



MAXIMILIAN JOACHIM HODAPP

**SIMULAÇÃO TRIFÁSICA POR TÉCNICAS DE CFD DA COMBUSTÃO DE  
CARVÃO MINERAL EM LEITO FLUIDIZADO CIRCULANTE**

CAMPINAS 2012



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA**

**MAXIMILIAN JOACHIM HODAPP**

**SIMULAÇÃO TRIFÁSICA POR TÉCNICAS DE CFD DA COMBUSTÃO DE CARVÃO  
MINERAL EM LEITO FLUIDIZADO CIRCULANTE**

**Orientador: Prof. Dr. Milton Mori**

**Co-orientador: Prof. Dr. Jhon Jairo Ramirez Behainne**

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós  
Graduação em Engenharia Química da Faculdade de Engenharia Química como parte dos  
requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA TESE  
DEFENDIDA PELO ALUNO MAXIMILIAN JOACHIM HODAPP E  
ORIENTADA PELO PROF. DR. MILTON MORI

Assinatura do Orientador:

A handwritten signature in blue ink, appearing to read "Milton Mori", is written over a horizontal line. The signature is fluid and cursive.

Campinas  
Setembro 2012

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA E ARQUITETURA - BAE - UNICAMP

H66s Hodapp, Maximilian Joachim  
Simulação trifásica por técnicas de CFD da combustão  
de carvão mineral em leito fluidizado / Maximilian  
Joachim Hodapp. --Campinas, SP: [s.n.], 2012.

Orientador: Milton Mori  
Coorientador: Jhon Jairo Ramirez Behainne.  
Tese de Doutorado - Universidade Estadual de  
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Fluidodinâmica Computacional (CFD). 2.  
Escoamento Multifásico. 3. Combustão. I. Mori, Milton.  
II. Ramirez Behainne, Jhon Jairo. III. Universidade  
Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia  
Química. IV. Título.

Título em Inglês: Three-phase CFD simulation of coal combustion in a  
circulating fluidized bed reactor

Palavras-chave em Inglês: Computational Fluid Dynamics (CFD),  
Multiphase Flow, Combustion

Área de concentração: Processos em Tecnologia Química

Titulação: Doutor em Engenharia Química

Banca examinadora: Ardson dos Santos Vianna Junior, Henry França  
Meier, Thamy Cristina Hayashi, Waldir Pedro  
Martignoni

Data da defesa: 27-09-2012

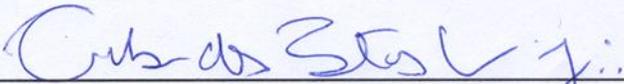
Programa de Pós Graduação: Engenharia Química

Tese de Doutorado defendida por Maximilian Joachim Hodapp e aprovada em 27 de Setembro de 2012 pela banca examinadora constituída pelos Doutores:



---

Prof. Dr. Milton Mori - UNICAMP



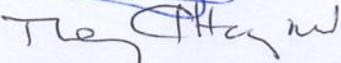
---

Prof. Dr. Ardson dos Santos Vianna Junior - USP



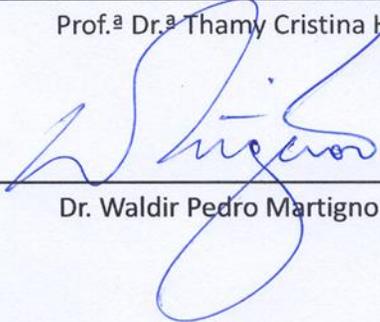
---

Prof. Dr. Henry França Meier - FURB



---

Prof.ª Dr.ª Thamy Cristina Hayashi - UFRGS



---

Dr. Waldir Pedro Martignoni - PETROBRAS

## **Prefácio**

Esta Tese de Doutorado foi desenvolvida na Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) no Laboratório de Processos Químicos e Gestão Empresarial (PQGe) entre os invernos de 2009 a 2012. Minha participação neste grupo de pesquisa iniciou-se com o mestrado em 2007 e teve sequência com o presente trabalho. Estas oportunidades consolidaram-se e resultaram em projetos finalizados com sucesso graças ao apoio e encorajamento do meu orientador Prof. Dr. Milton Mori.

A origem do tema escolhido para este trabalho provém dos esforços do meu Co-orientador Prof. Dr. Jhon Jairo Ramirez-Behainne em dar continuidade ao trabalho experimental desenvolvido por ele durante seu doutoramento, agora através de simulações numéricas por técnicas de CFD. Este esforço resultou no financiamento deste projeto de pesquisa por parte do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq). Ainda durante os estágios iniciais, decidiu-se por buscar fora o conhecimento que seria necessário ao desenvolvimento de algumas das atividades planejadas. Com o aceite por parte do Prof. Viktor Scherer da Ruhr Universität Bochum (RUB) e com o apoio do Deutscher Akademischer Austausch Dienst (DAAD) foi possível ampliar os horizontes da pesquisa, durante o período passado na cidade de Bochum, Alemanha, no inverno de 2010/2011.

Guardo grande alegria pelos momentos passados com o grupo do LEAT na RUB, pelos ensinamentos científicos e pessoais. Não menor é o meu apreço pelas pessoas com as quais trabalhei durante estes longos anos no PQGe, sempre me motivando e prontas para ajudar. Por fim, meu muito obrigado ao apoio recebido da minha família, de meus amigos, sem os quais não teria encontrado o equilíbrio entre vida profissional e pessoal, e em especial a Kaoma, pelo companheirismo e amor.

## Resumo

A queima de carvão mineral em Leito Fluidizado Circulante (CFBC) tem interessado pesquisadores por várias décadas, tendo sido propostos inúmeros modelos matemáticos que visam descrever os complexos fenômenos de transferência de massa, energia e quantidade de movimento deste sistema gás-sólido. A fase sólida é uma mistura de materiais inertes, como a areia e a cinza de carvão, um agente desulfurizante, além do próprio combustível. A técnica de Fluidodinâmica Computacional tem sido aplicada com sucesso para simular não somente escoamentos multifásicos mas também problemas que envolvem reações químicas e troca de calor. Apesar disto, a caracterização individual dos diversos materiais da fase sólida não é muito estudada. Deste modo, neste trabalho foi pesquisada a representação numérica do escoamento no interior de um leito fluidizado por CFD. Numa primeira etapa estudou-se a fluidodinâmica gás-sólido a quente e numa segunda a implementação de uma abordagem trifásica para representar o processo de queima de carvão mineral. Assim, a fase gás e o material inerte foram considerados fluidos, conforme a abordagem Euleriana, enquanto o material reativo foi representado pela descrição Lagrangeana. A combustão ocorre principalmente num leito fluidizado de 4 m de altura e 0,1m de diâmetro, operado no regime de baixa densidade de sólidos e rápida fluidização. As reações do sistema são aquelas que ocorrem na fase gasosa devido à liberação de voláteis do carvão, bem como a reação heterogênea do carbono. Os resultados das simulações CFD mostraram-se de acordo com os dados experimentais disponíveis para temperatura e composição dos gases de saída. A escolha de modelos de reação heterogênea e do inventário de sólidos do sistema se mostrou de grande importância à simulação do processo. Conclui-se que a abordagem trifásica apresentada mostra-se viável para sistemas nos quais a massa de material reativo sólido no sistema representa apenas uma fração da massa total dos sólidos presentes.

## **Abstract**

Coal combustion in Circulating Fluidized Bed Combustors (CFBC) has received great attention from researchers who have developed several approaches in order to model the complex phenomena of mass, energy and momentum exchange in this gas-solid system. The solid phase is usually a mixture of inert material, sand and ash, a desulfurization material such as limestone and the fuel itself. Computational Fluid Dynamics has been successfully applied to simulate not only the fluid dynamics of multiphase flow in components of CFBC's, but also to study the associated heat and mass transfer phenomena. However, the inclusion of more than one solid phase is not usually the subject of research. Ideally each particle could be tracked in a Lagrangian formulation, which, for denser flows, could include inter-particle interactions. However even for small-scale plants the total number of particles by far exceeds currently available computing resources. In this work, a three-phase approach was applied to model fast bed CFBC riser, in which the gas phase and the inert particle phase are described in an Euler-frame while the reacting coal particles are tracked individually in a Lagrangian approach. A small pilot-plant unit feed with ash-rich Brazilian coal has been chosen as a study case. The combustion took place in a riser of 4m height and 0.1m internal diameter, operating in the low-density regime. The chemical reactions in the system were those of the gas-phase homogeneous oxidation of the devolatilized components and the heterogeneous char combustion. The simulation results were in good agreement with experimental measurements for temperature and flue gas composition, hence the three-phase modeling showed to be a viable alternative to a more complete simulation of the CFBCs coal combustion process.

## Sumário

1	Introdução .....	1
1.1	Motivação da Pesquisa .....	2
1.2	Objetivo Geral .....	3
1.3	Objetivos Específicos .....	3
1.4	Organização da Tese .....	4
2	Fundamentação Teórica .....	5
2.1	Leitos Fluidizados Circulantes.....	6
2.2	Material Particulado .....	9
2.3	Material Combustível.....	11
2.4	Simulação Numérica com as Técnicas de Fluidodinâmica Computacional .....	13
2.5	Revisão da Modelagem Matemática Aplicada a CFBCs .....	15
3	Materiais e Métodos .....	25
3.1	Unidade Experimental .....	26
3.2	Caracterização dos Materiais .....	27
3.3	Modelagem Matemática.....	30
3.3.1	Caso 1: Modelagem Sem Reação Química .....	31
3.3.2	Caso 2: Modelagem Com Reação Química.....	46
3.4	Método Numérico .....	70
4	Resultados e Discussões .....	73
4.1	Caso 1: Sem Reação Química .....	74
4.1.1	Condições Operacionais e de Contorno .....	74
4.1.2	Malha Numérica .....	77
4.1.3	Análise do Escoamento Multifásico .....	81
4.2	Caso 2: Com Reação Química.....	96
4.2.1	Condições Operacionais e de Contorno .....	96

4.2.2	Malha Numérica .....	101
4.2.3	Determinação da Corrente de Reciclagem.....	106
4.2.4	Características do Escoamento Reativo.....	110
4.2.5	Estudos de Modelagem e Análise de Efeitos.....	125
5	Conclusões e Sugestões.....	156
5.1	Conclusões .....	157
5.2	Sugestões .....	159
6	Referências Bibliográficas .....	161
7	Publicações Associadas à Tese .....	172
7.1	Trabalhos Publicados .....	172
7.2	Trabalhos Apresentados.....	172
7.3	Trabalhos em Preparação.....	172

## Lista de Figuras

Figura 1. Esquema simplificado de operação de uma unidade de leito fluidizado circulante.....	7
Figura 2. Classificação de materiais particulados sob fluidização por ar atmosférico a temperatura e pressão ambientes, definido por GELDART (1973). .....	9
Figura 3. Classificação do carvão mineral, adaptado de SCHWEINFURTH (2004). .....	12
Figura 4. Esquema da unidade de combustão de carvão, adaptado de RAMIREZ-BEHAINNE (2007), com cotas dadas em mm.....	26
Figura 5. Distribuição granulométrica do carvão mineral, areia e dolomita, conforme dados de RAMIREZ-BEHAINNE (2007). .....	30
Figura 6. Comparação das correlações de Sutherland e Lo et al. para a viscosidade em função da temperatura.....	34
Figura 7. Regimes de escoamento gás-sólido em relação ao número de Stokes, adaptado de SINCLAIR (2011). .....	49
Figura 8. Esquema representativo das principais etapas no processo de combustão de carvão mineral. ....	53
Figura 9. Esquema do modelo de duas reações concorrentes para representação da devolatilização durante o processo de queima de carvão mineral. ....	55
Figura 10. Esquema com as divisões por zonas de queima pelas regiões de temperatura.....	57
Figura 11. Representação dos modelos que descrevem o comportamento das partículas de carvão durante a combustão, adaptado de HANNES (1996). .....	59
Figura 12. Detalhes das entradas e saída na geometria construída para o leito fluidizado do CFBC para o estudo de fluidização.....	75
Figura 13. Comparação dos resultados para o teste de malha do Caso 1, no qual foram analisados: a) diferença de pressão relativa entre a base e a saída do leito fluidizado; b) perfil da velocidade axial média da fase dispersa no raio a 3m de altura. ....	78
Figura 14. Isosuperfícies no leito fluidizado em 10 s de simulação para os desequilíbrios mássicos de: a) $1 \cdot 10^{-11}$ kg/s; b) $1 \cdot 10^{-9}$ kg/s .....	80
Figura 15. Campos instantâneos em 10 s de: a) viscosidade turbulenta; b) energia cinética turbulenta; c) dissipação da energia turbulenta da fase contínua. ....	82
Figura 16. Perfil de fração volumétrica média da fase dispersa tirado a partir de médias na área de planos transversais ao longo do comprimento do leito fluidizado. ....	83
Figura 17. Histórico temporal do fluxo mássico de sólidos (areia), avaliada na saída do leito fluidizado simulado.....	84

Figura 18. Análise do espectro de potência a partir do histórico temporal da Figura 15. ....	85
Figura 19. Campos de fração volumétrica da fase dispersa (areia) em 8 s, 9 s, 10 s e na média temporal, incluindo cortes transversais nas alturas de 2 m e 3 m.....	86
Figura 20. Campo da velocidade axial média da fase dispersa (areia) num plano central do leito fluidizado e em cortes transversais a 2m e 3m de altura.....	87
Figura 21. Isosuperfície para fração volumétrica de 15% da fase dispersa (areia) colorida de acordo com a velocidade axial da fase dispersa.....	88
Figura 22. Campo da fração volumétrica instantânea da fase dispersa (areia) em 10 s de simulação, sob os vetores de velocidade da: a) fase contínua; b) fase dispersa. ....	89
Figura 23. Cortes da seção transversal localizada a 2 m de altura, para as seguintes propriedades instantâneas da fase dispersa (areia) em 10 s de simulação: a) fração volumétrica; b) temperatura granular; c) tensão de cisalhamento.....	90
Figura 24. Temperatura granular da fase dispersa em 10 s de simulação.....	91
Figura 25. Tensão de cisalhamento instantânea da fase dispersa em 10 s de simulação. ....	92
Figura 26. Perfil médio de temperatura da fase contínua (ar) no leito fluidizado, resultados experimentais e numéricos. ....	93
Figura 27. Campo de temperatura médio: a) corte axial para fase contínua (ar); b) corte axial para fase dispersa (areia); c) corte transversal para fase contínua (ar) a 1,5 m de altura; d) corte transversal para fase dispersa (areia) a 1,5 m de altura.....	95
Figura 28. Detalhes das entradas e saída na geometria criada para o leito fluidizado do CFBC para o estudo de combustão.....	97
Figura 29. Esquema do injetor pneumático de carvão mineral instalado na planta. Adaptado de RAMIREZ-BEHAINNE (2007). ....	98
Figura 30. Composição da dolomita utilizada nos testes de combustão e as respectivas reações sofridas.....	100
Figura 31. Comparação de diferentes malhas numéricas para o Caso 2, comparando: a) diferença de pressão relativa entre a base e a saída; b) perfil médio da velocidade axial da fase dispersa ao longo do eixo radial na altura de 3m.....	102
Figura 32. Malha numérica do leito fluidizado, em detalhe: a) entrada de combustível; b) saída com configuração em T.....	103
Figura 33. Isosuperfícies no leito fluidizado em 10 s de simulação do Caso 2 para os desequilíbrios mássicos de: a) $1.10^{-11}$ kg/s; b) $1.10^{-8}$ kg/s . ....	105

Figura 34. Campo de fração volumétrica da fase dispersa (areia) em: a) 7 s; b) 8 s; c) 9 s; d) 10 s; e) média temporal. ....	108
Figura 35. Campo da concentração mássica da fase discreta (carvão) nos instantes de tempo: a) 7 s; b) 8 s; c) 9 s; d) 10 s. ....	109
Figura 36. Campos instantâneos em 10s de: a) Calor de reação das transformações homogêneas; b) Calor devido ao termo fonte da fase discreta (carvão) relacionado a mudança de fase. ....	110
Figura 37. Campos instantâneos em 10s da fase contínua (ar): a) Massa específica; b) Viscosidade dinâmica laminar; c) Temperatura; d) Velocidade axial. ....	111
Figura 38. Perfil médio ao longo do eixo axial da: a) velocidade da fase contínua (ar); b) fração volumétrica da fase contínua (ar). ....	112
Figura 39. Campos instantâneos da fração volumétrica da fase dispersa (areia) e vetores da fase contínua (ar) no tempo de 10 s de simulação. ....	113
Figura 40. Campos de fração mássica média dos componentes da fase contínua (ar) para o caso B, onde: a) Oxigênio; b) Dióxido de carbono; c) Monóxido de carbono; d) Monóxido de dihidrogênio; e) Voláteis. ....	115
Figura 41. Campos das médias quadráticas dos desvios em relação a média da fração mássica dos componentes da fase contínua (ar) para o caso B, onde: a) Oxigênio; b) Dióxido de carbono; c) Monóxido de carbono; d) Água; e) Voláteis. ....	117
Figura 42. Histograma da distribuição percentual do tempo de residência real das partículas da fase discreta (carvão) medida na saída do leito fluidizado. ....	118
Figura 43. Histórico instantâneo em 10 s de simulação da velocidade axial de todas as partículas discretas (carvão) provenientes de um ponto de injeção pelo tempo de residência no domínio. ....	119
Figura 44. Histórico instantâneo em 10 s de simulação da posição axial de todas as partículas discretas (carvão) provenientes de um ponto de injeção pelo tempo de residência no domínio. ....	120
Figura 45. Histórico instantâneo em 10 s de simulação do número de Reynolds de todas as partículas discretas (carvão) provenientes de um ponto de injeção pelo tempo de residência no domínio. ....	122
Figura 46. Histórico instantâneo em 10 s de simulação da massa de todas as partículas discretas (carvão) provenientes de um ponto de injeção pelo tempo de residência no domínio. ....	123
Figura 47. Histórico instantâneo em 10 s de simulação da temperatura de todas as partículas discretas (carvão) provenientes de dois pontos de injeção (Alimentação e Reciclo) pelo tempo de residência no domínio. ....	124

Figura 48. Histograma da distribuição percentual do número de partículas discretas (carvão) pelas suas respectivas temperaturas medida na saída do leito fluidizado. ....	125
Figura 49. Perfis de fração mássica média em base úmida ao longo do comprimento do leito fluidizado na categoria reação através dos modelos de difusão, difusão/cinética e intrínseca para: a) Oxigênio; b) Dióxido de carbono; c) Monóxido de carbono. ....	128
Figura 50. Taxa instantânea em 10 s de simulação do caso B das reações homogêneas das Equações: a) 72 (Voláteis); b) 73 (CO). ....	130
Figura 51. Comparação da fração mássica simulada de oxigênio, dióxido de carbono e monóxido de carbono (multiplicado por 100) na saída do reator com dados experimentais de RAMIREZ-BEHAINNE (2007). ....	131
Figura 52. Perfil de temperatura médio ao longo do comprimento do leito fluidizado para reação através dos modelos de difusão, difusão/cinética e intrínseca. ....	132
Figura 53. Perfis de fração mássica média em base úmida ao longo do comprimento do leito fluidizado na categoria partícula para reação através do modelo intrínseco com diâmetro de partícula constante e variável para: a) Oxigênio; b) Dióxido de carbono; c) Monóxido de carbono. ....	134
Figura 54. Comparação da fração mássica simulada de oxigênio, dióxido de carbono e monóxido de carbono (multiplicado por 100) na saída do reator com dados experimentais de RAMIREZ-BEHAINNE (2007). ....	135
Figura 55. Perfil de temperatura médio ao longo do comprimento do leito fluidizado para reação através do modelo intrínseco com diâmetro de partícula constante e variável. ....	136
Figura 56. Perfis de fração mássica média em base úmida ao longo do comprimento do leito fluidizado na categoria produto para reação incompleta e completa do coque para: a) Oxigênio; b) Dióxido de carbono; c) Monóxido de carbono. ....	137
Figura 57. Comparação da fração mássica simulada de oxigênio, dióxido de carbono e monóxido de carbono (multiplicado por 100) na saída do reator com dados experimentais de RAMIREZ-BEHAINNE (2007). ....	138
Figura 58. Perfil de temperatura médio ao longo do comprimento do leito fluidizado para reação incompleta e completa do coque. ....	140
Figura 59. Perfil de temperatura médio ao longo do comprimento do leito fluidizado para as condições de parede com temperatura constante e com fluxo de calor negativo. ....	142

Figura 60. Perfis de fração mássica média em base úmida ao longo do comprimento do leito fluidizado na categoria parede para as condições de parede com temperatura constante e com fluxo de calor negativo para: a) Oxigênio; b) Dióxido de carbono; c) Monóxido de carbono. ....	143
Figura 61. Comparação da fração mássica simulada de oxigênio, dióxido de carbono e monóxido de carbono (multiplicado por 100) na saída do reator com dados experimentais de RAMIREZ-BEHAINNE (2007). ....	144
Figura 62. Perfil médio de fração volumétrica da fase dispersa (areia no caso B e areia/cinzas no caso G) ao longo do eixo central do leito fluidizado. ....	146
Figura 63. Planos instantâneos em 10 s de simulação da diferença entre os resultados dos casos G e B para: a) Calor das reações homogêneas; b) Taxa da reação descrita pela Equação 72; c) Taxa da reação descrita pela Equação 73. ....	147
Figura 64. Perfis de fração mássica média em base úmida ao longo do comprimento do leito fluidizado para os inventários de sólido inicial e final da fase dispersa (areia): a) Oxigênio; b) Dióxido de carbono; c) Monóxido de carbono. ....	148
Figura 65. Comparação da fração mássica simulada de oxigênio, dióxido de carbono e monóxido de carbono (multiplicado por 100) na saída do reator com dados experimentais de RAMIREZ-BEHAINNE (2007). ....	149
Figura 66. Perfil de temperatura médio ao longo do comprimento do leito fluidizado para os inventários de sólido inicial e final. ....	151
Figura 67. Histograma da distribuição percentual do número de partículas discretas (carvão) pelas suas respectivas temperaturas medidas na saída do leito fluidizado para o caso G. ....	152
Figura 68. Campos médios da fração volumétrica da fase dispersa do topo e base do leito fluidizado para: a) Caso G; b) Caso B; c) Diferença entre os casos. ....	153
Figura 69. Campos médios da velocidade axial da fase contínua do topo e base do leito fluidizado para: a) Caso G; b) Caso B; c) Diferença entre os casos. ....	154
Figura 70. Histograma da distribuição percentual do número de partículas discretas (carvão) pelos seus respectivos tempos de residência medido na saída do leito fluidizado para o caso G. ....	155

## Nomenclatura

### Letras Latinas

$a$	Coeficiente modelo de arraste
$A$	Constante da taxa da reação turbulenta
$A_0$	Constante da relação de Tognotti
$A_p$	Área superficial, $m^2$
$A_r$	Fator pré-exponencial, (unidade dependente da ordem da reação)
$Ar$	Número de Arquimedes
$B$	Constante da taxa da reação turbulenta
$B_0$	Constante da relação de Tognotti
$C_x$	Constantes modelos de turbulência, Sutherland e reação heterogênea
$C$	Concentração molar, $mol/m^3$
$C_p$	Calor específico, $J/kg.K$
$C_D$	Coeficiente de arraste
$C_i$	Concentração do vapor do líquido, $kmol/m^3$
$d$	Diâmetro, $m$
$D_t$	Coeficiente de dispersão turbulenta
$D$	Coeficiente de difusão mássica, $m^2/s$
$e$	Coeficiente de restituição
$E_r$	Energia de ativação, $J/kgmol$
$f$	Fração de calor absorvida pela partícula
$F$	Termo fonte
$Fr$	Constante empírica, $Pa$
$\bar{g}$	Gravidade, $m/s^2$

$g_0$	Distribuição radial
$G$	Produção de energia cinética turbulenta
$G_s$	Taxa de recirculação de sólidos, $\text{kg}/\text{m}^2.\text{s}$
$h$	Coefficiente de transferência de calor convectivo, $\text{W}/\text{m}^2.\text{K}$
$h_g$	Coefficiente de transferência de calor global, $\text{W}/\text{m}^3.\text{K}$
$h_{mix}$	Entalpia da espécie na mistura ponderada pela fração mássica, $\text{J}/\text{kg}$
$H$	Entalpia, $\text{J}/\text{kg}$
$H_R$	Calor gerado pela reação, $\text{W}$
$\vec{I}$	Matriz identidade
$I$	Inventário de sólidos, $\text{kg}$
$\vec{J}$	Taxa mássica difusiva, $\text{kg}/\text{m}^2.\text{s}$
$k$	Condutividade térmica, $\text{W}/\text{m}.\text{K}$
$k_c$	Coefficiente de transferência de massa, $\text{m}/\text{s}$
$k_\varphi$	Coefficiente de difusão temperatura granular, $\text{kg}/\text{m}.\text{s}$
$k_B$	Constante de Boltzmann
$k_r$	Taxa cinética de reação, (unidade dependente da ordem da reação)
$K$	Energia cinética turbulenta, $\text{m}^2/\text{s}^2$
$L$	Escala de comprimento, $\text{m}$
$L_h$	Calor latente de vaporização, $\text{kJ}/\text{kg}$
$\dot{m}$	Fluxo mássico, $\text{kg}/\text{s}$
$m$	Massa, $\text{kg}$
$M$	Peso molecular, $\text{kg}/\text{kmol}$
$N_A$	Número de Avogadro
$Nu$	Número de Nusselt
$p$	Pressão, $\text{Pa}$

$Pr$	Número de Prandtl
$\bar{r}_p$	Raio médio dos poros do carvão, m
$r_c$	Termo de reação cinética, $\text{kg}/\text{m}^2 \cdot \text{Pa} \cdot \text{s}$
$r_d$	Termo de reação difusiva, $\text{kg}/\text{m}^2 \cdot \text{Pa} \cdot \text{s}$
$R$	Constante universal dos gases, $\text{J}/\text{kg} \cdot \text{mol} \cdot \text{K}$
$R_r$	Taxa da reação, $\text{kmol}/\text{m}^3$
$Re$	Número de Reynolds
$S$	Modulo do tensor “ <i>rate-of-strain</i> ” médio, $\text{s}^{-1}$
$s_b$	Coefficiente estequiométrico, $\text{kmol}$
$Sc$	Número de Schmidt
$St$	Número de Stokes
$t$	Tempo, s
$T$	Temperatura, K
$v$	Velocidade, $\text{m}/\text{s}$
$V$	Volume, $\text{m}^3$
$Y$	Fração mássica

### Letras Gregas

$\alpha$	Coefficiente modelo de volatilização, intrínseco
$\Phi$	Coefficiente de acomodação
$\xi$	Inverso do número efetivo de Prandtl
$\beta$	Coefficiente de transferência de quantidade de movimento, $\text{kg}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$
$\beta_r$	Expoente da temperatura na taxa de reação
$\beta_t$	Constante modelo de turbulência
$\Gamma$	Taxa de colisão

$\gamma$	Dissipação por colisão de energia, $\text{kg/m}^3 \cdot \text{s}$
$\varepsilon$	Fração volumétrica
$E$	Taxa de dissipação turbulenta, $\text{m}^2/\text{s}^3$
$\eta$	Relação entre escalas de tempo turbulentas
$\eta'$	Ordem da reação dos reagentes
$\eta''$	Ordem da reação dos produtos
$\eta_{ef}$	Fator de efetividade
$\vartheta$	Temperatura granular, $\text{m}^2/\text{s}^2$
$\Theta$	Porosidade da partícula de coque
$\delta$	Fração de sítios ocupados
$\psi$	Ângulo, graus
$\chi$	Constante de proporcionalidade
$\lambda$	Viscosidade sólido, $\text{Pa} \cdot \text{s}$
$\mu$	Viscosidade dinâmica, $\text{Pa} \cdot \text{s}$
$\nu$	Viscosidade cinemática, $\text{m}^2/\text{s}$
$\rho$	Massa específica, $\text{kg/m}^3$
$\sigma$	Tensão de cisalhamento ( <i>shear stress</i> ), Pa
$\omega$	Número de Prandtl dispersivo
$\vec{U}$	Vetor velocidade, m/s
$\Pi$	Interação turbulenta entre as fases
$\varphi$	Flutuação da velocidade, $\text{kg/m}^3 \cdot \text{s}$
$\varphi_{Th}$	Modulo de Thiele
$\tau$	Tempo característico, s
$\vec{T}$	Tensor tensão, Pa

## Subscritos

$O$	Inicial ou seio da fase continua
$c$	Cinzas
$ef$	Efetivo
$g$	Fase gasosa
$gs$	Interação entre fases
$i$	Fase ou substância genérica
$K$	Energia cinética turbulenta
$max$	Máximo
$min$	Mínimo
$ox$	Oxigênio
$p$	Fase particulada
$r$	Reação
$s$	Fase sólida
$t$	Turbulência
$v$	Voláteis
$w$	Parede
$E$	Taxa de dissipação turbulenta
$\vartheta$	Temperatura granular
$\infty$	Ambiente

## **Siglas**

CFBC	Combustão em Leito Fluidizado Circulante
CFD	Fluidodinâmica Computacional
DAF	Base Seca Livre de Cinzas
DEM	Método dos Elementos Discretos
EMMS	Minimização da Energia em Múltiplas Escalas
FEM	Faculdade de Engenharia Mecânica
FEQ	Faculdade de Engenharia Química
K-E	K-Épsilon
KTGF	Teoria Cinética do Escoamento Granular
LES	Simulação de Grandes Escalas
LFC	Leito Fluidizado Circulante
MVF	Método dos Volumes Finitos
PCI	Poder Calorífico Inferior
PDF	Função Densidade de Probabilidade
RANS	Médias de Reynolds na Equação de Navier-Stokes
RMS	Média da Raiz dos Quadrados
RNG	Re-Normalização de Grupos

# **1 Introdução**

Aos leitores desta tese, independente de sua formação ou conhecimentos específicos, deseja-se proporcionar um aprofundamento gradativo no tema da modelagem matemática da combustão de carvão mineral em Leito Fluidizado Circulante. Buscou-se abordar todos os assuntos relevantes aos fenômenos envolvidos de modo direto e claro. Em pontos-chaves referências são fornecidas para discussões mais amplas sobre conhecimentos que fogem do escopo deste texto. Os resultados encontrados através da reprodução de uma planta piloto em um domínio virtual são analisados e validados sob o ponto de vista da engenharia.

## 1.1 Motivação da Pesquisa

Atualmente, as reservas de carvão mineral no Brasil somam ao redor de 32,3 bilhões de toneladas. Em barris equivalentes de petróleo, a energia contida nesta quantidade de combustível representa, isoladamente, quase 57% das reservas totais disponíveis no país (BEN, 2011). Apesar disto, surpreende o fato de que o consumo de carvão mineral na matriz energética brasileira não supera ainda 2%, sendo que a produção em 2010 somou 5,6 milhões de toneladas. Também em 2010, 80,7% do consumo de carvão mineral nacional foi destinado a geração de energia elétrica, enquanto o restante foi utilizado diretamente pelas indústrias para geração de vapor. Já o carvão mineral utilizado pela indústria metalúrgica provem integralmente de importações.

Na geração de eletricidade, por exemplo, vários motivos apontam para a baixa participação do carvão mineral extraído no Brasil na matriz energética, com três deles merecendo destaque. O primeiro fator é a associação desta fonte de energia como sendo altamente poluente pela sociedade, tornando o recurso economicamente menos atrativo frente às demais fontes de energia primária, principalmente as unidades hidroelétricas. Um segundo motivo é a característica físico-química do carvão nacional, particularmente desfavorável, devido à alta proporção de cinzas e de enxofre contida na sua estrutura em comparação com a dos outros carvões usados na geração de vapor em outras partes do mundo, o que contribui para uma queima menos eficiente e impõe maiores dificuldades na redução do impacto ambiental nas caldeiras convencionais atualmente disponíveis. Finalmente, em terceiro lugar, cabe mencionar o atraso na implantação de tecnologias e procedimentos de combustão mais modernos, como os oferecidos pela combustão em Leito Fluidizado Circulante (LFC) (*Circulating Fluidized Bed Combustion* - CFBC), que têm obtido sucesso em países desenvolvidos para uso de carvões considerados de baixa qualidade. Esta tecnologia permite a aplicação conjunta de metodologias para redução de poluentes, como a captura de SO<sub>x</sub>. Neste último aspecto, o projeto da Usina USITESC, a ser implantada na localidade de Treviso/SC para produzir 440 MW de energia elétrica a partir de um sistema CFBC, representa um avanço importante no uso racional dos combustíveis sólidos de origem fóssil disponíveis no país.

A tecnologia CFBC foi dominada pelos países desenvolvidos há mais de três décadas, sendo logo implantada comercialmente para a geração de energia elétrica. Nos últimos anos, ela teve ampla difusão comercial em países da Ásia, principalmente na China, onde usinas de porte considerável estão sendo implementadas. No Brasil, o cenário é bem diferente, pois pesquisas teóricas e experimentais relacionadas a esta tecnologia são ainda incipientes. A revisão da literatura mostra que são poucos os estudos de combustão de carvão nacional em sistemas CFBC

publicados até o momento. Mesmo num contexto global, poucos dos trabalhos disponíveis envolvem pesquisas com aplicação de técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD – *Computational Fluid Dynamics*) confrontadas com informações experimentais.

O estudo deste tipo de sistema de combustão através de técnicas CFD permitirá elevar o grau de conhecimento sobre os fenômenos envolvidos em qualquer região do equipamento. Ao contrário de estudos experimentais, mudanças de condições operacionais ou de geometria poderão ser analisadas e avaliadas tecnicamente com rapidez e sem grandes custos.

## **1.2 Objetivo Geral**

- Esta tese tem como objetivo principal modelar e simular, através da técnica de CFD, o fenômeno da combustão de carvão mineral brasileiro numa unidade piloto CFCB. Deseja-se validar os resultados obtidos com dados experimentais e, deste modo, ampliar o conhecimento sobre as características da fluidodinâmica, da transferência de calor e de massa que ocorrem no interior do equipamento.

## **1.3 Objetivos Específicos**

- Elaborar um estado da arte sobre simulação de combustores em Leito Fluidizado Circulante, bem como levantar informações físico-químicas dos materiais envolvidos e das cinéticas de reação.
- Adotar uma geometria correspondente a um equipamento real com condições operacionais conhecidas.
- Determinar a modelagem que melhor se adequa para a representação dos fenômenos de transferência de massa, energia e quantidade de movimento no escoamento multifásico turbulento.
- Realizar simulações tridimensionais e transientes da fluidodinâmica multifásica, sem e com reações de combustão.
- Validar os resultados obtidos com dados da planta experimental.

## **1.4 Organização da Tese**

De modo a facilitar o acompanhamento da pesquisa aqui descrita, a tese está separada por capítulos, iniciando com a apresentação e identificação da motivação para a o desenvolvimento do problema a ser estudado. No Capítulo 2 é mostrada a fundamentação teórica do sistema investigado, bem como uma revisão da literatura, que visa levantar o estado da arte na área do trabalho. No Capítulo 3 são apresentadas as ferramentas que foram utilizadas para a descrição e posterior simulação numérica do sistema físico. Neste capítulo inclui-se em detalhes a caracterização da unidade, com sua funcionalidade e os materiais empregados. No Capítulo 4 apresenta-se os principais resultados obtidos com a modelagem proposta, além de uma discussão sobre estes. No Capítulo 5 faz-se um apanhado geral do trabalho e ressaltam-se as suas conclusões finais, bem como sugestões para a sequência da pesquisa.

## **2 Fundamentação Teórica**

A tarefa de modelar Leitos Fluidizados Circulantes leva inevitavelmente ao estudo profundo dos fenômenos de transporte. O escoamento gás-sólido a altas temperaturas com transferência de massa entre as fases no interior do equipamento torna o estudo dos LFCs altamente complexo. Diversas abordagens têm sido empregadas na descrição dos fenômenos envolvidos, sendo o CFD uma das mais recentes e já bastante difundida. Neste capítulo são discutidos o funcionamento do sistema de LFC, bem como as características das modelos apresentados pela literatura para estudar os fenômenos inerentes ao regime de fluidização rápida.

## 2.1 Leitos Fluidizados Circulantes

Muitos processos de transformação química requerem o contato entre diferentes estados de matéria, como é o caso das reações heterogêneas gás-sólido. Industrialmente, uma classe de equipamentos que utiliza processos para este fim vem sendo desenvolvida intensamente desde a metade do século XX, com o nome de reatores de leito fluidizado (KUNII e LEVENSPIEL 1969). Estes equipamentos operam com material sólido na forma de particulados, que inicialmente depositados na forma de um leito passam a se comportar como um fluido devido ao gás passado através deles. Dentre as aplicações industriais, a mais conhecida é a combustão de carvão, biomassa ou resíduos para a geração de energia. Outras aplicações incluem dessulfurização de gases, calcinação, produção de cimento e craqueamento catalítico de petróleo (RAMIREZ-BEHAINNE 2007).

Quando a vazão do fluido é grande o suficiente, o material particulado é arrastado, de modo que um processo em circuito fechado é desenvolvido para este regime de fluidização rápida, denominado de Leito Fluidizado Circulante (LFC). Apesar da grande quantidade de variações de *design* dos equipamentos, o funcionamento de um LFC é conceitualmente um processo simples. O equipamento em si não possui partes móveis, sendo que apenas a alimentação das correntes de entrada garantem o funcionamento do sistema. A Figura 1 apresenta de modo simplificado um esquema do circuito de uma unidade de LFC gás-sólido.

O sistema é composto por quatro módulos principais. O primeiro é o leito fluidizado, ou *riser* - reator vertical, no qual o leito de sólidos é fluidizado. A corrente gás-sólida que deixa o leito fluidizado passa posteriormente por uma unidade de separação de fases, como um ciclone por exemplo, no qual o gás efluente deixa o sistema. Os sólidos colectados pelo ciclone são despejados no *standpipe*, ou coluna de retorno, para finalmente atingirem a válvula de recirculação de partículas. Este último módulo é responsável por reconduzir os sólidos de volta ao leito fluidizado mediante a garantia de uma perda de carga que permita o cumprimento do balanço de pressão no sistema fechado. Alguns dos dispositivos mais comuns de retorno das partículas ao leito fluidizado são válvulas tipo L, J ou *loop-seal* (KUNII e LEVENSPIEL 1969).

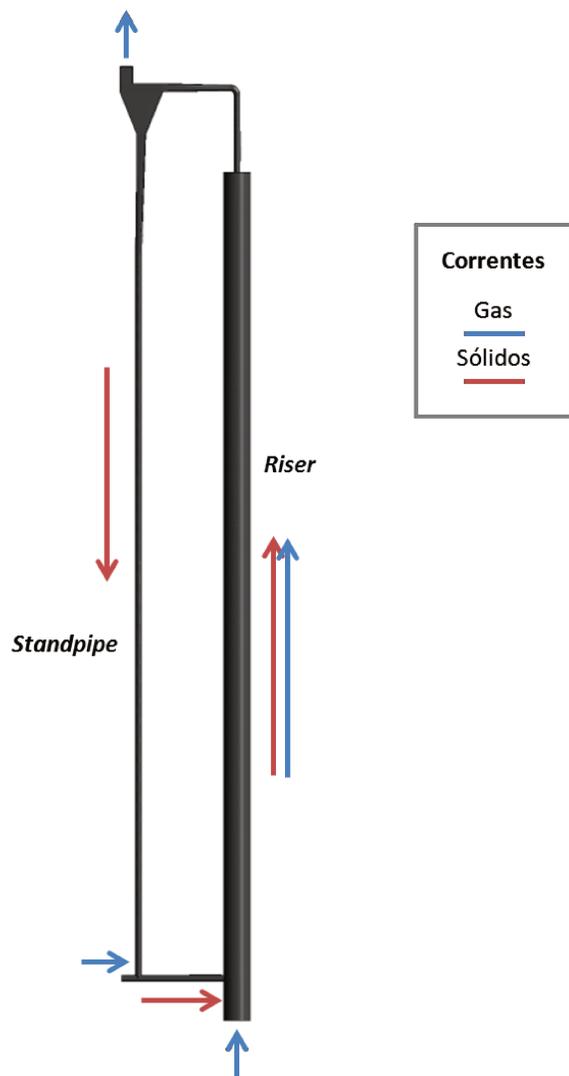


Figura 1. Esquema simplificado de operação de uma unidade de leito fluidizado circulante.

O objetivo do sistema é a transformação química de particulados através do veemente contato entre as fases, que ocorre com maior intensidade no leito fluidizado, fazendo deste o módulo de principal interesse para o estudo dos fenômenos. Portanto o conhecimento do escoamento multifásico no seu interior é a chave para alcançar a eficiência esperada do processo.

Duas importantes variáveis de operação do leito fluidizado são as vazões de alimentação de gás e de sólidos (esta última pode ser proveniente tanto dos sólidos recirculados como de sólidos alimentados externamente ao circuito). A combinação entre elas define como o sistema irá operar. Se a vazão de gás e sólidos for pequena, porém ainda superior a velocidade terminal da partícula, ambas as fases irão escoar em sentido ascendente. A medida que aumenta-se a alimentação de sólidos, o padrão ascendente colapsa e um processo de recirculação interna irá

ocorrer no leito fluidizado. Este último regime cria um comportamento característico, no qual um fluxo diluído ascendente se forma no centro do leito fluidizado e outro fluxo denso e descendente aparece próximos as paredes. Este padrão é conhecido como centro-anular e tem sido reportado por diversos pesquisadores através de medidas experimentais em unidades de LFCs (HARTGE et al. 1988, RHODES 1990, KRUSE e WERTHER 1995).

Outras categorias de leitos fluidizados foram reportadas por GRACE et al. (1997). Esta comparação entre categorias de leitos fluidizados é apresentada na Tabela 1.

Tabela 1. Características de categorias de fluidização de sólidos.

	<b>Leitos fluidizados de baixa velocidade</b>	<b>Leitos fluidizados circulantes</b>	<b>Leitos de transporte diluídos</b>
<b>Tempo de residências das partículas</b>	Grandes períodos de tempo (minutos ou horas) no reator	Circulam repetidas vezes pelo reator, tempo medido em segundos	Passam uma vez pelo reator
<b>Regime hidrodinâmico</b>	Borbulhante, turbulento, com uma interface definida	Rápida fluidização, podendo ter base do leito densa	Transporte pneumático
<b>Velocidade superficial do gás (m/s)</b>	Abaixo de 2	De 3 a 16	De 15 a 20
<b>Diâmetro médio das partículas (mm)</b>	0,03 a 3	0,05 a 5	0,02 a 0,08
<b>Taxa de saída de sólidos (kg/m<sup>2</sup>s)</b>	0,1 até 5	15 até 1000	Até 20
<b>Fração volumétrica de gás</b>	De 0,6 a 0,8 no leito, muito maior na região acima	Média de 0,8 a 0,98 no leito fluidizado	Maior que 0,99
<b>Mistura do gás</b>	Dispersão axial substancial	Dispersão axial intermediária	Pouca dispersão axial

## 2.2 Material Particulado

Devido a grande variedade de materiais particulados de interesse industrial que são submetidos a processos de fluidização, surgiu a necessidade da classificação das características de fluidização generalizadas para todos os tipos de material particulado, de acordo com as propriedades físicas destes. Neste contexto GELDART (1973) foi pioneiro na criação de um sistema de classificação. O autor dividiu os particulados em 4 grupos principais, de A a D, sendo que cada um apresenta comportamento distinto quando fluidizado. Os grupos foram determinados de acordo com a diferença da massa específica do material particulado e do material fluidizante pelo tamanho das partículas. A Figura 2 mostra a divisão proposta pelo autor.

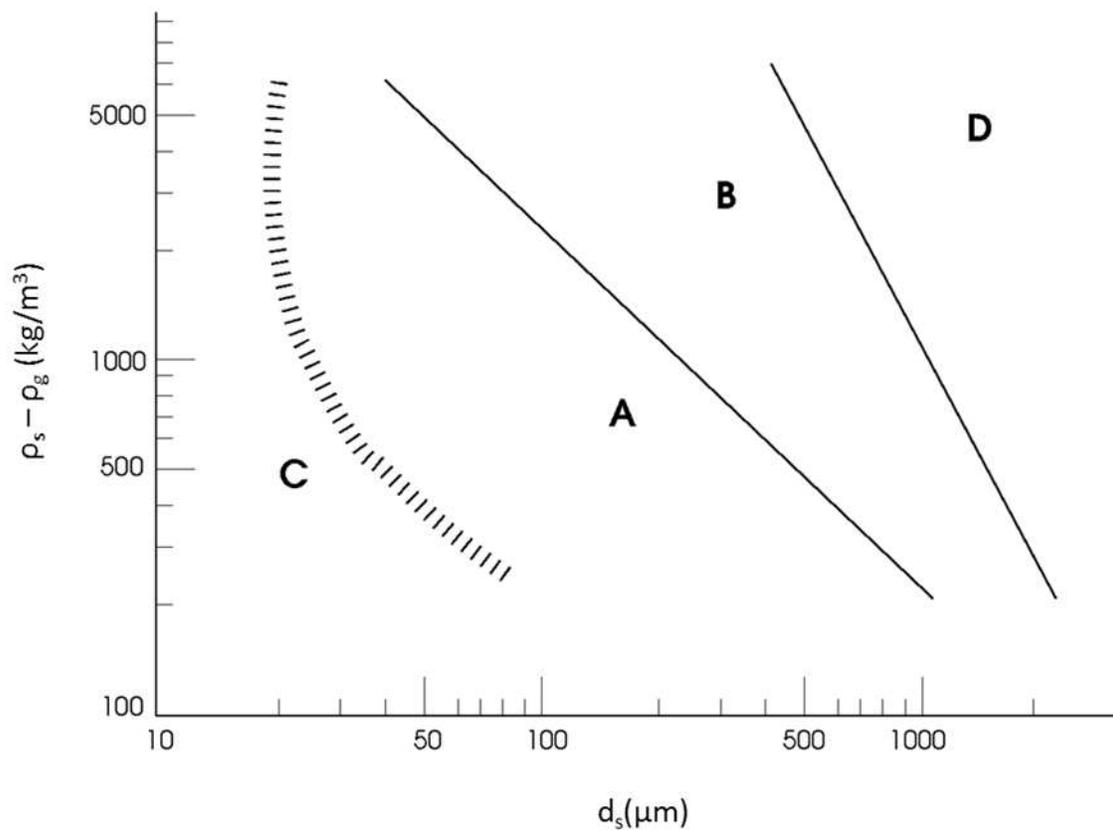


Figura 2. Classificação de materiais particulados sob fluidização por ar atmosférico a temperatura e pressão ambientes, definido por GELDART (1973).

As características dos materiais foram descritas por KNOWLTON (2005) da seguinte maneira:

O grupo A é caracterizado de modo geral por materiais de pequeno diâmetro, na faixa entre 30 e 100  $\mu\text{m}$  e massa específica até 1400  $\text{kg}/\text{m}^3$ . Apresentam boa fluidização, normalmente com formação de pequenas bolhas quando alcançada a velocidade mínima de formação de bolhas.

O grupo B abrange partículas de 100 a 1000  $\mu\text{m}$ . A fluidização tende a gerar bolhas que coalescem ao acenderem pelo leito, fazendo com que o borbulhamento seja vigoroso. É neste grupo que encontram-se grande parte dos sólidos utilizados em LFCs industriais.

O grupo C é composto por partículas pequenas, abaixo de 30  $\mu\text{m}$ , sendo muito coesas e de difícil fluidização. As forças interpartículas são significativas, de modo que blocos de partículas sejam transportados. Grande possibilidade de ocorrer formação de canais e caminhos preferenciais.

Por fim, o grupo D é composto pelas maiores, acima de 1000  $\mu\text{m}$ , causando a formação de caminhos preferenciais. A operação de leitos com estas partículas se dá geralmente no regime de jorros.

Entretanto, o estudo de GELDART (1973) foi realizado apenas a temperatura e pressão ambientes, de modo que sua classificação não pode ser livremente empregada para outras condições operacionais. Com o intuito de ampliar a validade desta classificação, YANG (2007) realizou estudos de leitos fluidizados e apresentou uma reinterpretação da classificação original. Este autor se baseou na hipótese da importância relativa dos fenômenos laminares e turbulentos que governam o comportamento de fluidização, conforme proposto por GOOSSENS (1998). Assim, a classificação estendida dos particulados foi determinada em função da massa específica relativa entre sólidos e fluidos pelo número de Arquimedes ( $Ar$ ). Deste modo, segundo o autor, é possível reunir num gráfico materiais particulados distintos, fluidizados a diferentes temperaturas e pressões e por fluidos com propriedades variáveis.

Estudos da dinâmica da transferência de energia térmica em unidades de LFC são ainda pouco desenvolvidos devido a sua complexidade. Segundo GLICKSMAN (1997) a transferência de calor está intimamente relacionada com a fluidodinâmica do escoamento nos leitos envolvendo processos combustivos. Cada partícula que recebe energia térmica ao passar por uma reação exotérmica troca calor com o gás a sua volta, com as outras partículas, que podem estar sofrendo reações semelhantes ou serem inertes e também com as paredes ou trocadores de calor utilizados em sistemas de geração de energia. Isto leva a identificação de três processos de transferência de calor: leito-paredes, gás-partículas e partículas-partículas (MIHÁLIKÓ et al. 2004).

### 2.3 Material Combustível

O carvão é um mineral com alto teor de carbono e na maioria dos casos baixo teor de enxofre e nitrogênio. Entretanto a composição física e química dos diferentes tipos de carvão mineral apresenta grandes variações. O carvão é formado pelo depósito sucessivo de material biótico em local apropriado, após um longo período de tempo sob pressão. De modo geral, quanto maior a profundidade e tempo depositado, maior é a concentração de carbono e o poder calorífico do carvão (SCHWEINFURTH 2004).

Neste lento processo, o material formado inicialmente é a turfa, que é considerada o precursor do carvão. A denominação do material mineral como carvão começa com o Lihito, o mais baixo na classificação dos tipos de carvão mineral. Este tipo é utilizado principalmente para a geração de energia elétrica. Em seguida aparece a categoria Sub Betuminoso, que além da aplicação para geração de energia elétrica também é empregado como fonte de hidrocarbonetos aromáticos leves. O carvão Betuminoso é empregado para geração de energia e vapor, sendo também utilizado para produzir o coque para uso na indústria de metalurgia. Por fim a categoria mais elevada recebe a denominação de Antracito e é utilizada principalmente para aquecimento doméstico e comercial. Um resumo da classificação do carvão é ilustrado na Figura 3.

