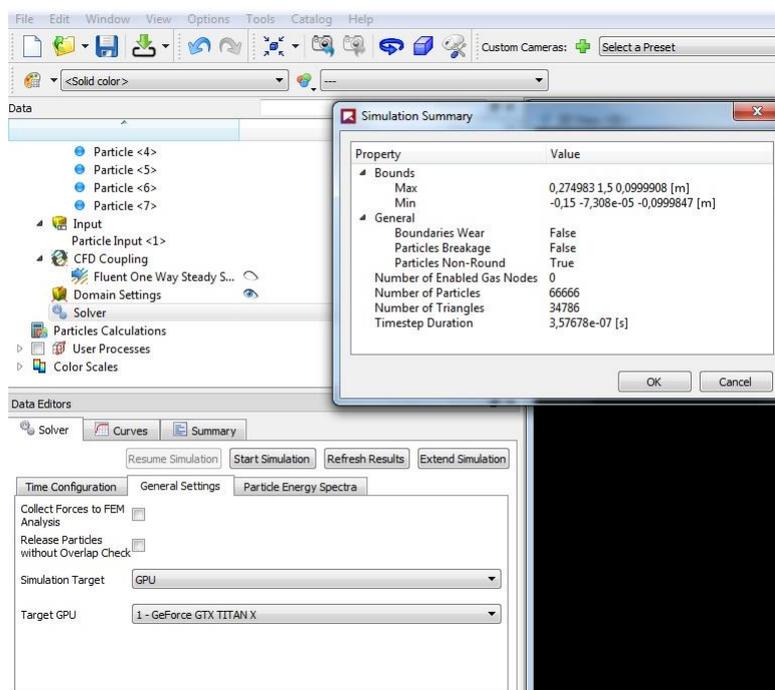


Figura 105: Escolha de hardware para realização da simulação e início da mesma.

No acoplamento 2 vias existe a interação simultânea entre o fluido e as partículas, ou seja, o fluido afeta o comportamento das partículas e vice-versa à medida que a simulação é realizada.

Nesse caso, em relação ao Acoplamento 1 Via, as alterações serão majoritariamente realizadas no software ANSYS Fluent®, uma vez que, a definição das partículas no software ROCKY® é a mesma para ambos os casos, mudando basicamente o tipo de acoplamento.

Setup ANSYS FLUENT – Acoplamento 2 Vias

Neste caso, diferente do Acoplamento 1 Via, as recomendações de criação de malha baseando-se em boas práticas de CFD podem ser ignoradas, isso porque é utilizado um procedimento que evita grandes volumes de frações em uma determinada célula de domínio CFD, distribuindo o volume das partículas posicionadas nos limites das células entre as adjacentes. Desse modo se lida com uma grande quantidade de partículas dentro de uma célula CFD e, portanto, é recomendado uma malha bem maior que a maior partícula presente no domínio.

A Figura 106 apresenta a malha usada para a realização da simulação nesse caso. Nota-se uma malha muito mais grosseira se comparada com a malha utilizada no caso do Acoplamento Uma Via.