Uma vez que o carvão mineral foi um dos primeiros combustíveis sólidos descobertos pelo homem após a biomassa, o desenvolvimento inicial da tecnologia de queima ocorreu de forma intensiva, porém principalmente empírica. Com o passar do tempo, a pesquisa científica passou a buscar modelos fundamentais, o que gerou conhecimentos mais detalhados do processo. A modelagem foi baseada principalmente em experimentos com partículas isoladas, de modo que os processos fundamentais que governam o aquecimento, devolatilização, pirólise e combustão pudessem ser identificados.

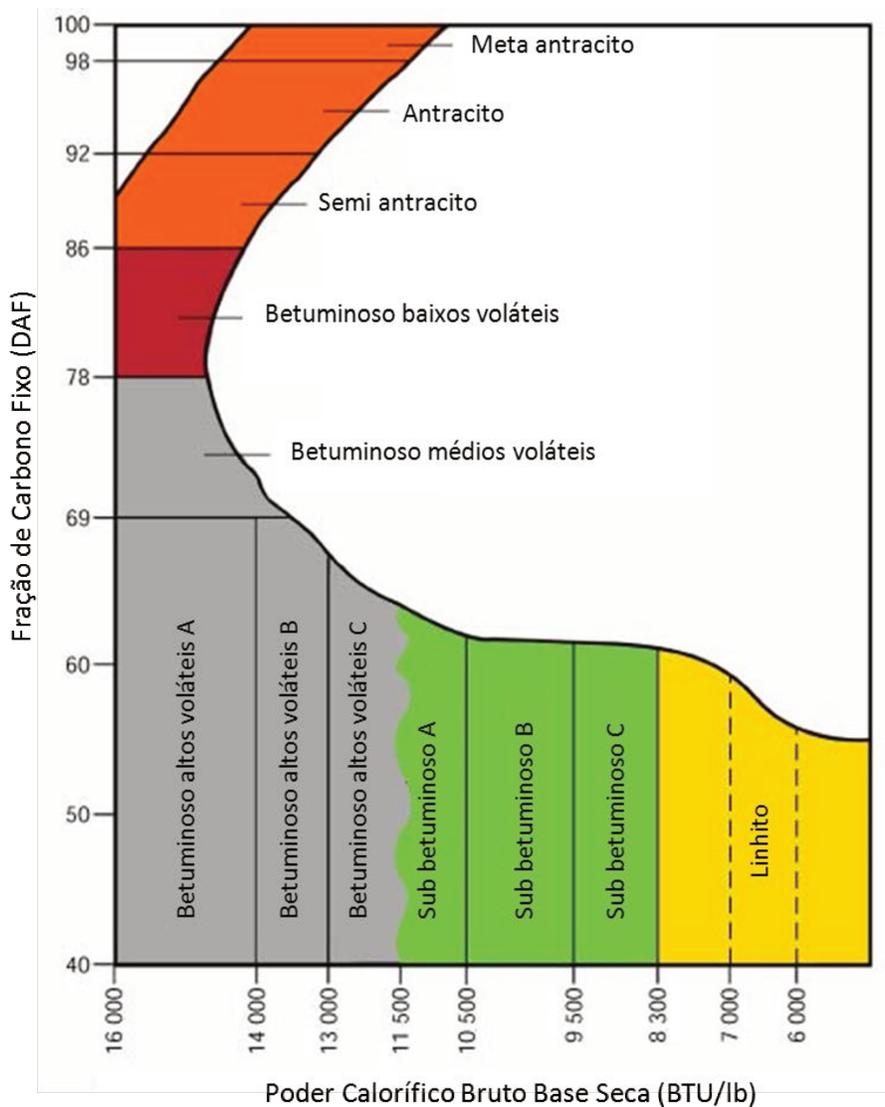


Figura 3. Classificação do carvão mineral, adaptado de SCHWEINFURTH (2004).

De acordo com o tamanho do particulado, o processo de queima acontece de diferentes formas. O mineral pode ser queimado sobre grades quando as partículas são maiores que 25 mm de diâmetro, em leitos fluidizados quando seu diâmetro for menor que 10 mm, em suspensão com partículas menores que 75  $\mu\text{m}$  e finalmente como micropartículas de carvão seco ou em lamas (*coal water slurry*) para partículas na faixa de 4 a 10  $\mu\text{m}$  (ANNAMALAI e RAYN, 1993).

## 2.4 Simulação Numérica com as Técnicas de Fluidodinâmica Computacional

A Fluidodinâmica Computacional (CFD) é o termo geral que se dá à simulação numérica, através da resolução de um conjunto de modelos matemáticos, que descrevam um sistema físico em que haja escoamento. Todavia, fenômenos adicionais também podem ser descritos, como a transferência de energia térmica, cinética de reações químicas ou mudanças de fase (ANSYS FLUENT 2009).

A difusão inicial desta técnica pode ser associada à indústria aeroespacial na década de 1960, quando passou-se a contar com o apoio do CFD. Em pouco tempo, outras áreas passaram a investigar e aplicar esta técnica para as mais diversas situações físicas. Atualmente a resolução de problemas de engenharia através da simulação numérica com técnicas de CFD se tornou bastante popular, tanto no meio acadêmico como no industrial. Grandes números de publicações do meio científico assim como a disponibilidade de softwares, de código aberto ou comerciais, ajudaram na divulgação e ampliação da base de conhecimentos gerados para CFD (MALISKA 2004).

Uma das principais vantagens recai na flexibilidade de alterar condições geométricas e de operação, bem como recriar situações em condições extremas, tóxicas ou possivelmente danosas, sem criar qualquer risco a pessoas ou ao meio ambiente. Por outro lado, uma das limitações do CFD é o poder computacional requerido para descrições mais complexas ou realistas de problemas físicos, ou sistemas muito grandes, de escala industrial. Todavia, com o crescente desenvolvimento de processadores aliados a algoritmos cada vez mais robustos, a mecânica dos fluidos computacional tem se colocado num papel mais importante em projetos industriais (ROSA 2008).

A aplicação de CFD para casos com apenas uma fase alcançou um nível bastante avançado, sendo que a maioria dos casos foram simulados com sucesso (ANDERSON 1995). Entretanto para a descrição de escoamentos multifásicos ainda há grandes desafios na correta predição do comportamento desta complexa categoria.

Há duas principais formas de modelar a fase particulada em escoamentos multifásicos por CFD. A primeira, denominada Lagrangeana, ou modelo de partículas discretas, acompanha individualmente a trajetória dos particulados, através de uma equação para o balanço de forças na partícula. A interação entre as partículas pode ser descrita por uma força potencial, pelo choque dinâmico ou pode ser negligenciado para casos diluídos (VAN WACHEM 2000). A outra abordagem, denominada Euleriana, considera que o conjunto de partículas tem o comportamento de um fluido, não sendo portanto necessário representar cada objeto por si só. Esta abordagem trata a fase particulada como um contínuo, através de médias das escalas de movimento das partículas

individuais. Entretanto modelos estatísticos complexos são necessários para transcrever o comportamento de partículas individuais para um contínuo. A transcrição mais difundida é denominada de Teoria Cinética do Escoamento Granular (KTGF), desenvolvida na década de 1980 (GIDASPOW 1994), tendo-se estabelecido como padrão para a representação de leitos fluidizados.

A modelagem de reações químicas homogêneas pode ser descrita por mecanismos simples de reações diretas ou mesmo com várias reações intermediárias. Ainda podem levar em consideração a turbulência do escoamento. Porém, quando trabalha-se com escoamentos multifásicos a descrição de reações heterogêneas ainda é desafiadora em simulações numéricas com as técnicas de CFD. A complexidade dos fenômenos envolvidos pode fazer com que instabilidades numéricas ocorram, além do custo computacional elevar-se, fator que deve ser sempre considerado.

Para a fase particulada há mais uma metodologia, baseada na abordagem Lagrangeana, que leva em consideração a interação entre as partículas. Esta metodologia denominada *Discrete Element Model* (DEM) é adequada para simular o movimento de partículas em leitos densos. Reações químicas também podem ser implementadas acoplando-se DEM com informações de uma fase contínua calculada por CFD (HORIO E KAJIKAWA, 2001).

Um trabalho recente neste contexto que merece ser destacado foi publicado por GENG e CHE (2011). Os autores utilizaram uma abordagem de três fases para simular o escoamento reativo de um leito fluidizado borbulhante de areia e carvão mineral. A fase contínua foi descrita através das equações de Navier-Stokes e ambas as fases sólidas foram representadas através de partículas discretas pela metodologia DEM. Como o leito é denso, a interação entre as partículas é um aspecto fundamental que deve ser modelado. Dois sistemas foram estudados, o primeiro com apenas uma partícula de carvão de 3 mm em um leito de areia de 0,5 mm e o segundo caso uma pequena quantidade de partículas de carvão de 1 mm no mesmo leito. O número total de partículas calculadas não superou 7500, principalmente devido ao grande custo computacional requerido para uma descrição tão detalhada dos sólidos. Na modelagem da reação de queima de carvão foi considerado que a queima gera somente CO, uma vez que o leito denso inibe a oxidação do CO a CO<sub>2</sub> na camada próxima a partícula. Os resultados alcançados são bastante satisfatórios, representando com precisão valores de temperatura e tamanho das partículas de carvão, bem como temperatura e composição dos gases de combustão no leito estudado. Entretanto a aplicação desta metodologia para sistemas maiores, como LFCs, ainda é inviável devido ao grande número de trajetórias a serem seguidas e portanto ao alto custo computacional.

## 2.5 Revisão da Modelagem Matemática Aplicada a CFBCs

A revisão apresentada a seguir contém alguns dos principais trabalhos publicados na literatura que tiveram influência nesta tese. Apesar dos trabalhos não estarem separados por temas, dá-se uma ideia da evolução da modelagem e simulação de sistemas gás-sólido aplicada a combustão.

GRIFFITHS (1995) fez uma extensa revisão sobre modelagem da combustão de hidrocarbonetos. O autor também descreveu as características necessárias dos estudos experimentais para que as informações obtidas possam fundamentar a modelagem matemática, especialmente os modelos cinéticos. Adicionalmente foi realizado um estudo das aplicabilidades dos métodos analíticos e dos métodos numéricos para a resolução de diversos problemas envolvendo reações químicas.

FÖRTSCH et al. (1998) analisaram a combustão de carvão em um reator de combustão estagiada, modelado por uma abordagem Euler-Lagrange. Especial atenção foi dada a produção de  $\text{NO}_x$  através da identificação das fontes geradoras deste em cada estágio das partículas. Deste modo, as reações das etapas de devolatilização foram divididas em duas fases, representadas por um total de oito reações. A reação heterogênea foi considerada incompleta, sendo o monóxido de carbono posteriormente oxidado na fase gasosa. As previsões das simulações se aproximaram bem dos dados experimentais, mostrando a importância do modelo complexo utilizado para o balanço de  $\text{NO}_x$ .

SOTUDEH-BHAREBAAGH et al. (1998) utilizaram um modelo unidimensional para a simulação de um LFC, alimentado com uma mistura de carvão e calcário. Apesar das simplificações inerentes as simulações deste tipo, a modelagem das reações químicas mostrou-se de interesse. As etapas descritas dividiram-se em devolatilização e subsequente reação homogênea dos voláteis, reação heterogênea com o carbono restante no carvão, formação de  $\text{NO}_x$  e absorção de  $\text{SO}_2$ . No que se refere a última parte, o processo de captura de  $\text{SO}_2$  pelo calcário ocorre em duas etapas, sendo a primeira a calcinação e a segunda a sulfatação. A primeira etapa foi considerada instantânea, sendo apenas a segunda modelada. Esta hipótese foi considerada de grande importância para o presente trabalho, uma vez que sendo instantânea, pode-se simplificar a modelagem do CFBC.

ALVES et al. (2000) analisaram por meio de técnicas de CFD a aplicação de LFC ao processo de FCC da indústria de refino de petróleo. Um modelo de dois fluidos turbulento foi utilizado para caracterizar o escoamento de partículas de catalisador e areia em um leito fluidizado, sob condição de fluidização rápida. Duas geometrias e diferentes condições operacionais foram testadas e validadas com boa concordância com dados experimentais disponíveis na literatura. O trabalho mostrou que a modelagem aplicada para o escoamento multifásico com a KTGF para descrever as propriedades da fase particulada conseguiu representar as características do sistema multifásico.

VAN WACHEN (2000) investigou detalhadamente a KTGF na representação da fluidodinâmica da fase dispersa em LFCs. Esta tese contém uma ampla discussão sobre as bases teóricas, bem como uma estimulante discussão dos resultados da aplicação da KTGF ao caso de interesse. Segundo o autor, a principal restrição no projeto de reatores de LFC recai no problema de *scale-up*. Isto deve-se ao fato do escoamento em leitos fluidizados serem sistemas caóticos determinísticos. Assim sendo, o autor afirma que métodos não lineares baseados na entropia de Kolmogorov poderiam determinar as imprevisibilidades do sistema e assim o comportamento fluidodinâmico.

HUILIN et al. (2000) utilizaram um modelo unidimensional, permanente que incluiu a fluidodinâmica, a transferência de calor e as reações de combustão num leito fluidizado circulante. Os autores separaram o modelo fluidodinâmico em duas regiões distintas, uma inferior densa e outra superior diluída. Do mesmo modo, as reações também foram segregadas pelas regiões. Enquanto que na região densa ocorre a secagem, a devolatilização e a queima do carbono, na região diluída ocorre a queima do carbono e a adsorção de  $\text{SO}_2$ . Os resultados foram validados para uma planta de 35 ton/h e partículas de carvão de 1,96 mm de diâmetro médio. Apesar de o modelo conseguir representar um reator de LFC, os autores afirmaram que mais dados são necessários para tornar o modelo mais confiável.

COSTA (2002) desenvolveu um modelo matemático para a combustão de carvão pulverizado, analisando o escoamento gás-sólido em uma região de um LFC. Grande ênfase foi dada ao mecanismo de reação proposto, contendo 500 reações e 88 espécies. O processo de redução de  $\text{SO}_x$  também foi estudado, tendo sido ainda determinada a influência da água neste. Os resultados obtidos pelo autor foram validados para devolatilização, consumo global de massa, temperatura da partícula, extensão da calcinação e sulfatação e para a composição dos gases efluentes. Pontos de injeção de água também foram incluídos, buscando favorecer o percentual de captura de  $\text{SO}_2$ .

LOEFFLER et al. (2002) investigaram experimentalmente a oxidação do CO em leitos fluidizados. Os parâmetros avaliados foram: temperatura, razão ar-combustível, concentração de CO na entrada, relação H/C, diâmetro e fração volumétrica das partículas. Os autores afirmaram que a temperatura, a relação ar-combustível e o diâmetro das partículas foram os parâmetros que mais influenciaram nos resultados. Este último parâmetro influenciou de forma inversamente proporcional na oxidação de CO, para a faixa de partículas estudadas, de 250 a 1500  $\mu\text{m}$ .

MOREIRA (2002) investigou o processo de queima de coque depositado sobre catalisador de FCC em um estudo numérico em regenerador, aplicando a técnica CFD. Dois modelos foram utilizados neste trabalho: um modelo bidimensional que incluiu as características fluidodinâmicas do escoamento gás particulado e a cinética de regeneração do catalisador pela queima do coque e um modelo tridimensional que contemplou apenas a fluidodinâmica do escoamento monofásico em uma geometria industrial. O processo de regeneração de catalisador FCC tem similaridades com o processo de queima de carvão mineral. A abordagem de dois fluidos foi utilizada pelo autor para descrever ambas as fases. A reação de queima de coque foi representada por uma equação cinética do tipo Arrhenius para a oxidação do carbono a CO e CO<sub>2</sub>, sendo um relação estequiométrica empregada para a determinação da razão entre os produtos formados.

LI et al. (2003) realizaram um estudo tridimensional em CFD, através da abordagem multifásica com o modelo Euleriano-Euleriano para a combustão de carvão. A preocupação dos autores foi prever a formação de NO<sub>x</sub>, de modo que algumas características especiais foram adotadas na simulação, tais como: uma versão do modelo de turbulência k- $\epsilon$ -kp modificado e um modelo de segunda ordem de momento para as taxas de reação. Segundo os autores, o modelo de turbulência modificado foi necessário devido à característica essencialmente anisotrópica do escoamento, o que o modelo k- $\epsilon$  regular não descreve adequadamente. Também foram apresentados dados cinéticos da reação de oxidação do carbono com oxigênio, para cada reação individualmente, ao invés de acopladas.

SHENG et al. (2004) utilizaram o pacote computacional Ansys Fluent para simular a queima de carvão. A abordagem Euleriana-Lagrangeana descreveu as fases gás e particulada respectivamente, enquanto a turbulência foi descrita através do modelo k- $\epsilon$ . As reações foram representadas através do modelo *Probability Distribution Function* (PDF). Os autores concluíram que, apesar dos resultados sobrestimarem as reações de queima, técnicas de CFD predisseram corretamente outros comportamentos do caso estudado.

WENDT (2004) realizou um estudo experimental e teórico da ignição de uma partícula de carvão mineral, como função da forma e tamanho. Um modelo unidimensional, baseado no trabalho de DU e ANNAMALAI (1994), foi desenvolvido considerando também os fenômenos de transferência de massa e calor no interior da partícula. Os resultados encontrados foram condizentes com os experimentos, sendo as diferenças atribuídas a incertezas na estrutura das amostras. Experimentos em microgravidade foram conduzidos com a finalidade de encontrar uma relação entre a forma da partícula e o processo de ignição. Os resultados destes experimentos mostraram que não há dependência em relação a forma.

ZHOU et al. (2004b) deram sequência ao estudo fluidodinâmico e analisaram a combustão de carvão mineral via simulação CFD através da abordagem Euleriana-Lagrangiana num leito fluidizado borbulhante. O modelo de turbulência LES foi adotado para a fase contínua. Um conjunto de reações homogêneas e heterogêneas descreveu a cinética de queima de carvão. Foi determinado que a contribuição de transferência de calor por colisões é baixa, menor que 5% do total transferido.

BENIM et al. (2005) reproduziram o comportamento hidrodinâmico de uma escala laboratorial de um separador de carvão pulverizado, através da abordagem Euleriana-Lagrangiana. Os autores estudaram a influência dos modelos de turbulência para as partículas, bem como o número de correntes de partículas injetadas no domínio. Devido a forma operacional, no reator havia duas saídas para os sólidos. A razão do fluxo mássico obtida numericamente entre elas foi validada por dados experimentais. Para as condições operacionais do sistema, foi determinado que a influência das partículas sobre o gás é desprezível. Do mesmo modo, a inclusão de um modelo de turbulência para as partículas não mostrou diferenças significativas no que diz respeito a característica divisória do escoamento.

MILIOLI e MILIOLI (2006) estudaram a dessulfuração de um gás com calcário em um sistema CFB por meio de técnicas de CFD. Os autores utilizaram a abordagem Euleriana-Euleriana para a descrição da fluidodinâmica do escoamento. Nas simulações, o leito fluidizado foi considerado como o domínio do estudo, inicialmente através de uma simulação em estado estacionário que serviu como condição inicial à simulação transiente, da qual os resultados finais foram obtidos. A reação de calcinação também foi contemplada através de uma cinética que obedecia a equação de Arrhenius. O tempo de residência da fase sólida foi o parâmetro chave na taxa de adsorção de  $\text{SO}_2$ , cuja predição ficou abaixo dos valores esperados. Os autores também

indicaram que a representação rigorosa da fluidodinâmica deve ser observada para que resultados aproximem-se do comportamento encontrado experimentalmente.

FILKOSKI et al. (2007) estudaram a queima do carvão pela abordagem Euleriana-Lagrangeana. Foram utilizados dois *softwares*, um desenvolvido pelo próprio grupo de pesquisa e outro comercial. Simulações tridimensionais transientes, representando a turbulência através do modelo k-épsilon, com reações de combustão modeladas de acordo com a abordagem PDF foram realizadas. A radiação também foi considerada através do modelo simplificado P-N, conhecido como P-1. Os resultados, quando comparados com dados experimentais mostraram-se bastante satisfatórios, prevendo corretamente os perfis de temperatura no equipamento. Houve variações entre os *softwares* utilizados, porém a opinião dos pesquisadores foi favorável à utilização do software comercial. A importância das técnicas de CFD também foi bastante destacada.

ASOTANI et al. (2007) estudaram a combustão de carvão pulverizado, processo cujo diâmetro das partículas é menor que aquelas usadas em CFBs. O foco do trabalho foi a ignição do carvão, ou seja, na importância da ordem dada a modelagem dos processos de devolatilização e de combustão. A maioria dos trabalhos apresentados na literatura considera que estas etapas são sequenciais, primeiramente ocorre a devolatilização e posteriormente a reação heterogênea do carvão, aqui considerada incompleta. Entretanto esta abordagem faz com que a ignição do carvão seja atrasada para os casos em que estas etapas se sobrepõem, como no estudo de carvão pulverizado apresentado pelos autores. Esta modelagem foi aplicada a um combustor do tipo *tangentially fired boiler*, de 40 MW, portanto considerado de porte comercial, com boas previsões de temperatura e composição de gases de saída.

MITCHELL et al. (2007) desenvolveram um modelo para prever as variações físicas em partículas de carvão em processo de queima. O modelo busca prever a taxa de reação, temperatura, diâmetro, densidade e área superficial durante todo o histórico da partícula. Entretanto apenas uma única partícula foi analisada, através de simulação numérica direta, não sendo levado em conta o equipamento como um todo. Estes estudos foram considerados fundamentais para a obtenção de conhecimento sobre o comportamento dos modelos matemáticos aplicados a sistemas particulados reativos, porém a transferência direta para simulações que também contemplem o escoamento multifásico completo ainda não se mostraram viáveis. Dos resultados obtidos pelos autores, notou-se que parâmetros que geralmente são considerados constantes nas simulações que utilizam CFD têm na verdade um comportamento não linear durante o processo de queima das partículas, como acontece por exemplo com o parâmetro

que relaciona a variação da massa específica em conjunto com o diâmetro devido a perda de massa do carvão.

SYRED et al. (2007) confrontou um importante aspecto da modelagem da queima de carvão mineral mas que geralmente é desconsiderado, o fracionamento e quebra das partículas em leitos fluidizados. É conhecido que a distribuição inicial de tamanhos de partículas, parâmetro determinado nos estudos de combustão, não se mantém ao longo do processo de queima. A fragmentação pode ocorrer principalmente devido a fatores como tensões térmicas, pressões localizadas devido à devolatilização ou ainda devido ao processo oxidativo que causa erosão à estrutura sólida, deixando-a frágil. Embora os mecanismos de quebra sejam conhecidos, um modelo geral não foi desenvolvido devido as grandes incertezas envolvidas no processo real, bem como a variações entre os diferentes tipos de carvão utilizados. Ainda assim, os autores buscaram implementar um modelo de fracionamento no modelo Lagrangeano do *software* comercial Ansys Fluent. Para tal fim, o estudo baseou-se no modelo de MITCHELL e AKANETUK (1996) incluindo uma série de simplificações, devidas tanto às limitações do *software* como ao tempo computacional necessário. Os autores ressaltam a dificuldade de implementar tal modelo e de validá-lo, uma vez que existem poucos dados experimentais de distribuição de diâmetros das partículas de carvão ao longo do processo de combustão. Mesmo assim, os resultados de composição de gases e temperatura obtidos foram favoráveis, mostrando que o modelo foi vantajoso para os sistemas estudados.

PALLARES e JHONSSON (2008) estudaram um modelo semi-empírico para mistura de diferentes tipos de materiais combustíveis. O foco do trabalho também foi colocado sobre a modelagem do processo de queima, com as etapas de evaporação da umidade, devolatilização e combustão heterogênea do carbono presente na partícula. Neste trabalho a fragmentação do sólido combustível também foi investigada, porém determinada através de uma taxa fixa, baseada em estudos de outros autores. O tamanho médio das partículas usadas foi de 8 mm, maiores do que as utilizadas por SYRED et al. (2007).

PAPADIKIS et al. (2008) apresentaram um dos únicos trabalhos em CFD encontrados que utiliza-se da abordagem Euler-Euler-Lagrange para um sistema gás-sólido, no qual o sólido é decomposto em um fluido Euleriano e uma partícula Lagrangeana. O sistema estudado foi um leito fluidizado borbulhante, o que fez com que os autores se preocupassem com uma modelagem modificada para o arraste da partícula discreta, dependendo da fração volumétrica do fluido ao seu redor. Para simplificar o problema, os autores utilizaram apenas uma partícula Lagrangeana,

cujo movimento no leito foi monitorado. As simulações mostraram que a partícula permaneceu durante todo o tempo no leito de areia, nunca subindo até a região diluída do escoamento. Além do arraste, a massa virtual também foi considerada, porém com a força de arraste sendo indicada como a principal envolvida na transferência de quantidade de movimento entre as fases.

DAS et al. (2008) realizaram um estudo experimental de perfil axial de concentração de sólidos ao longo de um leito fluidizado de LFC com diferentes sólidos. Partículas de catalisador de FCC, carvão, areia e minério de ferro foram fluidizadas individualmente e misturadas. A influência do diâmetro das partículas, da densidade, da taxa de recirculação de sólidos e da velocidade superficial do gás sobre o perfil de concentração de sólidos foram estudados. Para as condições operacionais utilizadas, foram encontrados os perfis clássicos que dividem o leito fluidizado em um fundo denso e uma região diluída.

HIGUERA (2008) procedeu com um estudo da influência do tamanho das partículas e da velocidade do escoamento da fase gasosa sobre a combustão de carvão mineral. Apesar do autor calcular apenas uma partícula, os resultados obtidos indicam que a taxa da reação aumenta com a velocidade da partícula enquanto que a temperatura da partícula permanece independente do tamanho e da velocidade, sendo apenas função da temperatura do gás e da concentração de oxigênio. Também foi concluído que o coeficiente de arraste não sofre influência pela presença de uma chama produzida pela camada de CO ao redor da partícula. A maior concentração de CO<sub>2</sub> ao redor das partículas apresenta apenas importância a altas temperaturas (acima de 1300 K), quando a reação endotérmica de gaseificação ocorre. A temperatura mínima para esta reação ocorrer diminui quando o tamanho da partícula aumenta.

WANG et al. (2009) trabalharam num leito fluidizado para modelar a gaseificação de carvão. A abordagem Euleriana para ambas as fases foi utilizada, sendo que a fase gás foi descrita pelo modelo de turbulência k- $\epsilon$ , ao passo que a fase particulada foi modelada através da Teoria Cinética do Escoamento Granular. As reações homogêneas e heterogêneas de pirólise e combustão foram consideradas, sendo descritas através do modelo híbrido *Arrhenius-Eddy Dissipation*, o qual calcula a taxa de reação sendo limitada conjuntamente pela cinética e pela mistura dos reagentes. A composição de saída dos gases de combustão calculados foi comparada com valores experimentais, mostrando boa concordância com estes.

PELTOLA (2009) estudou a dinâmica das partículas não reativas em uma unidade LFC piloto. Estes estudos envolveram a descrição experimental baseada em medições por imagens como fonte detalhada de dados para a validação de simulações através de CFD do leito. O autor

apresentou uma descrição detalhada da metodologia experimental empregada, apontando os pontos fortes e fracos da mesma. O código aberto OPENFOAM foi utilizado para descrever o escoamento gás-sólido através da abordagem de dois fluidos. Entretanto o leito experimental foi desenvolvido visando a simulação bidimensional do escoamento. Modificações foram propostas ao *solver* para torná-lo mais eficiente e condizente com os fenômenos físicos, porém os resultados ainda apresentaram diferenças com os valores medidos.

STURM et al. (2010) estudaram o escoamento em sistemas de transporte pneumático denso. A abordagem utilizada baseou-se no acoplamento entre as metodologias CFD para a fase fluida e DEM para a fase sólida. Deste modo foi possível para os autores simularem as características da fase sólida através da abordagem Lagrangeana levando em consideração as interações partícula-partícula ainda em conjunto com o escoamento do gás. Estes sistemas são computacionalmente intensivos, de modo que o número de partículas simuladas deve ser coerente. Assim sendo, os autores se valeram de algumas simplificações, como adoção de condições de contorno periódicas para realizar um estudo de um duto de escala industrial. O diâmetro das partículas estudadas foi relativamente grande, de 3,0 mm e 0,5 mm. Bons resultados foram alcançados, para perda de carga, fração de vazio e velocidade do leito. Detalhes na descrição do comportamento do sistema de transporte também foram identificados, como a pouca mistura entre as camadas de particulado.

WISCHNEWSKI et al. (2010) simularam um CFBC de grande porte através do emprego de um modelo semi-empírico tridimensional. Tanto a fluidodinâmica quanto as reações de queima de carvão e outros combustíveis foram estudadas. O modelo previu concentração de sólidos, composição do gás e temperaturas de forma bastante satisfatória, mostrando a importância da modelagem das reações homogêneas e heterogêneas para o balanço energético.

WANG et al. (2010b) realizaram um trabalho experimental para melhor entender a fluidodinâmica de um escoamento multifásico em um leito fluidizado de um LFC. As condições operacionais utilizadas pelos autores se aproximam muito com o trabalho de RAMIREZ-BEHAINE (2009), mostrando dados adicionais da fase particulada. Os autores também realizaram simulações com o modelo de arraste *Energy Minimization Multi-Scale* (EMMS) através do *software* MFIX. As simulações foram realizadas para duas configurações geométricas de saída, uma suave e outra abrupta, sendo que para a última uma maior concentração de sólidos no topo do leito fluidizado foi encontrada, confirmando resultados encontrados por JIN et al. (1988) para leitos fluidizados rápidos.

BERMÚDEZ et al. (2011) modelaram o processo de gaseificação de carvão mineral através de uma abordagem Lagrangeana para as partículas. Para o carvão com alto teor de cinzas estudado, um modelo que considera apenas a variação da temperatura e massa específica de cada partícula foi adotado. Os autores também consideraram as partículas como permanecendo esféricas, com diâmetro e massa específica das cinzas constantes. Esta hipótese somente é válida para carvões desta natureza. Como na maioria das simulações Lagrangeanas, a condutividade térmica do sólido foi considerada alto o suficiente para não haver gradientes internos de temperatura, de modo que as taxas de evaporação de umidade e devolatilização são uniformes em cada partícula. Os autores propuseram uma modelagem alternativa para a descrição no processo de gaseificação e combustão, tirando a ênfase dos parâmetros cinéticos, que não são bem conhecidos. Esta abordagem, apesar de ser baseada em experimentos de laboratório e não em uma unidade piloto ou industrial, foi validada com sucesso.

GHAREBAGHI et al. (2011) realizaram simulações CFD da combustão de carvão pulverizado através da abordagem Euleriana-Lagrangiana. Especial atenção foi dada para a modelagem da turbulência na fase contínua, tendo sido utilizado o modelo LES. Apesar do maior detalhamento do fenômeno da turbulência e da predição da chama, os resultados para temperatura encontrados foram similares aos obtidos com modelos RANS. Já para modelar o processo de queima das partículas de carvão, modelos convencionais de devolatilização e combustão do coque foram utilizados. Segundo os autores, uma análise mais detalhada dos sub-modelos empregados deve ser realizada para predições mais precisas.

LOPES et al. (2011) estudaram através de CFD o comportamento de um leito fluidizado de FCC, cujo material sólido classifica-se no grupo A de GELDART (1973). Além do estudo da fluidodinâmica do escoamento em geometria complexa, reações de craqueamento de óleos pesados em frações leves foram consideradas. As reações homogêneas foram representadas por equações cinéticas do tipo Arrhenius, não para os componentes individuais da mistura, mas sim pelo agrupamento destes em conjuntos representados por propriedades físicas e químicas médias. Também foi aplicada uma abordagem trifásica, considerando o sistema Euleriano-Euleriano-Lagrangeano, onde esta última fase representou a alimentação de óleos pesados que rapidamente se vaporizam. Deste modo, as partículas Lagrangeanas são calculadas apenas numa pequena região do domínio de controle, sendo logo transferidas para a fase contínua. Deste modo, bons resultados foram alcançados para a conversão dos grupos de componentes.

ZHOU et al. (2011) investigaram a modelagem e simulação por CFD de emissões de gases poluentes como o  $\text{NO}_x$  e o  $\text{SO}_x$  em leitos fluidizados circulantes alimentados com carvão. A abordagem de dois fluidos foi utilizada para um leito fluidizado bidimensional. Uma condição de contorno de temperatura constante foi utilizada para as paredes, porém foram adicionados termos fontes para corrigir a curvatura para uma representação 2D plana. Cinéticas da literatura foram utilizadas para a representação dos compostos nitrogenados. A adição de calcário também foi estudada, sendo determinada sua influência sobre a concentração final de  $\text{SO}_2$ .

HASHIMOTO et al. (2012) desenvolveram um novo modelo para representar a devolatilização do carvão mineral, denominado processo de devolatilização tabulado. Nesta proposta, uma base de dados foi montada incluindo históricos de temperatura e parâmetros de devolatilização, que foram então empregados a cada passo de tempo numa simulação transiente em CFD. Os resultados mostraram que houve diferença entre os modelos convencionais e o modelo proposto, que apresentou maior grau de precisão na validação com dados experimentais.

CHANG et al. (2012) estudaram a transferência térmica em um leito fluidizado turbulento denso. Em especial, foi modelada a transferência de calor entre as partículas de classes distintas. Simulações Euleriana-(n)Euleriana foram realizadas com o modelo proposto. Os autores concluíram que a transferência térmica partícula-partícula em relação a transferência gás-partícula ficou na faixa de 1,27% a 3,09% confirmando a simplificação adotada por outros trabalhos que consideram este fenômeno desprezível.

Com esta revisão buscou-se conhecer o caminho já trilhado por outros pesquisadores e identificar as lacunas pouco estudadas que pudessem ser melhor investigadas neste trabalho. O que se encontrou foram trabalhos com variadas abordagens para a representação do processo de queima de carvão em leitos fluidizados, cada qual com suas hipóteses simplificadoras e que levaram a resultados mais ou menos promissores. Neste contexto, foram verificados poucos trabalhos que levam em conta mais de uma fase sólida na simulação numérica pelas técnicas de CFD, aspecto este que foi avaliado neste estudo.

### **3 Materiais e Métodos**

No âmbito da fluidodinâmica computacional são utilizadas equações de transporte, de caráter genérico, para descrever a ação das forças motrizes que buscam restaurar o equilíbrio do sistema. Além destas, são utilizadas equações constitutivas, geralmente de base empírica, adicionadas à modelagem para o fechamento das lacunas dos modelos teóricos. Neste capítulo são descritos com detalhes os casos de estudo desta tese. Também mostra-se o modo pelo qual o problema estudado é abordado, quais os modelos utilizados para descrever cada aspecto dos fenômenos físicos e químicos envolvidos no processo de queima de carvão mineral em leito fluidizado rápido.

### 3.1 Unidade Experimental

A unidade experimental para queima de carvão mineral instalada no Laboratório de Processos Térmicos e Engenharia Ambiental (ProTEA) da Faculdade de Engenharia Mecânica da UNICAMP foi utilizada como base para este estudo numérico. Esta unidade foi projetada para operar no regime de leito fluidizado circulante. A operação da unidade e obtenção dos dados experimentais foram reportados em detalhes por RAMIREZ-BEHAINNE (2007) em sua tese. Na Figura 4 é apresentado um esquema simplificado da unidade principal.

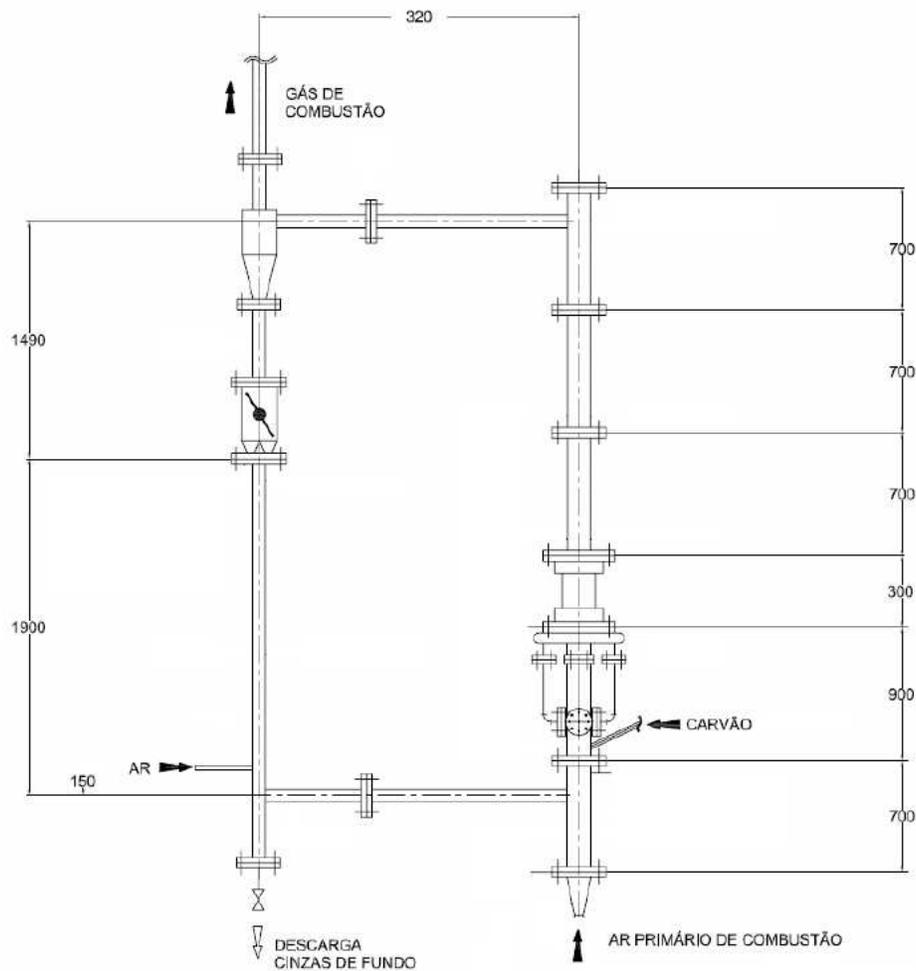


Figura 4. Esquema da unidade de combustão de carvão, adaptado de RAMIREZ-BEHAINNE (2007), com cotas dadas em mm.

O funcionamento do LFC é bastante simples e é explicado resumidamente. Esta unidade consiste de um circuito fechado, composto por uma coluna principal ou leito fluidizado, no qual

forma-se o leito fluidizado e onde as partículas de carvão são alimentadas através de uma rosca sem-fim. Ar pré-aquecido é fornecido na base do leito fluidizado por um compressor do tipo *roots*. Na saída do leito fluidizado há um ciclone tangencial, que separa e despeja os sólidos, conduzindo-os por um *standpipe*. Estes se acumulam na base, formando um leito denso, o que força as partículas a entrarem novamente no leito fluidizado, passando por uma válvula do tipo L. Medidores de temperatura e pressão foram instalados ao longo do leito fluidizado e em outros pontos de interesse no sistema. Também foram coletados dados de concentração de componentes da fase gasosa na saída da chaminé. Todo o circuito foi fabricado em aço inoxidável AISI 310 e foi isolado termicamente por manta cerâmica, restringindo as perdas térmicas a valores aceitáveis. Ainda, o particulado fino que escapa do sistema é coletado por um filtro mangas.

### 3.2 Caracterização dos Materiais

Três materiais granulares distintos são alimentados no sistema: areia do tipo quartzosa que é um material inerte necessário para a estabilidade térmica e dinâmica do sistema, calcário tipo dolomítico, como absorvente de  $SO_2$ , além do carvão mineral, o combustível de interesse deste estudo.

A Tabela 2 mostra as propriedades da areia industrial quartzosa. O principal objetivo em alimentar a areia ainda na fase de pré-aquecimento é promover a uniformidade térmica do circuito, evitando zonas frias que possam dificultar a ignição do carvão. Também insere-se maior massa deste material frente ao combustível, com o intuito de promover o correto balanço de pressão no sistema e fluxo de partículas, obrigando estas a descerem pelo *standpipe* e retornarem ao leito fluidizado sem qualquer equipamento mecânico móvel.

Tabela 2. Propriedades físicas do material inerte, areia quartzosa, segundo RAMIREZ-BEHAINNE (2007).

Massa específica, $\rho$	2680 kg/m <sup>3</sup>
Calor específico, $C_p$	830 J/kg.K
Diâmetro médio de Sauter, $d$	353 $\mu$ m
Classificação de Geldart	Grupo B

A areia utilizada pertence ao grupo B da classificação de GELDART (1973). Apesar desta classificação de fluidização para sólidos ter sido obtida a temperaturas ambientes, YANG (2006) a revisou para temperaturas mais elevadas e propôs uma classificação corrigida. Mesmo nesta nova classificação, verificou-se que as partículas de areia permanecem no grupo B.

O material absorvente de SO<sub>2</sub>, a dolomita, é composto não apenas de carbonato de cálcio, mas também de carbonato de magnésio. A absorção do dióxido de enxofre é devida apenas ao cálcio, de modo que o teor deste elemento havia sido utilizado nos balanços que determinaram a quantidade a ser alimentada no sistema misturada ao carvão. A Tabela 3 mostra as propriedades físicas e químicas da dolomita.

Tabela 3. Propriedades físicas e análise elementar do material absorvente, dolomita, segundo RAMIREZ-BEHAINNE (2007).

Massa específica, $\rho$	1203 kg/m <sup>3</sup>
Diâmetro médio de Sauter, $d$	111 $\mu$ m
Classificação de Geldart	Grupo A
Composição elementar em massa:	
Cálcio	0,17
Magnésio	0,081

Por outro lado, o material combustível escolhido foi o carvão mineral oriundo de Criciúma em Santa Catarina. Este carvão é considerado de baixa qualidade, uma vez que apresenta baixo teor de carbono e alto teor de cinzas. A composição química do carvão foi determinada através de uma análise elementar, enquanto uma análise imediata forneceu informações sobre os grupos de materiais e o poder calorífico liberado pela queima do mesmo, conforme Tabela 4.

Tabela 4. Propriedades físicas, análise elementar e análise imediata do material combustível, carvão mineral.

Massa específica, $\rho$	1586 kg/m <sup>3</sup>
Diâmetro médio de Sauter, $d$	431 $\mu$ m
Classificação de Geldart	Grupo B
Composição elementar em massa <sup>#,*</sup> :	
Carbono	0,8081
Hidrogênio	0,0548
Oxigênio	0,0859
Nitrogênio	0,0183
Enxofre	0,0329
Composição imediata em massa:	
Carbono fixo*	0,3586
Material volátil*	0,2470
Cinzas*	0,3944
Umidade	0,0062
Poder Calorífico Inferior	19.580 kJ/kg

# Livre de cinzas, \* Base seca

As análises elementares e imediatas deste carvão haviam sido determinadas por MORITA (2009), baseado em análises realizadas pelo Instituto de Química e pelo Laboratório Didático da Faculdade de Engenharia Mecânica, ambos da Universidade Estadual de Campinas bem como pelas análises realizadas pelo CIENTEC do Rio Grande do Sul em relatório de ensaio número 7308/18686 de 2003. O Poder Calorífico Inferior foi obtido por RAMIREZ-BEHAINNE (2007).

A distribuição granulométrica dos materiais sólidos é apresentada de forma resumida na Figura 5. A areia apresenta a menor faixa de distribuição, sendo um material de tamanho uniforme, enquanto o carvão e a dolomita apresentam uma distribuição mais ampla. Ainda assim, o diâmetro médio de Sauter da areia e carvão são mais próximos e maiores aos da dolomita.

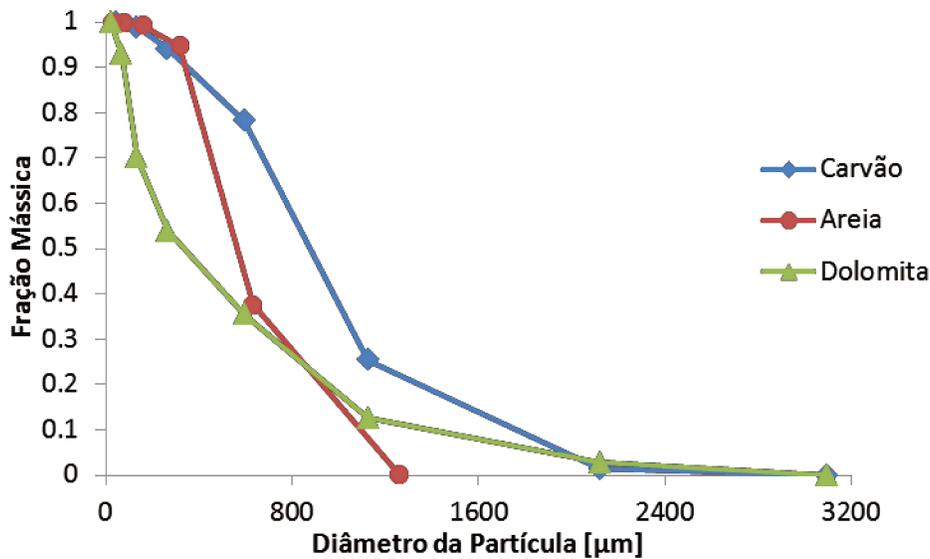


Figura 5. Distribuição granulométrica do carvão mineral, areia e dolomita, conforme dados de RAMIREZ-BEHAINNE (2007).

### 3.3 Modelagem Matemática

Inicialmente foi definido que o volume de controle a ser aplicado ao sistema de CFBC deveria restringir-se somente ao leito fluidizado, uma vez que a simulação numérica detalhada de todo o *loop* exigiria um tempo computacional inviavelmente elevado, devido principalmente a presença do ciclone, cujo escoamento rotacional requer modelos mais avançados de turbulência (DIAS et al. 2008). O *standpipe* e a válvula-L também apresentam seus desafios, uma vez que estes operam com leitos densos, o que acarretaria inclusão de modelos complementares para colisão entre partículas de sólidos no caso da descrição discreta da fase particulada, tornando possivelmente necessária a inclusão da metodologia DEM (SIMSEK et al. 2012), também muito custosa computacionalmente.

Após determinado o objeto de estudo, partiu-se para a busca da melhor forma para reproduzir os fenômenos físicos associados ao escoamento multifásico reativo a altas temperaturas, inerentes à operação do LFC para queima de carvão mineral. Deste modo, este estudo foi dividido em duas etapas. Numa primeira fase, foi buscada a representação apenas do escoamento multifásico a altas temperaturas, sem no entanto considerar os fenômenos de transferência de massa entre as fases e o transporte de espécies químicas. Esta etapa foi validada com dados experimentais obtidos do trabalho de RAMIREZ-BEHAINNE (2007) na fase de pré-combustão, ou seja, com o conjunto inerte e gases circulando a temperaturas em torno de 673 K.

Uma vez escolhida a modelagem da fluidodinâmica, procedeu-se à determinação do modo como seria incluído o carvão mineral e de qual forma seriam introduzidas as reações homogêneas e heterogêneas resultantes do processo de queima de particulados. Buscou-se reproduzir os experimentos realizados por RAMIREZ-BEHAINNE (2007) na mesma unidade, agora operada no processo de combustão. O grande desafio da presente pesquisa consistiu na passagem da primeira para a segunda etapa, uma vez que a complexidade dos fenômenos envolvidos elevou-se consideravelmente.

Com o intuito de facilitar a leitura, denominou-se *Caso 1* o caso da primeira etapa e *Caso 2* o caso da segunda etapa. Pormenores das condições de operação e da modelagem matemática e numérica para cada caso são apresentados a seguir.

### **3.3.1 Caso 1: Modelagem Sem Reação Química**

A abordagem denominada de modelo de dois fluidos (Euleriano-Euleriano) foi utilizada para representar o escoamento multifásico neste estudo sem reações químicas. Simulações por técnicas de CFD permitem que o escoamento em qualquer geometria possa ser estudado. Para que as equações possam ser discretizadas espacialmente através do Método dos Volumes Finitos (MVF), torna-se necessário desenhar uma malha numérica para a geometria proposta. Em cada volume de controle da malha gerada as equações de transporte de massa, quantidade de movimento e energia devem ser integradas. Equações adicionais específicas para o tipo de escoamento estudado, chamadas de equações constitutivas, são acrescentadas a modelagem do problema. Para o sistema proposto de um leito fluidizado circulante, no qual escoam gás e sólidos particulados, modelos de turbulência, propriedades da fase particulada bem como troca de calor entre as fases foram agregadas à modelagem matemática do caso.

O equacionamento matemático do escoamento estudado é apenas apresentado, uma vez que todos os modelos utilizados estão disponíveis na literatura. Para uma discussão mais aprofundada sobre o desenvolvimento e tratamento das equações sugere-se os trabalhos de MEIER (1998), PEIRANO e LECKNER (1998) e MALISKA (2004).

A equação da continuidade para uma fase  $i$ , que pode ser tanto gás com sólido, é dada pela Equação (1) abaixo:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_i \rho_i) + \nabla \cdot (\varepsilon_i \rho_i \bar{u}_i) = 0 \quad (1)$$

Onde  $\varepsilon$  é a fração volumétrica,  $\rho$  é a massa específica,  $t$  é o tempo e  $\bar{u}$  é o vetor velocidade.

A equação da quantidade de movimento para a fase gás é expressa pelo balanço de forças aplicado a um volume de controle, que na forma diferencial pode ser expresso pela Equação (2).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g \bar{u}_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \bar{u}_g \bar{u}_g) = -\varepsilon_g \nabla p_g + \nabla \bar{T}_g + \varepsilon_g \rho_g \bar{g} + \beta_{gs}^m (\bar{u}_s - \bar{u}_g) \quad (2)$$

Onde  $\bar{g}$  é o vetor da força da gravidade,  $p$  é a pressão e  $\beta_{gs}^m$  é o termo de transferência de quantidade de movimento entre as fases, para um caso multifásico.

A massa específica do gás é função da composição do gás, além da temperatura e pressão. Como as condições de operação que serão estudadas encaixam-se numa região de pressões moderadas e temperaturas moderadas a elevadas, a equação de gás ideal é utilizada para prever esta característica como uma média da propriedade de cada componente puro da fase gasosa, conforme Equação (3).

$$\frac{1}{\rho_g} = \frac{RT}{p} \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_i} \quad (3)$$

Já o tensor tensão da equação de quantidade de movimento para um fluido Newtoniano é dado pela Equação (4).

$$\bar{T}_g = \varepsilon_g \mu_g \left( (\nabla \bar{u}_g + (\nabla \bar{u}_g)^T) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \bar{u}_g) \bar{I} \right) \quad (4)$$

Onde  $\mu$  é a viscosidade dinâmica do fluido. Esta viscosidade é função da temperatura e é determinada a partir da correlação empírica de Sutherland (SUTHERLAND e MAASS, 1932). Os autores utilizaram-se de dados até 550 K para obter esta correlação, Equação (5).

$$\mu_g = \frac{C_1 T^{\frac{3}{2}}}{T + C_2} \quad (5)$$

sendo que para ar  $C_1 = 1,458 \cdot 10^{-6} \text{ kg/m.s.K}^{1/2}$  e  $C_2 = 110,4 \text{ K}$ .

Entretanto estudos posteriores expandiram os dados da faixa de temperatura e novas correlações foram propostas, como por exemplo por LO et al. (1966), Equação (6).

$$\mu_g = C_1 (C_2 T - C_3)^{\frac{5}{9}} \quad (6)$$

onde  $C_1$ ,  $C_2$  e  $C_3$  são constantes cujos valores são  $4,38 \cdot 10^{-2}$ ,  $1,01 \cdot 10^{-3}$  e  $9,3 \cdot 10^{-2}$  respectivamente. A viscosidade é obtida em centiPoises e temperatura em Kelvin por esta correlação.

Ainda assim, valores muito próximos são obtidos a altas temperatura pela correlação proposta por Sutherland, Figura 6, de modo que esta foi utilizada para prever o comportamento da viscosidade do fluido gasoso.

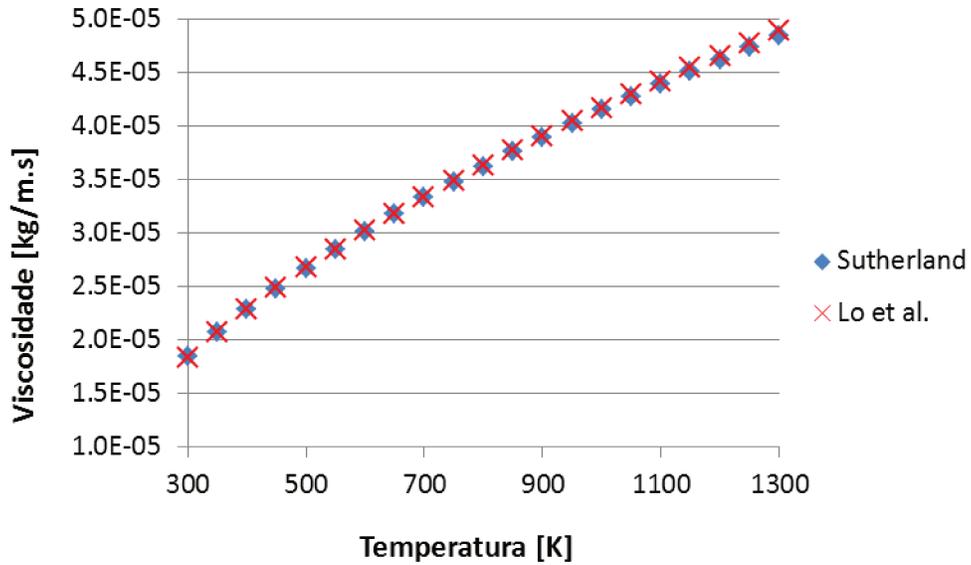


Figura 6. Comparação das correlações de Sutherland e Lo et al. para a viscosidade em função da temperatura.

Já para a fase sólida, a Equação (7) expressa o balanço de quantidade de movimento.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\epsilon_s \rho_s \bar{u}_s) + \nabla \cdot (\epsilon_s \rho_s \bar{u}_s \bar{u}_s) = \nabla \cdot \bar{T}_s + \epsilon_s \rho_s \bar{g} + \theta_{gs}^m (\bar{u}_g - \bar{u}_s) \quad (7)$$

A descrição do tensor tensão  $\bar{T}_s$ , apresentado na Equação (8), necessita de equações de fechamento para ser computado. Quando colisões entre partículas dominam o escoamento, uma analogia com a teoria cinética dos gases pode ser utilizada. Deste modo, a Teoria Cinética do Escoamento Granular (KTGF), que fornece equações constitutivas para a viscosidade e a pressão da fase sólida é aplicada. Vários autores desenvolveram modelos dentro desta teoria, sendo que os utilizados neste trabalho são apresentados com mais detalhes nas Equações (9) a (16).

$$\bar{T}_s = (-p_s + \lambda_s \nabla \cdot \bar{u}_s) \bar{I} + \mu_s \left( (\nabla \bar{u}_s + (\nabla \bar{u}_s)^T) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \bar{u}_s) \bar{I} \right) \quad (8)$$

Onde  $\lambda_s$ , a viscosidade da fase s3lida devido a colis3es de part3culas e  $\mu_s$ , a viscosidade din4mica da fase s3lida, s3o dadas pelas Equa3es (9) e (10) propostas por LUN et al. (1984) e GIDASPOW (1994) respectivamente.

$$\lambda_s = \frac{4}{3} \varepsilon_s^2 \rho_s d_s g_o (1+e) \sqrt{\frac{\vartheta}{\pi}} \quad (9)$$

$$\mu_s = \frac{4}{5} \varepsilon_s \rho_s d_s g_o (1+e) \left(\frac{\vartheta}{\pi}\right)^{1/2} + \frac{\varepsilon_s \rho_s d_s \sqrt{\vartheta \pi}}{6(3-e)} \left(1 + \frac{2}{5} (1+e)(3e-1) \varepsilon_s g_o\right) \quad (10)$$

O coeficiente de restitui33o,  $e$ , 3 uma medida da energia dissipada pela colis3o entre part3culas da mesma fase. O valor de 0,9 foi utilizado, conforme estudo de JIRADILOK et al. (2006). Na modelagem da viscosidade da fase dispersa, a temperatura granular,  $\vartheta$ , 3 o termo relacionado com as flutua3es da energia cin3tica turbulenta da part3cula, conforme Equa33o (11).

$$\vartheta = \frac{1}{3} u_s'^2 \quad (11)$$

Realizando um balan3o para a temperatura granular, chega-se a Equa33o de transporte (12).

$$\frac{3}{2} \left( \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s \vartheta) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \bar{u}_s \vartheta) \right) = (-\rho_s \bar{T} + \bar{T}_s) : \nabla \bar{u}_s + \nabla \cdot (k_\vartheta \nabla \vartheta) - \gamma_\vartheta + \varphi_{gs} \quad (12)$$

O primeiro termo do lado direito representa a gera33o de energia pelo tensor tens3o da fase s3lida, o segundo termo a difus3o de energia, o terceiro termo a dissipac3o por colis3o part3cula-part3cula de energia e o 3ltimo termo a dissipac3o ou produ33o de temperatura granular causada pela influ3ncia da fase gasosa sobre as part3culas. Entretanto, conforme apontado por VAN WACHEN (2000), 3 comum simplificar o balan3o para uma express3o alg3brica, Equa33o (13),

desconsiderando os termos convectivos e difusivos da Equação (12), uma vez que os termos de dissipação e produção são dominantes nas regiões densas do escoamento.

$$O = (-\rho_s \vec{I} + \vec{T}_s) : \nabla \vec{u}_s - \gamma \vartheta \quad (13)$$

Há ainda o termo da função de distribuição radial,  $g_o$ , relacionado ao empacotamento máximo do sólido em questão. Para partículas em leitos fluidizados, o valor de 0,63 é adotado para o empacotamento máximo, conforme ANSYS FLUENT (2009), e a função proposta por OGAWA et al. (1980) é aplicada para a determinação da distribuição radial.

$$g_o = \left( 1 - \left( \frac{\epsilon_s}{\epsilon_{s,max}} \right)^{1/3} \right)^{-1} \quad (14)$$

Por outro lado, o termo para descrever a pressão da fase sólida,  $p_s$ , é dado pela soma da pressão devido a contribuição cinética e a colisional,  $p_s^{k+t}$  Equação (15) segundo LUN et al. (1984), e pela pressão em escoamentos densos,  $p_s^f$ , Equação (16) por JOHNSON e JACKSON (1987).

$$p_s^{k+t} = \rho_s \epsilon_s [1 + 2(1 + e)\epsilon_s g_o] \vartheta \quad (15)$$

$$p_s^f = Fr \frac{(\epsilon_s - \epsilon_{s,min})^n}{(\epsilon_{s,max} - \epsilon_s)^p} \quad (16)$$

Onde as constantes  $Fr = 0,05$ ,  $n = 2$ ,  $p = 3$  e  $\epsilon_{s,min} = 0,55$  conforme sugerido por VAN WACHEN (2000).

Um aspecto de fundamental importância para a modelagem de escoamentos multifásicos é o termo que representa a interação entre as fases.  $\theta_{gs}^m$  pode ser decomposto em mais termos, cada qual com sua contribuição. Para escoamentos gás-sólido as forças de arraste, empuxo, massa

virtual, forças de Brownian e de Saffman, além da termoforese podem ocorrer. Entretanto, dentre as forças atuantes sobre os sólidos, apenas a gravidade e o arraste contribuem significativamente para partículas dos grupos A e B de Geldart operadas em leitos fluidizados (PROSPERETTI e TRYGGVASON, 2007), de modo que apenas o arraste é considerado no termo de interação entre as fases.

Trabalhos anteriores em leitos fluidizados (BASTOS et al. 2008, HODAPP 2009) também se preocuparam em modelar o balanço de forças interfásicas, tendo sido considerada somente a força de arraste. Várias propostas de correlações estão disponíveis na literatura, algumas baseadas em dados empíricos, outras apenas em dados simulados. Uma das mais difundidas é a proposta por GIDASPOW (1994), também utilizada neste trabalho, a qual utiliza a correlação de Ergun para regiões densas e a correlação de Wen e Yu para locais com baixa concentração de sólidos. Deste modo, o arraste para  $\varepsilon_g \leq 0,8$  é calculado por:

$$\theta_{gs}^m = 150 \frac{\varepsilon_s^2 \mu_g}{\varepsilon_g d_s^2} + 1,75 \frac{|\vec{U}_s - \vec{U}_g| \varepsilon_s \rho_g}{d_s} \quad (17)$$

E quando  $\varepsilon_g > 0,8$  corrigido para a presença de mais partículas:

$$\theta_{gs}^m = \frac{3}{4} C_D \frac{|\vec{U}_s - \vec{U}_g| \varepsilon_s \rho_g}{d_s} \varepsilon_g^{-2,65} \quad (18)$$

O coeficiente de arraste  $C_D$  é relacionado ao número de Reynolds da partícula pela seguinte expressão:

$$C_D = \frac{24}{Re} (1 + 0,15 Re^{0,687}) \quad \text{para } Re_s < 1000 \quad (19)$$

$$C_D = 0,44 \quad \text{para } Re_s \geq 1000 \quad (20)$$

Onde o número de Reynolds para a partícula é dado por:

$$Re_s = \frac{|\vec{u}_s - \vec{u}_g| \rho_g d_p}{\mu_g} \quad (21)$$

Para escoamentos com altos valores de Reynolds, a turbulência é uma característica que se torna natural e não pode ser evitada. Diversos modelos matemáticos já estabelecidos para a representação da turbulência em escoamentos fluidos são introduzidos por vários autores como McCOMB (1990), GARDE (1994), FERZIGER e PERIC (2002). Já a modelagem da turbulência em escoamentos multifásicos torna-se significativamente mais complexa do que em um caso monofásico. ENWALD et al. (1996) e posteriormente PEIRANO e LECKNER (1998) publicaram extensas revisões de modelagens para escoamentos gás-sólido que contemplam a descrição da turbulência. Para o caso de escoamentos com uma fase secundária diluída, onde as colisões entre partículas podem ser negligenciadas, o processo dominante das flutuações turbulentas da fase secundária é devido à influência provocada pela turbulência da fase primária. Deste modo, a representação da turbulência na fase secundária pode ser relacionada com propriedades da fase contínua e ao tempo de relaxação das partículas.

Através da aplicação de médias de Reynolds sobre as equações de Navier-Stokes (equações RANS) é possível obter equações de conservação válidas para representar escoamentos turbulentos. Deste modo após a realização de tal operação na equação de quantidade de movimento, Equação (2), o único termo novo gerado é conhecido como tensão de Reynolds e precisa ser constituído para que o modelo seja fechado e passível de solução.

O tensor de Reynolds para os modelos que se baseiam na relação turbulência-viscosidade depende da seguinte equação:

$$\vec{T}_g = -\frac{2}{3}(\rho_g K_g + \rho_g \nu_{t,g} \nabla \cdot \vec{u}_g) \vec{I} + \rho_g \nu_{t,g} (\nabla \vec{u}_g + (\nabla \vec{u}_g)^T) \quad (22)$$

Onde  $K_g$  é energia cinética turbulenta e define-se  $\nu_{t,g}$  como a viscosidade turbulenta cinemática do gás. Deste modo é possível reduzir o problema de seis componentes do tensor de Reynolds para apenas um, o escalar viscosidade turbulenta (FOX 2003).

Para descrever a variação da viscosidade turbulenta por todo o domínio, há uma categoria de modelos que se baseiam em equações de transporte. Dentre estes, o modelo de duas equações  $k$ -épsilon ( $K$ - $E$ ) é utilizado para modelar a turbulência no escoamento multifásico estudado. Neste modelo as flutuações turbulentas são descritas pelo balanço do transporte da produção e da dissipação de energia cinética turbulenta. De acordo com a Hipótese de Boussinesq, uma analogia é feita entre a transferência da quantidade de movimento e o transporte cinético molecular, de modo que o fluxo é proporcional ao gradiente de velocidade. Para relacionar os efeitos da turbulência no escoamento, é adicionado um termo de viscosidade turbulenta que reúne estas flutuações e é adicionado a viscosidade do fluido da fase contínua.

O modelo  $K$ - $E$  originalmente proposto, também denominado padrão, foi posteriormente modificado para representar com mais precisão escoamentos turbulentos. Uma destas modificações propostas leva o nome de  $K$ - $E$  RNG e é adotado para o presente trabalho. Nesta versão do modelo  $K$ - $E$ , a viscosidade turbulenta é escrita como função da energia cinética turbulenta, conforme Equação (23), para altos números de Reynolds.

$$\mu_{t,g} = \rho_g C_\mu \frac{K_g^2}{E_g} \quad (23)$$

Onde  $E_g$  é o termo da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta e  $C_\mu$  é uma constante do modelo.

Por outro lado, para baixos números de Reynolds o modelo RNG utiliza uma expressão diferencial (Equação (24)) para o cálculo da viscosidade efetiva, diferentemente do  $K$ - $E$  padrão apropriado apenas para altos números de Reynolds.

$$d\left(\frac{\rho_g^2 K_g}{\sqrt{E_g \mu_g}}\right) = 1,72 \frac{\hat{\mu}}{\sqrt{\hat{\mu}^3 - 1 + C_{\hat{\mu}}}} d\hat{\mu} \quad (24)$$

Onde  $\hat{\mu}$  é a razão entre a viscosidade efetiva e a viscosidade dinâmica. A integração de  $\hat{\mu}$  permite uma descrição mais precisa do efeito da variação do número de Reynolds sobre o escoamento turbulento, além de melhorar a descrição próximo a paredes.

O tempo característico dos turbilhões turbulentos,  $\tau$ , é definido como:

$$\tau_{t,g} = \frac{3}{2} C_{\mu} \frac{K_g}{E_g} \quad (25)$$

A escala de comprimento para os turbilhões,  $L$ , é dado por:

$$L_{t,g} = \sqrt{\frac{3}{2}} C_{\mu} \frac{K_g^{3/2}}{E_g} \quad (26)$$

Para o cálculo da turbulência, as variáveis  $K$  e  $E$  são transportadas através das Equações (27) e (28) respectivamente.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_g \rho_g K_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \bar{u}_g K_g) = \nabla \cdot (\varepsilon_g \xi_K \hat{\mu}_{t,g} \nabla K_g) + \varepsilon_g G_{K,g} - \varepsilon_g \rho_g E_g + \varepsilon_g \rho_g \Pi_{K_g} \quad (27)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_g \rho_g E_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \bar{u}_g E_g) = \nabla \cdot (\varepsilon_g \xi_E \hat{\mu}_{t,g} \nabla E_g) + \varepsilon_g \frac{E_g}{K_g} C_{1E} (G_{K,g} + C_{3E} - C_{2E} \rho_g) - R_E + \varepsilon_g \rho_g \Pi_{E_g} \quad (28)$$

Onde  $\Pi$  é o termo de interação e representa a influência da fase dispersa sobre a fase contínua,  $G_{K,g}$  é a produção de energia cinética turbulenta,  $C_{1E}$  e  $C_{2E}$  são constantes do modelo. Os termos  $\xi_K$  e  $\xi_E$  representam o inverso do número efetivo de Prandtl e são calculados pela Equação (29).

$$\left| \frac{\xi - 1,3929}{\xi_0 - 1,3929} \right|^{0,6321} \left| \frac{\xi - 2,3929}{\xi_0 - 2,3929} \right|^{0,3679} = \frac{\mu_g}{\mu_{ef}} \quad (29)$$

Para altos números de Reynolds a relação entre  $\mu_g$  e  $\mu_{ef}$  é muito menor que a unidade.

O termo  $\prod_{K_g}$  pode ser derivado a partir da equação instantânea da fase contínua, conforme Equação (30), onde o termo  $K_{gs}$  é o coeficiente de transferência turbulento.

$$\prod_{K_g} = \sum_{p=1}^M \frac{K_{gs}}{\varepsilon_g \rho_g} (K_{gs} - 2K_g + \vec{U}_{rel} \cdot \vec{U}_{dr}) \quad (30)$$

Onde a velocidade relativa é dada pela Equação (31).

$$\vec{U}_{rel} = \vec{U}_s - \vec{U}_g - \vec{U}_{dr} \quad (31)$$

De acordo com SIMONIN (1990) a velocidade *drift* ( $\vec{U}_{dr}$ ) representa a dispersão das partículas pelas grandes escalas turbulentas da fase gasosa, através da correlação entre as flutuações de velocidade da fase gasosa e a distribuição espacial do sólido particulado.

$$\vec{U}_{dr} = - \left( \frac{D_{ts}}{\omega_{sg} \varepsilon_s} \nabla \varepsilon_s - \frac{D_{tg}}{\omega_{sg} \varepsilon_g} \nabla \varepsilon_g \right) \quad (32)$$

Onde os termos  $D_{ts}$  e  $D_{tg}$  são coeficientes de dispersão e  $\omega_{sg}$  é o número de Prandtl turbulento. Esta equação é obtida assumindo que o sólido esteja suspenso em um fluido cuja turbulência seja isotrópica. Se a turbulência fosse modelada anisotropicamente, os coeficientes de dispersão seriam substituídos por tensores.

Já o termo  $\prod_{\varepsilon_g}$  é dado pela Equação (33).

$$\Pi_{E_g} = C_{3E} \frac{E_g}{K_g} \Pi_{K_g} \quad (33)$$

Ainda na Equação (29) o termo  $R_E$  é uma das principais diferenças entre os modelos K-E RNG e K-E padrão. Este termo é expresso conforme Equação (34).

$$R_E = \frac{C_\mu \rho_g \eta^3 \left(1 - \frac{\eta}{\eta_0}\right) E_g^2}{K_g (1 + \beta_t \eta^3)} \quad (34)$$

Sendo que a constante  $\beta_t$  é relacionada com a constante de von Kármán e  $\eta$  representa uma relação entre a escala de tempo turbulenta e a escala de tempo média das tensões ( $S$ ), conforme YAKHOT et al. (1992). Esta última é representada pela Equação (35).

$$\eta = S \frac{K_g}{E_g} \quad (35)$$

A turbulência na fase dispersa é baseada no cálculo de escalas de tempo e comprimento que caracterizam o movimento do particulado. Assim, o tempo de relaxação de uma partícula, em ligação com os efeitos inerciais é dado pela Equação (36).

$$\tau_{sg} = \frac{\varepsilon_s \rho_g}{B_{sg}} \left( \frac{\rho_s}{\rho_g} + C_V \right) \quad (36)$$

Ao passo que a escala de tempo integral Lagrangeana calculada para a trajetória das partículas é definida pela Equação (37).

$$\tau_{t,sg} = \frac{\tau_{t,g}}{\sqrt{(1 + C_\theta \zeta^2)}} \quad (37)$$

Onde

$$\zeta = \frac{|\bar{U}_{gs}| \tau_{t,g}}{L_{t,g}} \quad (38)$$

E a constante  $C_\theta$ :

$$C_\theta = 1,8 - 1,35 \cos^2 \psi \quad (39)$$

Na qual  $\psi$  é o ângulo entre a velocidade média da partícula e a velocidade média relativa partícula/gás. A razão entre os dois tempos característicos é dada pela Equação (40).

$$\eta_{sg} = \frac{\tau_{t,sg}}{\tau_{sg}} \quad (40)$$

Os termos turbulentos para a fase dispersa são expressos de acordo com SIMONIN e VIOLLET (1990), conforme Equações (41) a (45).

$$K_s = K_g \left( \frac{b^2 + \eta_{sg}}{1 + \eta_{sg}} \right) \quad (41)$$

$$K_{sg} = 2K_g \left( \frac{b + \eta_{sg}}{1 + \eta_{sg}} \right) \quad (42)$$

$$D_{t,sg} = \frac{1}{3} K_{sg} \tau_{t,sg} \quad (43)$$

$$D_s = D_{t,sg} + \left( \frac{2}{3} K_s - \frac{1}{3} b K_{sg} \right) \tau_{F,sg} \quad (44)$$

$$b = (1 + C_v) \left( \frac{\rho_s}{\rho_g} + C_v \right)^{-1} \quad (45)$$

Com exceção de  $C_{3E}$  e  $\omega_{sg}$ , as outras constantes têm seus valores idênticos ao do modelo K-E RNG monofásico. Os valores adotados para as constantes são apresentados na Tabela 5.

Tabela 5. Valores dos parâmetros do modelo de turbulência multifásica adotado.

Parâmetro	Valor	Equação
Constante do Modelo K-E, $C_\mu$	0,0845	(23), (25), (26)
Constante do Modelo K-E, $C_{1E}$	1,42	(28)
Constante do Modelo K-E, $C_{2E}$	1,68	(28)
Constante do Modelo K-E, $C_{3E}$	1,2	(28), (33)
Constante do Modelo K-E, $C_{\hat{\mu}}$	100	(24)
Coefficiente de adição de massa, $C_v$	0,5	(45)
Inverso do número efetivo de Prandtl, $\xi_0$	1	(29)
Inverso do número efetivo de Prandtl, $\xi_E = \xi_K$	1,393	(29)
Número de Prantl Dispersivo, $\omega_{sg}$	0,75	(32)
Constante RNG, $\eta_0$	4,38	(34)
Constante RNG, $\beta_t$	0,012	(34)

Numa próxima etapa da modelagem, o balanço de energia em sistemas multifásicos é considerado. A Equação (46) representa o transporte de entalpia para a fase genérica  $i$ .

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_i \rho_i H_i) + \nabla \cdot (\bar{u}_i (\varepsilon_i \rho_i H_i + p)) = \nabla \cdot \left( k_{ef} \nabla T_i - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\bar{\tau}_{ef} \cdot \mathbf{u}) \right) + F_h \quad (46)$$

Onde  $k_{ef}$  é a condutividade térmica efetiva, a qual é calculada pela soma da condutividade do material mais a condutividade térmica turbulenta.  $\vec{J}_j$  representa a taxa difusiva da espécie química  $j$  e o terceiro termo do lado direito da equação acima representa a transferência de energia devido a dissipação viscosa, sendo esta última negligenciada. Todas as outras formas de geração de calor são condensadas no termo fonte  $F_h$ .

A variável transportada  $H$  pode ser expressa por:

$$H = h_{mix} - \frac{p}{\rho} + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \quad (47)$$

Na qual  $h_{mix}$  é a soma da entalpia para cada espécie química ponderada pela sua fração mássica e é integrada da temperatura de referência (estipulada em 298,15K) até a temperatura local conforme:

$$h_{mix} = \int_{T_{ref}}^T c_p dT \quad (48)$$

Para as fases sólidas, o calor específico do material foi considerado invariável com a temperatura, como hipótese simplificadora. A taxa de transferência de energia térmica entre as fases é dada pela diferença de temperatura e por um coeficiente volumétrico global. Este coeficiente está relacionado ao número de Nusselt conforme Equação (49).

$$h_{gs} = \frac{6k_s \epsilon_g \epsilon_s Nu}{d_s^2} \quad (49)$$

Onde  $k_s$  é a condutividade térmica do sólido e  $Nu$  é o número de Nusselt. O número de Nusselt é determinado pela correlação obtida por RANZ-MARSHALL (1952), que é uma função do número de Reynolds da partícula e do número de Prandtl, Equação (50):

$$Nu = 2 + 0,6 Re_s^{0,5} Pr^{0,333} \quad (50)$$

e o número de Prandtl:

$$Pr = \frac{Cp\mu_g}{k} \quad (51)$$

### 3.3.2 Caso 2: Modelagem Com Reação Química

Na segunda etapa da pesquisa, foram incluídas nas simulações a combustão de partículas de carvão no mesmo leito fluidizado até então operado em condições de pré-combustão. A modelagem do sistema multifásico reativo por CFD é uma tarefa desafiadora. Há algumas possibilidades para a inclusão do carvão nas simulações:

- Uma nova espécie química na fase dispersa (Euler-Euler);
- Uma nova fase dispersa (Euler-Euler-Euler);
- Uma nova fase discreta (Euler-Euler-Lagrange);

A primeira opção possui algumas restrições, principalmente quanto à caracterização do material sólido, uma vez que a areia e o carvão têm propriedades distintas. A segunda opção, incluir uma nova fase Euleriana, corresponderia com maior fidedignidade aos sólidos, porém a relação mássica entre inertes e combustíveis é pequena, de modo que o tempo de cálculo adicional pela baixa fração volumétrica seria pouco eficiente computacionalmente.

A grande vantagem da formulação Lagrangeana deve-se a possibilidade de acompanhar a história de uma partícula, pela trajetória individual no espaço-tempo. Assim é possível estabelecer o efeito entre as partículas e o gás circundante através dos termos fonte de massa, quantidade de movimento e energia. Esta modelagem é a que mais se aproxima da realidade física, tendo porém sua aplicação limitada pelo número de partículas a serem acompanhadas, uma vez que a integração das equações de movimento e de transferência de calor e massa é realizada para cada uma das trajetórias acompanhadas.

Entretanto esta abordagem apresenta uma simplificação que deve ser considerada quando deseja-se empregá-la. A interação partícula-partícula é negligenciada de modo que a aplicação de uma fase Lagrangeana é adequada somente a escoamentos diluídos. Como regra prática, o desenvolvedor do *software Fluent* afirma que é válido utilizar esta abordagem para uma fração volumétrica da fase de até 10%, acima da qual os choques entre partículas passam a modificar o escoamento da fase discreta, comportamento não representado por este método.

Considerar a equação de Newton para o balanço de forças numa partícula é o ponto de partida para a modelagem Lagrangeana de sólidos, Equação (52), na qual o observador acompanha a trajetória do volume de controle selecionado. A taxa de transferência de quantidade de movimento é igual a soma das forças externas agindo sobre a partícula,  $F_p^g$  a força peso e  $F_p^a$  a força de arraste partícula-fluido.

$$m_p \frac{d\vec{u}_p}{dt} = F_p^g + F_p^a \quad (52)$$

Para partículas pertencentes aos grupos A e B da classificação de GELDART (1973) em leitos fluidizados, os termos da força de arraste e da gravidade são considerados. Outras forças atuantes, como *Lift* de Saftman, Magnus, ou massa virtual podem ser negligenciadas pela baixa razão entre a massa específica do fluido e da partícula, gerando assim diminuta influência no balanço final de forças (SMOOT e SMITH 1985). Ainda, a força devido ao impulso provocado pela saída de massa da partícula, como pela evaporação da umidade ou voláteis e queima do coque, também poderia ser considerada. Entretanto considera-se que a partícula perca massa uniformemente por sua superfície, o que resulta no cancelamento das componentes de modo que este termo também não gera influência na variação da velocidade da partícula.

O termo da equação que deve ser modelado corresponde ao termo da força de arraste entre as fases. Este foi descrito, seguindo CROWE et al. (1998).

$$\frac{F_p^a}{m_p} = \frac{f}{\tau_p} (\vec{u}_g - \vec{u}_p) \quad (53)$$

O tempo de resposta da partícula, cujo sentido físico é o tempo em que uma partícula, partindo do repouso, alcança  $(1-1/\exp)$  da velocidade do fluido ao seu redor é dada pela Equação (54).

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_g} \quad (54)$$

Já o fator de arraste  $f$  é definido conforme Equação (55).

$$f = \frac{C_D Re}{24} \quad (55)$$

Várias correlações foram propostas para diferentes tipos de partículas e faixas de operação. A correlação de MORSI e ALEXANDER (1972) para partículas esféricas sólidas, Equação (56), na qual  $a_1$ ,  $a_2$  e  $a_3$  assumem valores específicos em diferentes faixas de número de Reynolds, foi utilizada.

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re} + \frac{a_3}{Re^2} \quad (56)$$

No estudo de escoamentos particulados o número de Stokes é um importante parâmetro adimensional a ser considerado, Equação (57). Este relaciona o tempo de resposta da partícula pelo tempo de resposta do fluido.

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_g} \quad (57)$$

O tempo de resposta da partícula é dado pela Equação (54). Já o tempo de resposta do fluido é dado pela relação entre a velocidade deste e o tamanho característico do escoamento, Equação (58).

$$\tau_g = \frac{L}{U_g} \quad (58)$$

Quando o  $St$  é baixo, o escoamento da partícula está fortemente ligado ao escoamento do fluido. A medida que  $St$  aumenta esta relação diminui de intensidade, até que o fluido não tenha mais influência sobre a trajetória da partícula. A Figura 7 esquematiza o comportamento do escoamento granular de acordo com o número de Stokes.

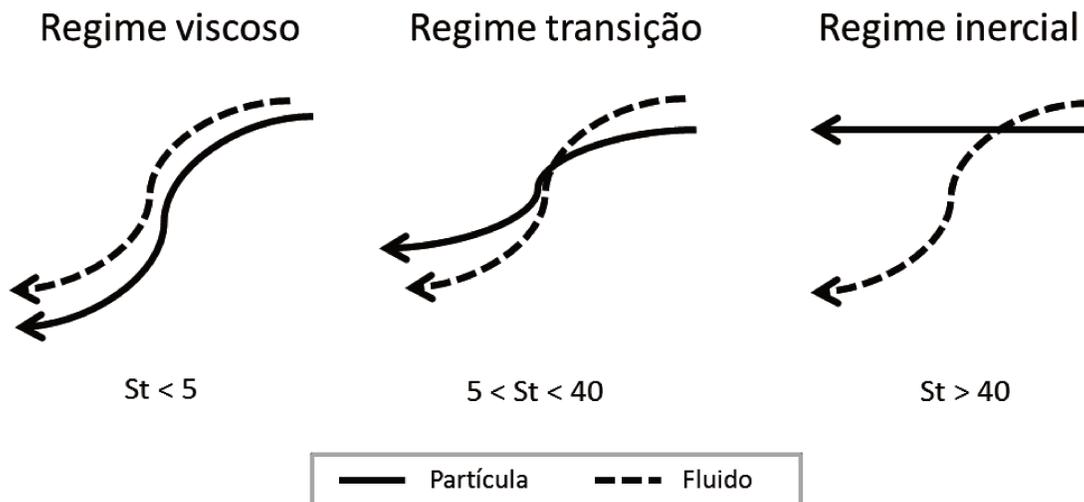


Figura 7. Regimes de escoamento gás-sólido em relação ao número de Stokes, adaptado de SINCLAIR (2011).

Ao contrário do Caso 1, nesta segunda etapa o transporte de espécies químicas na fase contínua é considerado. Tem-se portanto uma equação diferencial parcial para cada espécie  $i$  envolvida, conforme Equação (59).

$$\frac{d}{dt}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} Y_i) = -\nabla \cdot \left( -\left( \rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla Y_i - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T} \right) + r_i + S_i \quad (59)$$

Onde  $Y_i$  é a fração mássica da espécie  $i$ . O primeiro termo no lado direito representa o fluxo difusivo das espécies químicas, que aqui é aproximado pela Lei de Fick adaptada para escoamentos turbulentos. Uma vez que a difusão turbulenta é geralmente predominante, a difusão laminar completa (Equações de Maxwell-Stefan) pode ser negligenciada. Ainda,  $D_{i,m}$  é o coeficiente de difusão mássica,  $D_{T,i}$  é o coeficiente de difusão térmica, aqui negligenciado,  $Sc_t$  é o número de Schmidt turbulento,  $r_i$  é a taxa líquida de produção ou consumo da espécie  $i$  e  $S_i$  é o termo fonte para a espécies geradas ou consumidas em outra fase.

Reações químicas homogêneas podem ser modeladas de modos distintos. A taxa cinética é determinada por uma expressão que segue o comportamento de uma expressão do tipo Arrhenius, que considera que a reação química é o fator limitante na transformação de reagentes a produtos. Esta modelagem é geralmente adequada para as regiões laminares do escoamento e quando os reagentes estão completamente misturados. A outra forma modela a taxa de modo a considerar que o tempo de mistura dos reagentes passa a limitar a taxa da reação, não mais a cinética, e conseqüentemente os efeitos turbulentos do escoamento são determinantes. Seguindo a metodologia corrente (WANG et al., 2009), aplicam-se ambas as formas de calcular a taxa da reação e utiliza-se o menor valor obtido.

O balanço geral para cada espécie química é a soma dos balanços das  $N_R$  reacões nos quais a espécie participa:

$$r_i = M_i \sum_{r=1}^{N_R} \hat{r}_{i,r} \quad (60)$$

Onde  $M_{w,i}$  é o peso molecular da espécie  $i$  e  $\hat{r}_{i,r}$  é a taxa cinética da espécie  $i$  na reação  $r$ .  
 Considerando uma reação genérica irreversível (Equação (61)):



Onde  $Sb$  é o coeficiente estequiométrico de  $i$  e  $N$  é o número de espécies no sistema. Deste modo a taxa da reação cinética para a espécie  $i$  é dada por:

$$\hat{r}_{i,r} = (Sb''_{i,r} - Sb'_{i,r}) \left( k_r \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\eta'_{j,r} + \eta''_{j,r}} \right) \quad (62)$$

Onde  $C_{j,r}$  é a concentração molar da espécie  $j$  na reação  $r$ ,  $\eta'_{j,r}$  é a ordem da reação para os reagentes,  $\eta''_{j,r}$  para os produtos e  $k_r$  é a taxa cinética, que é dada pela Equação (63):

$$k_r = A_r T^{\beta_r} \exp\left(\frac{-E_r}{RT}\right) \quad (63)$$

Onde  $A_r$  é o fator pré exponencial,  $\beta_r$  é o expoente da temperatura,  $E_r$  é a energia de ativação e  $R$  é a constante universal dos gases.

Já a taxa da reação turbulenta é baseada no trabalho de MAGNUSSEN E HJERTAGER (1977). Uma vez que as reações químicas de combustão homogêneas são muito rápidas, pode-se assumir que a taxa da combustão é controlada pela de mistura em escala molecular dos turbilhões de material combustível e oxigênio, ou seja, pela taxa da dissipação dos turbilhões. Como o combustível e o oxigênio aparecem como quantidades intermitentes, há uma relação entre as flutuações e a concentração média das espécies. Deste modo, a taxa de dissipação da turbulência pode ser relacionada com a concentração média das espécies que participam da reação Equação (64).

$$r_{i,r} = Sb'_{i,r} M_i A \rho_g \frac{E}{K} \min \kappa \left( \frac{Y_\kappa}{Sb'_{\kappa,r} M_{w,\kappa}} \right) \quad (64)$$

Por outro lado, o oxigênio e o combustível podem estar no mesmo turbilhão, separado dos turbilhões contendo os produtos gerados. Neste caso, a taxa da combustão é determinada pelo avanço da chama, pelo mesmo mecanismo descrito. A Equação (65) leva em conta a dissipação destes turbilhões.

$$r_{i,r} = Sb'_{i,r} M_i A B \rho_g \frac{E}{K} \frac{\sum_\lambda Y_\lambda}{\sum_j^N Sb'_{j,r} M_{w,j}} \quad (65)$$

Em ambas as equações,  $Y_\kappa$  representa a fração mássica de um reagente específico,  $Y_\lambda$  a fração mássica de um produto qualquer,  $A$  e  $B$  são constantes empíricas. A taxa turbulenta é então assumida pelo menor valor local entre as duas expressões.

### 3.3.2.1 Processos Fenomenológicos da Queima de Carvão.

O processo de queima de uma partícula de carvão pode ser dividido em cinco etapas principais:

- Aquecimento da partícula e liberação da umidade.
- A pirólise do carvão, na qual os voláteis desprendem-se e passam para a fase gasosa.
- Queima dos voláteis através de reações homogêneas.
- Queima do coque, constituído principalmente de carbono, por reações heterogêneas.
- A partícula de cinzas remanescente comporta-se como inerte.

A Figura 8 ilustra este processo. Para uma correta representação da queima de carvão mineral, todas estas etapas devem ser consideradas na modelagem matemática do problema.

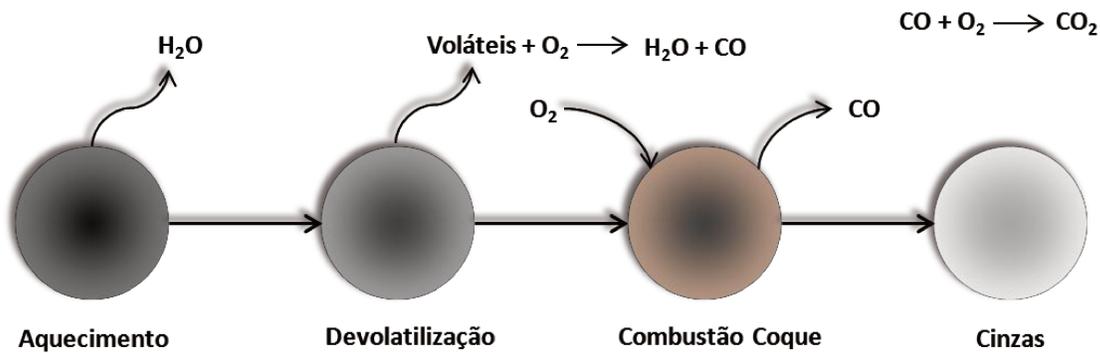


Figura 8. Esquema representativo das principais etapas no processo de combustão de carvão mineral.

O balanço de energia geral para cada partícula é dado pela Equação (66). Devido a presença de mais de uma fase Euleriana, a radiação foi desconsiderada nos cálculos de transferência de calor entre as fases. Também foi considerado que o gradiente de temperatura interno é próximo de zero, de modo que a condução de calor no interior da partícula fosse desprezado.

$$m_p C_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) - f_h \frac{dm_p}{dt} H_R + \frac{dm_p}{dt} L_h \quad (66)$$

Onde  $C_p$  é o calor específico,  $h$  é o coeficiente de transferência de calor convectivo determinado pela correlação de RANZ-MARSHALL (1952),  $A_p$  é a área superficial da partícula,  $H_R$  é o calor gerado pela reação heterogênea,  $f_h$  é a fração deste calor absorvida pela partícula e  $L_h$  é o calor latente de vaporização.

Quando a partícula comporta-se como um corpo inerte, apenas o primeiro termo do lado direito da Equação (66) é considerado. Esta condição ocorre até que a partícula alcance a temperatura de vaporização da umidade ou depois que todo o processo de combustão tiver sido completado, restando apenas as cinzas.

A liberação de componentes com baixo ponto de vaporização ocorre à medida que a partícula de carvão é aquecida. Por volta de 313 K a umidade presente começa a evaporar, causando também uma branda dessorção de outros componentes armazenados nos poros. A partir deste ponto inicia-se o processo de decomposição térmica de substâncias orgânicas

presentes no carvão, denominado de pirólise. Segundo JOOS (2006) este processo inicia-se em torno de 573 K, enquanto CHERN e HAYHURST (2004) determinaram valores na faixa de  $823 \text{ K} \pm 273 \text{ K}$  para carvão betuminoso. SILVA FILHO e MILIOLI (2008) determinaram, para um carvão nacional similar ao utilizado na planta piloto de RAMIREZ-BEHAINNE (2007), a temperatura de 740 K para o início da devolatilização, valor este adotado no presente trabalho.

Este processo pode ser subdividido em duas etapas. Nas temperaturas mais brandas, durante a assim chamada pirólise primária, as ligações fracas das macromoléculas são rompidas e o carvão é separado em hidrocarbonetos leves, alcatrão e coque. Os componentes devolatilizados são compostos principalmente por hidrocarbonetos de cadeia curta como  $\text{CH}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_6$ , HCN e outros gases como  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ , CO e  $\text{CO}_2$ . O alcatrão, que a temperatura ambiente é um líquido, torna-se nas temperaturas da pirólise primária um gás composto por cadeias mais longas de hidrocarbonetos. Com a continuação do aquecimento da partícula, começa a segunda fase da pirólise, denominada pirólise secundária. Nesta o alcatrão é quebrado em compostos de menores cadeias ou se deposita no sólido. Também durante esta etapa podem ocorrer rachaduras ou mesmo a fragmentação da partícula.

A composição final do material devolatilizado não depende somente da composição do carvão, mas também da taxa de aquecimento, ou seja, das temperaturas de operação do combustor. Segundo GÖRNER (1991) a quantidade de voláteis despreendidos num combustor com carvão pulverizado pode variar de 1,3 a 2 vezes a quantidade despreendida em um processo a temperaturas mais brandas. Na transformação química do carvão, segue-se a difusão dos componentes envolvidos na devolatilização para a superfície da partícula de carvão, onde estes passam para a fase gás, difundem-se e tomam parte de reações homogêneas, o que torna este processo similar a queima de combustíveis líquidos em forma de gotículas. Entretanto a descrição deste processo só pode ser feita de modo geral, uma vez que a grande variedade de carvões requer um estudo detalhado para cada tipo em determinadas condições operacionais.

Deste modo uma modelagem generalizada para o processo de devolatilização deve ser vista como uma simplificação do processo real. Ainda assim é possível distinguir entre o processo de secagem e de devolatilização da partícula de carvão.

Para determinar a evaporação da umidade presente na partícula de carvão, KUO (2005) apresentou um modelo baseado na abordagem clássica de Spalding, que leva em conta a mudança de fase de uma partícula, uma vez atingida a temperatura de vaporização e posteriormente ebulição. A taxa pela qual a umidade evapora é determinada pela transferência de calor do meio

para a partícula e pela diferença de concentração da umidade na partícula e no meio. Através da continuidade da massa na superfície da partícula, pode-se escrever o balanço de evaporação conforme a Equação (67) para o período decorrente entre a temperatura de vaporização e de ebulição e pela Equação (68) uma vez atingido o ponto de ebulição da água. Este processo ocorre antes do início da devolatilização.

$$\frac{dm_p}{dt} = -k_c (C_{i,p} - C_{i,\infty}) A_p M_i \quad (67)$$

$$\frac{d(d_p)}{dt} = \frac{4k_g}{\rho_i C_{p_g} d_p} (1 + 0,23\sqrt{Re_p}) \ln \left[ 1 + \frac{C_{p_g} (T_g - T_p)}{h} \right] \quad (68)$$

Onde  $k_c$  é o coeficiente de transferência mássico, calculado a partir do número de Sherwood,  $C_i$  é a concentração do vapor do líquido,  $k_g$  é a condutividade térmica do gás e  $\rho_i$  é a massa específica do material líquido.

Para a descrição da devolatilização o modelo proposto por KOBAYASHI et al. (1976) tornou-se bastante popular. Este é governado por duas taxas concorrentes,  $r_1$  para temperaturas brandas e  $r_2$  para temperaturas mais elevadas. Um esquema do modelo é apresentado na Figura 9.

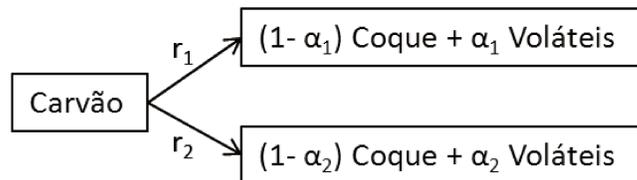


Figura 9. Esquema do modelo de duas reações concorrentes para representação da devolatilização durante o processo de queima de carvão mineral.

As taxas das devolatilização são dadas pelas Equações (69) e (70) respectivamente.

$$r_1 = A_{r1} \exp\left(\frac{-E_{r1}}{RT_p}\right) \quad (69)$$

$$r_2 = A_{r2} \exp\left(\frac{-E_{r2}}{RT_p}\right) \quad (70)$$

Um balanço das duas expressões gera a Equação (71), que representa a devolatilização em cada partícula no tempo.

$$\frac{m_v(t)}{(1 - f_{i,0})m_{p,0} - m_c} = \int_0^t (\alpha_1 r_1 + \alpha_2 r_2) \exp\left(-\int_0^t (r_1 + r_2) dt\right) dt \quad (71)$$

Onde  $m_v(t)$  é a quantidade de voláteis desprendidos até o momento  $t$ ,  $f_{i,0}$  é a fração mássica de umidade,  $m_{p,0}$  é a massa inicial da partícula de carvão,  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  são fatores de produção e  $m_c$  a massa de cinzas na partícula.

O material volátil liberado na fase gasosa passa por reações homogêneas de oxidação. Como a fração das diferentes substâncias que compõe os voláteis não é conhecida, utiliza-se os dados da análise elementar para determinar a composição em termos de carbono, hidrogênio, oxigênio e nitrogênio. Assim um pseudo-componente ( $C_wH_xO_yN_z$ ) chamado Voláteis é criado como uma mistura destes compostos. A oxidação homogênea dos voláteis é considerada em duas etapas, sendo que na primeira o carbono é oxidado parcialmente a monóxido de carbono, conforme Equação (72). Numa segunda etapa este é então completamente oxidado a dióxido de carbono, Equação (73).



Também a queima do carbono fixo ou coque é um fenômeno bastante complexo. O coque é composto por uma quantidade significativa de carbono, que possui uma baixa pressão de vaporização, de modo que uma volatilização e subsequente oxidação na fase gasosa não são possíveis (ANNAMALAI e RYAN, 1993). Reações heterogêneas são descritas pelos seguintes processos, sendo que a taxa da reação é dada pela etapa limitante:

- I. Difusão das espécies da fase gás para a superfície da partícula;
- II. Adsorção das moléculas nos sítios ativos da partícula;
- III. Formação dos produtos a partir das moléculas adsorvidas;
- IV. Desorção dos produtos formados;
- V. Migração dos produtos através do filme até o seio da fase gás.

A taxa da reação apresenta características próprias de acordo com as condições operacionais adotadas. De modo geral, a literatura distingue três zonas principais no processo de combustão heterogênea do coque remanescente na partícula de carvão após a devolatilização, conforme representado na Figura 10.

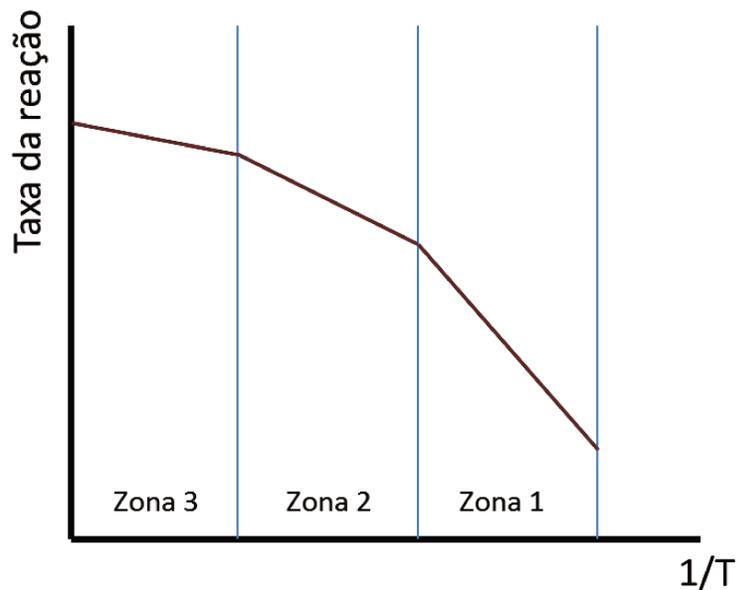


Figura 10. Esquema com as divisões por zonas de queima pelas regiões de temperatura.

A dependência exponencial com a temperatura das reações de superfície da Zona 1, tem como resultado que, em temperaturas mais baixas, a cinética das reações de superfície é o fator limitante, determinando assim a taxa da reação. Em temperaturas mais elevadas, as reações de superfície são rápidas, de modo que a difusão nos poros e na fase gás tornam-se limitantes. Forma-se um processo controlado pela difusão, com relativas baixas energias de ativação. Apesar da transição de uma zona para outra ser função das características físicas e químicas do carvão e condições operacionais, MITCHELL e MA (2005) citaram que para combustão de carvão pulverizado a Zona 1 seria para temperaturas abaixo de 900 K e a Zona 3 para temperaturas acima de 1800 K.

A concentração de oxigênio no meio também influencia a determinação da zona de reação, uma vez que baixas concentrações fazem com que a difusão controle o processo (LIXING 1993). Ainda, a velocidade relativa da fase gasosa com a partícula irão afetar a taxa da reação se esta estiver na zona controlada pela difusão, sendo porém pouco importante quando a cinética determina a queima.