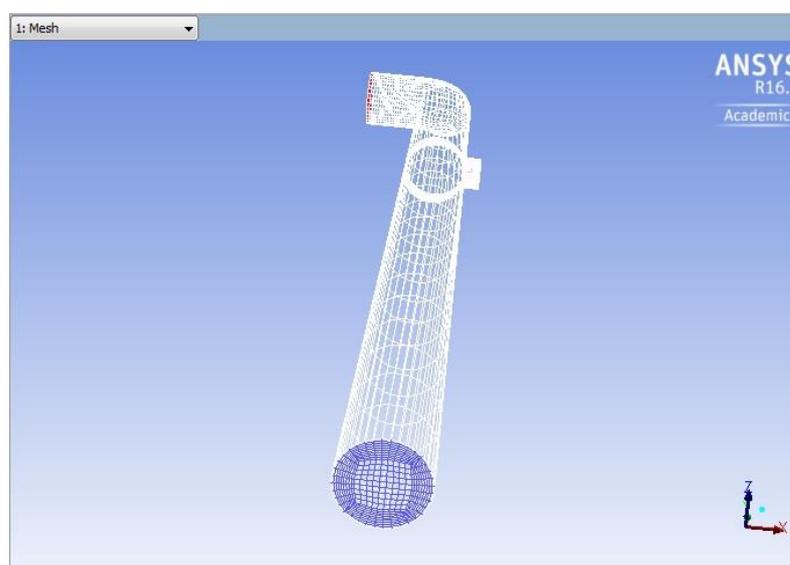


Figura 106: Malha utilizada nos testes com destaque para a saída inferior.

De posse da malha, a etapa seguinte foi configurar os parâmetros conforme o modelo utilizado. Diferente do modelo para o Acoplamento 1 Via, nesse caso deve-se estar atento ao fato da simulação ocorrer em regime transiente, justamente por ocorrer a interação de forças entre as partículas e o fluido, assim a Figura 107 apresenta a primeira modificação a ser tomada.

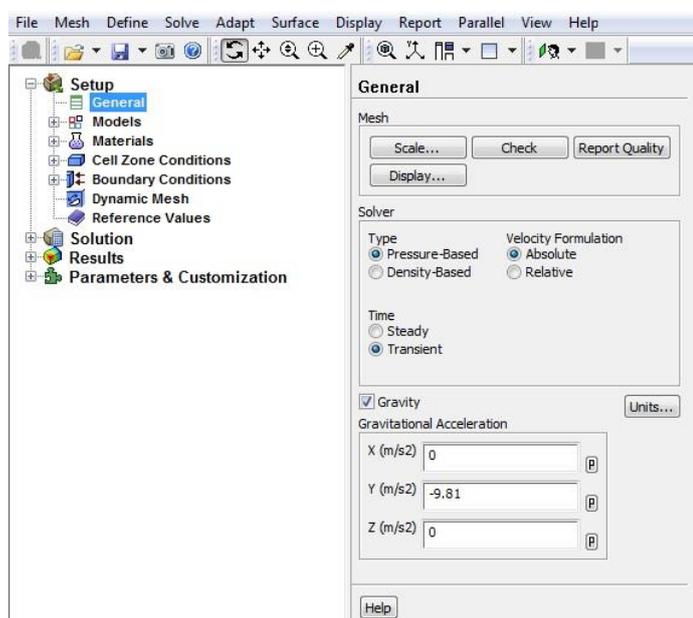


Figura 107: Detalhe na escolha do regime transiente.

O próximo passo é definir o material, nesse caso serão criadas duas fases fluidas, a primeira se refere ao ar e a segunda às partículas, como se fosse proceder uma modelagem Euleriana-Euleriana, logo deve-se selecionar esse tipo de modelo e adicionar a partícula como fase secundária. Assim, o software ROCKY[®] atuará posteriormente compartilhando dados de simulação por meio dessa fase de partículas criada, isentando o usuário de se preocupar com os parâmetros das partículas no software ANSYS Fluent[®], já que suas propriedades deverão ser definidas no software ROCKY[®].

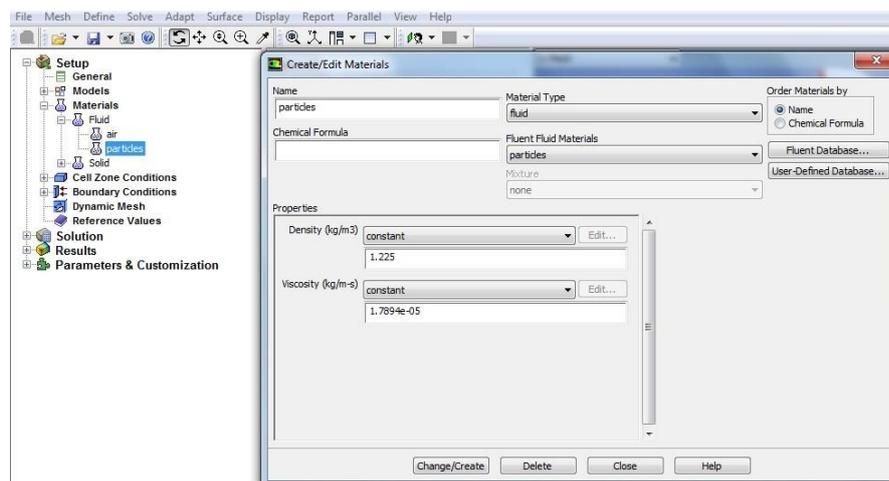


Figura 108: Criação da fase partículas.