Além da dependência com a temperatura, o tamanho das partículas também tem grande influência sobre o mecanismo determinante da queima de coque. Segundo DENNIS et al. (2006), de modo geral, para partículas grandes (diâmetro maior que 1,5 mm) a difusão externa a partícula, tanto do O<sub>2</sub> para a superfície quanto dos produtos de reação para a fase gás, são determinantes para a taxa da reação. Esta é portanto regida pelas leis da transferência de massa. Já para partículas menores, a taxa da reação passa ser função também da cinética química e da difusão interna nos poros da partícula. HIGUERA (2008) comenta que partículas na ordem de milímetros geralmente queimam como esferas que se contraem, ao contrário da queima a diâmetro constante, como é o caso de partículas menores.

Considerando a evolução da partícula, dois modelos idealizados podem ser adotados (HANNES 1996). O primeiro denominado modelo do encolhimento da partícula (*Shrinking Particle Model*) assume que a partícula queima apenas em sua superfície. À medida que a reação avança, as cinzas restantes se destacam da parte ainda não reagida, reduzindo o diâmetro da partícula e permitindo a continuação da queima superficial. Já o segundo modelo, denominado de encolhimento do núcleo (*Shrinking Core Model*) também considera uma camada limite de gás ao redor da partícula, pela qual as espécies químicas se difundem. Entretanto o diâmetro da partícula permanece constante e somente o núcleo de coque vai sendo consumido, de fora para dentro, mantendo uma camada de cinzas ao redor do núcleo não reagido, garantindo assim que a estrutura da partícula original permaneça intacta. Via de regra, segundo SOUNDARRAJAN et al.

(2008), carvão com baixo teor de cinzas terá uma maior fração de sua massa consumida pelo processo de queima, de modo que a estrutura do material mineral tenderá a se fragmentar mais facilmente. Por outro lado, isto é menos provável de ocorrer em partículas com alto teor de cinzas. A Figura 11 esquematiza o processo idealizado por ambos os modelos.

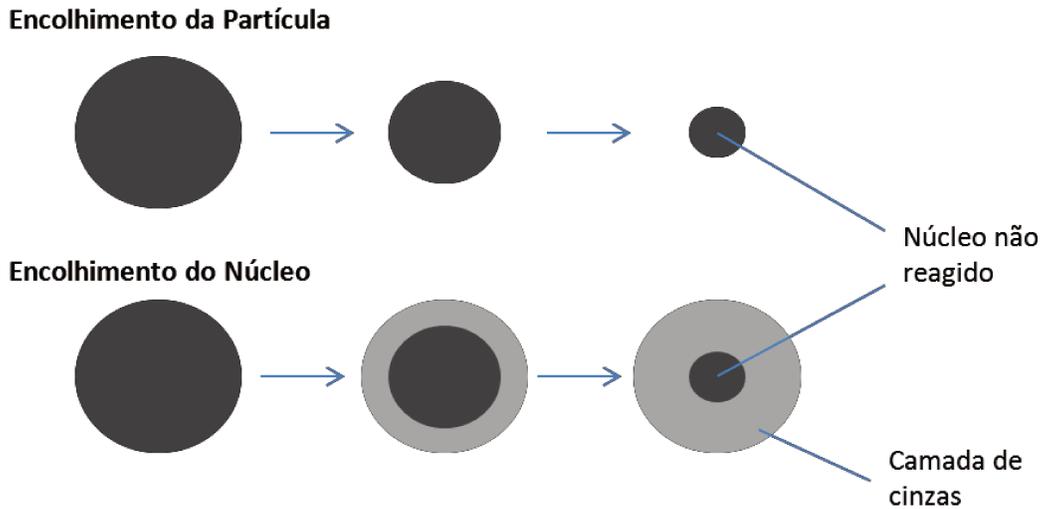


Figura 11. Representação dos modelos que descrevem o comportamento das partículas de carvão durante a combustão, adaptado de HANNES (1996).

Ao contrário das reações homogêneas dos voláteis, os mecanismos das reações heterogêneas ainda não são completamente conhecidos. Determinação experimental da taxa de reação heterogênea em sua maioria é relacionada a concentração do oxidante na fase gasosa e a superfície externa da partícula, sendo considerada assim uma taxa global, com combinação dos processos de difusão e cinética, expressa em uma equação do tipo Arrhenius. A seguir são apresentadas separadamente as principais formas de modelagem da taxa de reação de queima de coque.

### Difusão

Se a difusão dos compostos químicos entre a superfície da partícula e o seio da fase gasosa, processos I e V da queima heterogênea, controla a taxa global de reação, então o problema pode ser resolvido com as leis de transferência de massa e a fluidodinâmica. A relação da Equação

(74) é derivada do modelo proposto por BAUM e STREET (1971) sem a contribuição cinética da taxa de reação superficial.

$$\frac{dm_p}{dt} = -4\pi d_p D_{i,m} \frac{T_\infty Y_{ox} \rho_g}{Sb_{ox} (T_p - T_\infty)} \quad (74)$$

onde  $m_p$  é a massa da partícula,  $Y_{ox}$  é a fração mássica do oxigênio,  $T_p$  é a temperatura da partícula,  $T_\infty$  é a temperatura do gás ao redor da partícula,  $D_{i,m}$  é o coeficiente de difusão mássica turbulento do oxidante na fase gasosa (função do Número de Schmidt e da viscosidade turbulenta) e  $Sb_{ox}$  é o coeficiente estequiométrico do oxidante.

### Cinética heterogênea

De modo geral, as reações heterogêneas são descritas de forma análoga às homogêneas, sendo a taxa da reação expressa pela Equação (75).

$$\hat{r}_{i,r} = k_r \prod_{j=1}^N [C_j S b_j] \quad (75)$$

onde  $C_j$  é a concentração na superfície da espécie  $j$  por unidade de área. A adsorção de cada espécie gasosa  $j$  ocupa uma fração dos sítios de carbono na superfície ( $\delta_j$ ), enquanto que a área coberta por todas as espécies ( $\delta$ ) é dada pelo somatório dos  $\delta_j$ . Deste modo a adsorção aumenta  $\delta$  enquanto que a desorção diminui  $\delta$ . Além disto, uma fração das moléculas que colidem com a superfície retornam para a fase gás sem serem adsorvidas. Se a taxa de colisão da moléculas da espécie  $j$  é dado por  $\Gamma_j$  e o coeficiente de acomodação para adsorção é dado por  $\Phi_j$ , então a taxa de adsorção por unidade de área é dado por:

$$r_{ads} = \Gamma_j \Phi_j (1 - \delta) \quad (76)$$

onde

$$\Gamma_j = C_j \left( \frac{k_B N_A T}{2\pi M_j} \right)^{0,5} \quad (77)$$

sendo que  $C_j$  é a concentração da espécie  $j$ ,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $N_A$  é o número de Avogadro.

Já a taxa de retorno pela desorção da espécie  $i$  por unidade de área é dado por:

$$r_{des} = \chi_j \delta_j \quad (78)$$

onde  $\chi_j$  é uma constante de proporcionalidade.

Para valores constantes ou em estado estacionário de  $\delta_j$  a taxa de adsorção é igual a taxa de desorção, de modo que para um único componente ( $j = 1$ )

$$\delta = \frac{\Gamma_j \Phi_j}{(\chi_j + \Gamma_j \Phi_j)} \quad (79)$$

A taxa de reação para a espécie principal pode ser então escrita conforme Equação (80).

$$\hat{r}_{i,r} = \chi_j \delta = \frac{\chi_j \Gamma_j \Phi_j}{(\chi_j + \Gamma_j \Phi_j)} \quad (80)$$

A modelagem pode ser simplificada para alguns casos especiais. A seguir são descritos três situações possíveis: a), b) e c).

- a) Adsorção controla o processo.

Se a taxa de colisão for baixa ( $\chi_j \gg \Gamma_j \Phi_j$ ), a taxa da reação pode ser reescrita conforme Equação (81).

$$\hat{r}_{i,r} = \Gamma_j \Phi_j \quad (81)$$

Como  $\Gamma_j$  é proporcional a concentração da espécie  $j$  na fase gasosa, a reação controlada pela adsorção pode ser considerada de primeira ordem, de modo que a taxa da reação é expressa pela Equação (82).

$$\hat{r}_{i,r} = A_{ri} \exp\left(\frac{-E_{ri}}{RT}\right) p Y_w \quad (82)$$

b) Desorção controla o processo.

Se a taxa de desorção é lenta comparada com a taxa de adsorção ( $\chi_j \ll \Gamma_j \Phi_j$ ) então a taxa da reação torna-se simplesmente:

$$\hat{r}_{i,r} = \chi_j \quad (83)$$

Neste caso, todos os sítios ativos estão cobertos e portanto a concentração de nos sítios é independente da concentração da espécie, de modo que a reação é de ordem zero.

c) Reação controla o processo.

A transferência de oxigênio para o carbono acontece através de  $O_2$ ,  $CO_2$  e  $H_2O$ . A combustão heterogênea do coque acontece através de uma ou mais das seguintes reações:





(87)

O processo dominante nas condições típicas de combustão é o mecanismo da Equação (84) enquanto o mecanismo da Equação (85) é significativo na condição de ignição (ANNAMALAI E RAYN, 1993). A energia de ativação ( $E_a/R$ ) para a Equação (84) fica em torno de  $2,62 \cdot 10^4$  K e para a Equação (85) este valor é de  $2 \cdot 10^4$  K. A reação da Equação (86) é conhecida como redução de Boudouard e apresenta um  $E_a/R$  em torno de  $4 \cdot 10^4$  K. Como as energias de ativação são da mesma ordem de grandeza, pode-se dizer que estas reações possuem próximas sensibilidade à temperatura. Para carvão queimando com ar atmosférico, as concentrações de  $CO_2$  e  $H_2O$  são baixas o suficiente para que as reações representadas pelas Equações (86) e (87) sejam desprezíveis. Por outro lado, o processo de gaseificação de carvão é baseado nestas reações para a produção de CO e  $H_2$ .

A reação com o vapor de água é 50 vezes mais rápida do que com  $CO_2$  para temperaturas acima de 2073 K segundo HOWARD e SAROFIM (1978). Já MATSUI et al. (1983) determinaram que estas reações ocorrem na mesma taxa a temperaturas de 1150 K, porém ainda assim de  $10^4$  a  $10^5$  vezes mais lenta que a reação da combustão incompleta do carbono na faixa de 1100 K a 1200 K.

A determinação de qual o produto primário da reação heterogênea, aquele gerado na superfície do carbono, é um tema ainda estudado. Sabe-se que a combustão pode gerar  $CO_2$ , CO ou uma relação entre eles. Outra questão associada refere-se a saber onde a oxidação homogênea do CO é mais significativa, se no filme ao redor da partícula ou distante dela. Várias pesquisas experimentais foram realizadas, porém não se chegou a um consenso devido à complexidade do fenômeno, características físicas e químicas do material e condições operacionais bem como da dificuldade em obter medições precisas sem contudo assumir significativas simplificações (SCALA, 2011).

Para temperaturas acima de 1000 K o principal produto da reação heterogênea deve ser monóxido de carbono, segundo dados obtidos por vários estudos experimentais, conforme reportado por HAYHURST e PARMAR (1998). Entretanto, em princípio, pelo menos uma parte pode se oxidar a  $CO_2$  ainda no filme gasoso ao redor da partícula. Neste caso, como consequência, pode-se relacionar o  $CO_2$  formado como produto primário da reação, uma vez que o calor gerado estará na partícula. Porém leitos fluidizados parecem ser uma exceção, uma vez que a presença do material inerte próximo as partículas reativas inibe a oxidação do CO a  $CO_2$ , através da remoção heterogênea de radicais OH e  $HO_2$ . Ainda assim, algum  $CO_2$  pode ser formado ao redor do coque

antes que o CO difunda-se para longe da superfície externa do sólido (HAYHURST e PARMAR, 2002).

Para partículas grandes (na ordem de milímetros) tem-se que a difusão controla o processo de combustão, tanto da difusão o oxigênio para a superfície como do produto gerado para o meio. Neste caso a oxidação do CO na difusão pode ser maior do que para partículas menores. Assim, a reação (84) pode parecer ser a reação (85), segundo HAYHURST e PARMAR (1998).

Há também divergência na literatura quanto à ordem da reação, variando entre ordem zero a um para o oxigênio. De fato, é provável que a ordem dependa da temperatura, da concentração de oxigênio e da natureza do carbono que está sendo oxidado (MULCAHY e SMITH, 1969).

Um dos trabalhos que procurou relacionar a geração do produto da combustão com a temperatura foi desenvolvido por TOGNOTTI et al. (1990). Os autores determinaram através de medições de partículas únicas aquecidas por feixe de laser a relação apresentada na Equação (88).

$$\frac{m_{CO}}{m_{CO_2}} = A_0 p_{ox,s}^{\eta_0} \exp\left(\frac{-B_0}{T_p}\right) \quad (88)$$

sendo os valores sugeridos pelos autores  $A_0 = 0,02$ ,  $B_0 = 3040$  K e  $\eta_0 = 0,21$ . Assim, para uma pressão parcial de oxigênio de 10% e uma temperatura da partícula de 1100 K, a produção de CO é predominante.

### **Modelos complexos**

Uma vez apresentados os fenômenos separados, passa-se aos modelos mais completos, que fazem uso de mais de uma etapa do conjunto que representa o processo de queima heterogêneo. Dois modelos são apresentados a seguir, o primeiro é uma combinação do processo difusivo e cinético e o segundo um modelo intrínseco.

### **Difusão/Cinética**

As condições de operação do sistema experimental utilizado neste trabalho colocam a combustão do carvão na zona 2. Apesar da difusão do gás nos poros das partículas ser importante, a falta de informação detalhada sobre o carvão utilizado no sistema foi determinante para a escolha de um modelo que incorpore estes efeitos sem no entanto modelá-los explicitamente. Deste modo, a taxa da reação heterogênea é determinada por uma média harmônica de um termo de difusão (Equação (89)) e outro cinético (Equação (90)), resultando na Equação (91), conforme BOYD e KENT (1986).

$$r_d = \frac{C_1 [0.5(T_p + T_\infty)]^{0.75}}{d_p} \quad (89)$$

$$r_c = C_2 \exp\left(\frac{-E_{r5}}{RT}\right) \quad (90)$$

$$\frac{dm_p}{dt} = -A_p p_{ox} \frac{C_1 C_2 [0.5(T_p + T_\infty)]^{0.75} \exp(-E_{r5} / RT)}{C_1 [0.5(T_p + T_\infty)]^{0.75} + C_2 d_p \exp(-E_{r5} / RT)} \quad (91)$$

Sendo que  $m_p$  é a massa da partícula,  $A_p$  é a área superficial da partícula,  $p_{ox}$  é a pressão parcial do oxigênio,  $T_p$  é a temperatura da partícula,  $T_\infty$  é a temperatura do gás ao redor da partícula,  $C_1$  e  $C_2$  são as constantes difusiva e cinética respectivamente,  $d_p$  é o diâmetro da partícula e  $E_{r5}$  é a energia de ativação. Apesar de  $C_1$  poder ser determinado como função do número de Sherwood (WANG et al., 2009), como simplificação um valor constante foi adotado. Os parâmetros  $C_2$  e  $E_{r5}$  utilizados englobam o efeito da difusão gasosa nos poros do carvão. O diâmetro da partícula é considerado constante, sendo que apenas a massa específica varia durante o processo de queima.

SILVA FILHO e MILIOLI (2008) realizaram uma análise experimental para determinação dos parâmetros cinéticos de uma variedade de carvão nacional. O valor encontrado para energia de ativação, dentro da faixa reportada por outros trabalhos experimentais, foi utilizado neste trabalho. O fator pré-exponencial encontrado pelos autores, contudo, não pôde ser utilizado, uma vez que este era apenas função da variação da massa do carvão (unidade de  $s^{-1}$ ), ao passo que o presente modelo leva em conta também a concentração de  $O_2$  e tamanho da partícula (unidade de

kg.s<sup>-1</sup>.m<sup>-2</sup>.Pa<sup>-1</sup>)). Ainda segundo estes autores, os valores reportados para o fator pré-exponencial variam em muitas ordens de grandeza, não sendo possível estabelecer uma faixa de valores típicas de carvão. Portanto, devido a falta de dados sobre o carvão mineral nacional, o valor utilizado por FIELD (1969) foi adotado.

### Intrínseco

O modelo intrínseco aqui apresentado é baseado no trabalho de SMITH (1982) assumindo uma reação de ordem um. Este modelo parte do pressuposto, assim como o anterior, de que a reação heterogênea inclua os efeitos da difusão das moléculas até a superfície da partículas bem como a cinética da reação. A principal diferença reside no modo como a taxa cinética é calculada, sendo que neste modelo ela contém informações da difusão nos poros da partícula.

Partindo da Equação (91), a taxa cinética  $r_c$  é agora reescrita conforme Equação (92).

$$r_c = \eta_{ef} \frac{d_p}{6} \rho_p A_g k_{ri} \quad (92)$$

onde  $\eta_{ef}$  é o fator de efetividade que representa a relação entre a taxa real de combustão com a taxa obtida se a resistência pela difusão nos poro não existisse, conforme Equação (93).

$$\eta_{ef} = \frac{3}{\varphi_{Th}^2} (\varphi_{Th} \coth \varphi_{Th} - 1) \quad (93)$$

sendo que  $\varphi_{Th}$  é o modulo de Thiele:

$$\varphi_{Th} = \frac{d_p}{2} \left( \frac{S b_{ox} \rho_p A_p k_{ri} p_{ox}}{D_e \rho_{ox}} \right)^{0,5} \quad (94)$$

onde  $\rho_{ox}$  é a massa específica do oxidante na fase gás,  $A_p$  é a área superficial específica interna da partícula de coque e  $D_e$  é o coeficiente de difusão efetivo nos poros da partícula. Tomando-se como hipótese simplificadora que a distribuição dos poros é unimodal e que as difusões de Knudsen e no seio da fase gás procedam em paralelo, tem-se a Equação (95) para  $D_e$ .

$$D_e = \frac{\Theta}{\Omega^2} \left( \frac{1}{D_{Kn}} + \frac{1}{D_0} \right)^{-1} \quad (95)$$

onde  $\Omega$  é a tortuosidade dos poros, cujo valor adotado de  $\sqrt{2}$  corresponde a um ângulo médio dos interstícios de  $45^\circ$ , de acordo com sugestão de LAURENDEAU (1978).  $\Theta$  é a porosidade da partícula de coque, conforme Equação (96).

$$\Theta = 1 - \frac{\rho_p}{\rho_r} \quad (96)$$

sendo que  $\rho_p$  e  $\rho_r$  são as massas específicas aparente e real da partícula de coque.

Ainda da Equação (95),  $D_{Kn}$  é o coeficiente de difusão de Knudsen. Esta difusão é caracterizada por ocorrer em poros longos com estreito diâmetro e pelas frequentes colisões das moléculas do gás com as paredes dos poros. O coeficiente de difusão de Knudsen é dado pela Equação (97).

$$D_{Kn} = 97 \bar{r}_p \sqrt{\frac{T_p}{M_{ox}}} \quad (97)$$

onde  $\bar{r}_p$  é o raio médio dos poros.

Ainda na Equação (94)  $k_{ri}$  representa a reatividade intrínseca que é modelada através de uma equação cinética, Equação (98).

$$k_{ri} = A_{ri} \exp\left(\frac{-E_{ri}}{RT_p}\right) \quad (98)$$

Um fator importante na modelagem da queima do carvão é dado pela relação entre a redução da massa específica da partícula e o diâmetro devido à perda de massa e à alteração estrutural que ocorre neste processo. Três cenários podem ocorrer: a) a partícula pode manter seu diâmetro durante o processo de queima enquanto a massa específica varia; b) a massa específica pode permanecer constante e o diâmetro variar; c) ambos podem variar simultaneamente.

Quando ambas as propriedades variam, o modelo usualmente empregado considera que a variação no tamanho da partícula está relacionada com o módulo de queima  $\alpha$  e o grau de queima da partícula, de acordo com Equação (99).

$$\frac{d_p}{d_{p,0}} = \left[ 1 - \left( 1 - \frac{m_p}{m_{p,0}} \right) \right]^\alpha \quad (99)$$

O valor de  $\alpha$  varia de 0 a 0,333, sendo que o limite inferior corresponde ao caso a), o limite superior ao caso b) e um valor intermediário ao caso c).

Entretanto MITCHELL et al. (2007) apresentaram resultados questionando a validade desta aproximação. Para condições correspondentes a Zona 2, a redução do diâmetro e da massa específica varia não-linearmente ao longo da queima de uma partícula. Isto significa que  $\alpha$  deveria ser uma função e não uma constante, porém os autores não propuseram um modelo alternativo.

Além do material orgânico, carvão também é constituído por minerais. No processo de combustão estes são descritos como cinzas. Estes também sofrem transformações térmicas ou químicas, sendo a primeira forma predominante. Estes processos transformam as propriedades dos minerais, o que foi observado gerar efeitos catalíticos. Entretanto, na maioria dos estudos sobre simulação de queima de carvão, as cinzas são consideradas inertes, responsáveis apenas por manter a forma das partículas.

A Tabela 6 mostra de forma resumida os valores adotados para os parâmetros dos modelos de devolatilização, de reações homogêneas e heterogêneas. Desta última categoria, foram considerados os modelos de difusão, difusão/cinética e intrínseco.

Tabela 6. Resumo dos parâmetros envolvidos nas etapas de devolatilização e combustão do carvão.

	<b>Parâmetro</b>	<b>Valor<sup>#</sup></b>	<b>Equação</b>
<b>Devolatilização</b>	$A_{r1}$	$2.10^5 \text{ s}^{-1}$	(69)
	$A_{r2}$	$1,3.10^7 \text{ s}^{-1}$	(70)
	$E_{r1}$	$1,046.10^8 \text{ J/kgmol}$	(69)
	$E_{r2}$	$1,674.10^8 \text{ J/kgmol}$	(70)
	$\alpha_1$	0,3	(71)
	$\alpha_2$	1	(71)
<b>Reação Homogênea</b>	$Sb_1$	1,34 mol	(72)
	$Sb_2$	1,48 mol	(72)
	$Sb_3$	1,66 mol	(72)
	$Sb_4$	0,0378 mol	(72)
	$Sb_5$	0,5 mol	(73)
	$A_{r3}$	$2,119.10^{11} \text{ Kg/m}^3.\text{s}$	(63)
	$A_{r4}$	$2,239.10^{12} \text{ Kg/m}^3.\text{s}$	(63)
	$E_{r3}$	$2,2027.10^8 \text{ J/kgmol}$	(63)
	$E_{r4}$	$1,7.10^8 \text{ J/kgmol}$	(63)
	$A$	4	(64) e (65)
$B$	0,5	(65)	
<b>Reação Heterogênea</b>	$C_1$	$5.10^{-12} \text{ m}^2.\text{kg/s.K}^{0,75}$	(91)
	$C_2^{\text{a)}}$	$8,596.10^{-1} \text{ kg/m}^2.\text{s.Pa}$	(91)
	$E_{r5}^{\text{b)}}$	$8,51.10^7 \text{ J/kgmol}$	(91)

$A_p$	$3.10^5 \text{ m}^2$	(94)
$A_{ri}$	$3,0198.10^{-2} \text{ s}^{-1}$	(98)
$E_{ri}^{b)}$	$8,51.10^7 \text{ J/kgmol}$	(98)
$\Theta$	0,5	(96)
$\bar{r}_p^{c)}$	$1,5.10^{-7} \text{ m}$	(97)
$\Omega$	1,4142	(95)
$\alpha^{d)}$	0	(99)
$\alpha^{e)}$	0,25	(99)

#Todos parâmetros foram fornecidos pela base de dados do *software* utilizado a exceção de: a) FIELD (1969); b) e c) SILVA FILHO e MILIOLI (2008); d) Para os casos com diâmetro constante; e) Para os casos com diâmetro variável, SMITH (1971).

### 3.4 Método Numérico

As equações de transporte provenientes da mecânica dos fluidos somente podem ser resolvidas analiticamente para casos bastante simplificados. Quando deseja-se representar um escoamento em mais de uma dimensão ou seu histórico ao longo do tempo, são necessários métodos que geram soluções aproximadas para a obtenção de algum resultado. Há uma série de métodos numéricos desenvolvidos para este fim, aplicáveis a certas classes de problemas. Um método bastante utilizado quando se trabalha com sistemas de equações diferenciais parciais é o Método dos Volume Finitos (MVF). O princípio deste método baseia-se na conservação de uma quantidade física sobre qualquer volume finito, ou volume de controle. Com esta característica é possível adaptar volumes de controle a qualquer geometria que se queira estudar, dividindo-a em tantos volumes quanto forem necessários para que as escalas características do problema se tornem relevantes.

O *software* comercial Ansys Fluent utiliza-se do chamado *solver* baseado na pressão para resolver os campos das variáveis pertinentes ao escoamento. Neste procedimento as equações de quantidade de movimento são resolvidas para a obtenção dos campos de velocidade. O campo de pressão por sua vez é obtido por uma equação da correção da pressão pela relação entre a

continuidade e a quantidade de movimento. De modo geral, classifica-se a solução do prolema nas seguintes etapas:

- Divisão do domínio físico em volumes de controle;
- Integração das equações governantes em cada volume de controle para equações algébricas;
- Linearização das equações discretizadas e termos fonte;
- Solução do sistema resultante.

Os valores das variáveis são guardadas no centro de cada volume de controle. Porém, o termo convectivo torna necessário calcular o valor da variável também na face do volume. Deste modo, um procedimento de interpolação do tipo *Upwind* é adotado. Mesmo assim, os termos difusivos continuam sendo calculados por um esquema de diferenças centrais de segunda ordem.

BENYAHIA et al. (2007) fizeram uma análise da aplicação de esquemas *Upwind* de ordem um e dois para escoamentos multifásicos em regime *core-annulus*. Segundo os autores, conforme a malha vai sendo refinada, a diferença encontrada no resultado entre eles diminui, convergindo para um mesmo valor. Assim, de modo geral, os esquemas de ordem um são menos custosos computacionalmente quando comparados aos esquemas de ordens superiores, porém em contrapartida, tendem a requerer malhas mais refinadas.

Em simulações transientes as equações de transporte devem ser discretizadas tanto no tempo quanto no espaço. A integração temporal é implícita, sobre um passo de tempo  $\Delta t$  determinado. Todas as equações são resolvidas iterativamente para um determinado passo de tempo, até que um critério de convergência seja alcançado. Deste modo, avançar a solução em um passo de tempo requer um certo número de iterações por passo de tempo.

O passo de tempo utilizado em simulações transientes de escoamentos multifásicos incompressíveis é um parâmetro importante na estabilidade da simulação. Passos de tempo menores tendem a tornar a simulação mais estável, porém podem ser proibitivos no quesito tempo computacional. A determinação exata do tamanho do passo de tempo deve ser escolhida para cada caso baseada nas condições de contorno e estabilidade numérica do sistema. De acordo com alguns trabalhos do grupo de pesquisa (BASTOS et al. 2008, ROSA et al. 2008, LOPES et al. 2011), chegou-se a uma faixa de valores próprios para leite fluidizado. Como referência, usualmente inicia-se a simulação com um passo de tempo na ordem de  $10^{-5}$  s elevando-se o valor final de até  $10^{-4}$  s.

Já a fase Lagrangeana utiliza a mesma malha numérica das fases fluidas, porém o MVF não é método numérico pelo qual as equações do particulado são resolvidas. As equações da trajetória e qualquer outra equação, como de massa ou energia térmica, são resolvidas por integração numérica discreta no tempo. As equações diferenciais ordinárias podem ser integração analítica, assumindo-se que a variação da propriedade entre os passos de tempo é pequena, ou ainda por integração numérica, através dos esquemas de Euler implícito ou trapezoidal. O método de Runge-Kutta também pode ser utilizado para a resolução destas equações. Na formulação transiente, o passo de tempo da integração Lagrangeana pode ser definido independentemente das outras fases. Apesar disto, neste trabalho, optou-se por manter o mesmo valor para todas as fases. Deste modo, as partículas discretas são atualizadas a cada passo de tempo do escoamento fluido. Por fim, a quantidade de movimento, a massa e o calor gerados ou consumidos pelas partículas são computados nos termos fontes das respectivas equações de transporte da fase contínua. Este é denominado de acoplamento de duas vias, no qual a fase contínua influencia a fase discreta e vice-versa.

Assim, com o conjunto de equações que compõe a modelagem de cada caso definido e ajustado o método numérico, parte-se para a resolução dos problemas. Por fim, obtidos os resultados, passa-se então a sua análise.

## **4 Resultados e Discussões**

O escoamento multifásico com e sem adição de carvão mineral foi o objeto de interesse nos Caso 1 e Caso 2 respectivamente. Uma descrição detalhada de todos os fenômenos envolvidos nas condições operacionais do sistema foi viabilizada pela simulação numérica através das técnicas CFD. As análises das duas etapas deste estudo são apresentadas individualmente a seguir.

## 4.1 Caso 1: Sem Reação Química

Os resultados da modelagem matemática aplicada ao escoamento gás-sólido em um leito fluidizado a altas temperaturas são descritos nesta seção. Apesar de aparentemente simples quando comparado ao objetivo final do presente estudo, esta etapa é de fundamental importância para a correta predição do comportamento do sistema na etapa de combustão.

### 4.1.1 Condições Operacionais e de Contorno

As condições de operação da etapa de aquecimento do sistema de CFBC, anterior ao início do processo de combustão, foram minuciosamente estudadas e apresentadas por RAMIREZ-BEHAINNE (2007). O autor realizou uma série de experimentos baseados no modelo estatístico de planejamento composto central. Destes, foi escolhido o caso que representou ponto central do modelo, cujas condições são apresentadas na Tabela 7.

Tabela 7. Resumo das condições operacionais do sistema de CFBC na fase de pré-combustão do ensaio escolhido de RAMIREZ-BEHAINNE (2007).

Pressão, $p$	Atmosférica
Temperatura média, $T$	673 K
Velocidade de fluidização no leito fluidizado, $u_f$	6 m/s
Inventário de sólidos total, $I$	6,5 kg
Fluxo mássico de ar na válvula-L, $\dot{m}_g$	2 kg/h

Conforme prévio esclarecimento, apenas o leito fluidizado foi o objeto de estudos das simulações. Deste modo, uma vez determinado o domínio de cálculo, foi elaborada a geometria do equipamento, representada na Figura 12. O MVF requer a divisão da geometria em pequenos volumes de controle, de modo que uma malha foi construída sobre a geometria do leito fluidizado. Tanto a geometria como a malha foram desenhadas com o auxílio do *software* comercial Ansys ICEMCFD 11.0.

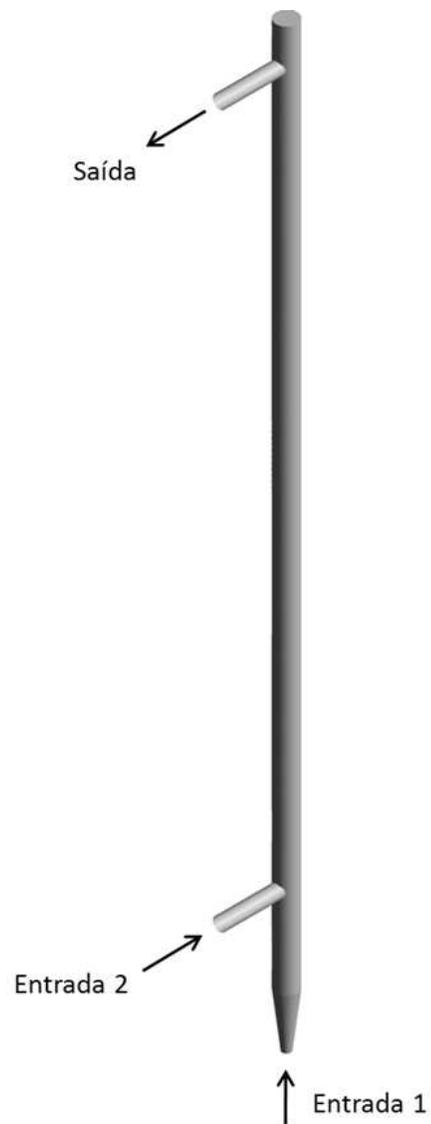


Figura 12. Detalhes das entradas e saída na geometria construída para o leito fluidizado do CFBC para o estudo de fluidização.

Na simulação do leito fluidizado rápido, apenas ar atmosférico e areia de quartzo foram considerados como fase contínua e dispersa, respectivamente. A abordagem Euleriana-Euleriana determina que ambas as fases sejam consideradas fluidos. Deste modo a fase contínua foi definida como um gás ideal, enquanto a fase dispersa foi representada através da KTGF. As condições de contorno para o Caso 1 estão apresentadas na Tabela 8.

Tabela 8. Condições de contorno do Caso de Estudo 1.

	Fase Contínua (Ar)	Fase Dispersa (Areia)
<b>Entrada 1</b>	Fluxo mássico: $2,46 \cdot 10^{-2}$ kg/s; Intensidade Turbulenta: 4,2%; Temperatura: 900 K	
<b>Entrada 2</b>	Fluxo mássico: $5,56 \cdot 10^{-4}$ kg/s; Intensidade Turbulenta: 5%; Temperatura: 624 K	Fluxo mássico: Função de reciclo; Temperatura: 624 K
<b>Saída</b>	Pressão relativa: 0 Pa	Pressão relativa: 0 Pa
<b>Paredes</b>	Não-deslizamento	Livre-deslizamento

A intensidade de turbulência para a Entrada 1 foi determinada de acordo com a correlação proposta por WANG et al. (2010a), a qual relaciona a intensidade de turbulência com o número de Reynolds na fronteira de entrada. Para a Entrada 2 o valor de intensidade de turbulência médio (5%) sugerido pelo *software* foi escolhido, uma vez que nesta entrada a fase contínua flui juntamente com a fase dispersa, tornando difícil o cálculo de um valor mais preciso.

Uma função para o cálculo do fluxo mássico de sólidos que retornam ao leito fluidizado foi implementada. Esta função soma a massa da fase dispersa que sai do domínio por cada uma das faces da superfície delimitada como saída a cada passo de tempo, inserindo este valor como condição de contorno na Entrada 2. Deste modo, garante-se que a massa de sólidos do sistema seja conservada.

Um aspecto de fundamental importância para uma descrição realista do escoamento no leito fluidizado foi a determinação do inventário de sólidos. Uma vez que parte do circuito que compõe o sistema não foi simulada, todo o sólido presente no ciclone, *standpipe* e na válvula-L devem ser desconsiderados. Usualmente utiliza-se um fluxo de recirculação mássico médio constante, medido experimentalmente na saída do leito fluidizado (LAN et al. 2009, LOPES et al. 2011, WANG et al. 2010a). No entanto com esta abordagem o tempo de simulação necessário até o sistema atingir um estado pseudo-estacionário pode ser elevado demais, dependendo das condições operacionais.

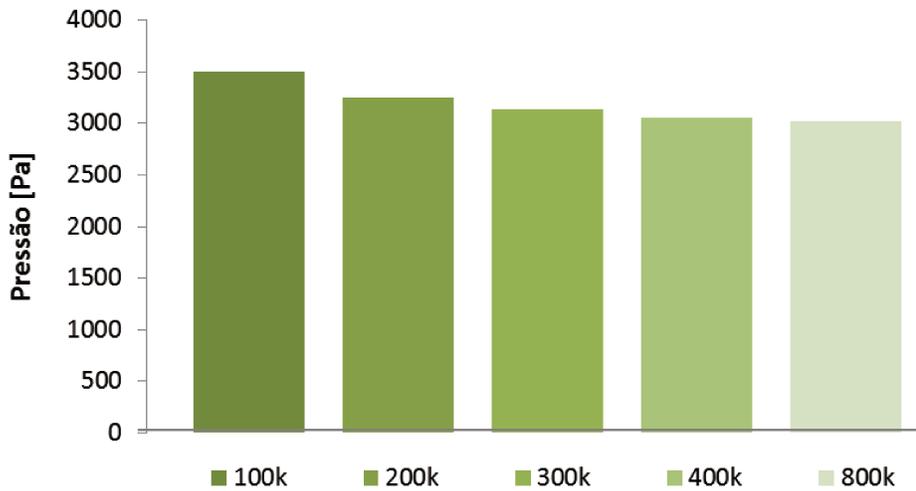
A solução proposta consiste em determinar o inventário de sólidos presentes apenas no leito fluidizado. Deste modo pode-se reduzir o tempo computacional, uma vez que a inicialização do problema pode ser efetuada com o inventário completo do leito fluidizado. O desenvolvimento do escoamento num leito fluidizado rápido ocorre em um curto espaço de tempo, pois altas vazões de ar são alimentadas ao leito fluidizado, fazendo com que o tempo de residência médio seja baixo. A metodologia para a determinação da condição inicial de sólidos no leito fluidizado foi descrita em detalhes por HODAPP et al. (2012).

A condição de contorno térmica nas paredes foi determinada através de um balanço de energia para convecção natural de gases ao redor de um corpo sólido (INCROPERA e DEWITT 2002). A temperatura da parede externa foi determinada através de medições na planta, cujo valor máximo de 338 K foi considerado para o cálculo do fluxo térmico. Deste modo, o fluxo de calor estimado perdido pelo leito fluidizado para o ambiente foi de  $175 \text{ W/m}^2$ .

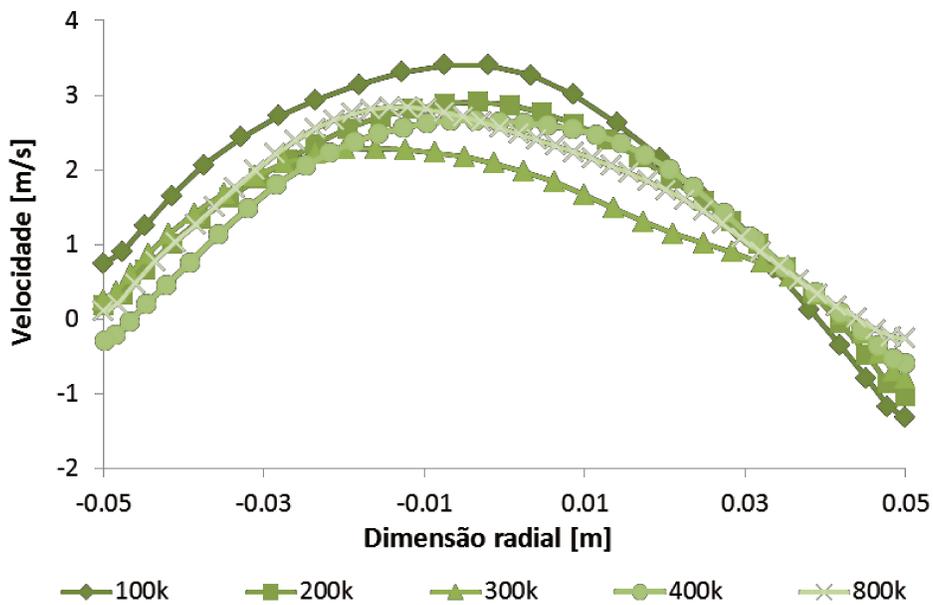
O conjunto do modelo numérico que garantiu a convergência da solução foi o acoplamento pressão-velocidade SIMPLE multifásico, o cálculo dos gradientes pelos mínimos quadrados nas células e as discretizações espacial e temporal de primeira ordem *Upwind* e implícita respectivamente. O resíduo estipulado para que as equações de transporte fossem consideradas convergidas foi determinado em  $1.10^{-3}$  em valores absolutos. O passo de tempo máximo utilizado foi de  $1.10^{-4}$  s.

#### **4.1.2 Malha Numérica**

Para garantir que os resultados obtidos sejam independentes do tamanho, e por consequência do número de volumes de controle da malha, foi construído um conjunto de malhas variando de 100 mil a 800 mil volumes de controle. A diferença de pressão entre a base e a saída do leito fluidizado, bem como o perfil de velocidade da fase dispersa foram extraídos depois de 10 segundos de simulação, como médias temporais dos últimos 4 segundos simulados, conforme Figura 13. A pouca variação entre os resultados da pressão no leito fluidizado para malhas com refino superior a 200 mil volumes, combinada com a análise do perfil de velocidade da fase dispersa, resultaram na escolha da malha de 400 mil volumes de controle para as simulações CFD.



a)



b)

Figura 13. Comparação dos resultados para o teste de malha do Caso 1, no qual foram analisados: a) diferença de pressão relativa entre a base e a saída do leito fluidizado; b) perfil da velocidade axial média da fase dispersa no raio a 3m de altura.

Os critérios de qualidade da malha selecionada também estão de acordo com o sugerido pelo desenvolvedor do *software* para a modelagem aplicada. A Tabela 9 apresenta maiores detalhes da malha de 400 mil volumes de controle.

Tabela 9. Critérios de qualidade da malha hexaédrica de 400 mil volumes utilizada no Caso 1.

Volume médio das células	$1,69.10^{-7} \text{ m}^3$
Volume mínimo de célula	$6,17.10^{-10} \text{ m}^3$
Ângulo mínimo	$27.54^\circ$
Determinante mínimo	0,392
Razão de aspecto máxima	28,5

O desequilíbrio no balanço de massa pode ser quantificado em todo o domínio de controle. Além do valor global do somatório dos resíduos monitorado a cada passo de tempo, pode-se ter uma visão do erro mássico em cada volume da malha. O valor máximo do desequilíbrio obtido foi de  $9,1.10^{-9} \text{ kg/s}$ , enquanto que o mínimo foi de  $-9,4.10^{-9} \text{ kg/s}$ . Valores positivos indicam ganho de massa ao passo que valores negativos representam perda de massa. Para o tempo de 10 s foram analisadas as isosuperfícies desta grandeza, conforme Figura 14. É possível perceber que há maior quantidade de células com resíduos baixos, na ordem de  $10^{-11} \text{ kg/s}$ , e apenas alguns com valores próximos ao desequilíbrio máximo gerado. O mesmo comportamento ocorre para os valores negativos.



Figura 14. Isosuperfícies no leito fluidizado em 10 s de simulação para os desequilíbrios mássicos de: a)  $1 \cdot 10^{-11}$  kg/s; b)  $1 \cdot 10^{-9}$  kg/s .

O tempo computacional de 30 dias foi necessário para rodar 10 segundos de simulação, na malha selecionada, paralelizada em 8 partições e computadas em processadores Intel Xeon *quadcore* 2,93 GHz e 16 GB de memória, para o caso multifásico.

### 4.1.3 Análise do escoamento Multifásico

Com a malha numérica adequada selecionada (400 mil volumes), foi realizada uma análise detalhada das características do escoamento gás-sólido. Infelizmente poucos dados experimentais da fluidodinâmica estavam disponíveis, de modo que os resultados obtidos foram avaliados de acordo com dados de literatura bem como pela experiência com simulações de casos similares realizadas pelo grupo de pesquisa. Ressalta-se porém que o objetivo do Caso 1 foi a preparação de uma modelagem que se mostrasse adequada para aplicação ao estudo de interesse da presente pesquisa, o Caso 2. Desta forma, a análise dos resultados é realizada principalmente sobre a forma como os modelos escolhidos influenciam e descrevem o comportamento do escoamento.

Iniciando com a análise da fase contínua, a representação da turbulência é uma característica de grande importância para escoamentos multifásicos confinados. Apesar da descrição da turbulência através de modelos de fechamento para estes sistemas ainda ser um problema não consolidado, o modelo aqui utilizado é empregado em muitos trabalhos numéricos gás-sólido, tendo produzido boa concordância de resultados com dados experimentais combinado a baixos custos computacionais (ZHANG e REESE 2003, BENYAHIA et al. 2005, LOPES et al. 2011).

O impacto do modelo K-E de turbulência no sistema é percebido na Figura 15. A variável que transfere os efeitos da turbulência para a equação de transporte de quantidade de movimento é a viscosidade, que conforme mostrado no capítulo da modelagem matemática, é modificada para a viscosidade denominada turbulenta. Deste modo, conforme a definição desta variável, Equação (23), os campos b) e c) da Figura 15 participam na geração do campo a). O maior efeito da turbulência encontra-se acentuado próximo a Entrada 1, uma vez que a intensidade de turbulência é definida na condição de contorno, e na região de expansão da seção transversal do leito fluidizado. Há também uma variação perceptível da viscosidade turbulenta na altura da Entrada 2, causada pela posição ortogonal desta tubulação ao sentido do escoamento no leito fluidizado.

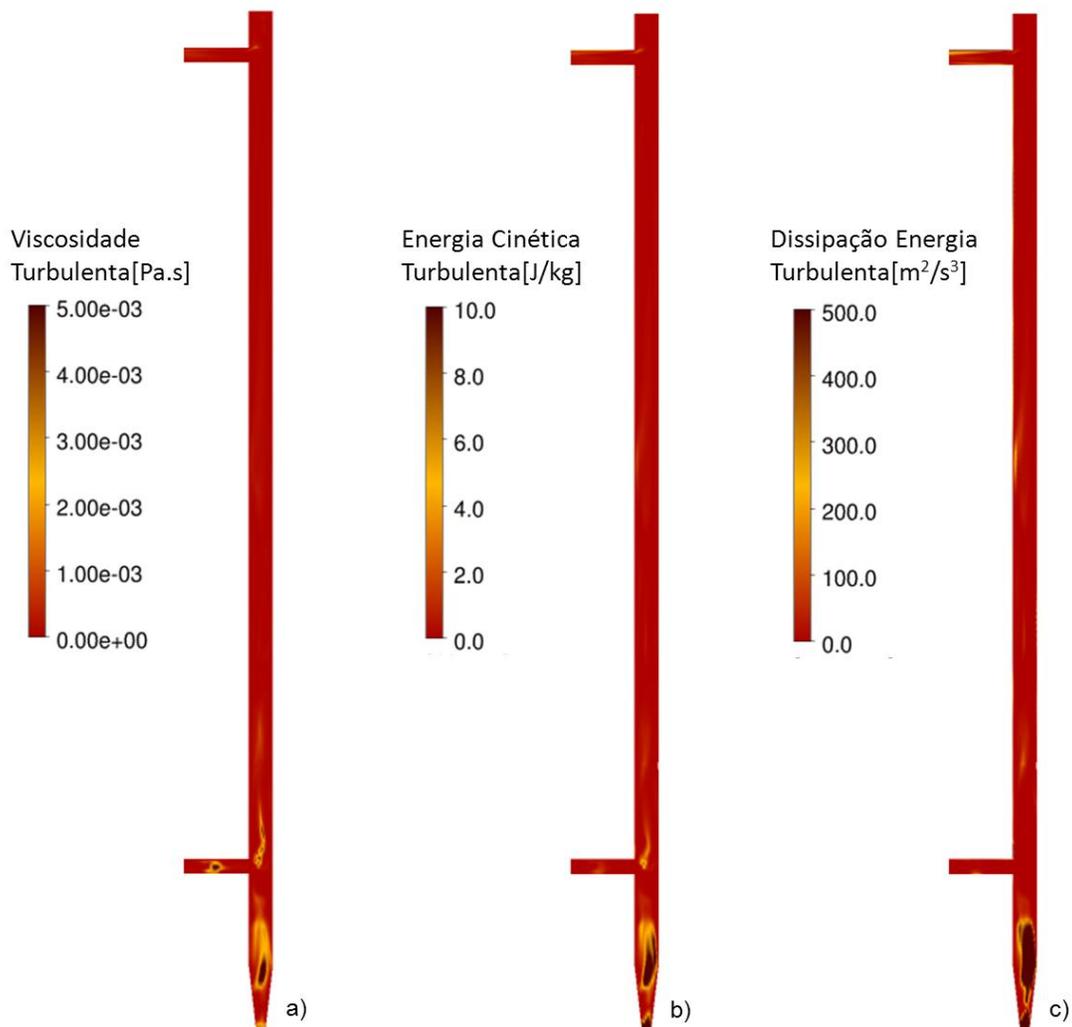


Figura 15. Campos instantâneos em 10 s de: a) viscosidade turbulenta; b) energia cinética turbulenta; c) dissipação da energia turbulenta da fase contínua.

Apesar da fase contínua ditar o sentido do escoamento, a influência causada pela presença da fase dispersa é o maior desafio na modelagem do leito fluidizado. O perfil de fração volumétrica médio ao longo do eixo axial no leito fluidizado apresentou um comportamento menos uniforme porém condizente ao reportado por alguns trabalhos na literatura (LIM et al. 1995, JIRADILOK et al. 2006, SCHLICHTHAERLE e WERTHER 2008, WU et al. 2010) para fluidização rápida. A curva do perfil apresentou pequena variação entre a concentração de sólidos na base e na região acima das entradas laterais do leito fluidizado, indicando portanto um leito ligeiramente dividido em duas regiões, a base um pouco mais densa e o topo diluída, Figura 16. A concentração de sólidos porém sempre manteve-se dentro da faixa encontrada em leitos fluidizados rápidos diluídos. Ainda foi

possível discernir duas alturas com valores relativamente altos de fração volumétrica de sólidos. O primeiro pico a partir da base corresponde a região da Entrada 2, pela qual os sólidos recirculados voltam ao leito fluidizado. Um segundo pico é encontrado no topo da região da saída em T do leito fluidizado, onde também há um acúmulo de sólidos, uma característica própria desta configuração de saída do leito fluidizado.

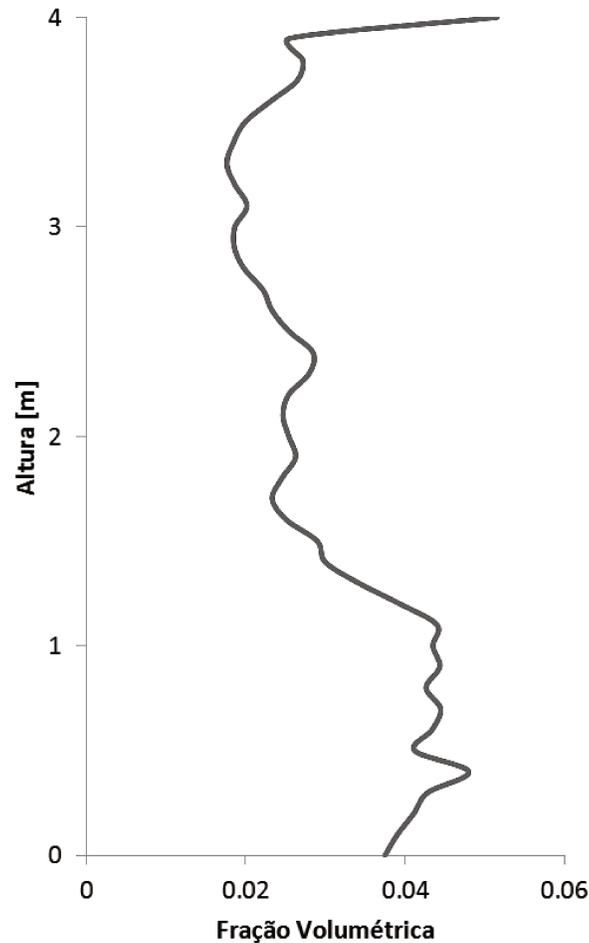


Figura 16. Perfil de fração volumétrica média da fase dispersa tirado a partir de médias na área de planos transversais ao longo do comprimento do leito fluidizado.

A análise da variação do fluxo mássico na saída do leito fluidizado confirmou o comportamento oscilatório obtido por outras pesquisas (SAMUELSBERG et al. 1996, WU et al. 2010, NIKOLOPOULOS et al. 2012) conforme gráfico apresentado na Figura 17. O sistema apresentou significativas variações no fluxo mássico de sólidos que deixam o leito fluidizado, uma consequência do escoamento turbulento e da distribuição não uniforme da fase dispersa no

interior do leito fluidizado. O valor médio do fluxo mássico da saída do leito fluidizado obtido pela simulação foi de  $59 \text{ kg/m}^2\text{s}$ . Como do circuito completo apenas o equipamento leito fluidizado foi considerado, a recirculação dos sólidos pela Entrada 2 apresenta a mesma variação da saída.

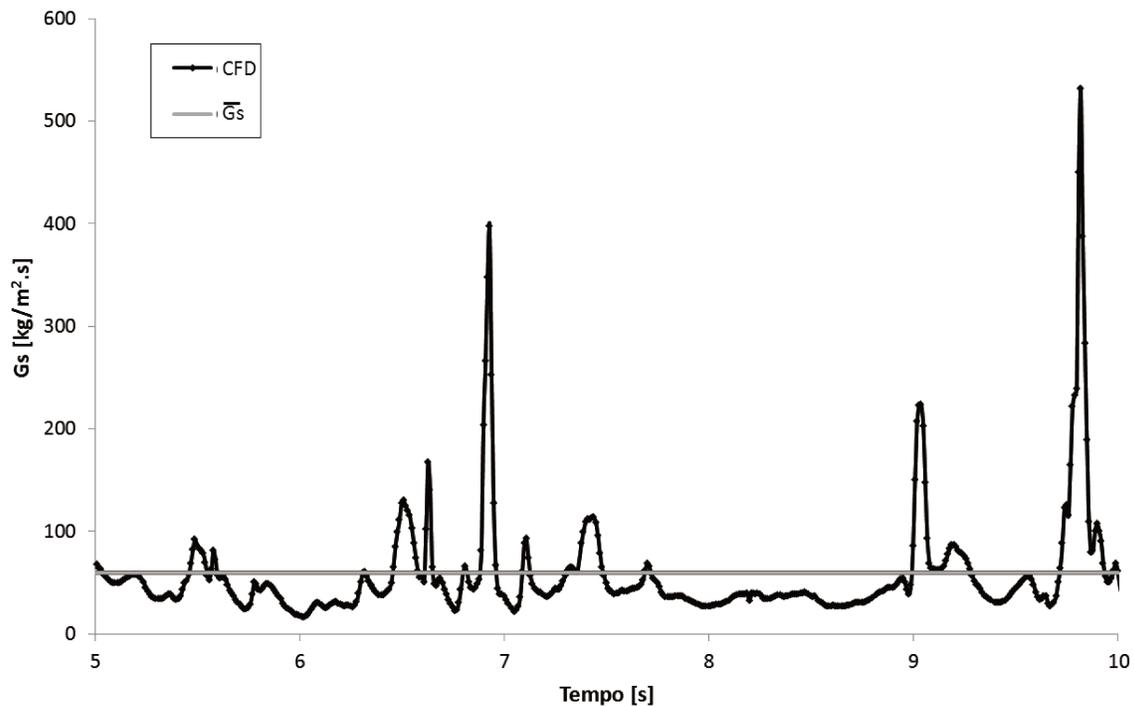


Figura 17. Histórico temporal do fluxo mássico de sólidos (areia), avaliada na saída do leito fluidizado simulado.

Como uma ferramenta adicional de análise, transpôs-se o histórico temporal do fluxo mássico de sólidos na saída para o espectro de potências. Assim, foi possível identificar aspectos cíclicos do escoamento e quantificar as frequências dominantes do sistema. Para tal finalidade, utiliza-se a transformada de Fourier. O procedimento desta metodologia foi descrito por CASTILHO (2011).

Vários trabalhos na literatura (BENYAHIA et al. (2000), DU et al. (2003), JIRADILOK et al. (2006), NIKOLOPOULOS et al. (2012)) utilizaram esta técnica para quantificar a escala de tempo dominante no escoamento multifásico. Segundo estes autores esta análise permite também identificar estruturas bem definidas, como bolhas ou a formação centro-anular em leitos fluidizados, pela presença de um significativo pico rodeado de outros menores. Entretanto, quanto

mais turbulento o leito, ou seja, maior grau de mistura do escoamento, menos definido torna-se este pico e passa-se a ter um perfil achatado.

Portanto, através da aplicação da transformada de Fourier, foi gerada a Figura 18. Os dados foram coletados para amostragem a cada 0,01 s, no intervalo de tempo de 5 a 10 s da simulação. A frequência dominante, representada pelo maior pico, corresponde a 0,36 Hz ou seja, a um tempo de aproximadamente 2,8 s. Este é o tempo característico do escoamento da fase sólida no leito fluidizado, condizente com valores encontrados experimentalmente por MALCUS et al. (2000). Outros picos menores estendem-se até 10 Hz, representando as oscilações menos intensas da Figura 17.

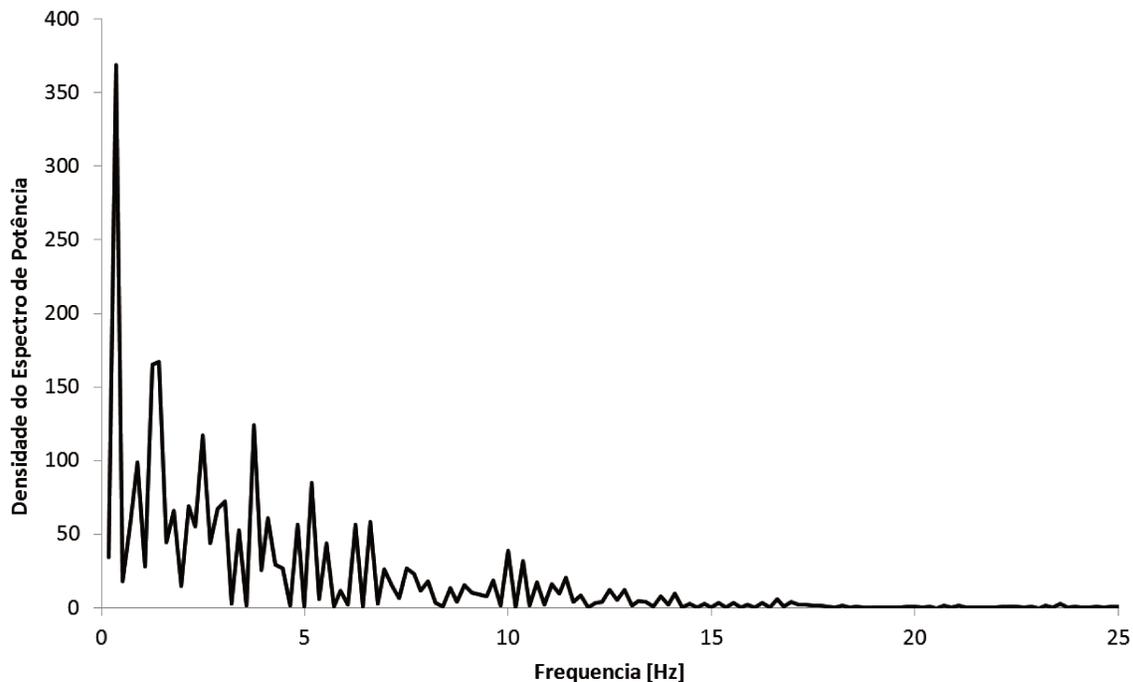


Figura 18. Análise do espectro de potência a partir do histórico temporal da Figura 15.

O padrão do escoamento gás-sólido obtido pela simulação se mostrou coerente com o reportado pela literatura (MASTELLONE e ARENA 1999, SALVATERA et al. 2005, BENYAHIA et al. 2007, WANG et al 2010b). A formação de uma configuração centro-anular foi confirmada no corpo do leito fluidizado, conforme visualizado na Figura 19. Embora a distribuição de sólidos no interior do leito fluidizado varie amplamente com o tempo, quando são considerados valores médios obtém-se um comportamento uniformizado.

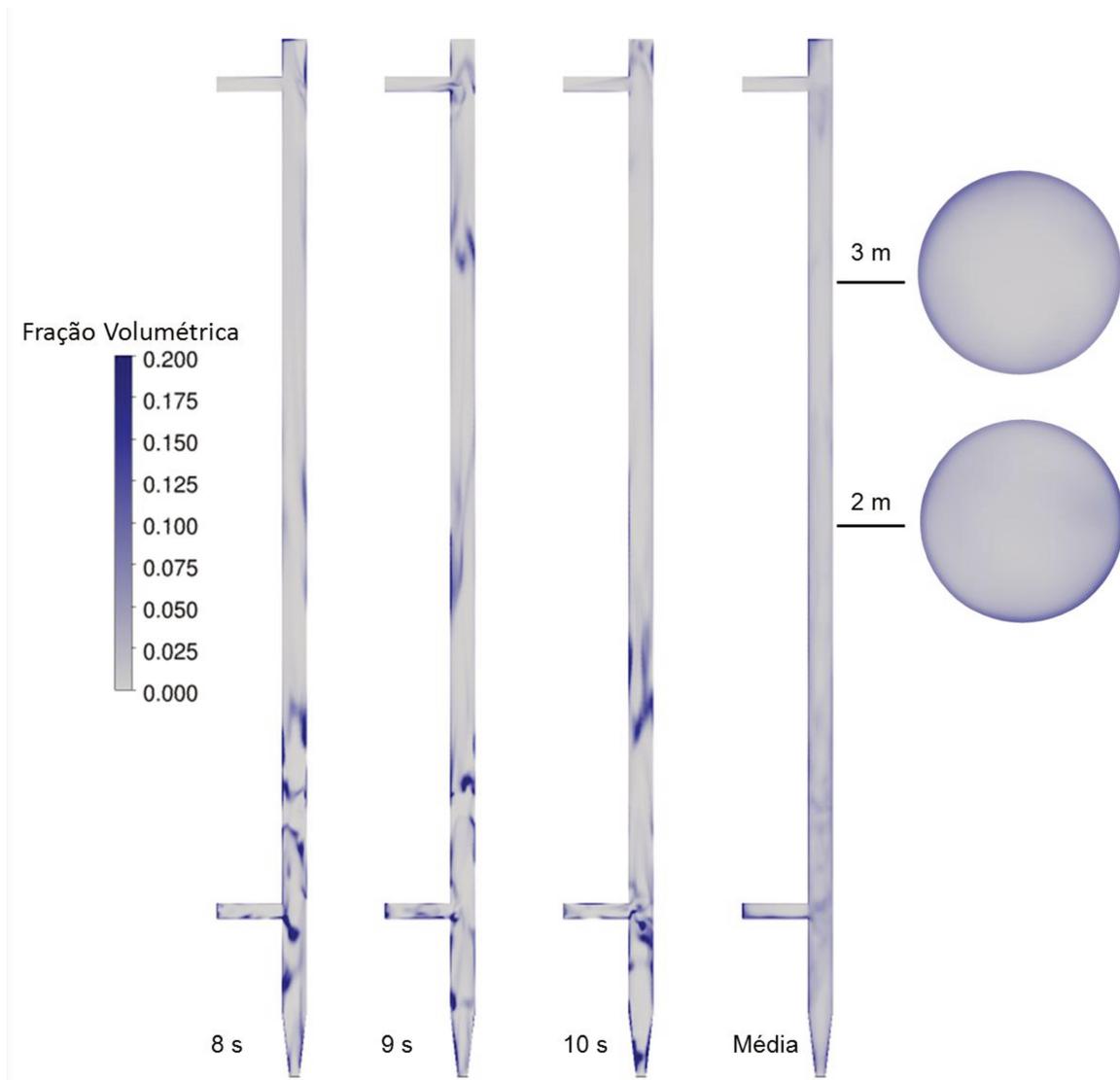


Figura 19. Campos de fração volumétrica da fase dispersa (areia) em 8 s, 9 s, 10 s e na média temporal, incluindo cortes transversais nas alturas de 2 m e 3 m.

Nesta configuração os sólidos tendem a se aglomerar na parede, enquanto no centro do escoamento, baixas concentrações de sólidos são registrados. O anel que se forma próximo às paredes pode se deslocar no mesmo ou no sentido oposto do escoamento, dependendo das condições operacionais (KARRI e KNOWLTON 1999), como visualizado nas Figura 20 e Figura 21.

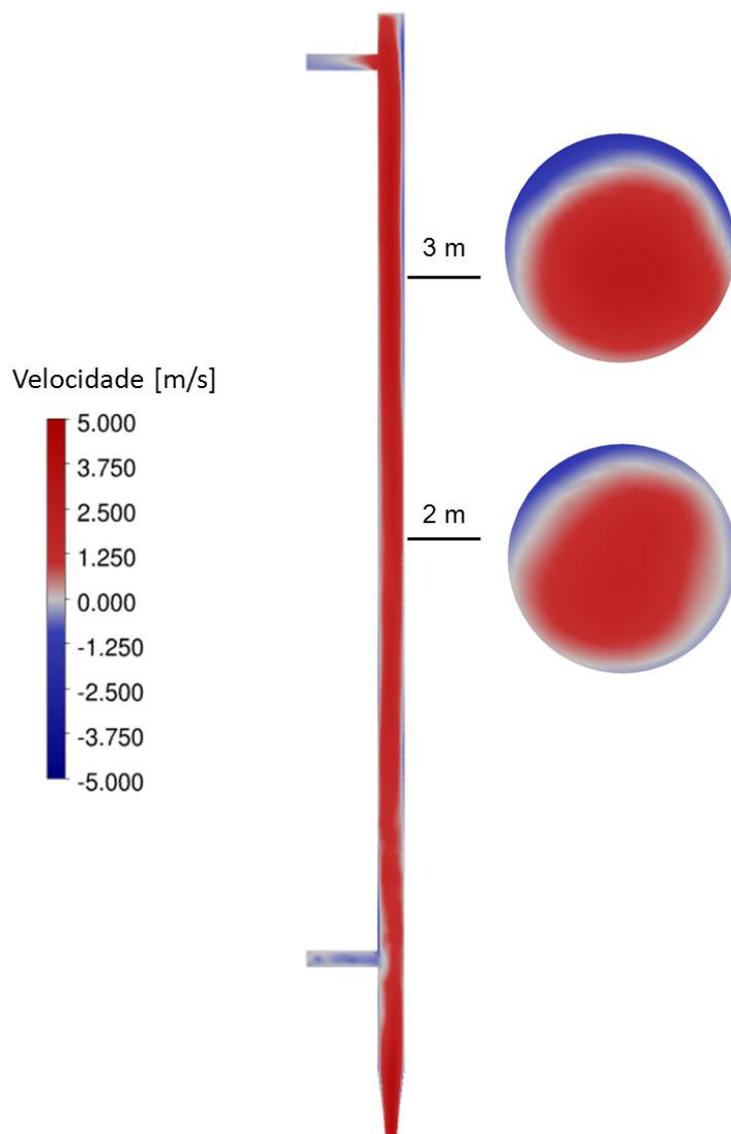


Figura 20. Campo da velocidade axial média da fase dispersa (areia) num plano central do leito fluidizado e em cortes transversais a 2m e 3m de altura.

Para a visualização do deslocamento do sólido no interior do leito fluidizado uma isosuperfície para a fração volumétrica de 15% de sólidos foi criada. A coloração desta indica a velocidade instantânea axial, que conforme apresentado na Figura 21, mostra o comportamento altamente variado do escoamento, com aglomerados de sólidos descendo ou mesmo subindo em algumas regiões, destacadas pelas cores azul e vermelho respectivamente. Quando analisado pelas médias temporais, este comportamento se torna menos volúvel e pode-se identificar um padrão de escoamento com maior facilidade.

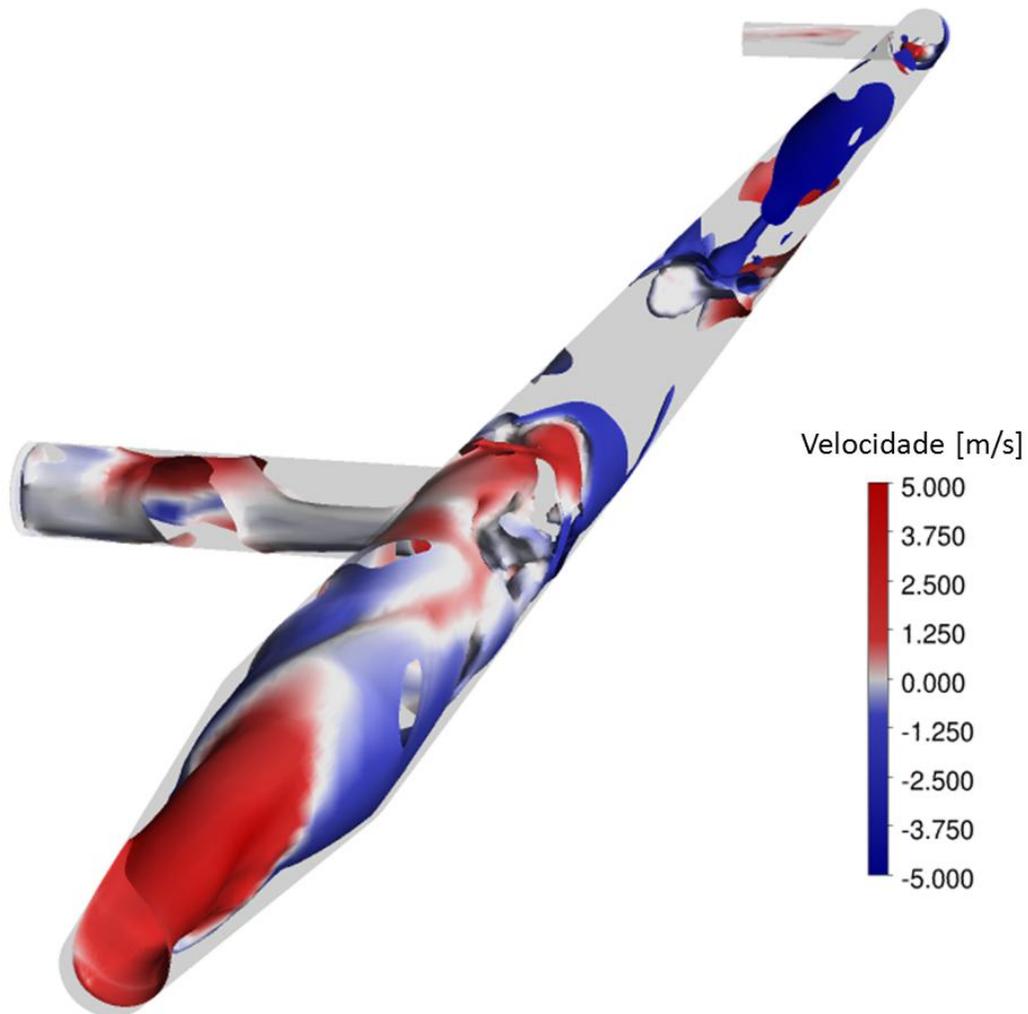


Figura 21. Isosuperfície para fração volumétrica de 15% da fase dispersa (areia) colorida de acordo com a velocidade axial da fase dispersa.

A presença de uma segunda fase no leito fluidizado modifica o comportamento do escoamento de modo significativo. A influência de uma fase sobre a outra pode ser exemplificada na Figura 22. O campo instantâneo de fração volumétrica da fase dispersa é sobreposto aos vetores velocidade de cada uma das fases. Pode-se notar que apesar das regiões com grandes concentrações de fração volumétrica, a fase contínua tende a um movimento predominantemente ascendente, com maiores velocidades nos caminhos livres que se formam na região central do

leito fluidizado. Já o comportamento da fase dispersa mostra uma recirculação interna e a dispersão dos sólidos quando o fluxo proveniente da Entrada 2 se encontra com o escoamento no corpo do leito fluidizado.

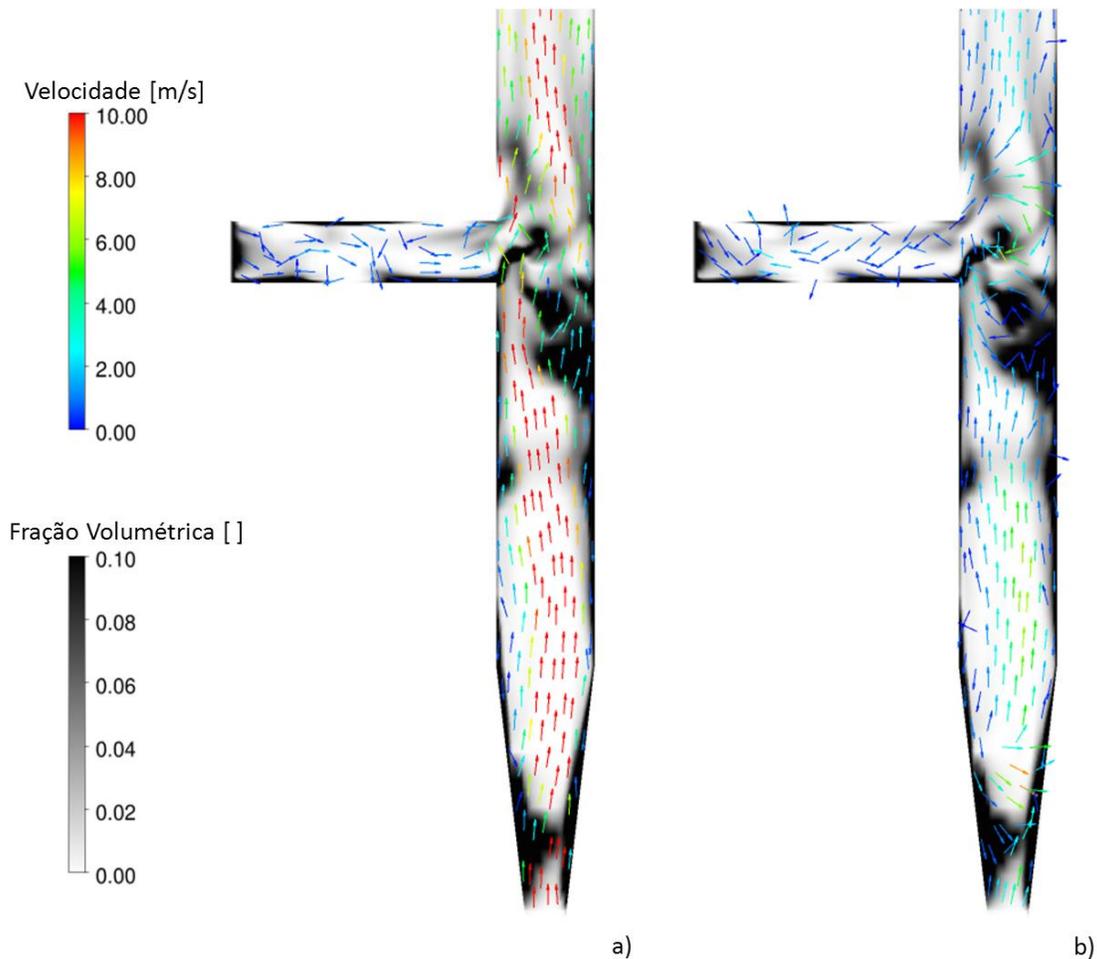


Figura 22. Campo da fração volumétrica instantânea da fase dispersa (areia) em 10 s de simulação, sob os vetores de velocidade da: a) fase contínua; b) fase dispersa.

O fenômeno que cria a configuração centro-anular pode ser melhor explicado quando se analisa a temperatura granular dos sólidos. Devido à inelasticidade parcial das colisões entre partículas e com a parede, uma fração de energia é dissipada, acarretando na redução local da temperatura granular. A tendência em regiões de baixa temperatura granular é ocorrer o aumento da concentração de partículas. As partículas se aglomeram formando *clusters*, reduzindo a área superficial de contato com a fase contínua, o que reduz a força de arraste, de modo que o

movimento descendente resultante do balanço de forças em cada partícula torna-se mais provável. Entretanto o aumento do movimento contrário ao fluxo da fase contínua aumenta a tensão de cisalhamento, o que por sua vez volta a aumentar a temperatura granular, afastando o material particulado das paredes. Na Figura 23 é possível identificar a relação descrita entre a tensão de cisalhamento, a temperatura granular e a fração volumétrica da fase dispersa para um corte na seção transversal do leito fluidizado.

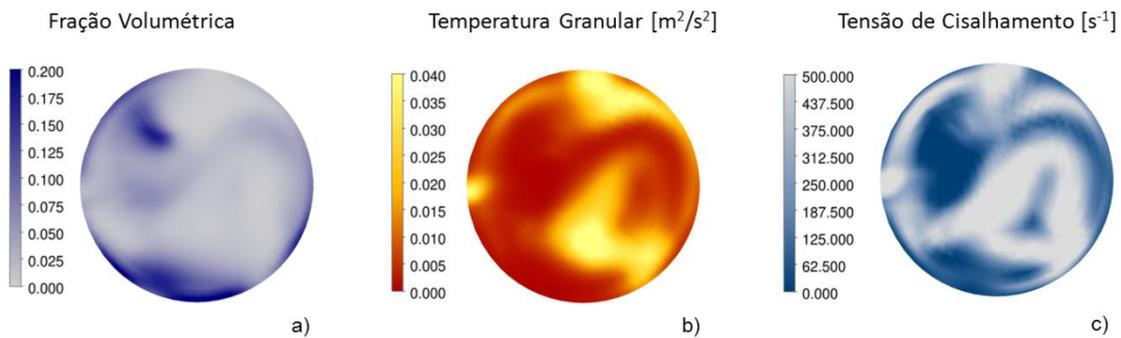


Figura 23. Cortes da seção transversal localizada a 2 m de altura, para as seguintes propriedades instantâneas da fase dispersa (areia) em 10 s de simulação: a) fração volumétrica; b) temperatura granular; c) tensão de cisalhamento.

Ao longo do comprimento do leito fluidizado, a temperatura granular apresenta valores elevados em algumas regiões como mostrado na Figura 24. Ainda conforme a Figura 19, para o mesmo instante de tempo, a maioria destas regiões possuem também maior concentração da fase particulada, o que indica tanto o processo de formação como de destruição dos *clusters* da fase dispersa.

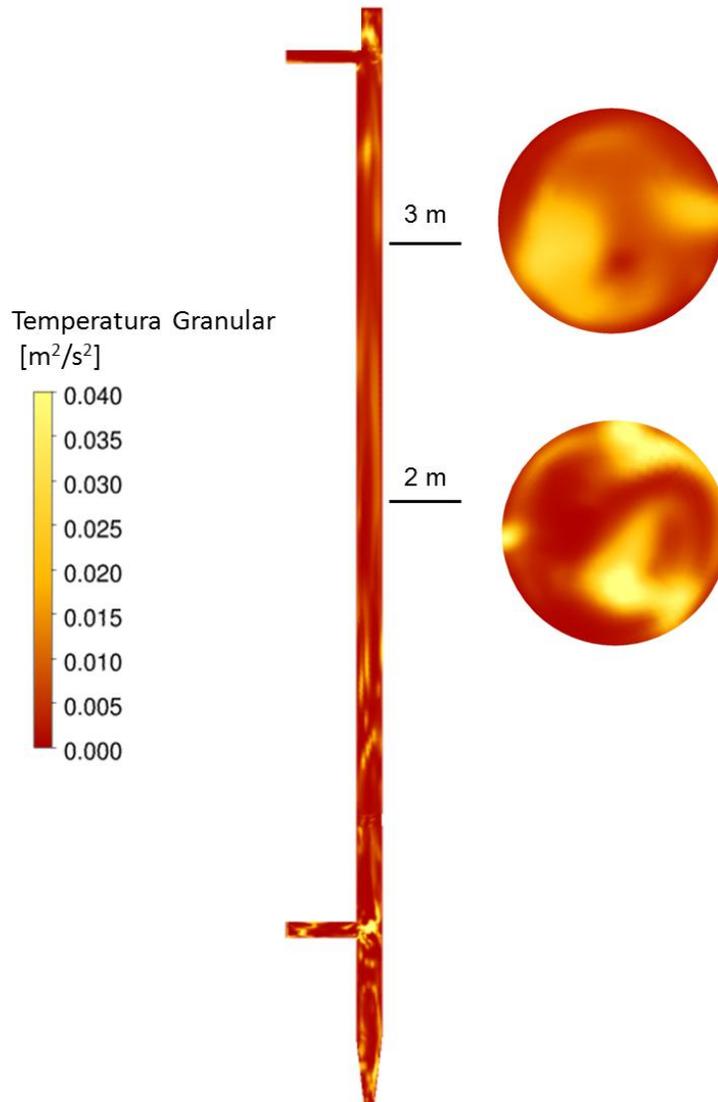


Figura 24. Temperatura granular da fase dispersa em 10 s de simulação.

A tensão de cisalhamento da fase dispersa atinge os maiores valores nas regiões onde as fases se chocam, como na seção em cone acima da Entrada 1 e na região adjacente à Entrada 2, Figura 25. É interessante notar também que a saída em T, assim projetada para reduzir o desgaste do material das paredes pelo constante atrito com partículas, apresenta uma região de maior tensão mas que logo antes da parede superior reduz-se bruscamente.

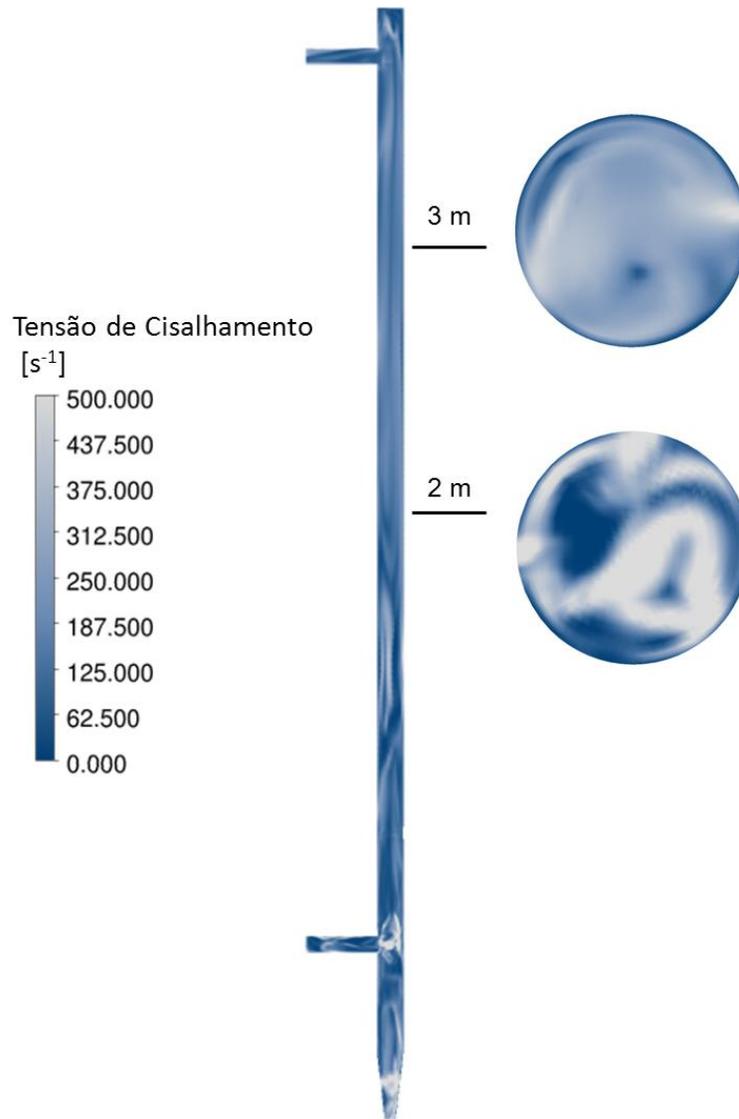


Figura 25. Tensão de cisalhamento instantânea da fase dispersa em 10 s de simulação.

A análise térmica do leito fluidizado foi validada por dados experimentais. O modelo de transferência de calor entre as fases considera um coeficiente global para leitos fluidizados. A Figura 26 apresenta a comparação do resultado simulado com dados experimentais da planta piloto.

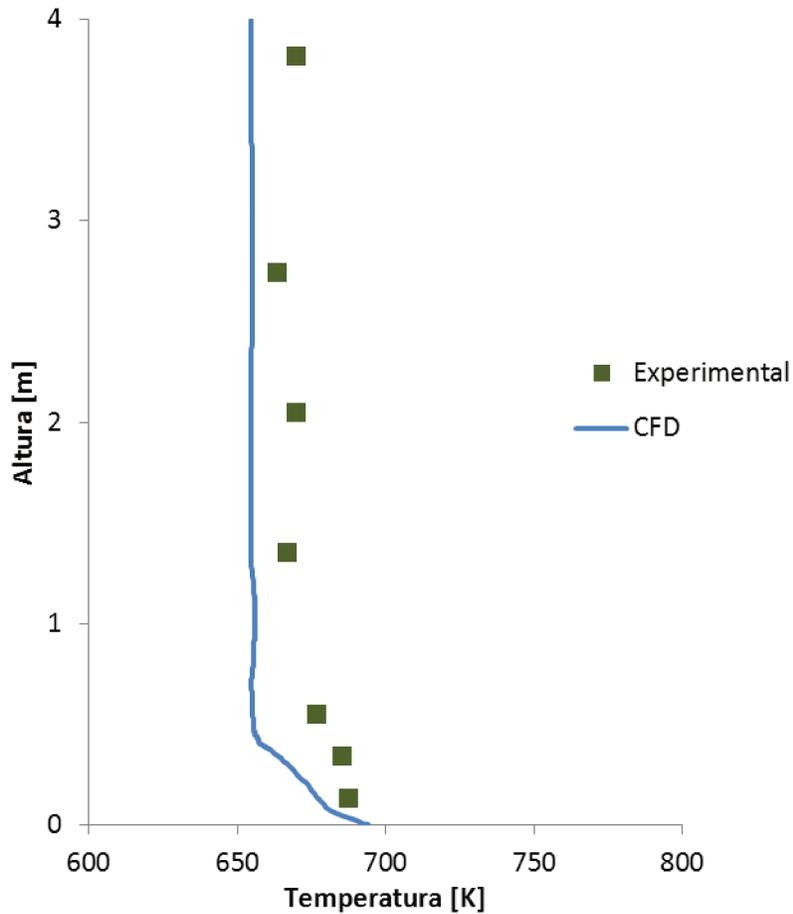


Figura 26. Perfil médio de temperatura da fase contínua (ar) no leito fluidizado, resultados experimentais e numéricos.

O perfil de temperatura é uma média temporal do leito fluidizado, correspondente à posição axial dos termopares na planta piloto. Da base até a região da reentrada de sólidos provenientes da recirculação externa, o perfil simulado ficou abaixo dos pontos experimentais em 22 K e 21 K para o segundo e terceiro ponto respectivamente, ou seja, um desvio de no máximo 3%. Já acima do primeiro metro do leito fluidizado os dados simulados encontram-se bem próximos aos experimentais, com desvio máximo de 2,3% para altura de 3,8 m. Isto indica que não somente a modelagem da transferência térmica mas também a descrição do escoamento na região superior do leito fluidizado encontra-se em bom acordo com o comportamento do equipamento.

Deve-se ainda salientar que o ponto relativo à altura de zero metros na Figura 26 corresponde ao início da seção cilíndrica do leito fluidizado. Os 260 mm referentes à seção cônica não possuem pontos de termopares na unidade experimental, de modo que a primeira informação

térmica do sistema só é obtida 130 mm acima da base cilíndrica. A necessidade de planejamento dos experimentos em consonância com os modelos da simulação numérica é uma das principais dificuldades encontradas para a resolução de um problema por CFD. Deste modo foi necessário estimar a temperatura de condição de contorno na Entrada 1, uma vez que para a correta previsão da fluidodinâmica do escoamento multifásico, a inclusão da seção cônica do leito fluidizado era indispensável. A temperatura média do termopar localizado logo após a saída do sistema de aquecimento dos gases de fluidização do leito fluidizado foi escolhida, considerando-se que as perdas térmicas entre os aquecedores e o leito fluidizado são desprezíveis.

A previsão da distribuição de temperatura no interior do leito fluidizado sem reações químicas apresenta-se bastante uniforme, como mostrado na Figura 27. Visando simplificar o problema, a temperatura de ambas as fases na condição de contorno para a Entrada 2 foi definida como sendo a medida experimental do termopar localizado na perna horizontal da válvula-L, uma vez que o intuito do trabalho foi considerar apenas a geometria do leito fluidizado. Esta temperatura é inferior à média no leito fluidizado pois há a necessidade de injeção de ar a temperatura ambiente para auxiliar na fluidização no material particulado proveniente do ciclone, bem como devido às perdas térmicas no restante do circuito do LFC. Apesar das correntes da Entrada 2 entrarem a uma temperatura significativamente inferior ao gás de fluidização da Entrada 1, o equilíbrio térmico entre as correntes é logo alcançado, mantendo-se estável até a saída, apresentando uma ligeira queda como consequência da perda de calor pelas paredes.

A diferença de temperatura entre as fases determinada pelo caso simulado é pequena, estando de acordo com o comportamento esperado para esta categoria de leito fluidizado, pelas altas taxas de transferência de calor encontradas. A média temporal apresentada indica que no corpo do leito fluidizado ocorre uma rápida equalização da temperatura das correntes de entrada de ar, dos sólidos recirculados externamente ao leito fluidizado e dos sólidos que recirculam internamente no leito fluidizado.

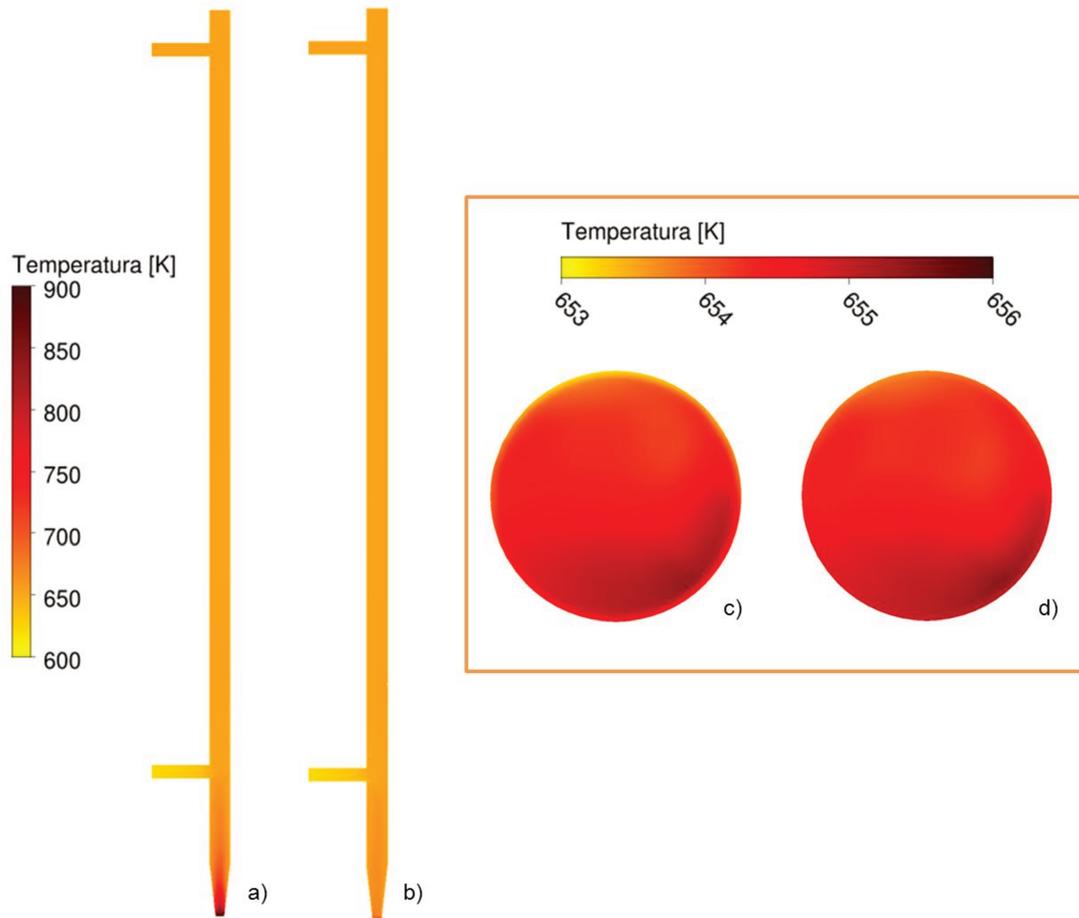


Figura 27. Campo de temperatura médio: a) corte axial para fase contínua (ar); b) corte axial para fase dispersa (areia); c) corte transversal para fase contínua (ar) a 1,5 m de altura; d) corte transversal para fase dispersa (areia) a 1,5 m de altura.

A principal finalidade do estudo fluidodinâmico e térmico sem reações químicas foi encontrar uma modelagem que representasse adequadamente o escoamento gás-sólido com transferência de calor entre as fases. Uma vez determinado o conjunto de modelos matemáticos que representam este escoamento, pode-se analisar a inclusão do carvão mineral no sistema e as transformações químicas associadas, descritas na seção que segue (Caso 2).

## 4.2 Caso 2: Com Reação Química

A simulação da queima de carvão mineral introduziu novas formas de abordar o problema do ponto de vista matemático. Os resultados obtidos com os diferentes modelos testados são apresentados nesta seção.

### 4.2.1 Condições Operacionais e de Contorno

As condições de operação da planta na etapa de combustão de carvão no sistema de CFBC também foram apresentadas pelo trabalho experimental de RAMIREZ-BEHAINNE (2007). Após a etapa de pré-aquecimento, quando o leito já estava a circular a uma temperatura estável suficiente para a ignição do combustível, foram iniciados os estudos da combustão de carvão. Assim como para a etapa anterior, o autor realizou uma série de experimentos orientados pelo planejamento composto central. Destes, foi escolhido o central, sobre o qual todos os testes de modelos foram efetuados. As principais condições do ensaio são apresentadas na Tabela 10.

Tabela 10. Resumo das condições operacionais do CFBC na fase de combustão dos ensaios escolhidos de RAMIREZ-BEHAINNE (2007).

Pressão, $p$	Atmosférica
Temperatura média, $T$	1106 K
Velocidade de fluidização no leito fluidizado, $v_f$	8,5 m/s
Inventário de sólidos inertes inicial, $I$	5 kg
Excesso de ar	25%

Apesar da geometria do equipamento ser a mesma, foi introduzida uma nova entrada para contemplar a alimentação do carvão mineral. A nova geometria, aplicada ao caso 2, é mostrada na Figura 28.



Figura 28. Detalhes das entradas e saída na geometria criada para o leito fluidizado do CFBC para o estudo de combustão.

A escolha da forma simplificada e do comprimento da Entrada 3 foi determinada pelo *trade-off* entre a semelhança com o mecanismo real de injeção de carvão e o custo computacional adicional estimado pela presença da entrada. Um esquema do mecanismo de injeção pneumático utilizado na planta é mostrado na Figura 29. Pode-se notar que apesar do carvão particulado descer pelo tubo de alimentação por uma distância de pelo menos 680 mm, somente na ponta

próxima ao corpo do leito fluidizado é liberado o fluxo de ar que auxilia a injeção das partículas. Deste modo, foi decidido criar um tubo de alimentação de apenas 40 mm de comprimento, na extremidade do qual a injeção de carvão estaria localizada.

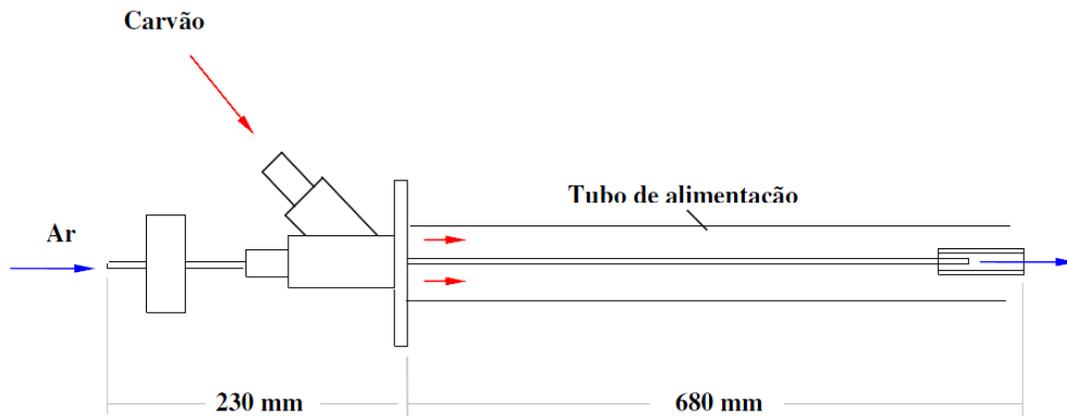


Figura 29. Esquema do injetor pneumático de carvão mineral instalado na planta. Adaptado de RAMIREZ-BEHAINNE (2007).

Na simulação do processo de combustão, além do ar atmosférico e da areia já presentes no sistema, há injeção de carvão mineral como material combustível. Assim como no Caso 1, os dois primeiros foram considerados como fase contínua e dispersa respectivamente, sendo ambas representadas pela abordagem Euleriana. Já para representar o carvão e as transformações deste, decorrentes do processo de queima, considerou-se cada partícula discretamente através de uma abordagem Lagrangeana. As condições de contorno para o ensaio incluído no Caso 2 estão apresentadas da Tabela 11. A hipótese do encolhimento do núcleo foi aplicada, ou seja, o diâmetro das partículas permanece constante, somente a massa específica varia a medida que esta perde massa durante a queima.

A injeção da fase Lagrangeana ocorreu na superfície das Entradas 2 e 3. Cada face dos volumes de controle que as compõe contém um ponto de injeção. Esta forma de alimentar as partículas de carvão mostrou ser mais adequada, principalmente para a simulação do caso paralelizado. O número de correntes assim criadas foi significativo e permitiu boa representação do escoamento.

Deve-se salientar que a temperatura da Entrada 1 não foi obtida por medição experimental, mas sim determinada com base na informação colhida pelo primeiro termopar na

base do leito fluidizado. Esta escolha foi considerada em detrimento à temperatura na saída do compressor, que está localizado a uma maior distância da condição de contorno da simulação, não sendo portanto representativo daquela região. Ainda assim, testes numéricos preliminares revelaram que a variação da condição de contorno térmica da Entrada 1 não tem efeito significativo no perfil de temperatura do leito.

Tabela 11. Condições de contorno do Ensaio 1 do Caso de Estudo 2.

	Fase Contínua	Fase Dispersa	Fase Discreta
<b>Entrada 1</b>	Fluxo mássico: $1,87 \cdot 10^{-2}$ kg/s; Intensidade de Turbulência: 4,8%; Temperatura: 1100 K		
<b>Entrada 2</b>	Fluxo mássico: $3,889 \cdot 10^{-4}$ kg/s; Intensidade de Turbulência: 5%; Temperatura: 1103 K	Fluxo mássico: Função de reciclo; Temperatura: 1103 K	Fluxo mássico: $3,9 \cdot 10^{-3}$ kg/s; Temperatura: 1103 K
<b>Entrada 3</b>	Fluxo mássico: $1 \cdot 10^{-3}$ kg/s; Intensidade de Turbulência: 5%; Temperatura: 313 K		Fluxo mássico: $2,5 \cdot 10^{-3}$ kg/s; Temperatura: 313 K
<b>Saída</b>	Pressão relativa: 0 Pa	Pressão relativa: 0 Pa	Pressão relativa: 0 Pa
<b>Paredes</b>	Não-deslizamento	Livre-deslizamento	Restituição: 0,94 <sup>#</sup>

<sup>#</sup> segundo ZHANG e REESE (2003)

Nos testes experimentais, dolomita foi acrescentada ao carvão como forma de reduzir a emissão de SO<sub>2</sub> na atmosfera. Porém o estudo da calcinação e sulfatação da dolomita não entrou

no escopo deste trabalho. Ainda assim a presença da dolomita e alguns de seus efeitos no sistema foram considerados. A alimentação da Entrada 3 é constituída por 92,3 % de carvão e 7,7% de dolomita. A análise elementar desta última, segundo RAMIREZ-BEHAINNE (2007), indicou uma composição com 17% de cálcio e 8,1% de magnésio. Estes componentes estão presentes na forma de carbonatos e apenas o carbonato de cálcio sofre reação química nas condições de combustão. O balanço foi resumido na Figura 30.

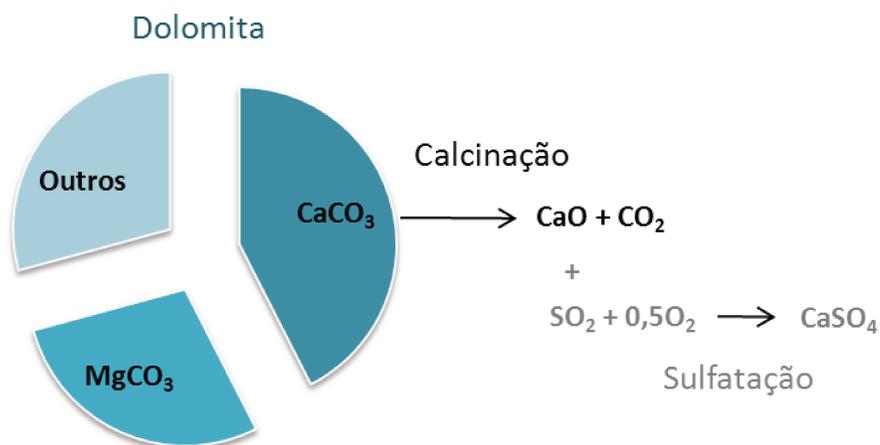


Figura 30. Composição da dolomita utilizada nos testes de combustão e as respectivas reações sofridas.