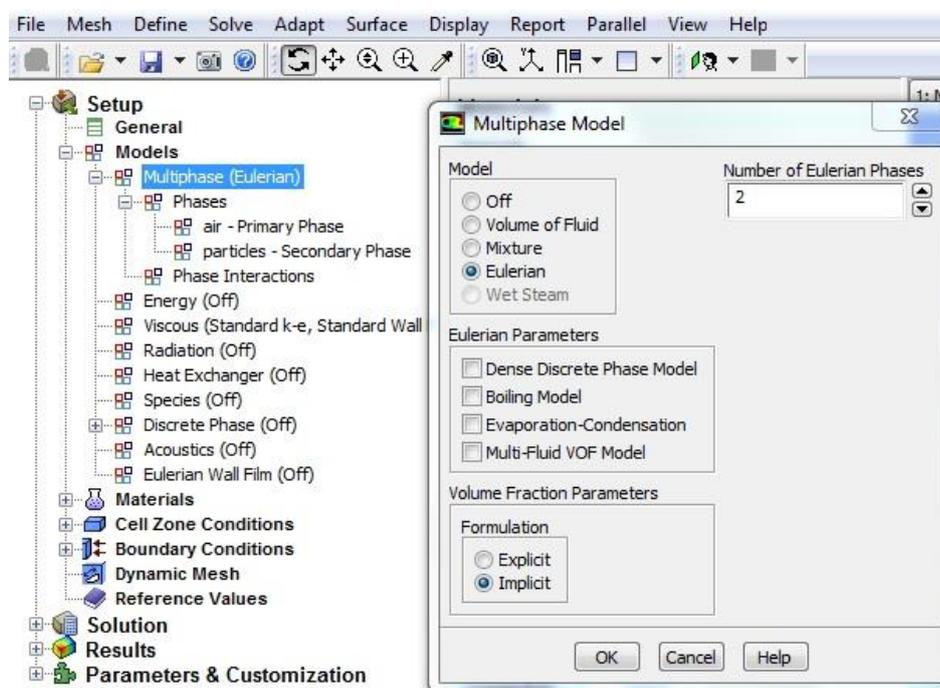


Figura 109: Escolha do modelo Euleriano com duas fases, sendo uma o ar e a outra as partículas.

Na escolha do modelo de turbulência, assim como no caso do Acoplamento 1 Via, também foi utilizado o modelo k- ϵ mantendo-se os mesmos valores de suas constantes que já estavam como padrão no software, porém, nesse caso deve-se estar atento para selecionar o modelo de turbulência multifásico disperso, conforme ilustrado na Figura 110.