Apesar deste processo não ter sido modelado, a produção de CO<sub>2</sub> pela reação de calcinação foi considerada na determinação das condições de contorno do problema. Conforme SOTUDEH-BHAREBAAGH et al. (1998) o processo de calcinação ocorre em uma escala de tempo pequena, sendo portanto considerado instantâneo neste trabalho. Assim, pela fração de CaCO<sub>3</sub> e pela vazão mássica de dolomita, chega-se à vazão mássica de dióxido de carbono, cuja fração em relação à corrente de ar pode ser então determinada e aplicada como condição de contorno da fase contínua na Entrada 3. O valor encontrado foi de 3,6% em massa. Já o calor de reação da calcinação consome 133 J/s para a carga de dolomita considerada na operação do experimento, ao passo que a capacidade térmica da planta é de 48,9 kJ/s, ou seja menos que 0,3% do calor gerado e portanto pouco significativo ao balanço térmico, tendo sido negligenciada neste trabalho.

A modelagem implementada para descrever o sistema reacional é apresentada na Tabela 12. Apenas são citados aqui os aspectos da modelagem que foram posteriormente variados, tendo sido todos detalhados no Capítulo 3.

Tabela 12. Modelagem reativa base inicial do Caso 2.

Modelo para reação heterogênea	Difusão e Cinética
Produto gerado pela reação heterogênea	Monóxido de Carbono
Comportamento da partícula discreta	Diâmetro constante, massa específica variável
Condição de contorno na parede	Temperatura prescrita
Inventário de sólidos inertes	Inicial

#### 4.2.2 Malha Numérica

A partir do Caso 1, foram realizados os estudos das simulações do processo de queima de carvão em leito rápido. Inicialmente foi considerada a simplificação da geometria para um domínio bidimensional. Entretanto testes iniciais com a modelagem trifásica apresentaram sérios problemas de divergência numérica. Assim passou-se a uma geometria tridimensional, porém com uma malha bastante grosseira, visando testar a viabilidade dos modelos selecionados. Esta malha inicial contém 20 mil volumes e através dela foi possível obter resultados parciais rápidos.

A análise transiente é característica intrínseca ao escoamento multifásico em leito fluidizados, conforme mostrado no Caso 1. A adição de uma terceira fase conservou este aspecto da modelagem, apesar de existir a possibilidade de incluí-la em regime permanente. Esta opção porém se mostrou impraticável devido a problemas de convergência. A descrição das três fases em função do tempo acrescentou maior estabilidade na solução e gerou resultados coerentes com o comportamento esperado do sistema. É importante ressaltar que os resultados que são apresentados como médias no tempo referem-se apenas aos últimos 5 segundos de um total de 10 segundos simulados. Esta medida visa a reduzir o efeito da condição inicial sobre as médias, bem como produzir resultados que possam ser validados com dados experimentais também médios.

Como as condições de operação, bem como as características do processo, diferem do Caso 1, foi realizado novo teste de independência de malha com resultados. Foram escolhidas cinco malhas entre 20 mil e 600 mil volumes de controle. A modelagem completa do problema, ou seja, multifásica e reativa, foi utilizada para realização do teste de malha, cujos resultados podem ser visualizados na Figura 31.

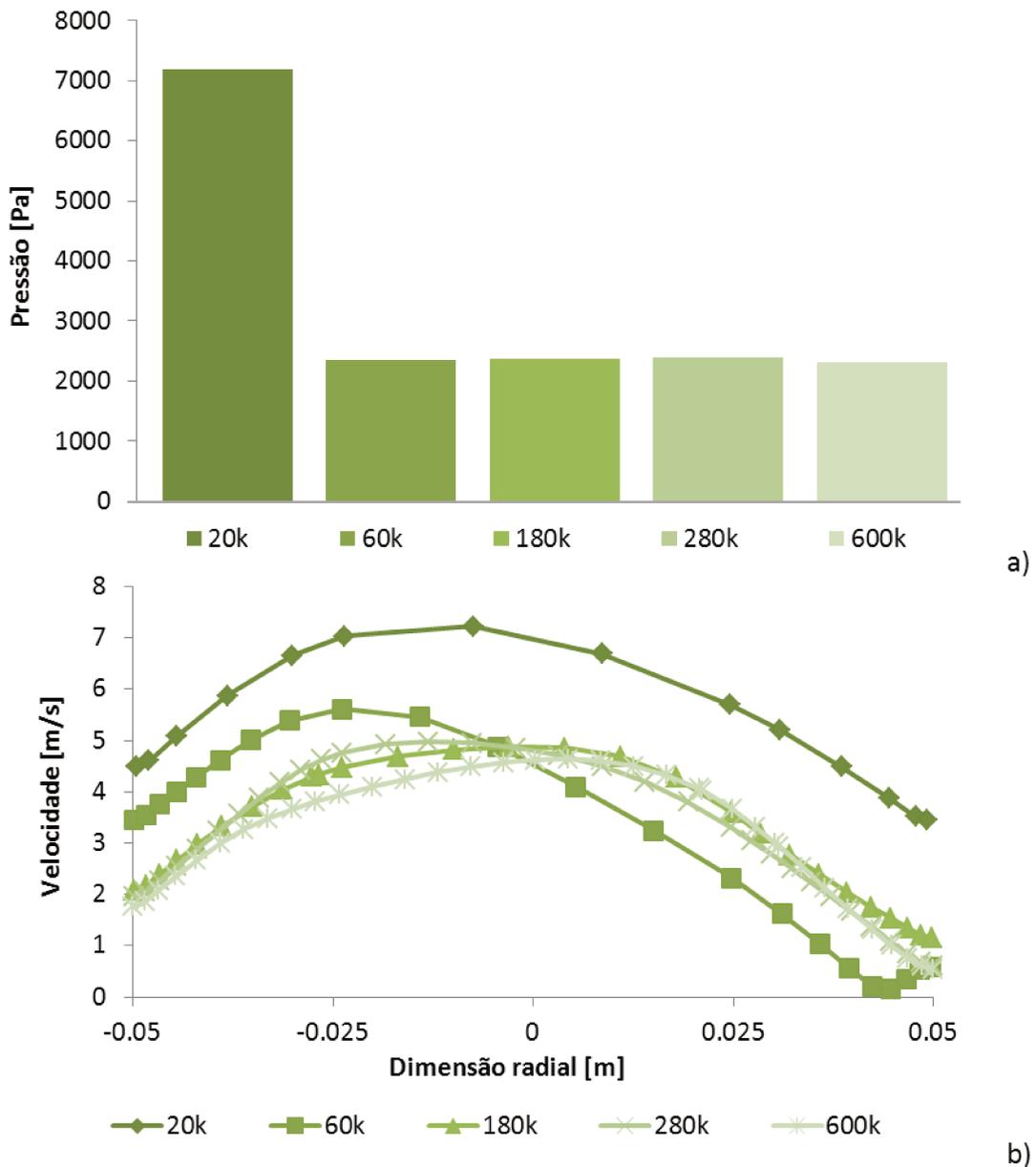


Figura 31. Comparação de diferentes malhas numéricas para o Caso 2, comparando: a) diferença de pressão relativa entre a base e a saída; b) perfil médio da velocidade axial da fase dispersa ao longo do eixo radial na altura de 3m.

Conforme a análise da diferença de pressão, todas as malhas apresentaram resultados similares, com excessão da mais grosseira, ficando a escolha entre as quatro restantes. Como os perfis de velocidade das três malhas mais refinadas ficaram muito próximos, a intermediária destas foi a escolhida. Apesar da maior complexidade do caso simulado, foi necessário considerar também o tempo computacional para o problema trifásico, de modo que uma malha menos refinada que no Caso 1 foi selecionada. Detalhes da malha hexaédrica elegida são destacados na Figura 32.

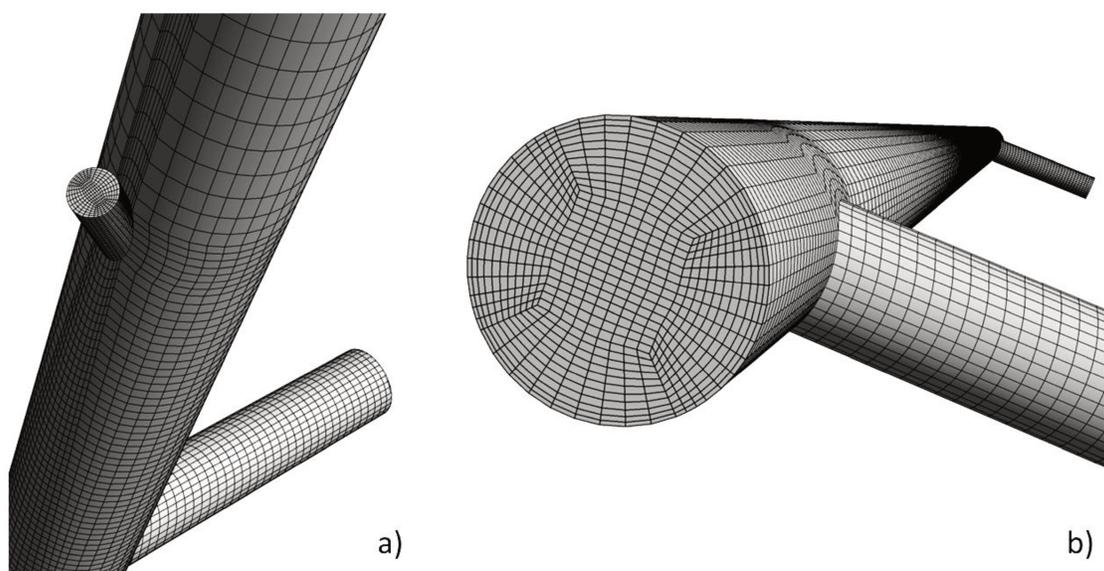


Figura 32. Malha numérica do leito fluidizado, em detalhe: a) entrada de combustível; b) saída com configuração em T

A qualidade desta malha também passou pela mesma avaliação de critérios do Caso 1. A Tabela 13 apresenta os dados de qualidade da malha de 280 mil volumes selecionada para este caso. Ressalta-se que o volume mínimo é inferior aquele da malha selecionada para o Caso 1 uma vez que para o duto da Entrada 3 foram requeridos menores volumes de controle.

Tabela 13. Critérios de qualidade para a malha hexaédrica de 280 mil volumes de controle selecionada para o Caso 2.

Volume médio das células	$1,78 \cdot 10^{-7} \text{ m}^3$
Volume mínimo de célula	$2,84 \cdot 10^{-10} \text{ m}^3$
Ângulo mínimo	$25,83^\circ$
Determinante mínimo	0,188
Razão de aspecto máxima	18,4

O desequilíbrio de massa gerado pela solução numérica para este caso foi maior uma vez que há reações químicas e uma terceira fase. Ainda assim, os valores gerados são várias ordens de grandeza menores que as vazões mássicas do sistema, garantindo assim a conservação da massa nas simulações. A Figura 33 mostra as isosuperfícies do desequilíbrio de massa para o tempo de 10 s de simulação.



Figura 33. Isosuperfícies no leito fluidizado em 10 s de simulação do Caso 2 para os desequilíbrios mássicos de: a)  $1.10^{-11}$  kg/s; b)  $1.10^{-8}$  kg/s .

O tempo computacional requerido para rodar um caso trifásico reativo na malha empregada é de aproximadamente 30 dias em 8 processos paralelos em núcleos Intel Xeon *quadcore* 2,93 GHz e 16 GB de memória. Os parâmetros do solver numérico foram os mesmos utilizados para o Caso 1, salvo o passo de tempo máximo utilizado agora como  $2.10^{-4}$  s.

O Caso 1 serviu como base de teste para a modelagem do sistema reativo. A maior complexidade introduzida pelo processo de queima de carvão sólido fez com que algumas novas considerações fossem necessárias. Os principais desafios enfrentados até alcançar um modelo estável e mais realista são discutidos a seguir.

### **4.2.3 Determinação da Corrente de Reciclagem**

Uma das preocupações iniciais para a simulação da queima de carvão mineral no leito fluidizado foi determinar uma metodologia para o reciclo de sólidos. Similarmente ao Caso 1, utilizou-se os dados gerados pelo modelo semi-empírico para a determinação da condição inicial do inventário de sólidos no leito fluidizado. Porém com a adição de uma corrente alimentando continuamente carvão mineral ao sistema, tornou-se necessário desenvolver uma forma de quantificar as partículas que deixam o leito fluidizado, bem como sua composição, uma vez que as reações de queima alteram as propriedades do carvão. Ainda mais, como o LFC opera em regime de rápida fluidização, o tempo de residência das partículas é baixo, o que significa que uma partícula de carvão alimentada no sistema passará mais de uma vez pelo leito fluidizado até ter todo o seu conteúdo de carbono consumido. Deste modo a conversão da queima do coque foi o parâmetro identificado como determinante na taxa de reciclo das partículas de carvão.

Um modo de determinar a taxa mássica do reciclo seria através de uma condição de contorno iterativa, variando a vazão e composição do carbono de reciclo de acordo com os dados da saída do leito fluidizado. Entretanto o tempo computacional requerido para alcançar uma condição permanente, na qual a composição e vazão de saída fossem independentes da entrada foi considerado demasiado elevado. A alternativa encontrada consistiu em calcular a variação média das propriedades do carvão e determinar a vazão mássica média de recirculação através da conversão do carvão em cada ciclo no leito fluidizado. O processo pode ser descrito nas quatro etapas a seguir:

- Encontrar, através de resultados prévios da simulação CFD, a conversão média das partículas de carvão deixando o leito fluidizado quando carvão é unicamente alimentado pela Entrada 3;
- Calcular quantos ciclos cada partícula precisaria para ter uma conversão final de 92%, conforme dados da unidade experimental;

- Adicionar a corrente de reciclo de carvão com as propriedades médias de massa específica e fração mássica de carbono na simulação CFD;
- Analisar a nova composição de saída e corrigir as propriedades e vazão de recirculação.

Foi observado que o quarto passo não precisou ser repetido, uma vez que a composição de saída média das partículas de carvão permanecia muito próxima do valor anteriormente estimado. Assim foi possível simular o processo de combustão apenas no leito fluidizado, desprezando o circuito completo.

A distribuição da fase dispersa no interior do leito fluidizado apresentou comportamento similar ao encontrado para o Caso 1. Detalhes do escoamento da fase inerte são retratados na Figura 34 para diferentes instantes de tempo e para a distribuição média.

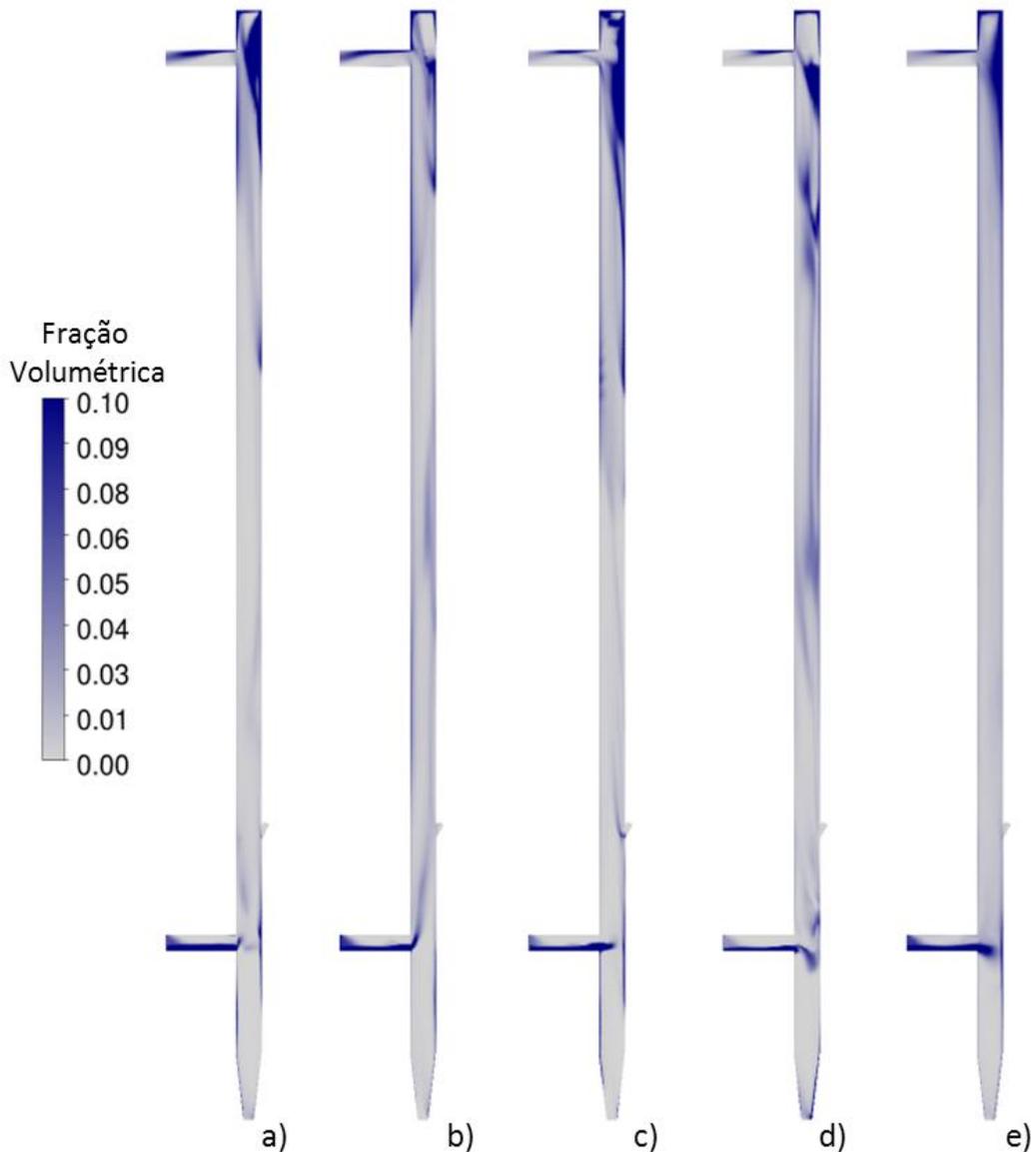


Figura 34. Campo de fração volumétrica da fase dispersa (areia) em: a) 7 s; b) 8 s; c) 9 s; d) 10 s; e) média temporal.

Já a distribuição instantânea da fase discreta, Figura 35, mostra um comportamento similar a outra fase sólida. Apesar desta fase ser discreta, durante o pós processamento passou-se esta informação para um campo de concentração mássica das partículas de carvão. Deste modo é possível ver que a vazão uniforme proveniente das Entradas 2 e 3 encaminham-se para o fluxo principal do leito fluidizado, quando são então dispersadas pelo escoamento central ascendente do gás. Assim como para a fase inerte dispersa, as partículas Lagrangianas também se acumulam no

topo do leito fluidizado, comportamento esperado como consequência da configuração geométrica da saída em T. No corpo do leito fluidizado há uma distribuição de partículas tanto pelo centro, cuja velocidade é maior, como pelas paredes, por onde o fluxo descendente das fases Eulerianas conduz o carvão a recircular internamente. Para comparação em termos de fração volumétrica, a concentração de  $1 \text{ kg/m}^3$  para as partículas cuja massa específica varie entre recém injetadas e totalmente queimadas, fica na faixa de  $6 \cdot 10^{-4}$  a  $1,3 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3_{\text{carvão}}/\text{m}^3_{\text{totais}}$ , respectivamente.



Figura 35. Campo da concentração mássica da fase discreta (carvão) nos instantes de tempo: a) 7 s; b) 8 s; c) 9 s; d) 10 s.

#### 4.2.4 Características do Escoamento Reativo

Partindo do caso com a modelagem inicial do problema, Tabela 12, pode-se analisar o comportamento do sistema reativo como consequência dos modelos implementados. Os principais efeitos do conjunto de reações exotérmicas que compõem o sistema podem ser percebidos pela análise da fase contínua. A Figura 36 mostra os ganhos de energia do sistema devido às reações homogêneas e heterogêneas. A intensidade destas é significativa na região central do leito fluidizado, porém também ocorrendo acima da Entrada 2. Ganhos negativos foram registrados logo abaixo da Entrada 3, devido à evaporação da umidade presente no carvão e à devolatilização.

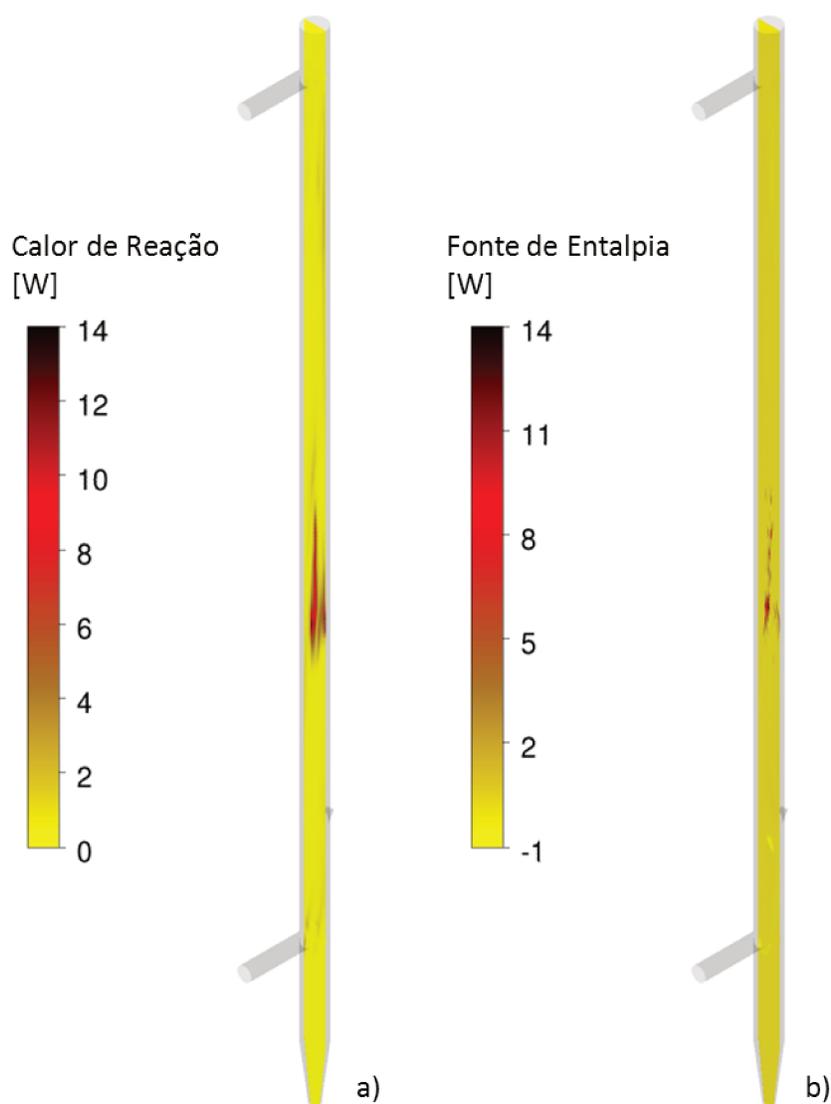


Figura 36. Campos instantâneos em 10s de: a) Calor de reação das transformações homogêneas; b) Calor devido ao termo fonte da fase discreta (carvão) relacionado a mudança de fase.

Quando o processo de combustão ocorre, a temperatura no sistema deixa de ser uniforme como na etapa de aquecimento e passa a apresentar regiões com diferenças significativas tanto ao longo do eixo axial como do radial. A fase contínua sofre mudanças em suas propriedades físicas nestas condições de operação, que devem ser consideradas para a simulação do processo. Duas destas que são função da temperatura são a massa específica ( $\rho_g$ ) e a viscosidade laminar ( $\mu_g$ ) do gás. À medida que a temperatura eleva-se,  $\rho_g$  diminui enquanto  $\mu_g$  aumenta, como representado pela Figura 37. Como consequência da expansão da fase gasosa pelas reações exotérmicas, a velocidade local desta fase também é afetada

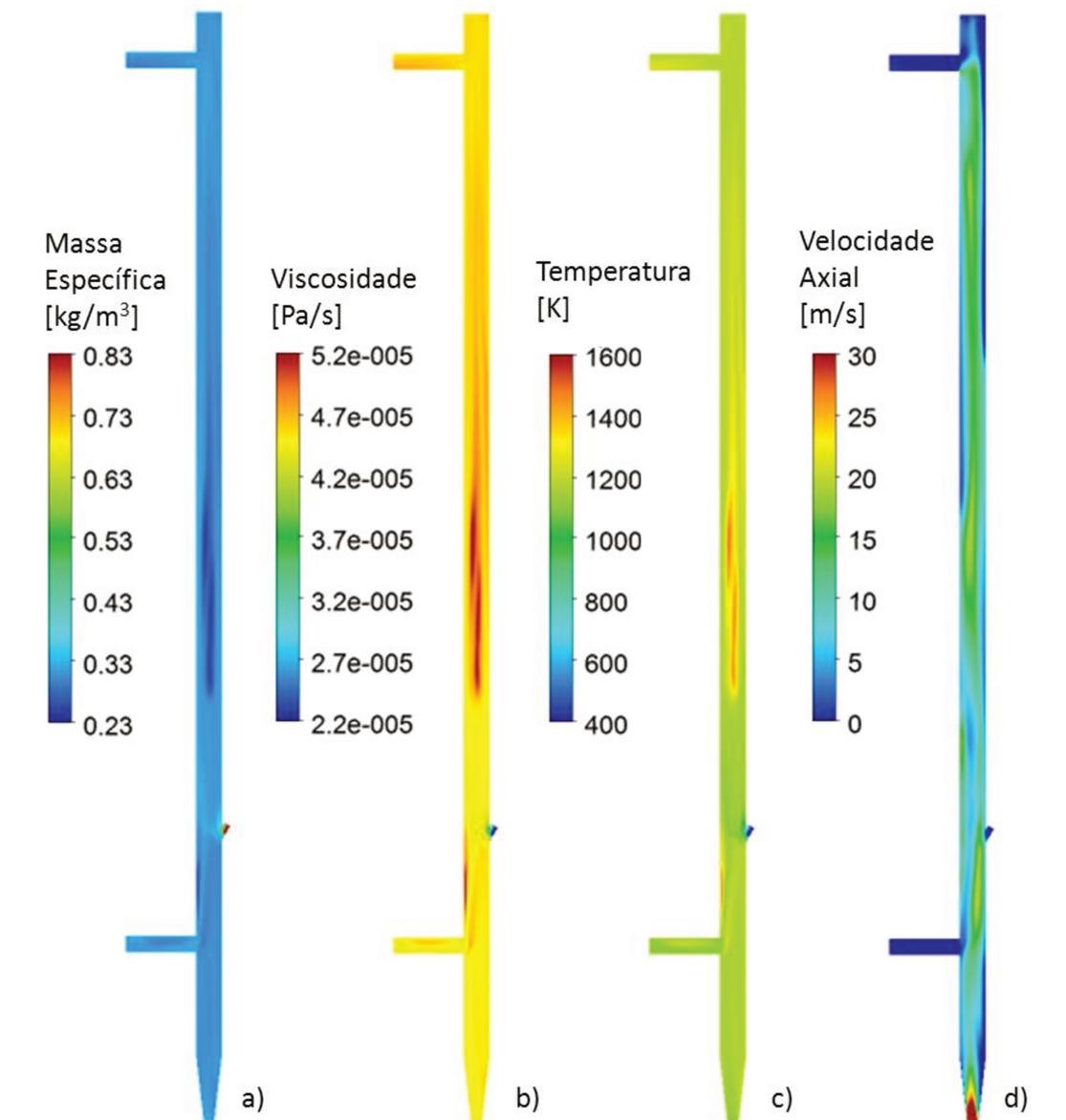


Figura 37. Campos instantâneos em 10s da fase contínua (ar): a) Massa específica; b) Viscosidade dinâmica laminar; c) Temperatura; d) Velocidade axial.

A variação da velocidade no leito fluidizado pode ser melhor visualizada pela Figura 38 a), que mostra o perfil de velocidade axial e superficial calculada a partir de médias na área de cortes na seção transversal ao longo da altura do leito. A distribuição do sólido é diretamente influenciada por este comportamento, apresentando concentrações menores nas regiões de maiores velocidades. O perfil de fração volumétrica da fase contínua segue uma tendência da forma C invertido para a região acima da Entrada 2 ( $h = 0,42$  m), conforme Figura 38 b). Tirando-se a média da velocidade superficial ao longo do leito fluidizado chegou-se ao valor de 8,57 m/s, coincidente com o valor determinado para os experimentos.

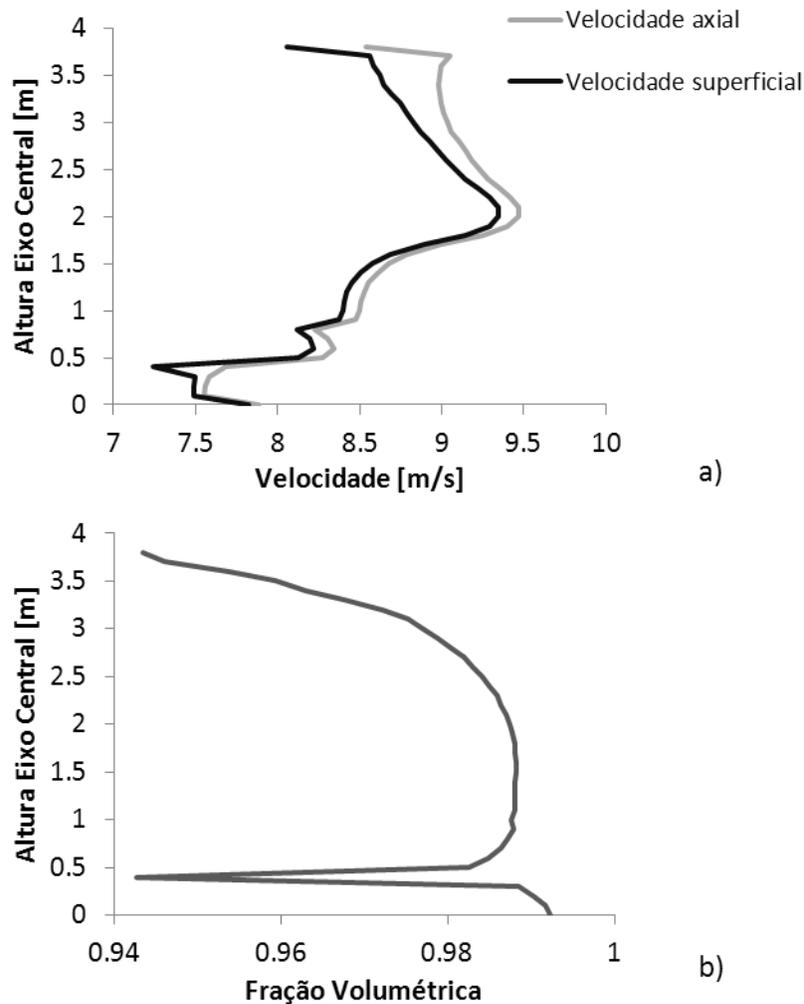


Figura 38. Perfil médio ao longo do eixo axial da: a) velocidade da fase contínua (ar); b) fração volumétrica da fase contínua (ar).

Como a interação de ambos os materiais particulados, areia e carvão, dá-se apenas com o contínuo, a fase discreta não toma conhecimento da fase dispersa. Apesar desta simplificação, a simples presença da segunda fase Euleriana modifica de modo significativo o escoamento, fazendo com que a trajetória das partículas Lagrangeanas de carvão sejam por conseguinte também influenciadas. Para melhor ilustrar este impacto, a Figura 39 mostra os vetores de velocidade da fase contínua e dispersa sobre um plano da fração volumétrica desta.

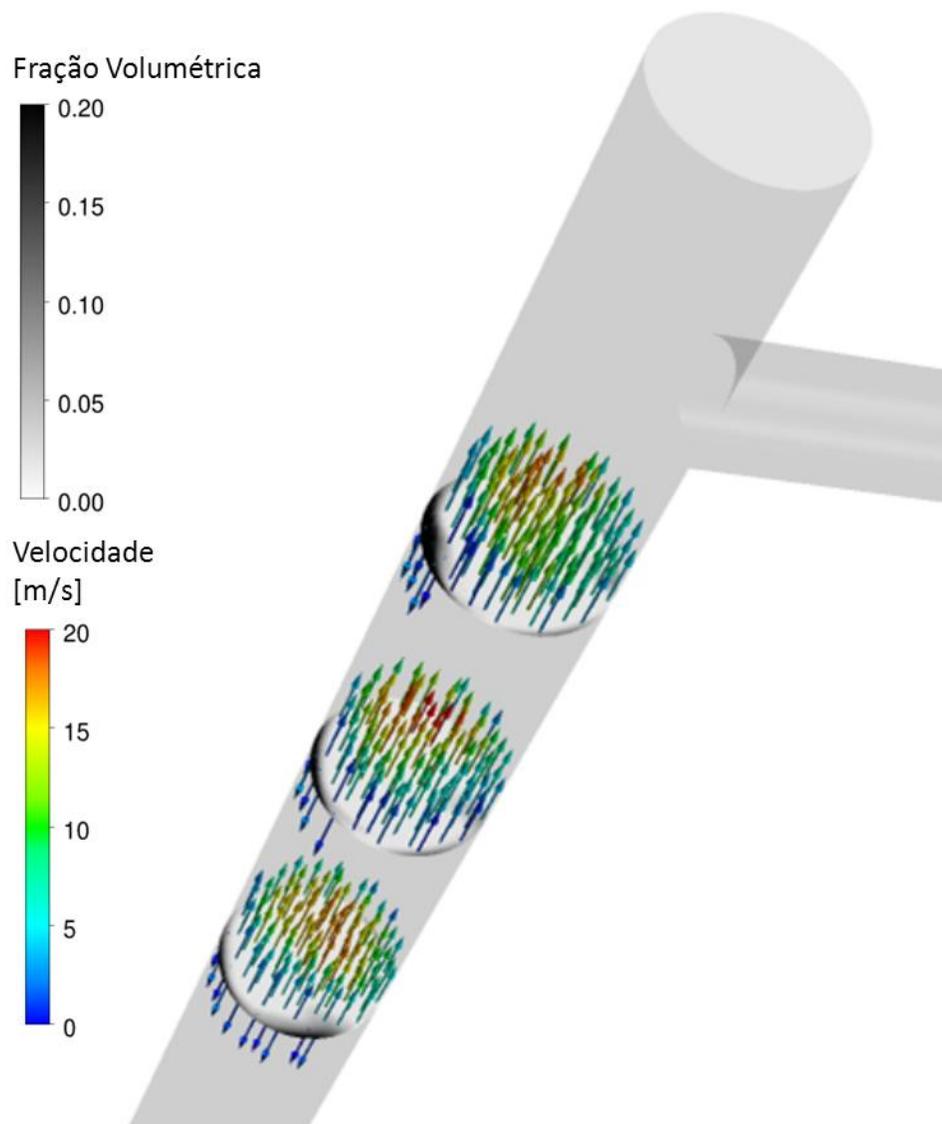


Figura 39. Campos instantâneos da fração volumétrica da fase dispersa (areia) e vetores da fase contínua (ar) no tempo de 10 s de simulação.

Pode-se perceber claramente que onde há maior concentração da fase dispersa, o campo de velocidade da fase contínua é fortemente afetado, ocorrendo até mesmo fluxo em contracorrente na região próxima a parede. Assim, a influência da fase dispersa sobre a contínua faz-se sentir também na fase discreta, de modo que ambas as fases particuladas percebam indiretamente uma a outra.

Quando o carvão mineral entra no sistema, modifica as propriedades e composição deste. Os campos médios da fração mássica simulados para este caso são apresentados na Figura 40 para os componentes da fase contínua, exceto o azoto ( $N_2$ ). Oxigênio e dióxido de carbono apresentam uma distribuição radial uniforme especialmente na metade superior do leito fluidizado. Os componentes gasosos que participam como reagentes, monóxido de carbono e voláteis, são degradados à medida que são liberados, tendo sua concentração reduzida significativamente até a saída do leito fluidizado. O vapor de água é formado tanto pela evaporação da umidade presente no carvão a ser alimentado como pela oxidação dos voláteis, alcançando um valor máximo de 4% no leito fluidizado.

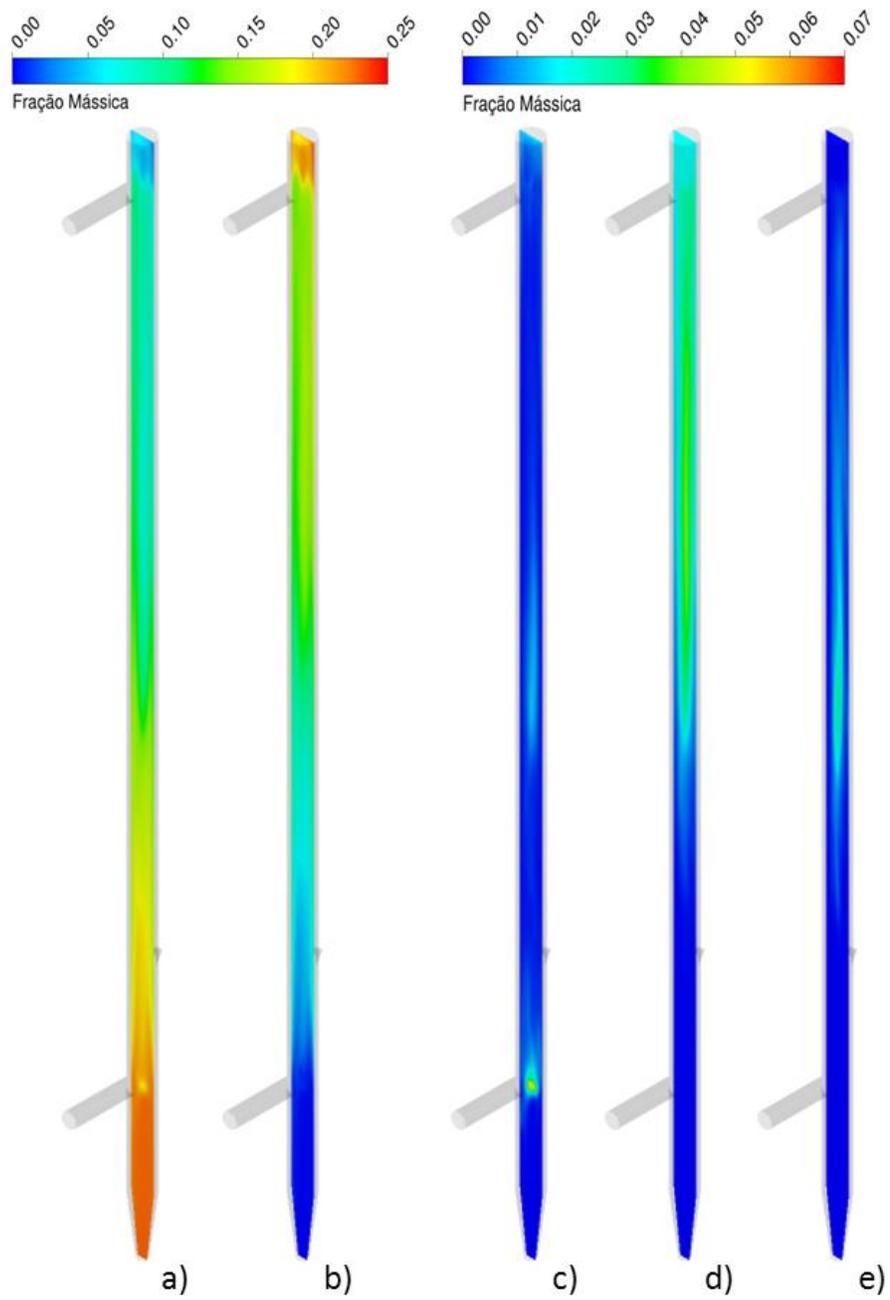


Figura 40. Campos de fração mássica média dos componentes da fase contínua (ar) para o caso B, onde: a) Oxigênio; b) Dióxido de carbono; c) Monóxido de carbono; d) Monóxido de dihidrogênio; e) Voláteis.

Apesar da Figura 40 retratar o comportamento médio da fase gasosa, variações ao longo do tempo são esperadas por causa do comportamento inerentemente transiente do sistema multifásico. Os desvios (média quadrática) em relação à média dos componentes na fase contínua são mostrados na Figura 41. Na base do leito fluidizado pouco ou nenhum desvio foi encontrado, devido à grande quantidade de movimento pela corrente convectiva ascendente proveniente da Entrada1, que conduz os reagentes e produtos em direção a saída do leito fluidizado. Acima da Entrada 2 já ocorrem expressivas variações, sendo as maiores na região da chama criada pelas reações homogêneas, especialmente pelo campo de e) desta figura, que representa os voláteis que são liberados do carvão e decompostos logo em seguida na fase gasosa. O desvio RMS dos campos a) e b) apresentou valores elevados em relação aos outros campos pois a concentração daqueles é também superior.

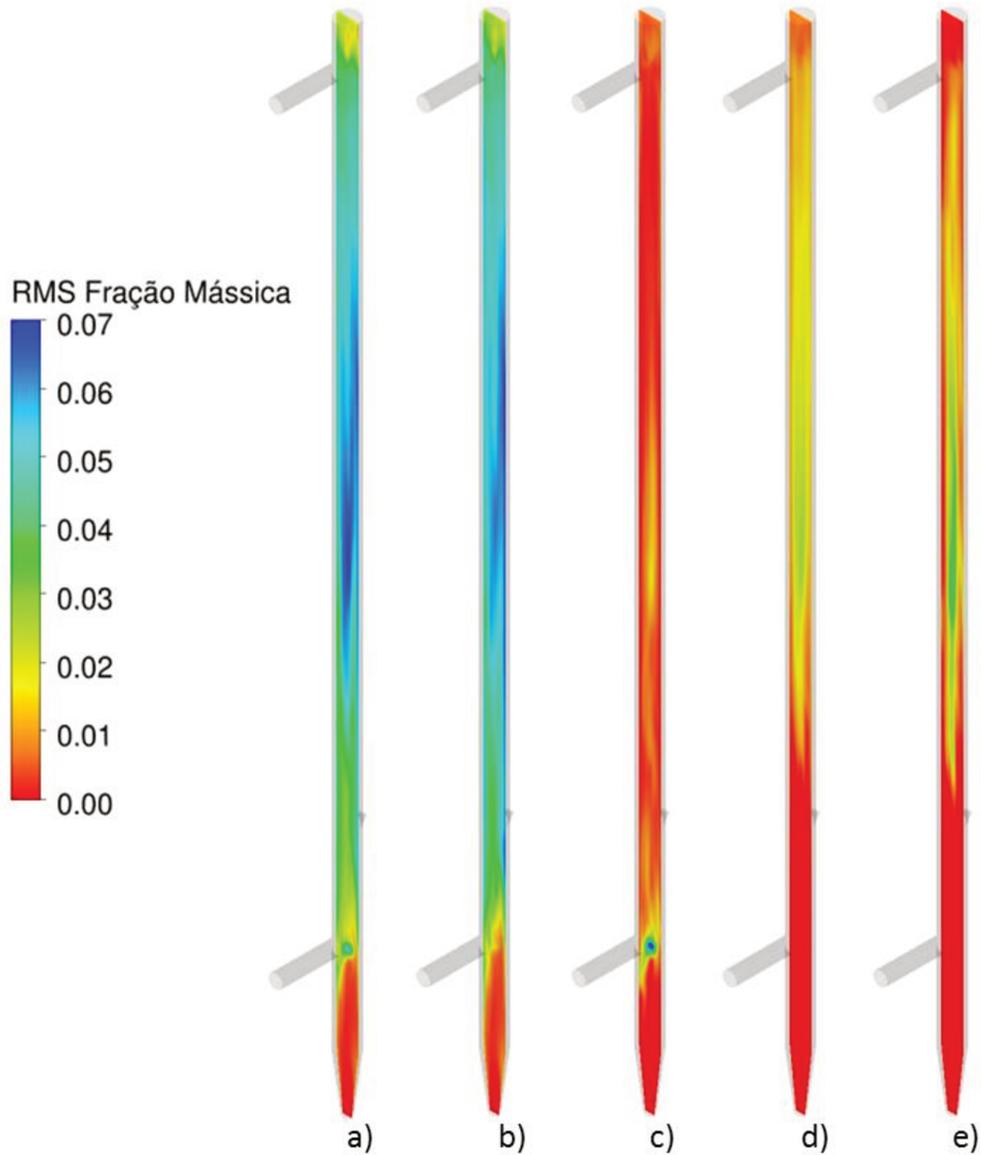


Figura 41. Campos das médias quadráticas dos desvios em relação a média da fração mássica dos componentes da fase contínua (ar) para o caso B, onde: a) Oxigênio; b) Dióxido de carbono; c) Monóxido de carbono; d) Água; e) Voláteis.

Ao contrário das fases Eulerianas, o volume de dados gerados pela fase discreta não é função do tamanho de malha mas sim do número de partículas presentes no sistema. Pelo baixo passo de tempo necessário para uma representação acurada do escoamento das partículas, cria-se um histórico rico em informações de cada partícula no sistema ao longo do tempo.

Do mesmo modo, quando as partículas deixam o domínio de cálculo, isto é, passam pela superfície da saída e deixam de ser rastreadas, é possível coletar dados médios das características destas. Um importante fator é o tempo de residência da fase particulada, que em simulações Eulerianas pode ser obtido apenas de forma aproximada. A Figura 42 mostra a distribuição do tempo de residência, obtida por  $2,84 \cdot 10^6$  partículas que deixaram o sistema entre 8,9 e 10,2 segundos de simulação.

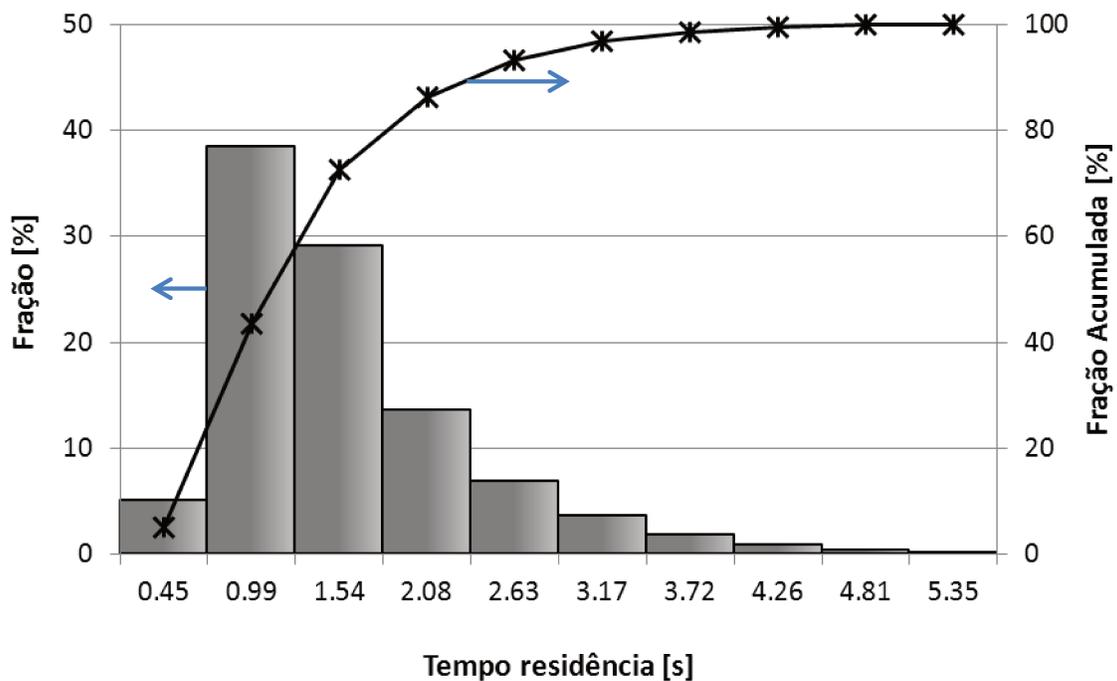


Figura 42. Histograma da distribuição percentual do tempo de residência real das partículas da fase discreta (carvão) medida na saída do leito fluidizado.

O menor tempo de residência foi de 0,45 s e o maior de 5,35 s, enquanto o valor médio foi de 1,55 s. De acordo com a curva acumulada, 72,58% das partículas discretas passam menos de 1,54 s no leito fluidizado. A quantidade de partículas com tempos de residência cada vez mais elevados saindo do domínio de cálculo diminui significativamente, o que leva a crer que apesar de algumas partículas ficarem retidas por mais tempo no leito fluidizado, provavelmente devido a zonas de recirculação interna, estas acabam por seguir o circuito completo da unidade.

Outro modo de analisar a fase discreta, com a finalidade de facilitar a representação gráfica de algumas das propriedades das partículas de carvão, baseia-se na retirada de dados de

uma corrente de partículas, provenientes de um único ponto da injeção, em função do tempo transcorrido da entrada de cada uma destas partículas no domínio de cálculo. Assim, é importante frisar que as próximas figuras representam uma visão instantânea de todas as partículas presentes no domínio provenientes de um único ponto de entrada e não uma evolução temporal de uma mesma partícula. Deste modo pode-se compreender o comportamento dinâmico do sistema, bem como as grandes instabilidades inerentes à conduta transiente do escoamento multifásico reativo.

A variação da velocidade axial das partículas discretas de carvão pode ser visto na Figura 43 enquanto que a posição das mesmas é mostrada na Figura 44. A corrente analisada foi originária da alimentação pela Entrada 3. Pode-se perceber que há maior concentração de dados nas faixas correspondentes às maiores frações de tempo de residência das partículas para o sistema (Figura 42), principalmente abaixo do tempo de 3 segundos.

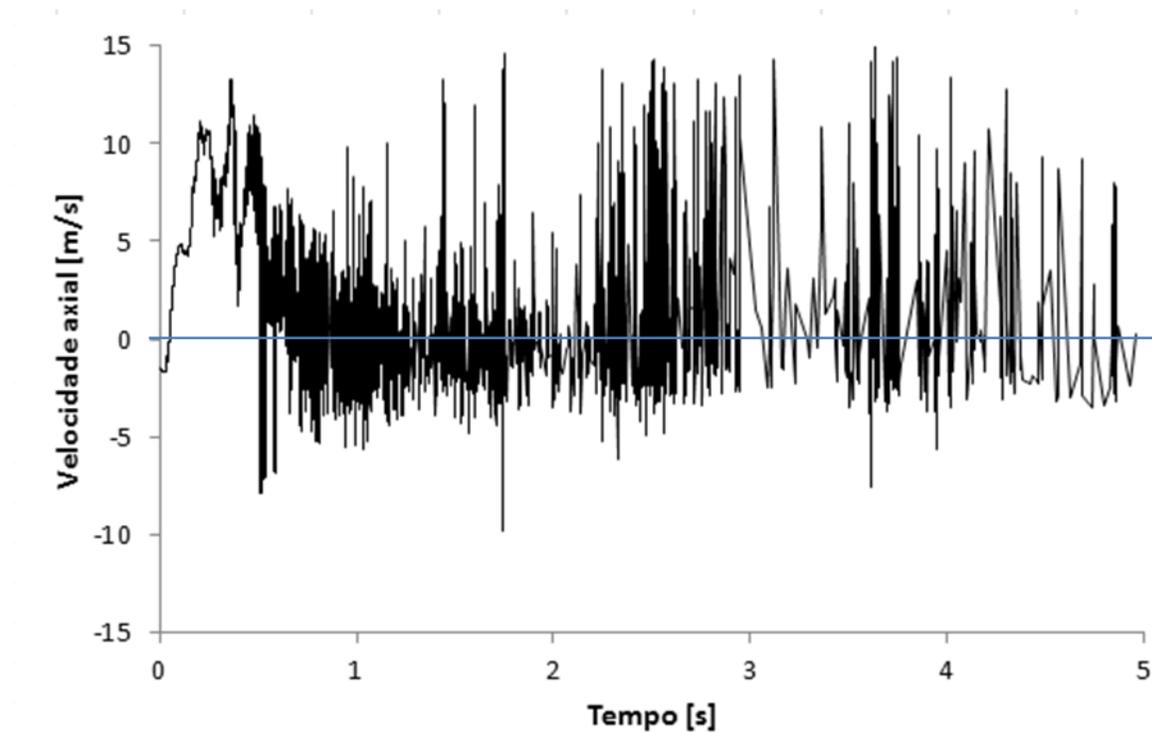


Figura 43. Histórico instantâneo em 10 s de simulação da velocidade axial de todas as partículas discretas (carvão) provenientes de um ponto de injeção pelo tempo de residência no domínio.

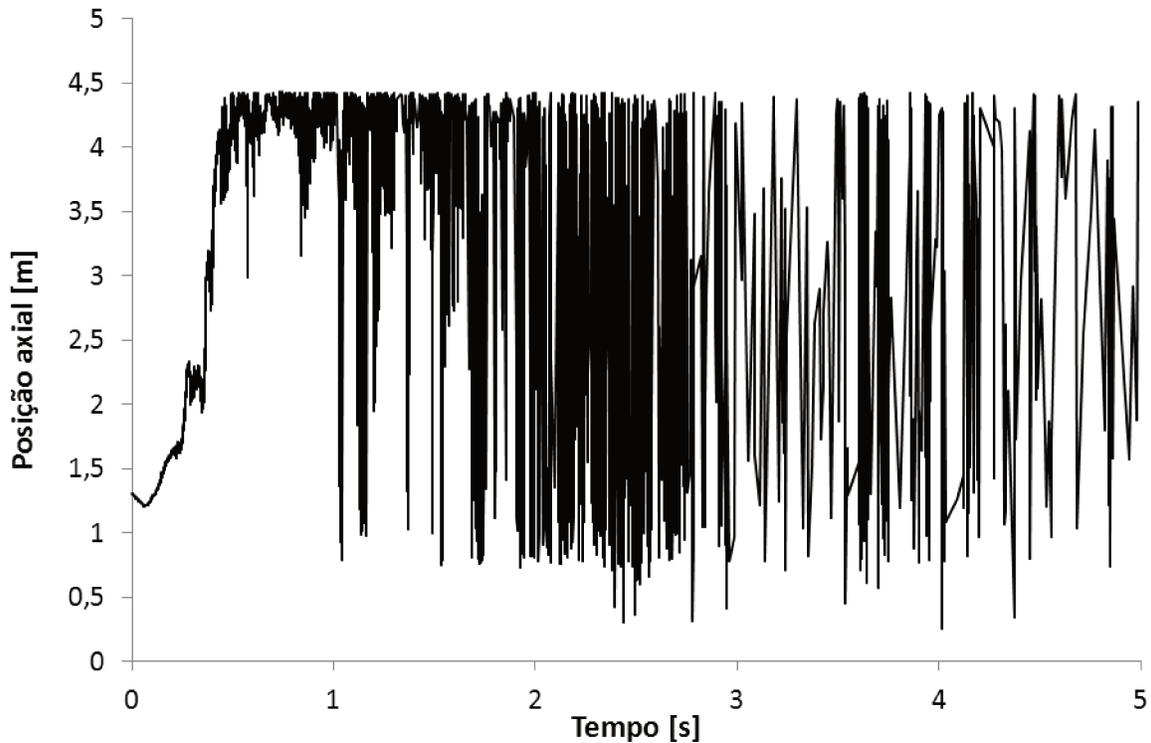


Figura 44. Histórico instantâneo em 10 s de simulação da posição axial de todas as partículas discretas (carvão) provenientes de um ponto de injeção pelo tempo de residência no domínio.

No início as partículas apresentam comportamento bastante próximo de velocidade, uma vez que nos primeiros décimos de segundo a velocidade inicial e a configuração geométrica em ângulo da Entrada 3 fazem com que as partículas permaneçam próximas. Deste modo, assim que as partículas entram no domínio de cálculo elas possuem velocidade axial negativa, porém logo após encontrarem o fluxo ascendente da fase contínua proveniente da base do leito fluidizado, elas sofrem uma mudança na direção e aceleração, o que leva a uma distribuição destas por todo o corpo do leito fluidizado. Como mostrado na Figura 42, uma percentagem das partículas escapa do domínio de controle após 0,45 s, que é o tempo necessário para as primeiras partículas alcançarem o topo do leito fluidizado, conforme Figura 44.

A partir deste ponto, o fluxo descendente nas paredes, ampliado pela configuração da saída em T, faz com que algumas partículas voltem a apresentar velocidades negativas, deslocando-se em sentido contra-corrente com o gás de fluidização. Este processo de recirculação interna tem como consequência que uma quantidade significativa das partículas com maior tempo de injeção apresente velocidades negativas. A variação de velocidade entre as subsequentes partículas injetadas pode chegar a uma ordem de grandeza, consequência da ampla distribuição

das partículas em diferentes regiões do escoamento. O tempo de resposta da partícula no sistema, conforme Equação (54), considerando as condições de operação e a massa específica inicial e final varia de 0,36 a 0,16 segundos. Ainda, o número de Stokes para estes tempos de resposta do sólido, considerando velocidade superficial média do gás e o comprimento característico como o diâmetro do leito fluidizado, ficou entre 31 e 14 respectivamente, colocando as partículas discretas na faixa de transição acima do regime viscoso.

De modo similar, o número de Reynolds das partículas, conforme definição da Equação (21), é mostrado na Figura 45. O regime de escoamento está localizado acima do Regime Laminar ( $Re < 0,4$ ) e abaixo do Regime Turbulento ( $Re > 500$ ), estando portanto na zona de transição (ORTEGA 2012). A principal fonte das oscilações no gráfico apresentado é devida à diferença entre a velocidade no seio da fase fluida e a velocidade da partícula. De modo geral, valores elevados de Reynolds significam que a partícula está numa zona de aceleração ou desaceleração, enquanto os valores baixos indicam que fluido e partícula fluem juntos. Além disto, o número de Reynolds da partícula também é função da massa específica (e diâmetro) dela e esta reduz-se conforme o processo de queima vai ocorrendo. Este comportamento pode ser observado pela redução dos picos do número de Reynolds conforme as partículas vão perdendo massa, cujo histórico é retratado pela Figura 46.

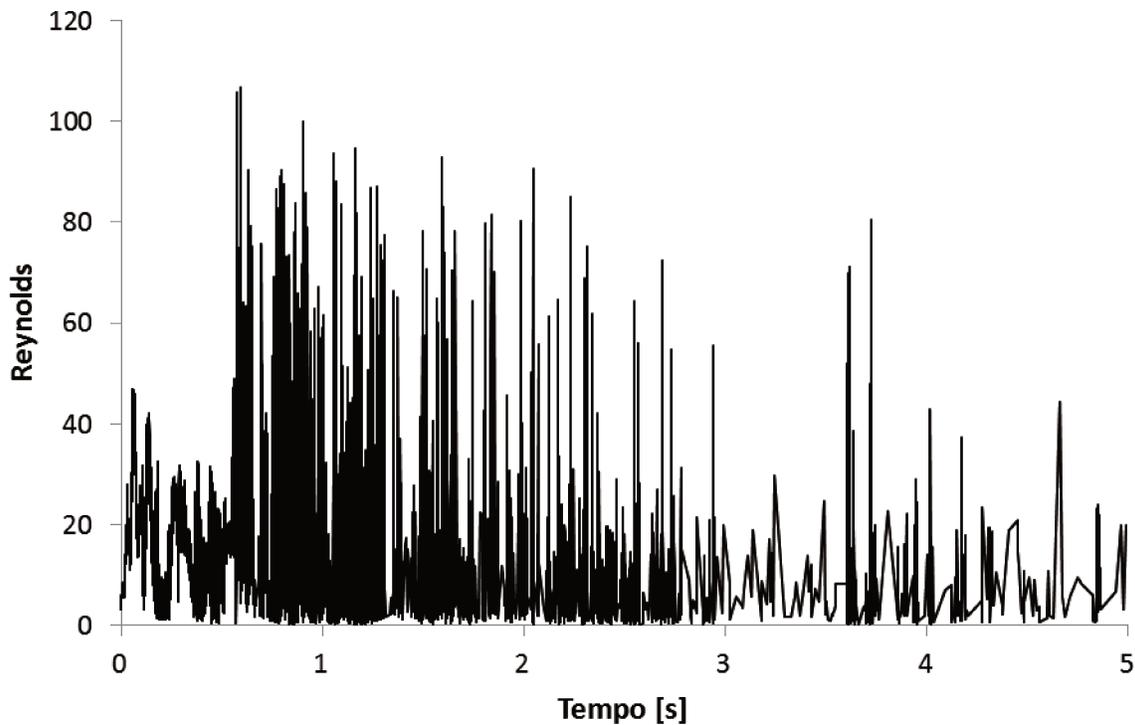


Figura 45. Histórico instantâneo em 10 s de simulação do número de Reynolds de todas as partículas discretas (carvão) provenientes de um ponto de injeção pelo tempo de residência no domínio.

De acordo com a modelagem empregada para descrever os fenômenos da queima do carvão mineral, as etapas do processo podem ser claramente identificadas. Logo após ter entrado no domínio de cálculo, a umidade da partícula é evaporada. A redução de massa é apenas ligeiramente perceptível uma vez que a umidade determinada pela análise do carvão mostrou um teor de somente 0,62%. Quando a partícula atinge a temperatura de devolatilização, os componentes voláteis presentes são liberados para a fase gás. Dependendo da taxa de aquecimento da partícula, bem como do seu tamanho, este processo pode ocorrer em uma escala de tempo muito pequena (CHERN e HAYHURST, 2004), como observado na presente simulação. Deste modo, embora o modelo de duas reações de KOBAYASHI et al. (1976) seja válido, seria também aceitável considerar um modelo mais simplificado para o processo de devolatilização sob estas condições operacionais.

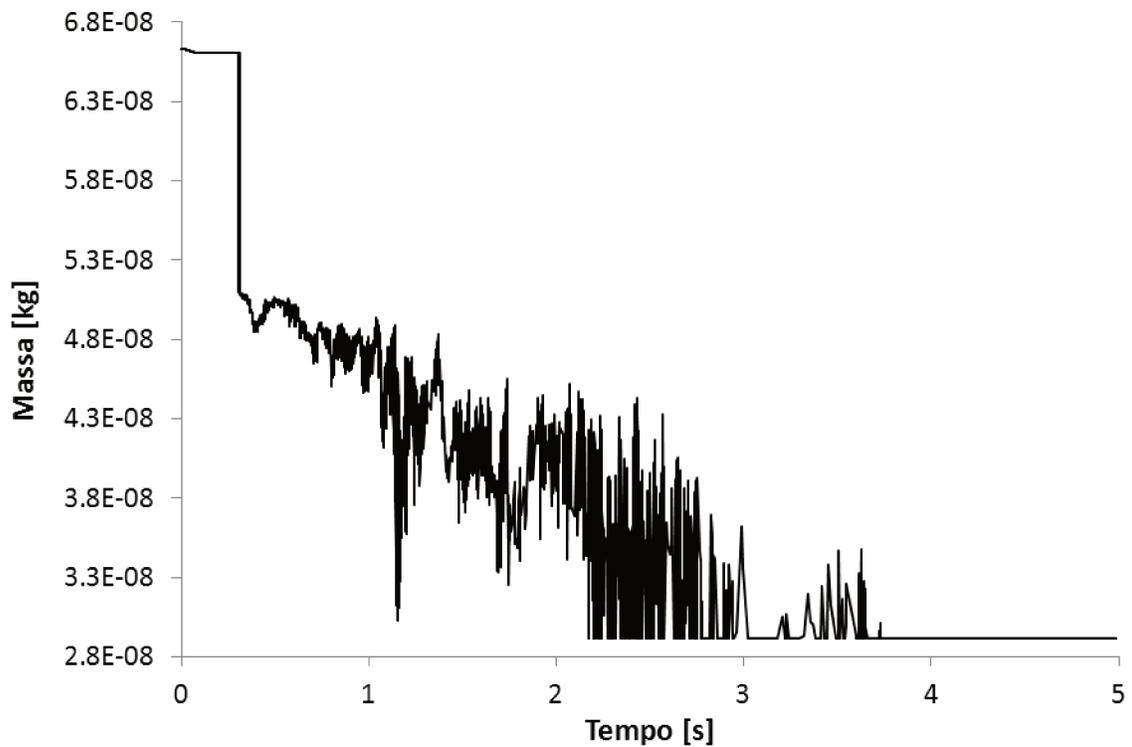


Figura 46. Histórico instantâneo em 10 s de simulação da massa de todas as partículas discretas (carvão) provenientes de um ponto de injeção pelo tempo de residência no domínio.

Terminada a devolatilização, inicia-se a combustão do carbono presente no carvão mineral. A escala de tempo desta etapa é maior e pode-se notar que as partículas com mais de 4 s de tempo de residência já não apresentam variação de massa, indicativo de que todo o coque tenha sido consumido. Complementar ao histórico da variação da massa, a variação da temperatura da partícula é apresentada na Figura 47.

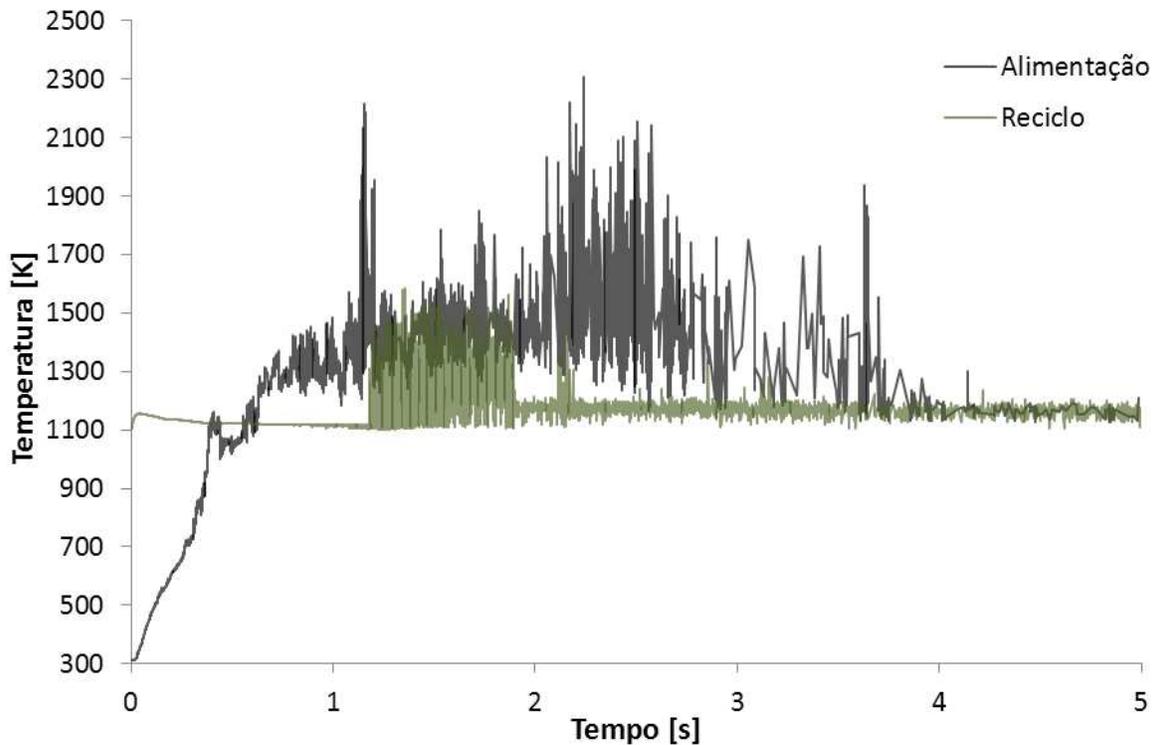


Figura 47. Histórico instantâneo em 10 s de simulação da temperatura de todas as partículas discretas (carvão) provenientes de dois pontos de injeção (Alimentação e Reciclo) pelo tempo de residência no domínio.

O carvão é alimentado na temperatura ambiente e em pouco menos de meio segundo tende a alcançar a temperatura do leito, em torno de 1100 K. O carvão proveniente do reciclo já entra a uma temperatura elevada, próxima àquela do leito. As partículas que ficam maior tempo no leito fluidizado podem alcançar temperaturas mais elevadas, enquanto contiverem carbono e estiverem reagindo.

Uma avaliação da temperatura da fase discreta na saída, Figura 48, indica que menos de 0,15% das partículas que deixam o leito fluidizado estão com temperatura superior a 1625 K. A grande maioria das partículas está com temperatura próxima ou acima da temperatura média de operação do leito fluidizado. Devido ao baixo tempo de residência o equilíbrio térmico das partículas em processo de reação com o gás não é alcançado. Apesar da variação de temperatura das partículas na saída, considerou-se que, após passar pelo ciclone e pelo *standpipe*, as partículas de carvão parcialmente queimadas estão na temperatura média do leito medido na válvula-L, no instante em que retornam ao leito fluidizado pela Entrada 2.

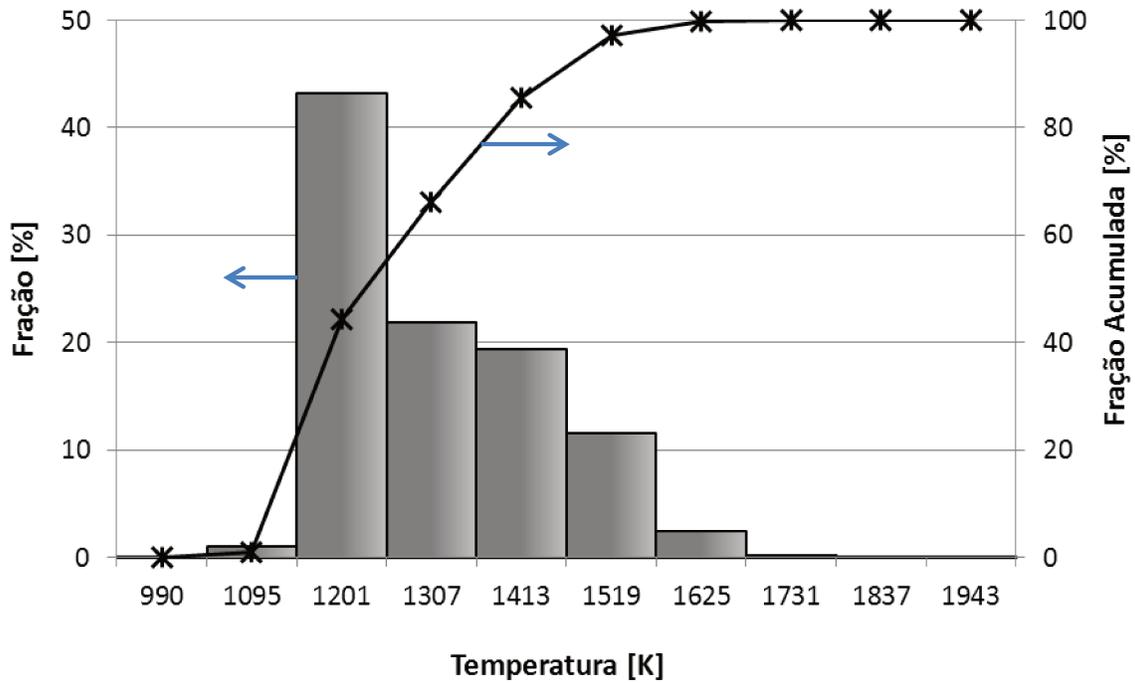


Figura 48. Histograma da distribuição percentual do número de partículas discretas (carvão) pelas suas respectivas temperaturas medida na saída do leito fluidizado.

#### 4.2.5 Estudos de Modelagem e Análise de Efeitos

Alguns aspectos da modelagem matemática do processo de combustão de carvão mineral foram analisados. Aqueles considerados importantes e que foram alvo de avaliação detalhada incluíram a abordagem do mecanismo de queima heterogênea de carvão, a influência da variação do diâmetro das partículas discretas de carvão, a formação de produtos pela combustão completa ou incompleta e a condição de parede do reator. A Tabela 14 detalha os modelos empregados em cada análise.

Tabela 14. Descrição dos modelos analisados para o Caso 2. Onde  $T_w$  indica temperatura na parede,  $d$  é o diâmetro e  $I_0$  inventário de sólidos inertes inicial.

<b>Categoria</b>	<b>Analisado</b>	<b>Modelagem mantida</b>	<b>Denominação</b>
	Difusão		A
<b>Reação</b>	Difusão/Cinética	$d$ : cte; CO; $T_w$ : cte; $I_0$ .	B
	Intrínseco		C
<b>Partícula</b>	Diâmetro variável	Intrínseco; CO; $T_w$ : cte; $I_0$ .	D
<b>Produto</b>	CO <sub>2</sub>	Difusão/Cinética; $d$ : cte; $T_w$ : cte; $I_0$ .	E
<b>Parede</b>	Fluxo de calor	Difusão/Cinética; $d$ : cte; CO; $I_0$ .	F
<b>Inventário</b>	Final	Difusão/Cinética; $d$ : cte; CO; $T_w$ : cte.	G

cte = constante

A seguir são apresentados os resultados das simulações utilizando os modelos de cada categoria, que serão comparados com dados experimentais e analisados entre si.

#### 4.2.5.1 Mecanismos de Reação Heterogênea

Um outro desafio da modelagem de um problema envolvendo combustão de carvão é a determinação do conjunto de equações matemáticas deste processo, sendo que mecanismos de difusão, adsorção e de cinética química podem estar presentes. Conforme visto na descrição matemática, muitos dados físicos e parâmetros empíricos são necessários para fechamento dos modelos. Apesar da incerteza associada a algumas destas informações, principalmente pela grande diversidade física, química e morfológica do material reagente e das variadas condições operacionais empregadas na sua combustão, é possível avaliar a influência do grau de complexidade dos modelos nos resultados obtidos. Em sequência decrescente de número de hipóteses simplificadoras o modelo que considera apenas a difusão dos gases até a partícula é o primeiro, seguido do modelo que, além da difusão, considera também a cinética e por fim do modelo que também considera a difusão dos gases no interior dos poros da partícula, chamado intrínseco.

Conforme as reações homogêneas de oxidação dos componentes voláteis e combustão heterogênea do coque tomam lugar, a temperatura no leito fluidizado eleva-se. Tanto no experimento como nas simulações há um período de transição entre o perfil inicial de temperatura e um perfil desenvolvido, que se forma quando a operação do equipamento entrou em um regime quasi-estacionário. Segundo RAMIREZ-BEHAINNE (2007) desde o início da combustão de carvão até a estabilização para tomada das medições, 4 horas foram necessárias. Como simulações CFD tridimensionais, trifásicas e transientes nestas escalas de tempo são inviáveis, iniciou-se o leito fluidizado já em condições o mais próximo possíveis da situação na qual os dados experimentais foram tirados. Ainda assim, nas simulações com o início da injeção de carvão, há um curto período de adequação no sistema, até que o carvão passe a fluir de por todo o equipamento, de modo que as médias foram retiradas apenas após esta etapa.

Com o objetivo de melhor visualizar o desenvolvimento dos perfis de concentração ao longo do leito fluidizado foram elaborados gráficos pelas médias de sucessivos planos transversais partindo da base da seção cilíndrica até a saída do leito fluidizado. Na altura da saída, os valores medidos experimentalmente foram mostrados para validação, conforme Figura 49.

Contudo, deve-se salientar que o ponto experimental do  $\text{CO}_2$  não foi obtido por um equipamento de medição, mas sim estimado a partir de uma correlação proposta para combustão de carvão pelo fabricante do medidor utilizado nas análises dos gases efluentes. Deste modo, as discussões dos resultados numéricos levam esta situação em consideração, sendo focados principalmente na comparação com os dados obtidos efetivamente por medições experimentais, caso do  $\text{CO}$  e  $\text{O}_2$ . Ainda assim, os gráficos com o perfil de concentração de dióxido de carbono e o ponto correspondente ao valor estimado para o experimento foram expostos, visando complementar a análise dos resultados, devendo ser contudo considerados com cuidado na comparação dos erros devido as incertezas envolvidas.

Outro fator que deve ser considerado refere-se à apresentação entre os dados experimentais e numéricos. Enquanto aqueles foram apresentados por RAMIREZ-BEHAINNE (2007) em termos de fração volumétrica em base seca, a simulação trata o sistema em base de fração mássica (ou molar), estando o vapor de água presente entre os compostos transportados. A conversão de um grupo de dados para comparação com o outro envolve a determinação da massa específica de cada componente na temperatura média da saída do reator, bem como a transformação de base úmida em seca, ou vice-versa.

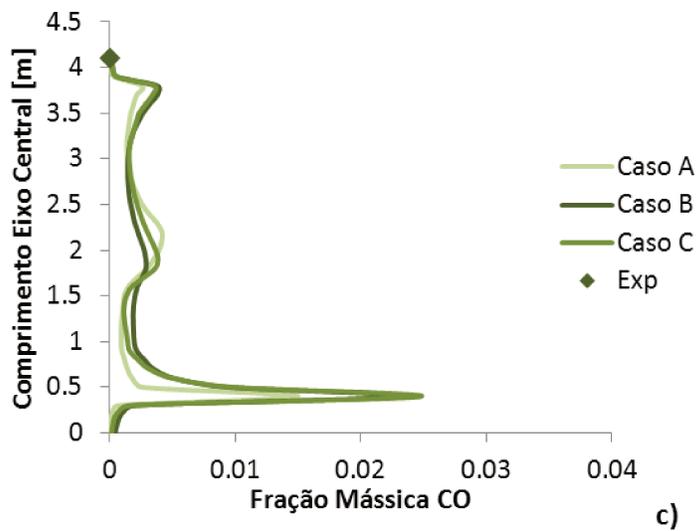
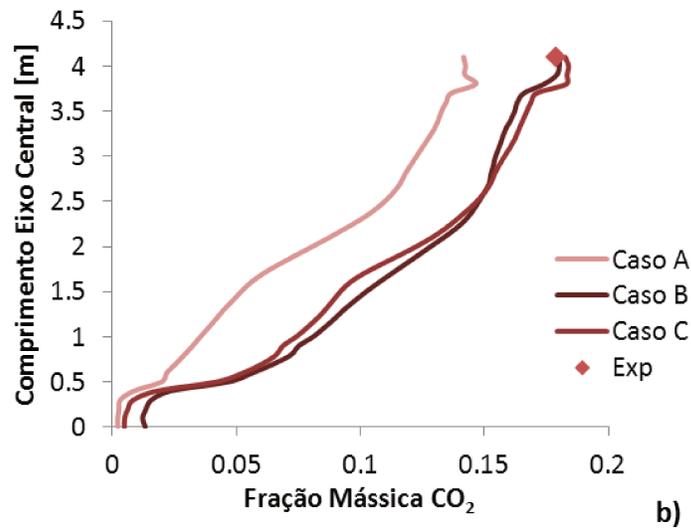
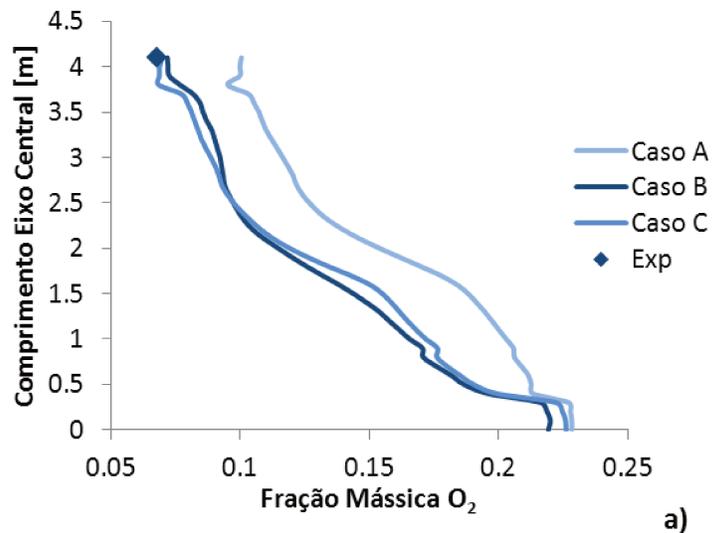


Figura 49. Perfis de fração mássica média em base úmida ao longo do comprimento do leito fluidizado na categoria reação através dos modelos de difusão, difusão/cinética e intrínseca para: a) Oxigênio; b) Dióxido de carbono; c) Monóxido de carbono.

O desenvolvimento do perfil de fração mássica dos componentes da fase gasosa ao longo do leito fluidizado ocorre conforme esperado para todas as modelagens analisadas. Na base, alto teor de oxigênio e baixo teor dos produtos das reações são observados, tendência que se inverte à medida que os gases se deslocam pelo reator. A Figura 51 complementa a Figura 49, indicando as diferenças absolutas entre os valores obtidos pelas simulações na saída do leito fluidizado com os dados experimentais.

Os casos A e B mostraram um consumo menor que o esperado do reagente  $O_2$  na saída do reator, tendo portanto a simulação resultado num valor fração mássica final maior. Já o caso C resultou numa maior conversão inclusive dos produtos das reações homogêneas, um indicativo da ação da modelagem da taxa heterogênea sobre o sistema. Ainda assim deve-se salientar que na planta, as reações homogêneas continuam a ocorrer quando os gases quentes deixam o leito fluidizado e passam pelo ciclone antes de serem resfriados. Entretanto devido às altas velocidades no duto de saída do leito fluidizado (acima de 22 m/s), o tempo de residência do gás até seu arrefecimento é baixo e as transformações químicas fora do leito podem ser consideradas pequenas. Por outro lado, esta pode ser uma explicação para o perfil do principal produto gerado (de maior fração mássica)  $CO_2$  ter ficado ligeiramente abaixo e do intermediário  $CO$  ter ficado acima do valor experimental. A Figura 50 mostra a taxa das reações homogêneas descritas pelas Equações (72) e (73) no topo do leito fluidizado para o caso B. Nesta figura é possível observar que há reações ocorrendo na tubulação de saída.

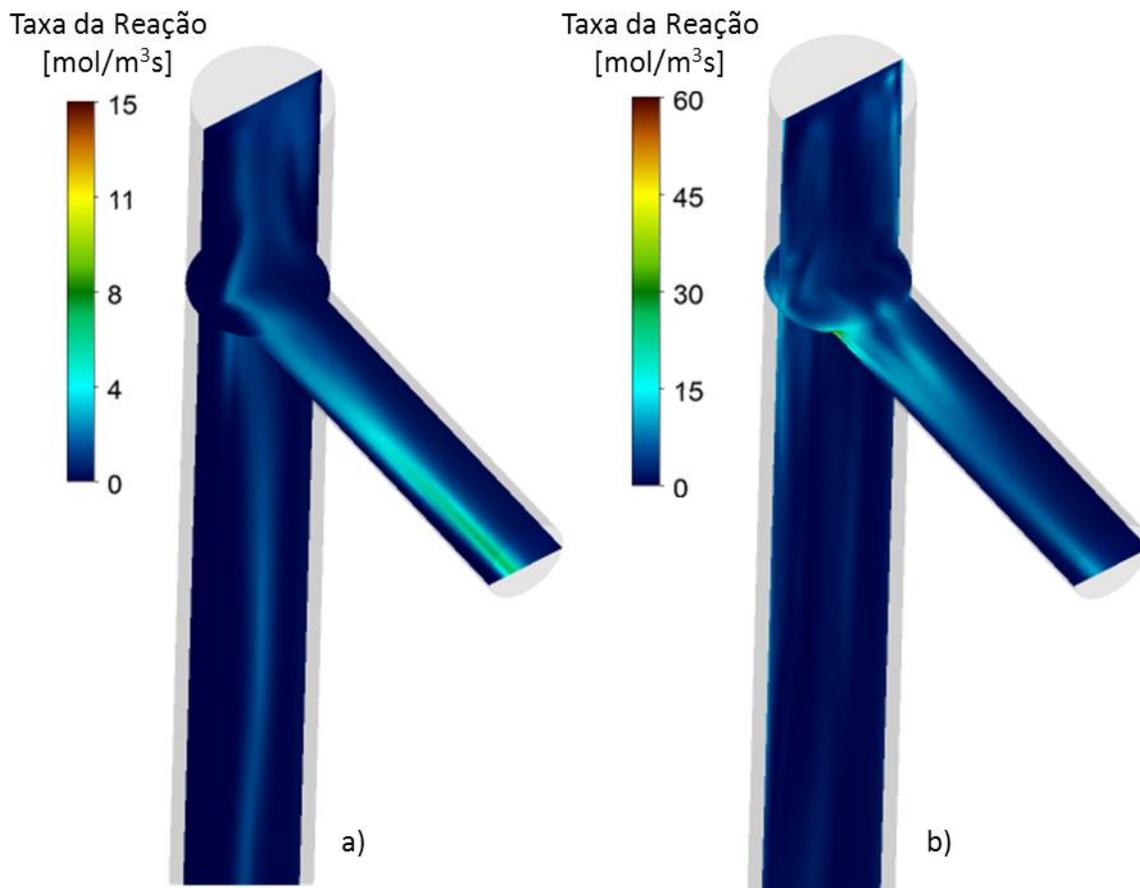


Figura 50. Taxa instantânea em 10 s de simulação do caso B das reações homogêneas das Equações: a) 72 (Voláteis); b) 73 (CO).

A fração mássica de CO nos gases efluentes apresentou as maiores discrepâncias, porém como sua concentração é pequena frente aos outros gases analisados (na ordem de 100 ppm<sub>v</sub>), logo as diferenças absolutas são baixas. A concentração de CO na simulação A ficou mais próxima aos dados experimentais do que nos casos B e C, apesar da maior diferença quando analisam-se O<sub>2</sub> e CO<sub>2</sub>. Isto deve-se a menor geração de produtos pela reação heterogênea que considera apenas a difusão externa e que posteriormente reflete-se na concentração de oxigênio e dióxido de carbono no sistema. Este resultado já era esperado, pois a condição operacional da planta estudada não se enquadra na Zona 3.

Já os casos B e C mostraram resultados bastante similares no perfil da composição dos gases efluentes. A modelagem intrínseca retrata com maior fidelidade os fenômenos físicos, porém a determinação destes com precisão ao longo do processo de combustão é de difícil obtenção,

uma vez que as constantes deste modelo se baseiam em dados do carvão virgem. Como a modelagem cinética do caso B engloba todos os fenômenos descritos pelo formalismo do caso C numa única taxa (SILVA FILHO e MILIOLI, 2008), os resultados similares encontrados fazem crer que ambas as abordagens descrevem a transformação química de modo semelhante, quando comparados com dados em escala macroscópica, como as concentrações na saída do reator. Ainda assim, o modelo intrínseco mostrou uma melhor representação da relação entre os produtos da combustão, CO e CO<sub>2</sub>, na saída do reator, pela análise dos erros relativos.

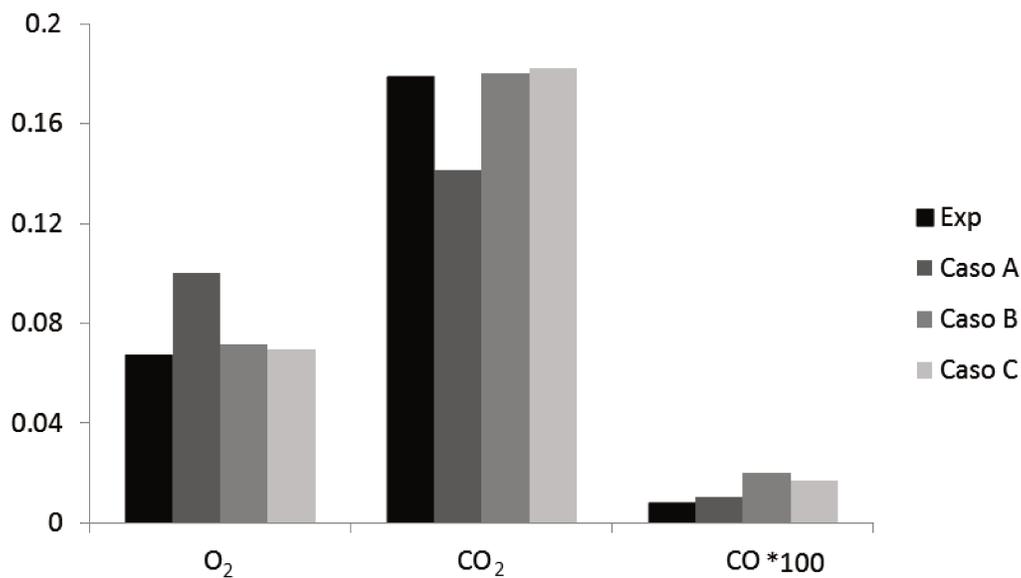


Figura 51. Comparação da fração mássica simulada de oxigênio, dióxido de carbono e monóxido de carbono (multiplicado por 100) na saída do reator com dados experimentais de RAMIREZ-BEHAINNE (2007).

O perfil de temperatura médio para as três modelagens foi comparado com dados experimentais. A Figura 52 mostra os valores médios ao longo do comprimento do eixo central do leito fluidizado. Os pontos experimentais apresentam barras com o desvio padrão, tomadas a partir das medições realizadas ao longo do decorrer do experimento.

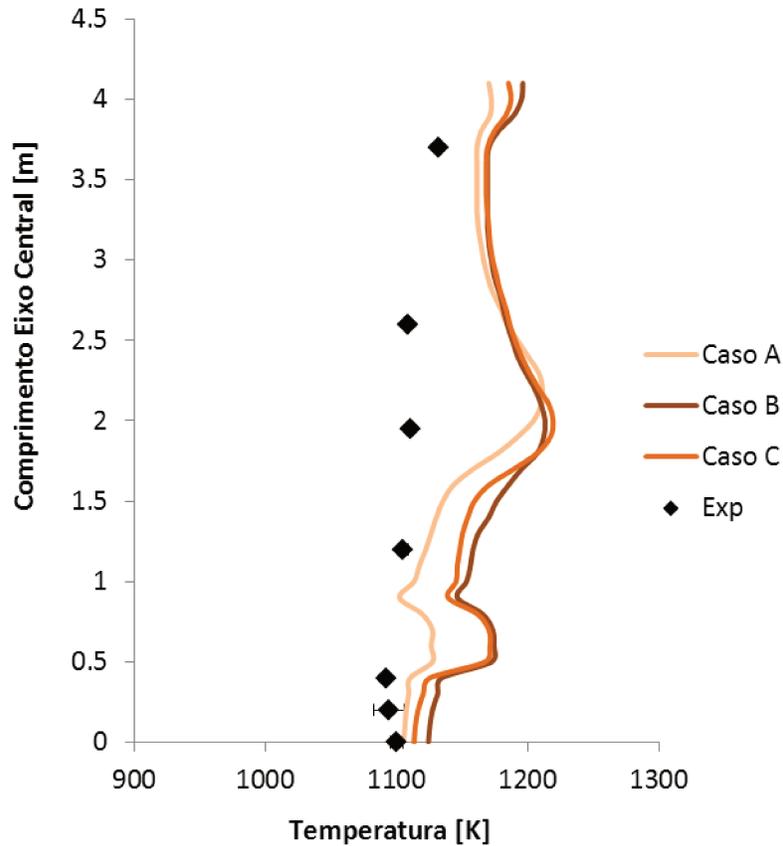


Figura 52. Perfil de temperatura médio ao longo do comprimento do leito fluidizado para reação através dos modelos de difusão, difusão/cinética e intrínseca.

Apesar da proximidade com os dados experimentais na base do reator, após a Entrada 2 a temperatura simulada sofre um aumento significativo até encontrar a corrente fria da Entrada 3. Porém logo acima, quando o carvão recém alimentado libera o material volátil e começa sofrer a reação de queima, a temperatura volta a subir rapidamente, apresentando um pico na altura de 2 m, onde uma chama alimentada pelos reagentes monóxido de carbono e voláteis pode ser identificada, como já mostrado na Figura 40 c) e e). Entretanto este pico de temperatura não é corroborado pelos dados experimentais. Possíveis explicações para esta discrepância incluem a desconsideração da distribuição de diâmetros das partículas de carvão, o que implicaria em uma maior variação nos processos de devolatilização e combustão, e também da quantidade de cinzas volantes no sistema. Contudo a diferença percentual a 2 m de altura foi de apenas 7,3%, 9,1% e 9,5% para os casos A, B e C respectivamente. Ainda assim, e especialmente na região das entradas

laterais 2 e 3, a temperatura predita pelo caso A foi menor que os outros dois casos pela menor taxa de reação heterogênea.

#### 4.2.5.2 Diâmetro Partículas

O modelo intrínseco permite contemplar além da variação da massa específica também a variação do diâmetro da partícula de carvão ao longo do processo de reação. Apesar da limitação apontada por MITCHELL et al. (2007) a este modelo, realizou-se um teste com o intuito de verificar a influência desta variável, mesmo que de uma forma simplificada, no sistema.

Assim, foram comparados os resultados obtidos pelo modelo intrínseco considerando o diâmetro das partículas constantes e este diâmetro variável ao longo do processo de queima em conjunto com a redução da massa específica da partícula, casos C e D respectivamente.

Com a massa específica e o diâmetro variando em função da massa da partícula, parâmetro  $\alpha$  da Equação (99), a dinâmica da evolução da combustão deve refletir este comportamento. Apesar da variação entre o diâmetro máximo e o mínimo encontrado no sistema ter sido de 13%, o diâmetro médio de Sauter ficou muito mais próximo ao inicial, apenas 3,7% menor, conforme Tabela 15.

Tabela 15. Dados da variação do diâmetro das partículas discretas de carvão para o caso D após 10 s de simulação.

Diâmetro Carvão	[ $\mu\text{m}$ ]
Máximo (inicial)	431
Mínimo	374
Médio Sauter	415

A formação de produtos foi ampliada pela redução do diâmetro das partículas, como mostrado na Figura 53. A tendência do desenvolvimento do perfil das espécies química é similar, porém o caso D apresentou um consumo maior de oxidante e como consequência uma maior geração dos produtos.

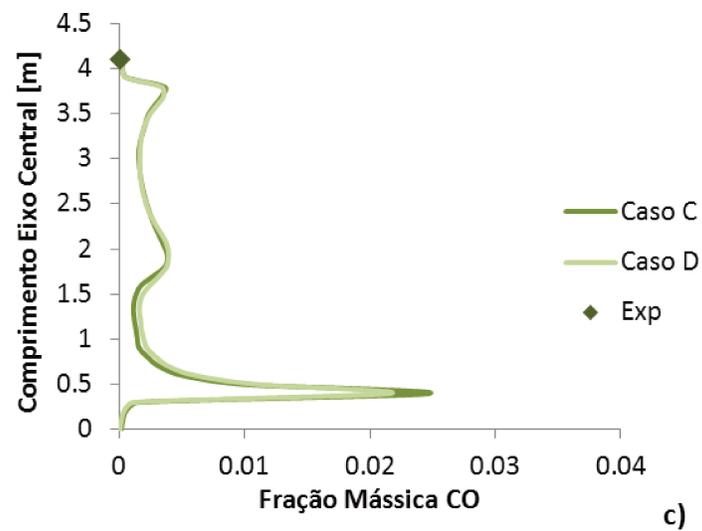
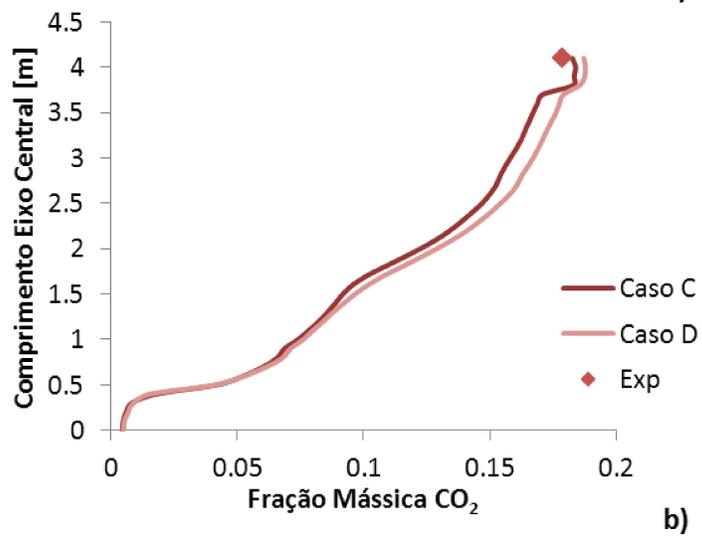
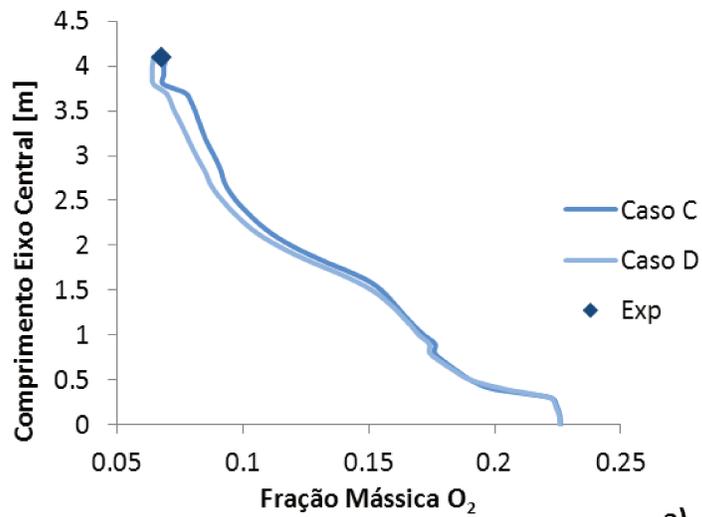


Figura 53. Perfis de fração mássica média em base úmida ao longo do comprimento do leito fluidizado na categoria partícula para reação através do modelo intrínseco com diâmetro de partícula constante e variável para: a) Oxigênio; b) Dióxido de carbono; c) Monóxido de carbono.

A diferença entre os modelos com os dados experimentais passa a ser maior no caso D, Figura 54. Os desvios de ambos os casos para o oxigênio e dióxido de carbono foram baixos, porém a predição da formação do monóxido de carbono ficou muito acima do esperado.

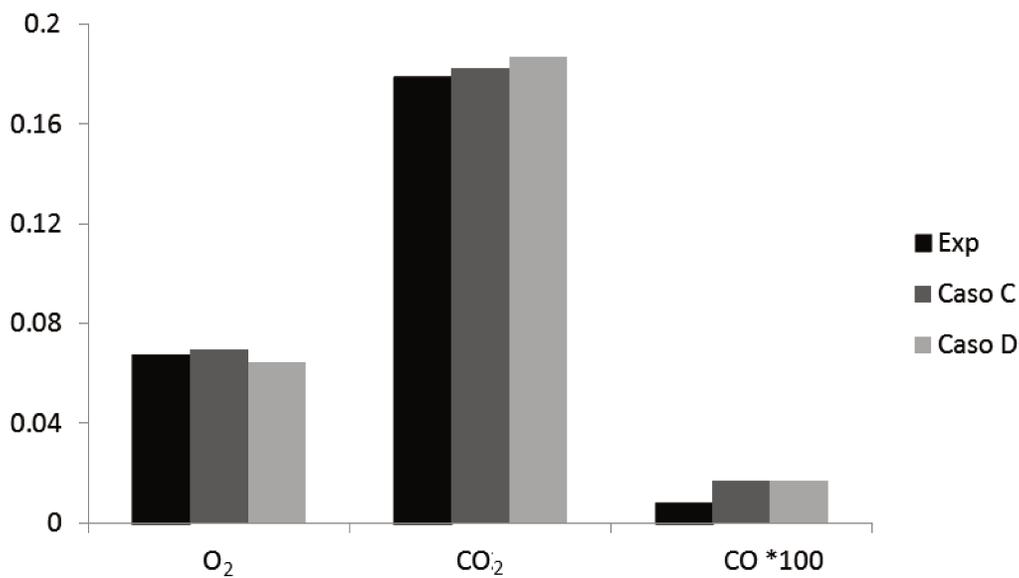


Figura 54. Comparação da fração mássica simulada de oxigênio, dióxido de carbono e monóxido de carbono (multiplicado por 100) na saída do reator com dados experimentais de RAMIREZ-BEHAINNE (2007).