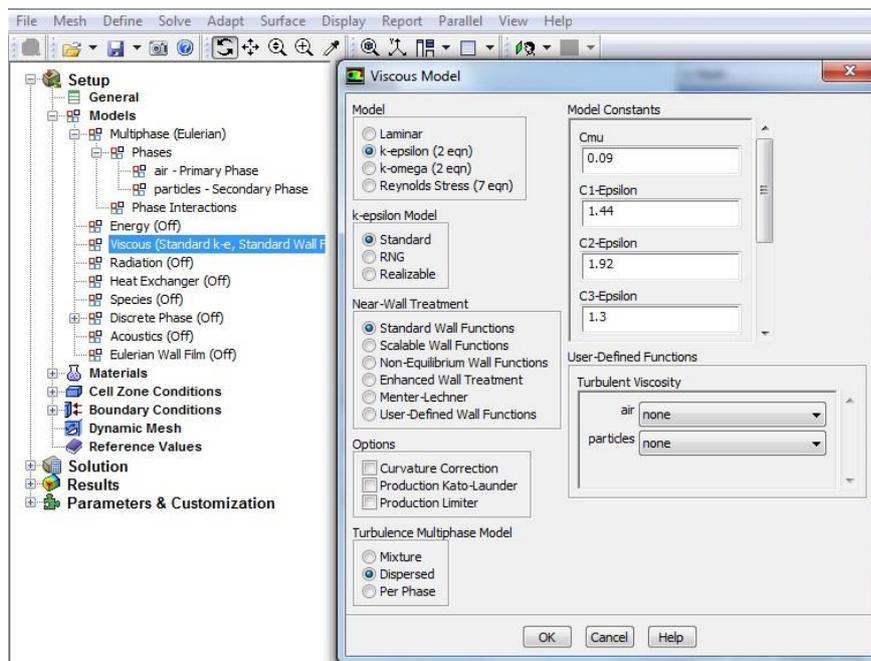


Figura 110: Selecionando o modelo de turbulência.

Fazendo o setup das condições de contorno, deve-se apenas certificar que tanto as velocidades como as frações volumétricas das partículas em todos os contornos devem ser iguais a zero.

Partindo para a parte de solução do problema, deve-se inicialmente atentar para os métodos de solução, onde no acoplamento pressão-velocidade deve-se escolher “*Phase coupled SIMPLE*” e na formulação transiente selecionar “*First Order Implicit*”.

Após essa etapa, ainda configurando a solução, deve-se inicializar os parâmetros, com o cuidado de manter como 0 as velocidades e frações volumétricas de partículas, uma vez que o perfil de fração volumétrica das partículas inicial será atualizado tão logo se inicializar o software ROCKY[®] com seus parâmetros, de acordo com a Figura 113.

Finalizando, deve-se definir o caminho para exportar os resultados da simulação, conforme a Figura 114, e definir um passo de tempo razoável, apresentado na Figura 115. O passo de tempo será atualizado após o acoplamento, de modo a ser um múltiplo inteiro do passo do ROCKY[®].

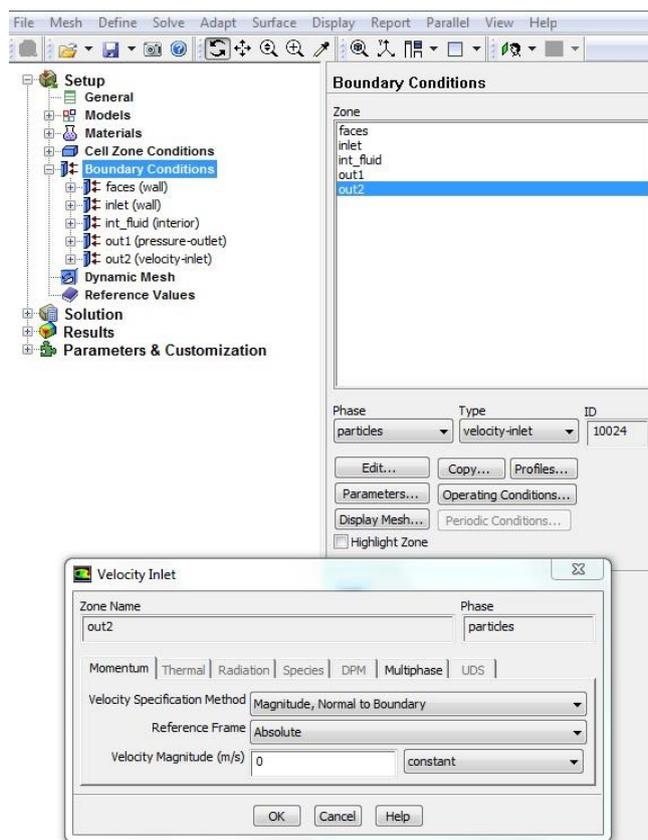


Figura 111: Condições de contorno da fase partículas.

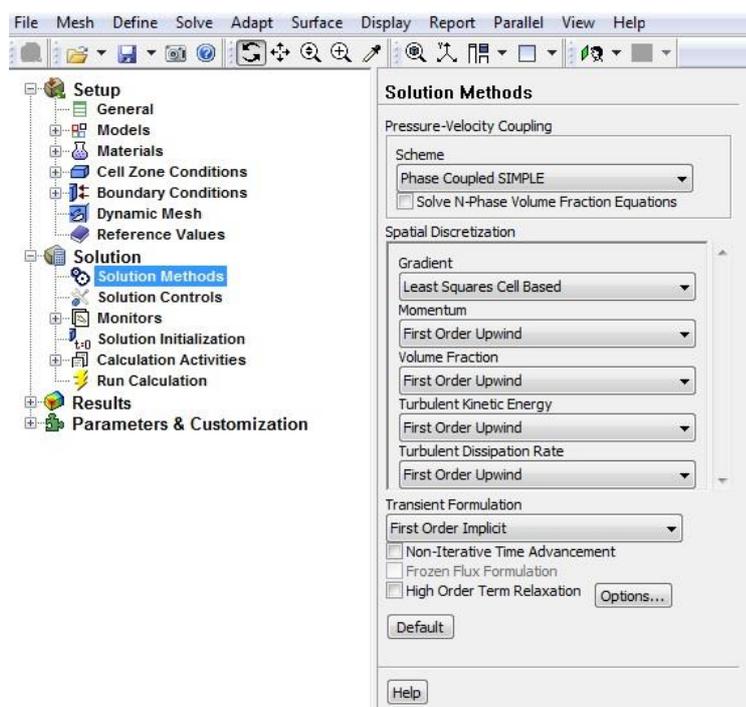


Figura 112: Métodos de Solução.

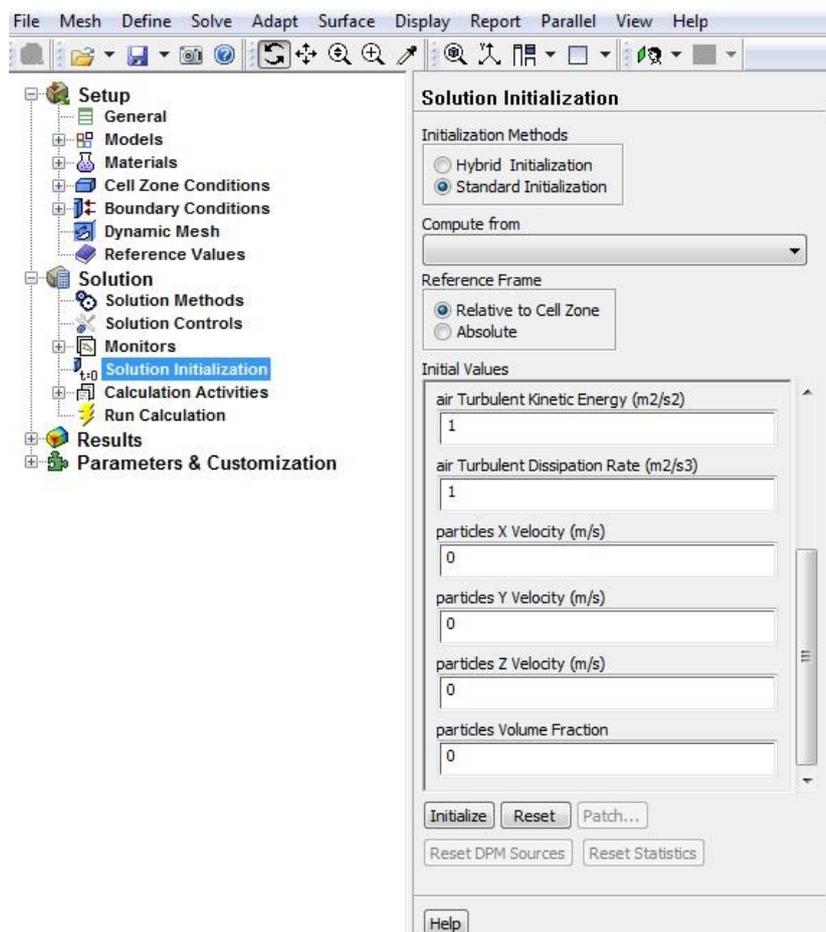


Figura 113: Inicialização dos parâmetros.

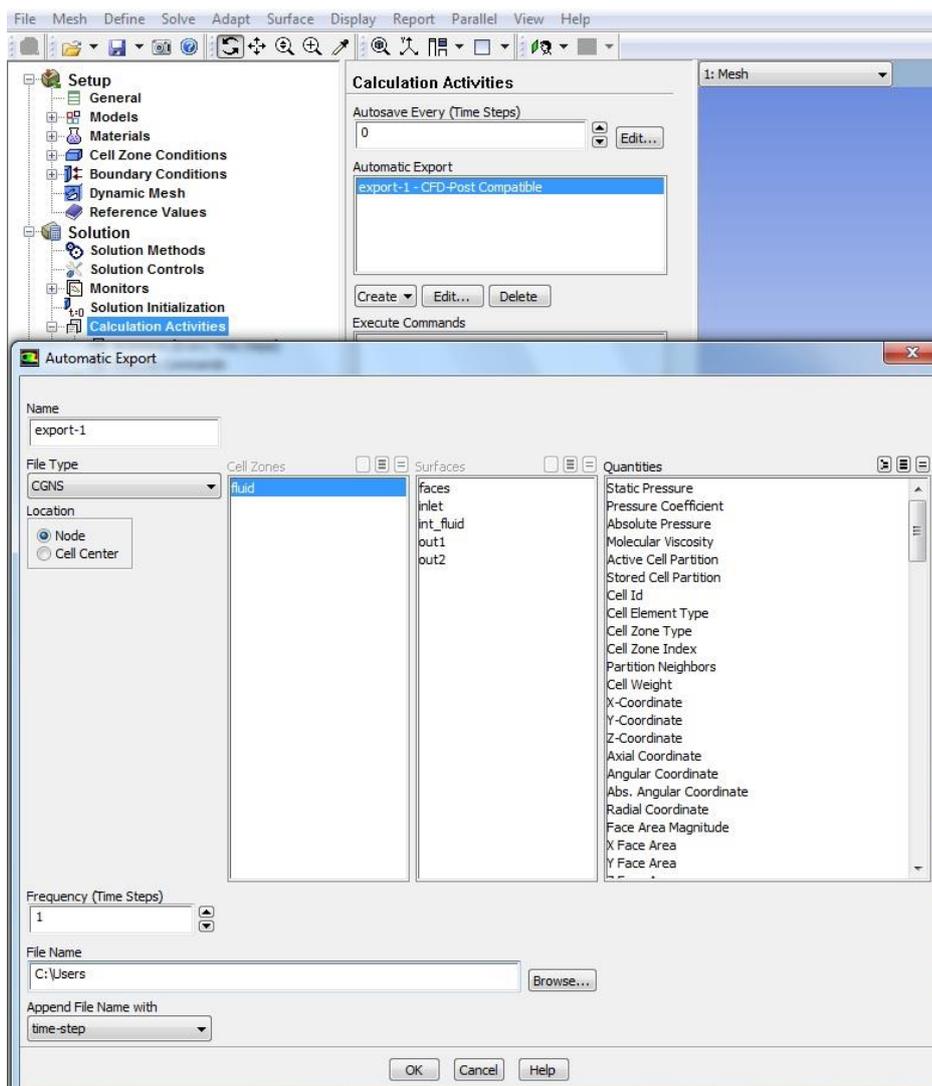


Figura 114: Exportação dos resultados de simulação.

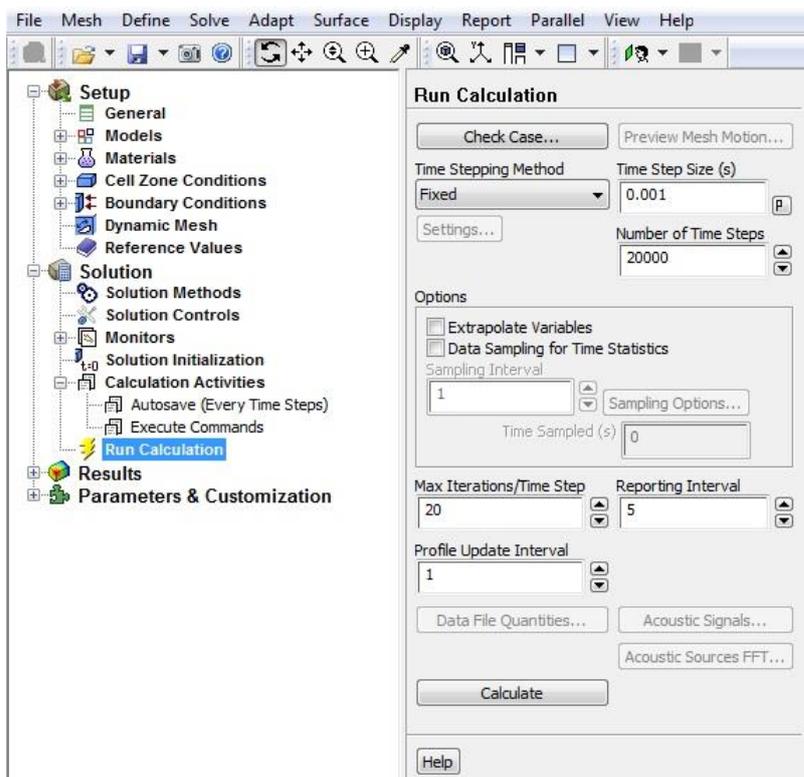


Figura 115: Definição dos passos de tempo.

As etapas para configuração dos parâmetros do software ROCKY®, desde a inserção da geometria até a criação e definição das partículas segue o mesmo procedimento já descrito no para o caso 1 via. A diferença se refere apenas ao tipo de acoplamento, que nesse caso será o Acoplamento 2 Vias.

Assim, ao escolher “*Fluent Two Way*” no software ROCKY, conforme Figura 116, imediatamente se abrirá uma janela onde o usuário deverá escolher o caso previamente configurado no software ANSYS Fluent® e salvo em seu computador, sendo que tal arquivo estará com a extensão “.cas”.

Clicando sobre o escrito “*Fluent Two Way*”, abrirá no editor de dados uma série de parâmetros que podem ser configurados pelo usuário, para este caso apenas garantimos que o coeficiente de arraste seja determinado segundo a lei de Di Felice e que na aba *Fluent*, a fase selecionada do software ROCKY® seja as partículas e seja usado 1 processador. Os demais parâmetros foram mantidos do modo como já se apresentavam no software.

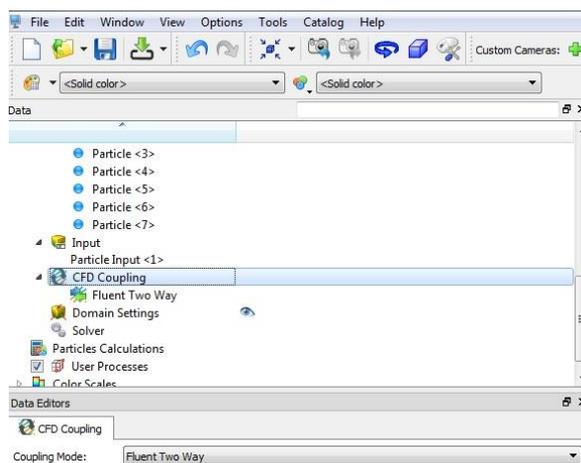


Figura 116: Selecionando o tipo de acoplamento.

Nesse caso a simulação ocorrerá simultaneamente nos softwares ANSYS Fluent® e ROCKY® sendo que o usuário poderá verificar o andamento da mesma tanto por um quanto por outro software.

Os resultados podem então ser verificados por meio dos diversos ícones de pós processamento presentes no próprio software ROCKY®.