A temperatura no sistema foi próxima àquela prevista pelo caso C na maioria das regiões do leito fluidizado, Figura 55. Ambos os picos de temperatura foram coincidentes, consequência da pequena redução no diâmetro das partículas que recirculam pelo sistema. A determinação deste diâmetro foi realizada através da mesma metodologia para o ajuste das outras propriedades da injeção do carvão recirculado. O segundo pico de temperatura também não foi influenciado pela redução no diâmetro das partículas, uma vez que este é consequência das reações homogêneas resultantes principalmente da liberação do material volátil do carvão recém alimentado. Como o modelo que representa a devolatilização não considera variações no diâmetro das partículas e esta ocorre antes da queima heterogênea, o resultado encontrado é coerente.

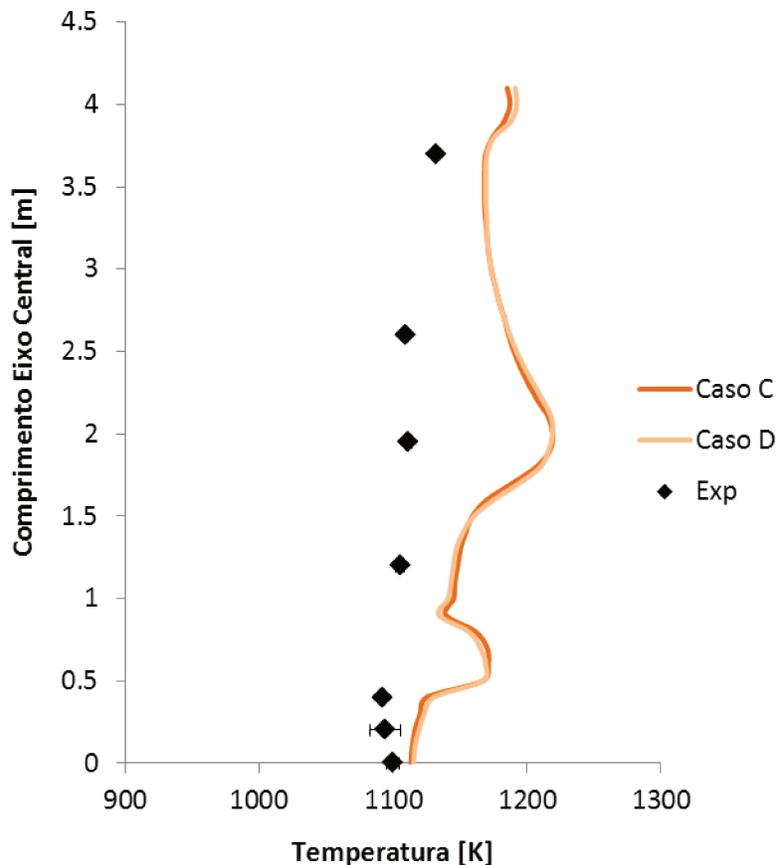
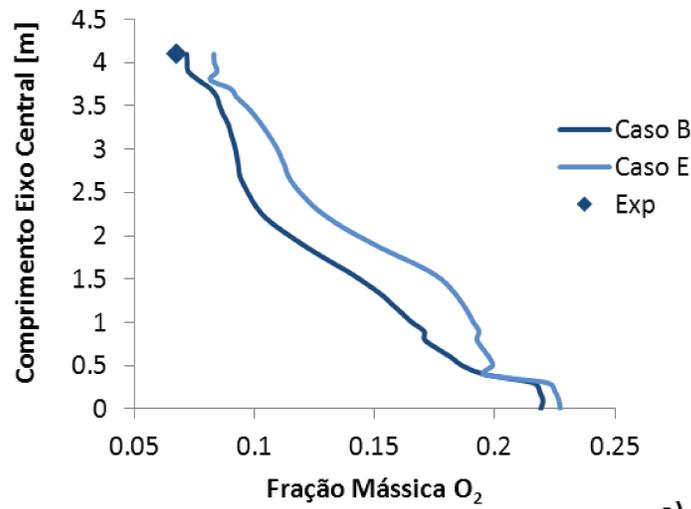


Figura 55. Perfil de temperatura média ao longo do comprimento do leito fluidizado para reação através do modelo intrínseco com diâmetro de partícula constante e variável.

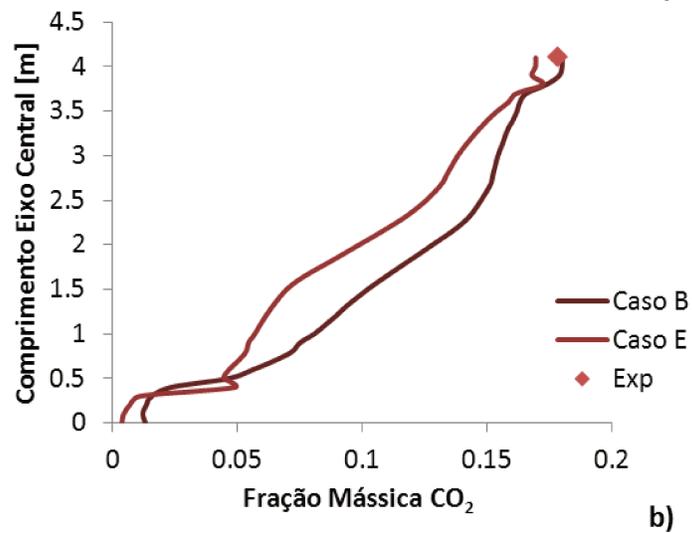
#### 4.2.5.3 Produto da Reação Heterogênea

Apesar de globalmente a combustão de material orgânico sólido com excesso de ar gerar principalmente dióxido de carbono por este ser o produto mais estável, a evolução da descrição da reação em uma partícula pode produzir somente  $\text{CO}_2$ , CO ou uma proporção entre eles, dependendo das condições operacionais, reagentes e onde é feita a análise.

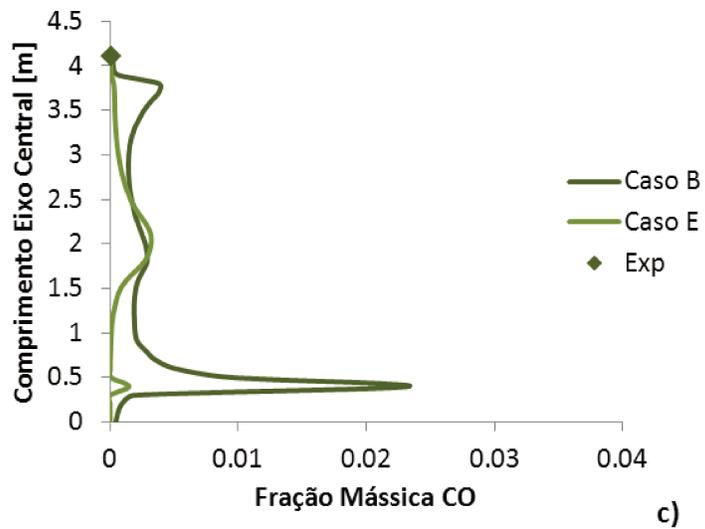
Nas condições operacionais do sistema estudado, a formação de CO pela reação heterogênea no sítio da partícula tende a ser predominante (BOYD e KENT, 1986; MITCHELL et al., 2007). Porém, ao passo que a desorção ocorre, oxidação do monóxido de carbono passa a acontecer e a concentração de  $\text{CO}_2$  aumenta. Para avaliar o impacto da consideração do produto formado pela reação heterogênea do coque num volume de controle maior que o diâmetro da partícula, foram considerados os casos extremos, combustão totalmente completa (E) ou incompleta (B), cujos resultados podem ser analisados na Figura 56.



a)



b)



c)

Figura 56. Perfis de fração mássica média em base úmida ao longo do comprimento do leito fluidizado na categoria produto para reação incompleta e completa do coque para: a) Oxigênio; b) Dióxido de carbono; c) Monóxido de carbono.

A concentração de  $\text{CO}_2$  na saída do reator não chegou ao mesmo nível do dado experimental para a combustão completa, caso E, apesar dele ser o único produto gerado pela queima do coque. A geração deste, bem como o consumo de  $\text{O}_2$ , foi inferior ao caso B ao longo da maior parte do reator. Para ambos os casos a reação homogênea dos voláteis ainda ocorre em duas etapas, formando inicialmente CO que pode ser oxidado para  $\text{CO}_2$ . Este comportamento é retratado pelo perfil de CO ao longo do leito fluidizado, no qual é possível perceber que a curva da reação completa (E) apresenta valores significativos de monóxido de carbono apenas acima da Entrada 3. O pico referente à Entrada 2 não ocorre uma vez que por esta entrada apenas carvão recirculado é alimentado, que já não possui material a ser volatilizado. O erro relativo entre cada caso e a medição experimental, Figura 57, mostrou a piora em relação aos gases de maior concentração para o caso E, porém uma melhora para o CO. Atribui-se este resultado à menor geração do produto intermediário, uma vez que no caso E apenas o balanço reacional do material volátil gera monóxido de carbono.

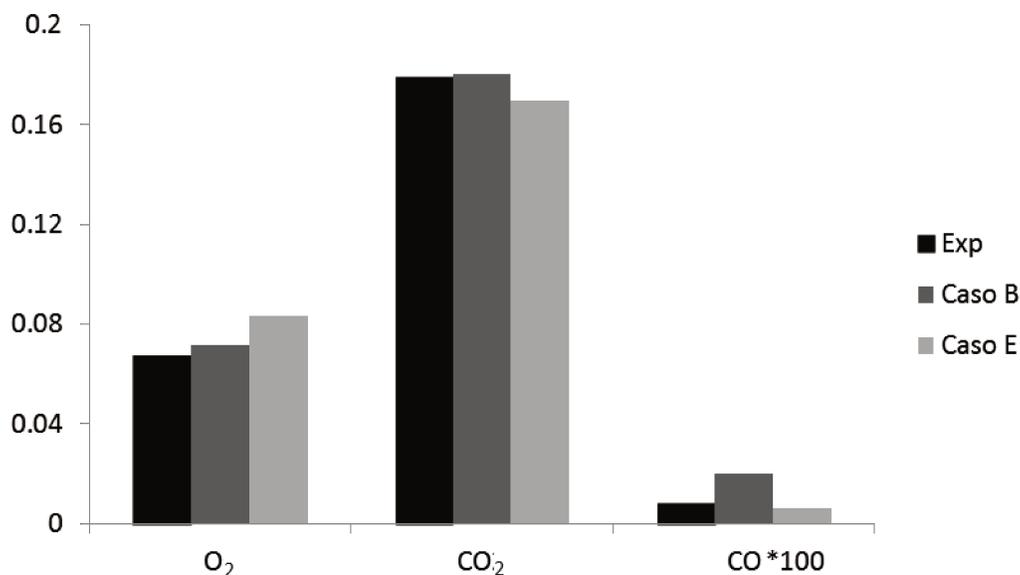


Figura 57. Comparação da fração mássica simulada de oxigênio, dióxido de carbono e monóxido de carbono (multiplicado por 100) na saída do reator com dados experimentais de RAMIREZ-BEHAINNE (2007).

A intensidade do calor liberado pela combustão heterogênea completa deve ter um efeito local superior, uma vez que toda a energia contida na oxidação do coque é liberada pontualmente, enquanto a reação incompleta implica numa geração de calor inicial quando o carbono sólido passa ao monóxido de carbono e uma segunda etapa do monóxido ao dióxido de carbono. Porém, além da diferença no produto gerado pelos casos B e E, há também uma variação na forma pela qual o calor de reação gerado é tratado. Quando a combustão heterogênea é completa, assume-se que todo  $\text{CO}_2$  é formado na superfície da partícula, porém apenas 30% do calor é mantido por ela, sendo o restante transferido à fase contínua do volume de controle no qual a partícula discreta se encontra. O motivo desta descrição deve-se ao fato de mesmo considerar combustão heterogênea completa, a reação na superfície do sólido (*i. e.* nos poros) gera principalmente CO, que devido à inibição da sua oxidação causada pela presença do material inerte, faz com que  $\text{CO}_2$  seja gerado fora da partícula de carvão (HAYHURST e PARMAR, 1998). O fator de 30% é baseado na relação entre os calores de formação dos produtos (BOYD e KENT, 1986), sendo portanto uma parte da energia liberada na fase gás. Já quando a combustão é incompleta todo o calor gerado permanece na partícula. A Figura 58 ilustra a diferença obtida entre a consideração do produto gerado no desenvolvimento térmico do sistema.

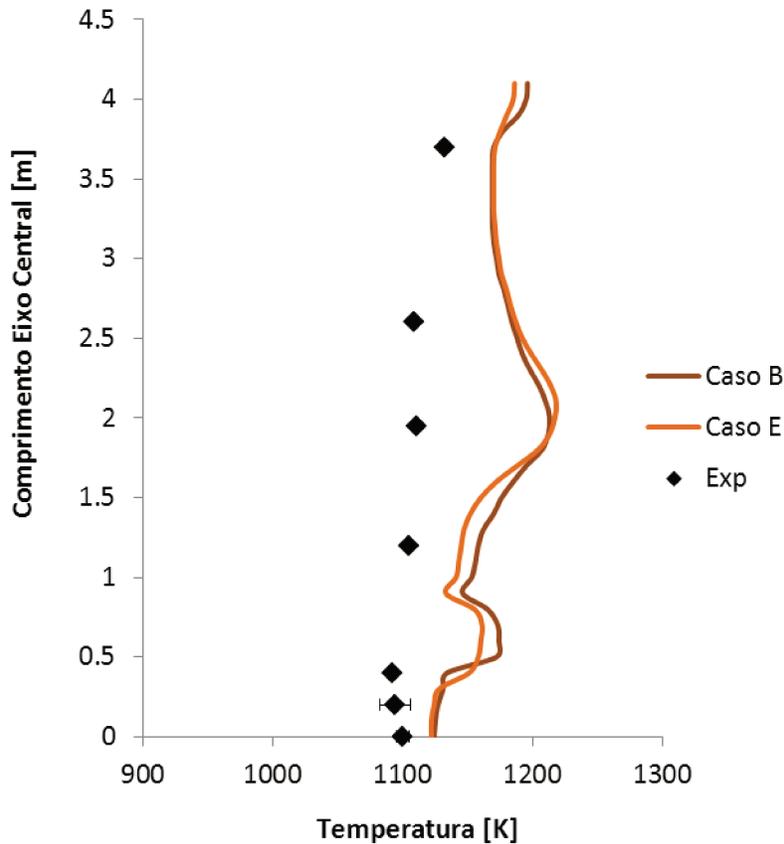


Figura 58. Perfil de temperatura média ao longo do comprimento do leito fluidizado para reação incompleta e completa do coque.

A temperatura na base do gráfico inicia-se em valores próximos para o caso E e o caso B. Contudo o pico de temperatura na Entrada 2 é inferior ao caso B. Pelo perfil de concentração dos gases (Figura 56) nota-se que é exatamente nesta região que as diferenças entre os modelos tornam-se maiores. Mais acima no leito fluidizado, após o segundo pico de temperatura, os perfis voltam a se aproximar e a diferença dos perfis de concentração permanece aproximadamente constante. A menor conversão no reator para o caso E está associada a uma menor temperatura média na fase contínua.

#### 4.2.5.4 Condição Térmica na Parede

A condição de contorno térmica na parede do reator foi avaliada, uma vez que um mapa térmico das paredes do reator não está disponível. Uma alternativa consiste em considerar que o isolamento térmico do leito fluidizado é eficiente o suficiente para que o reator seja considerado

como um vaso adiabático (WANG et al. 2009). Pode-se também estimar o fluxo de calor perdido pelas paredes por convecção natural, conforme realizado no Caso 1. Outra condição aplicável seria determinar uma temperatura constante na parede, sendo que esta bastante utilizada em trabalhos de simulação numérica de combustores de carvão (HUILIN et al. 2000, MURHPHY e SHADDIX 2006, ASOTANI et al. 2008). Por fim, é possível estimar a perda térmica como uma percentagem da capacidade térmica total do equipamento, como fizeram GRÄBNER et al. (2007) ao determinarem este valor em 1,5%. Estas duas últimas alternativas foram testadas para o sistema reativo.

A condição de temperatura constante na parede foi estimada como a temperatura média do leito fluidizado durante os experimentos, enquanto para a condição de fluxo de calor foi considerado o valor adotado por GRÄBNER et al (2007) sobre a energia produzida pela queima do carvão. Entretanto, como apenas o leito fluidizado foi simulado, determinou-se que este representa aproximadamente metade da área das paredes do *loop*, sendo portanto responsável por 50% das perdas térmicas. Deste modo, foi calculado o valor de  $270\text{W/m}^2$  para as perdas do leito fluidizado pelas paredes do equipamento.

Os perfis de temperatura ao longo do comprimento do leito fluidizado, obtidos para os casos com a condição de temperatura constante (B) e fluxo de calor negativo (F) nas paredes são comparados na Figura 59.

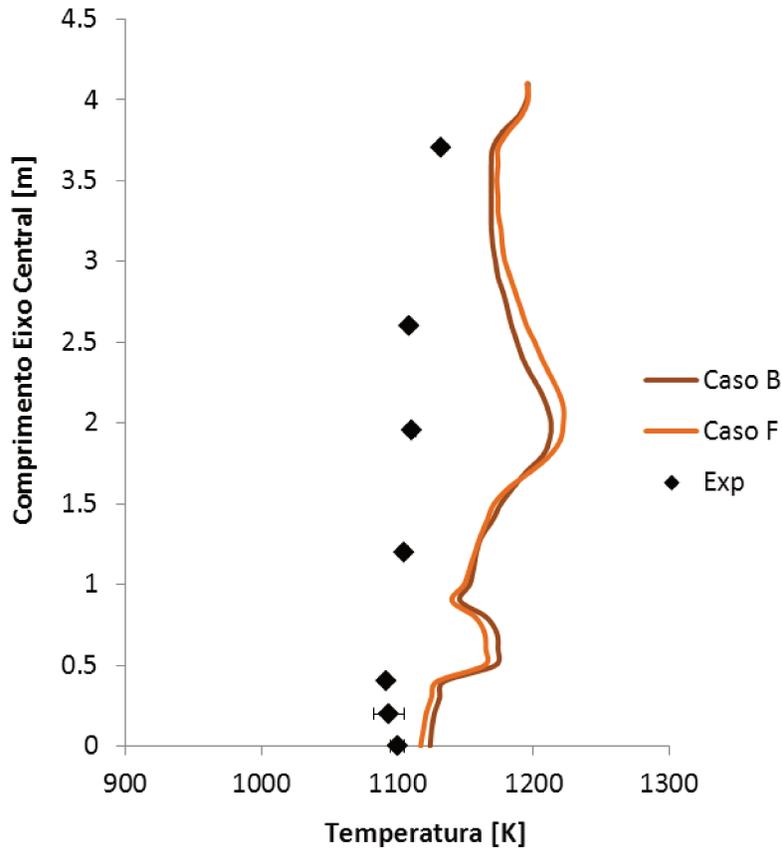


Figura 59. Perfil de temperatura média ao longo do comprimento do leito fluidizado para as condições de parede com temperatura constante e com fluxo de calor negativo.

A análise do perfil de temperatura não mostrou significativas diferenças entre os casos B e F, apesar da condição de contorno ser importante ao balanço térmico do sistema. A condição de fluxo de calor negativo gerou resultados próximos, entretanto mostrou um ligeiro aumento na região do maior pico de temperatura. Alguma alteração nos perfis também pôde ser notada na região da Entrada 2, onde o caso F apresentou valor inferior ao caso B. A maior diferença entre os casos foi de apenas 14 K na altura de 2,3 m. Deste modo, pode-se afirmar que ambas as condições de contorno para a parede são adequadas para a representação do escoamento reativo no leito fluidizado.

Assim como para a temperatura, a composição do sistema não apresentou maior variação entre estes casos, conforme mostrado na Figura 60 e na Figura 58.

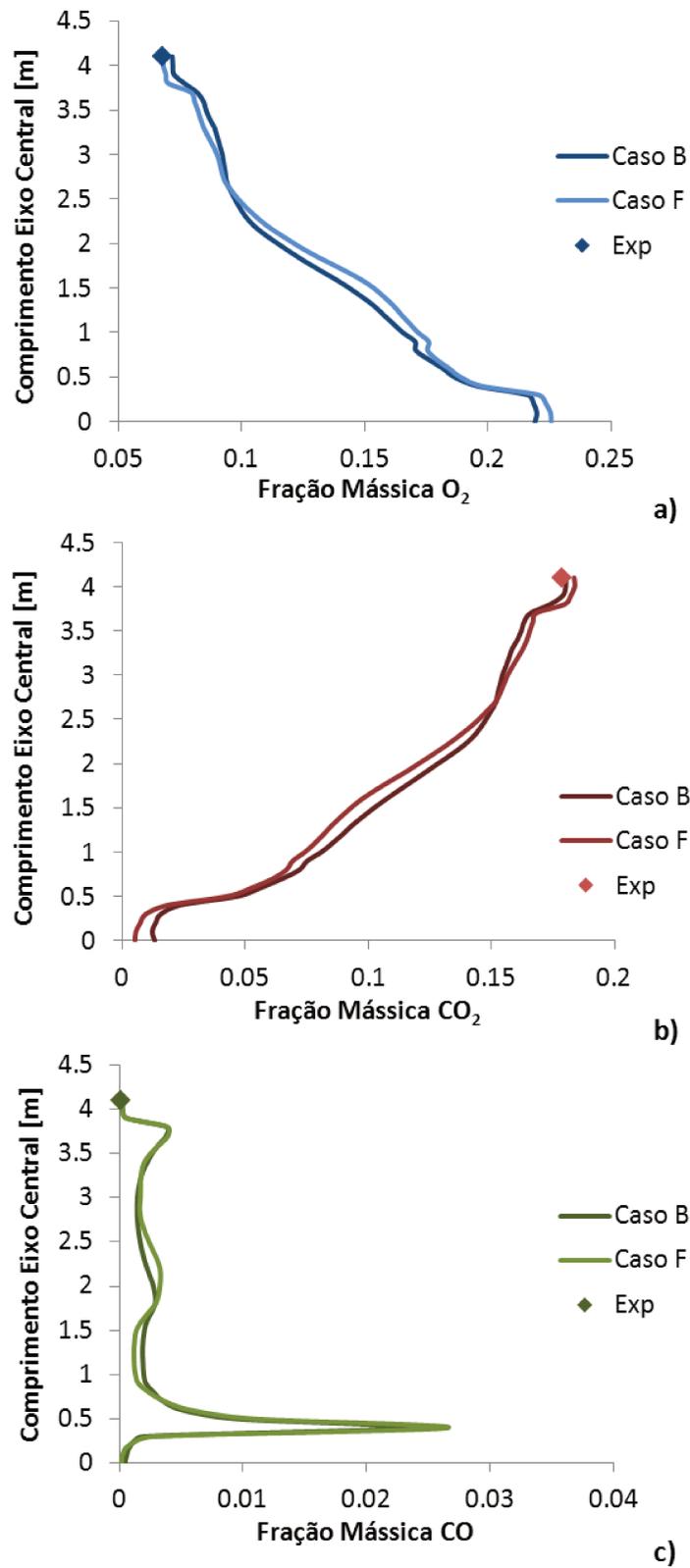


Figura 60. Perfis de fração mássica média em base úmida ao longo do comprimento do leito fluidizado na categoria parede para as condições de parede com temperatura constante e com fluxo de calor negativo para: a) Oxigênio; b) Dióxido de carbono; c) Monóxido de carbono.

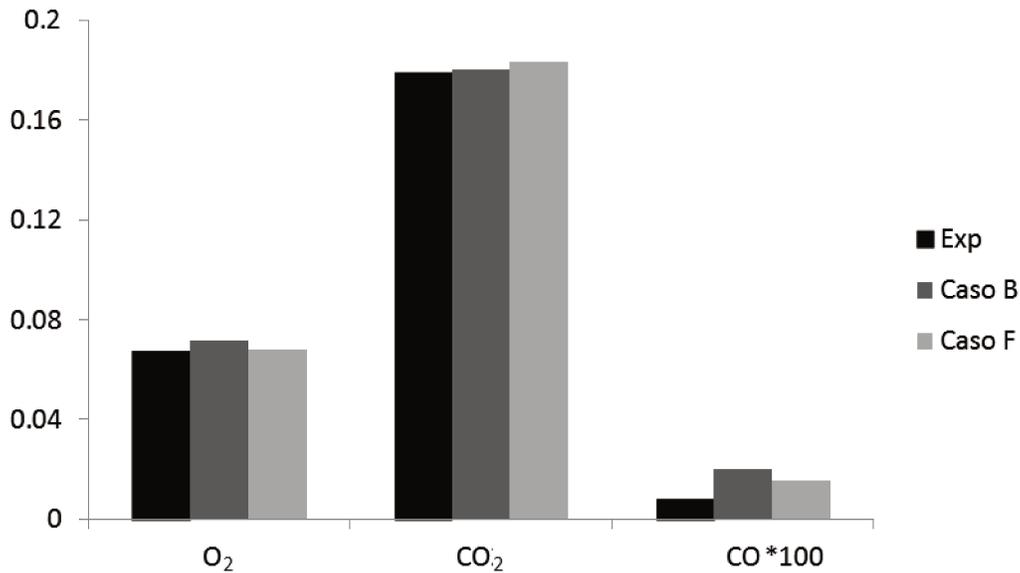


Figura 61. Comparação da fração mássica simulada de oxigênio, dióxido de carbono e monóxido de carbono (multiplicado por 100) na saída do reator com dados experimentais de RAMIREZ-BEHAINNE (2007).

Desde a base até próximo ao topo do leito fluidizado os perfis de concentração se mantiveram equivalentes, mostrando apenas pequenas diferenças, porém mesma tendência. Os erros relativos entre os casos ficaram próximos, à exceção do CO, porém a análise combinada dos perfis de temperatura e concentração evidencia as semelhanças obtidas com diferentes condições de contorno na parede.

#### 4.2.5.5 Inventário de Sólidos

Apesar da representação coerente dos fenômenos envolvidos no processo estudado, foi questionado o motivo do desvio do perfil de temperatura em relação às medidas experimentais. Dentre as hipóteses levantadas, a estimativa do inventário de sólidos no sistema foi posta em análise. Diferentemente do Caso 1, o sólido inerte no sistema não é verdadeiramente constante, uma vez que a contínua combustão de carvão gera grande quantidade de cinzas ao longo do tempo de operação. A planta piloto é dotada de um sistema para retirada de sólidos, visando a manter a operabilidade do circuito. Ainda assim, ao final do experimento, quando o leito foi esvaziado e pesado, este constituía-se de uma mistura de areia e cinzas. Como só é possível

simular alguns segundos de tempo real, a condição inicial do sistema simulado deve estar o mais próximo possível da condição operacional, uma vez que o tempo de operação da planta é de várias horas.

Por este motivo decidiu-se aplicar a mesma metodologia para a determinação do inventário de sólidos no leito fluidizado, considerando porém como inventário total a massa medida ao final do experimento. O caso B foi utilizado como base para comparação, mantendo-se a mesma modelagem matemática, porém determinando um novo inventário de sólidos inertes, para o caso agora denominado caso G. As propriedades médias atribuídas à fase dispersa para representar a mistura de areia e cinzas inertes podem ser lidas na Tabela 16.

Tabela 16. Propriedades físicas da fase dispersa utilizadas para a simulação do caso G.

Massa específica, $\rho$	2000 kg/m <sup>3</sup>
Diâmetro médio de Sauter, $d$	225 $\mu$ m
Classificação de Geldart	Grupo B

A alteração na concentração de material inerte no leito fluidizado pode ser percebida pelo perfil de fração volumétrica da fase dispersa ao longo do equipamento, conforme Figura 62, para os casos baseados na quantidade inicial e final de sólidos inertes no sistema.

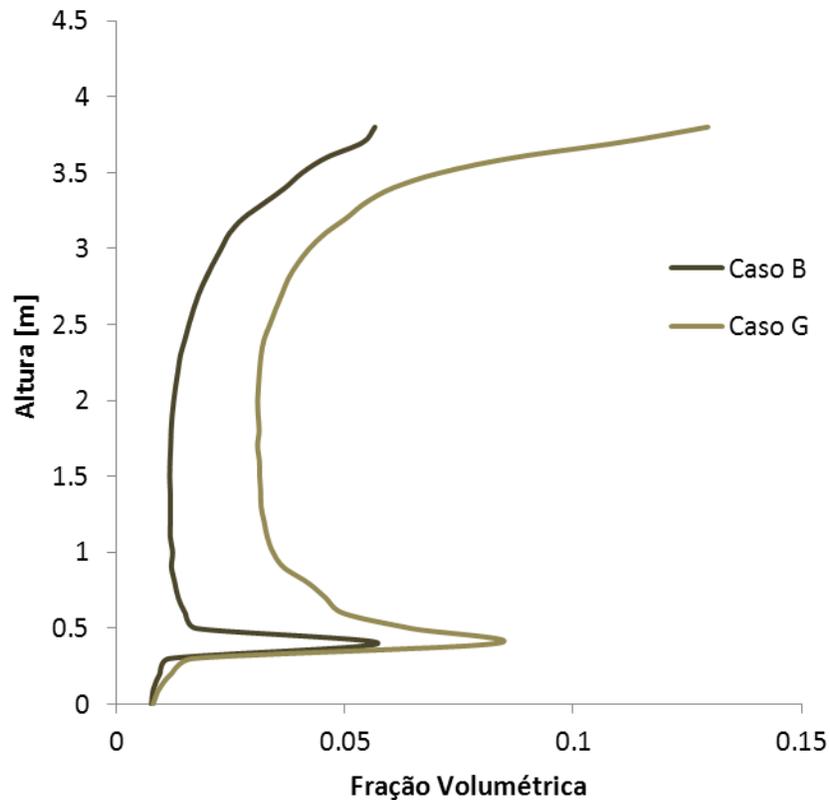


Figura 62. Perfil médio de fração volumétrica da fase dispersa (areia no caso B e areia/cinzas no caso G) ao longo do eixo central do leito fluidizado.

A maior concentração do material inerte é percebida principalmente na altura da Entrada 2, devido ao aumento do  $G_s$  do sistema. Também ocorreu a acentuação da forma C do perfil, com maior acúmulo de sólidos na região próxima à saída. A porosidade média do leito passou de 0,982 no caso B para 0,957 no caso G. O impacto da ampliação da presença da fase dispersa se mostrou significativo nos resultados, principalmente no balanço térmico do reator.

A Figura 63 mostra a diferença entre as reações químicas na fase contínua para ambos os casos (resultados do caso G menos resultados do caso B). Valores positivos indicam incremento no caso G em relação ao caso B, enquanto valores negativos apontam o contrário. O calor liberado pelas reações homogêneas foi deslocado para cima para caso com maior inventário de sólidos. Tanto a taxa da reação dos voláteis (Figura 63 b)) como da oxidação do monóxido de carbono (Figura 63 c)) passaram a ter maior intensidade na parte superior do leito fluidizado. Além disto, esta última reação também mostrou deslocamento das regiões de maior intensidade entre as

Entradas 2 e 3. Cabe lembrar que estes são dados instantâneos em 10 segundos de simulação e não médias, porém servem ao propósito da discussão.

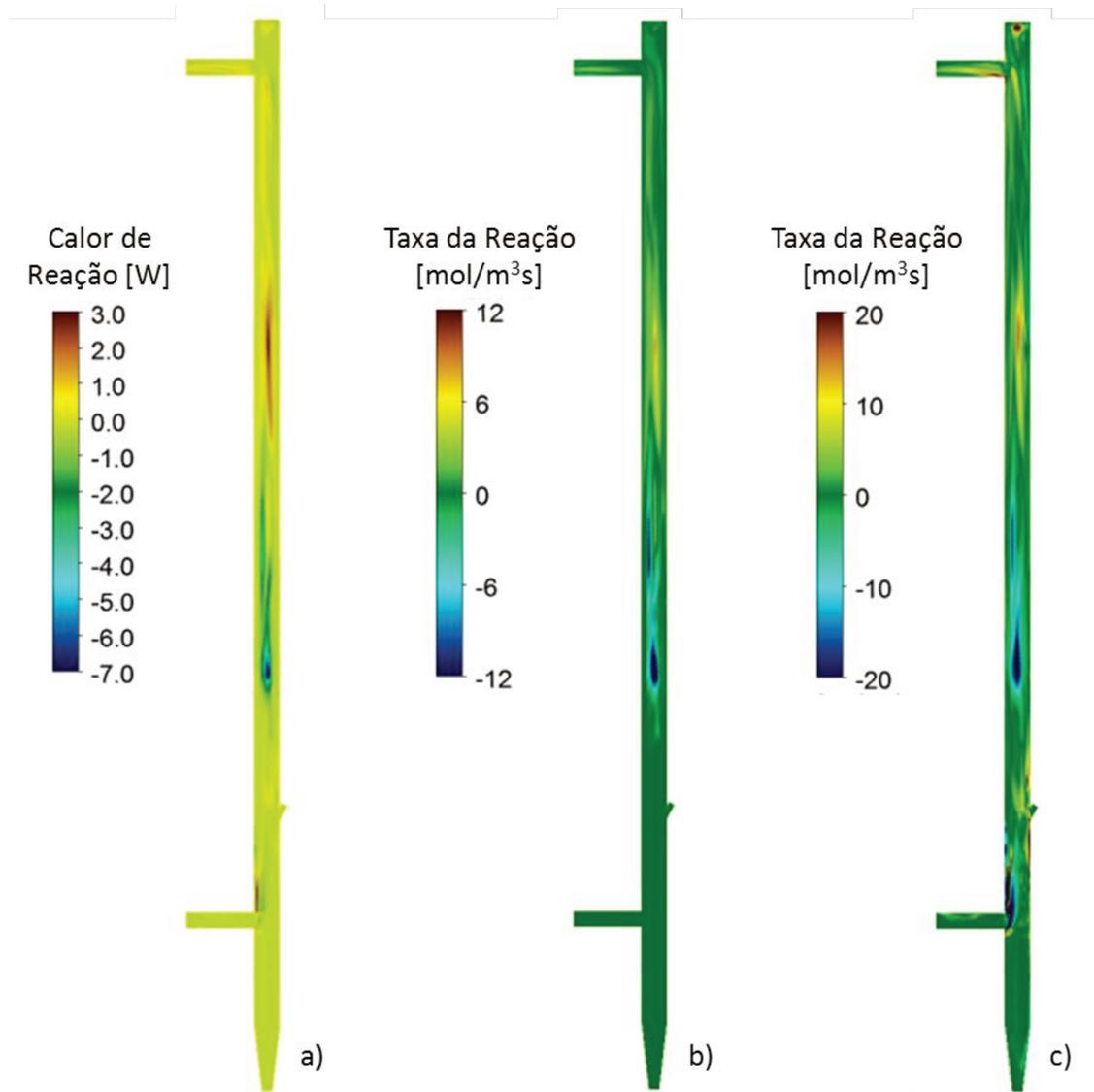


Figura 63. Planos instantâneos em 10 s de simulação da diferença entre os resultados dos casos G e B para: a) Calor das reações homogêneas; b) Taxa da reação descrita pela Equação 72; c) Taxa da reação descrita pela Equação 73.

Contudo, analisando os valores médios da concentração dos gases efluentes ao longo do comprimento do leito fluidizado pode-se ter uma melhor ideia do comportamento do sistema, conforme apresentado na Figura 64.

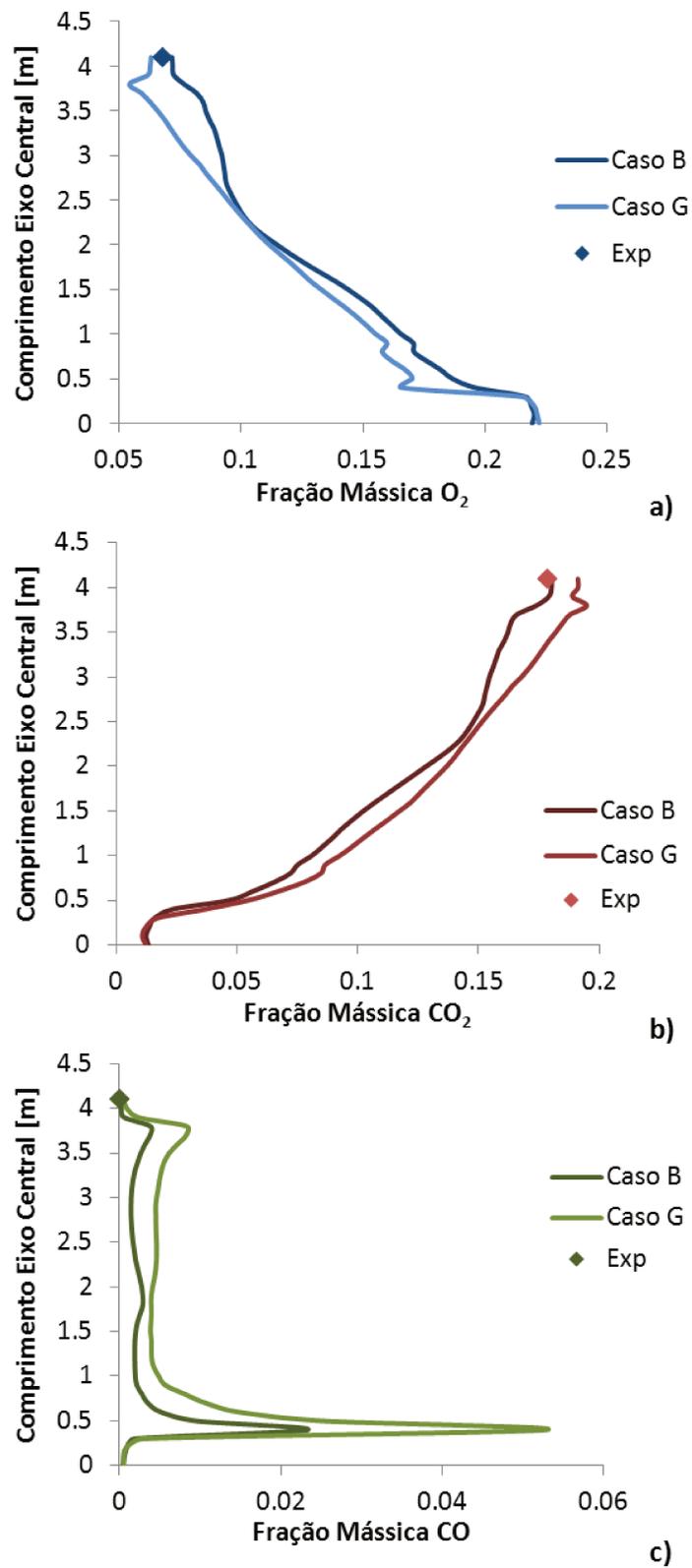


Figura 64. Perfis de fração mássica média em base úmida ao longo do comprimento do leito fluidizado para os inventários de sólido inicial e final da fase dispersa (areia): a) Oxigênio; b) Dióxido de carbono; c) Monóxido de carbono.

A alteração da fluidodinâmica do leito fluidizado teve influência sobre o comportamento das reações químicas. Todas as curvas da Figura 64 apresentam tendências parecidas, porém para o caso G o consumo de  $O_2$  e produção de  $CO_2$  ocorrem com maior intensidade já a partir de 0,4 m, mas igualam-se novamente na altura de 2 m e voltam a subir no topo do leito fluidizado. Houve maior geração do CO na base do leito, associado à redução da taxa da oxidação deste nesta região, ou seja, uma quantidade maior de CO permanece no leito sem reagir, reduzindo assim a liberação de calor nesta região do leito fluidizado. A Figura 65 mostra que os erros relativos foram maiores para o caso G, especialmente para a distribuição de CO que sofreu uma alteração significativa, ampliando sua participação nos gases efluentes.

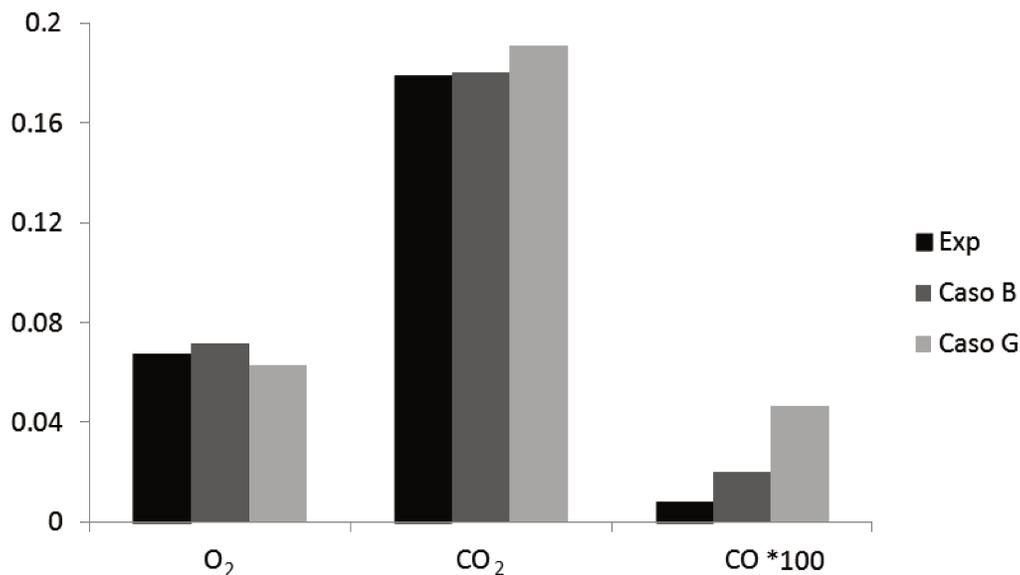


Figura 65. Comparação da fração mássica simulada de oxigênio, dióxido de carbono e monóxido de carbono (multiplicado por 100) na saída do reator com dados experimentais de RAMIREZ-BEHAINNE (2007).

Já o perfil de temperatura da fase contínua apresentou uma melhora significativa para o caso G, aproximando-se aos dados experimentais, Figura 66. A curva da temperatura ficou mais uniforme ao longo do leito fluidizado, reduzindo significativamente o pico acima da Entrada 3. A distribuição de calor é portanto fortemente influenciada pela presença do material inerte, que serve como estabilizador térmico do sistema, motivo pelo qual é adicionado aos sistemas de

CFBCs. Outros trabalhos também reportaram comportamento similar em relação ao inventário de sólidos no sistema. HU et al. (2012) reportaram um estudo realizado numa unidade de 135MW com diferentes inventários de sólidos, sendo que quanto maior o inventário de sólidos, menor a temperatura média em diversas regiões do circuito, inclusive no leito fluidizado. Uma outra conclusão tirada pelos autores foi uma menor conversão do carbono, que foi atribuído a uma piora na mistura gás-sólido apesar do aumento do tempo de residência, o que não ocorreu nestas simulações.

Outro motivo pelo qual o perfil de temperatura da simulação numérica foi tão fortemente influenciado pelo maior inventário de sólidos inertes deveu-se a recirculação externa destes. No Caso B, a vazão média de sólidos deixando o leito fluidizado foi de 0,51 kg/s, enquanto que para o Caso G este valor foi de 2,03 kg/s. Deste modo, para o Caso B aproximadamente 24% do leito de material inerte deixa o domínio de controle por segundo. Já para o Caso G este valor sobe para 55%, uma vez que a vazão do gás de fluidização é a mesma, porém o material inerte é menos denso, menor e está presente em maior quantidade (mistura de areia e cinzas). Como o circuito completo não foi simulado, a reentrada dos sólidos pela Entrada 2 dá-se a mesma temperatura para ambos os casos, esta baseada em medidas experimentais coletadas na válvula-L. Isto significa que a energia térmica levada para fora do leito fluidizado pelo material inerte (vazão mássica vezes diferença de temperatura média entre a saída e a reentrada) no Caso G é em torno de 3,4 vezes maior. A consequência é a estabilização da temperatura do leito.

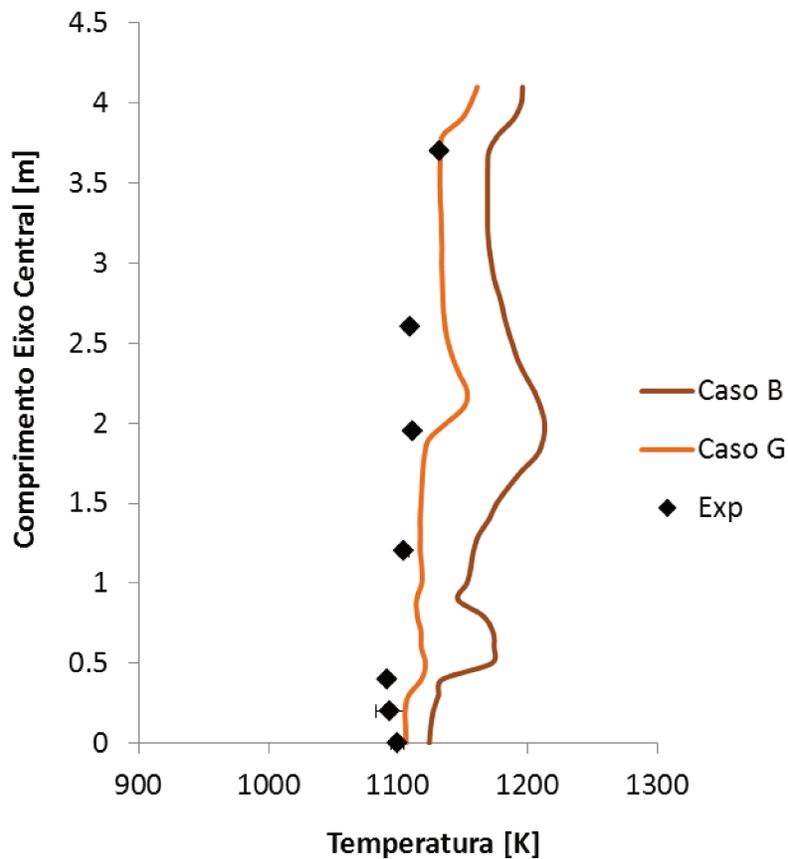


Figura 66. Perfil de temperatura média ao longo do comprimento do leito fluidizado para os inventários de sólido inicial e final.

O desvio máximo da temperatura prevista pelo caso B de 9,1% para o ponto experimental a dois metros de altura foi reduzido para 1,2% no caso G. A redução na temperatura média do leito fluidizado teve certa influência nas reações associadas à queima do carvão, como mostrado pela composição do gás efluente (Figura 64), porém ainda assim a tendência encontrada foi similar. A temperatura de saída das partículas de carvão também foi menor, sendo que a média passou de 1312 K do caso B para 1218 K do caso G. O histórico da temperatura das partículas que deixam o leito fluidizado deste último caso é mostrado na Figura 67.

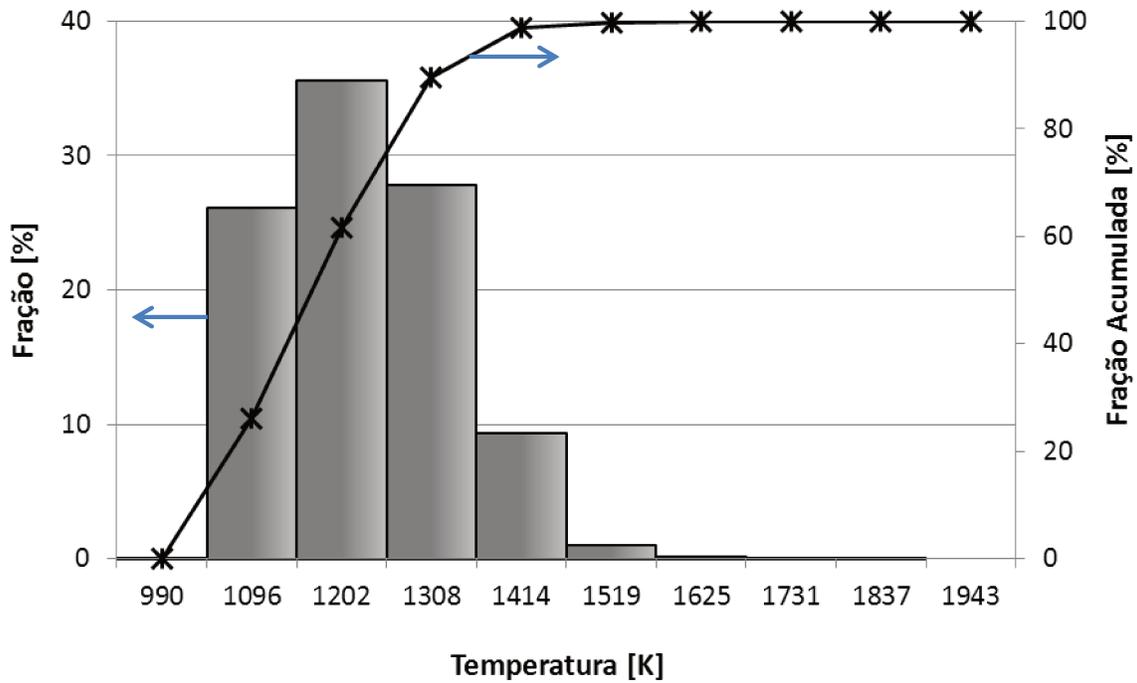


Figura 67. Histograma da distribuição percentual do número de partículas discretas (carvão) pelas suas respectivas temperaturas medidas na saída do leito fluidizado para o caso G.

Apesar da redução da temperatura média no leito, a conversão das espécies químicas apresentou pequeno aumento. Este resultado deve-se ao maior tempo de residência do material combustível no sistema, uma vez que um maior inventário de sólidos implica na alteração do comportamento do escoamento gás-sólido e num aumento da recirculação interna de sólidos, inertes e reativos. Estas alterações podem ser observadas tanto na Figura 68 como na Figura 69, as quais mostram a fração volumétrica média da fase dispersa e a velocidade média da fase contínua para ambos os casos bem como a diferença entre eles.

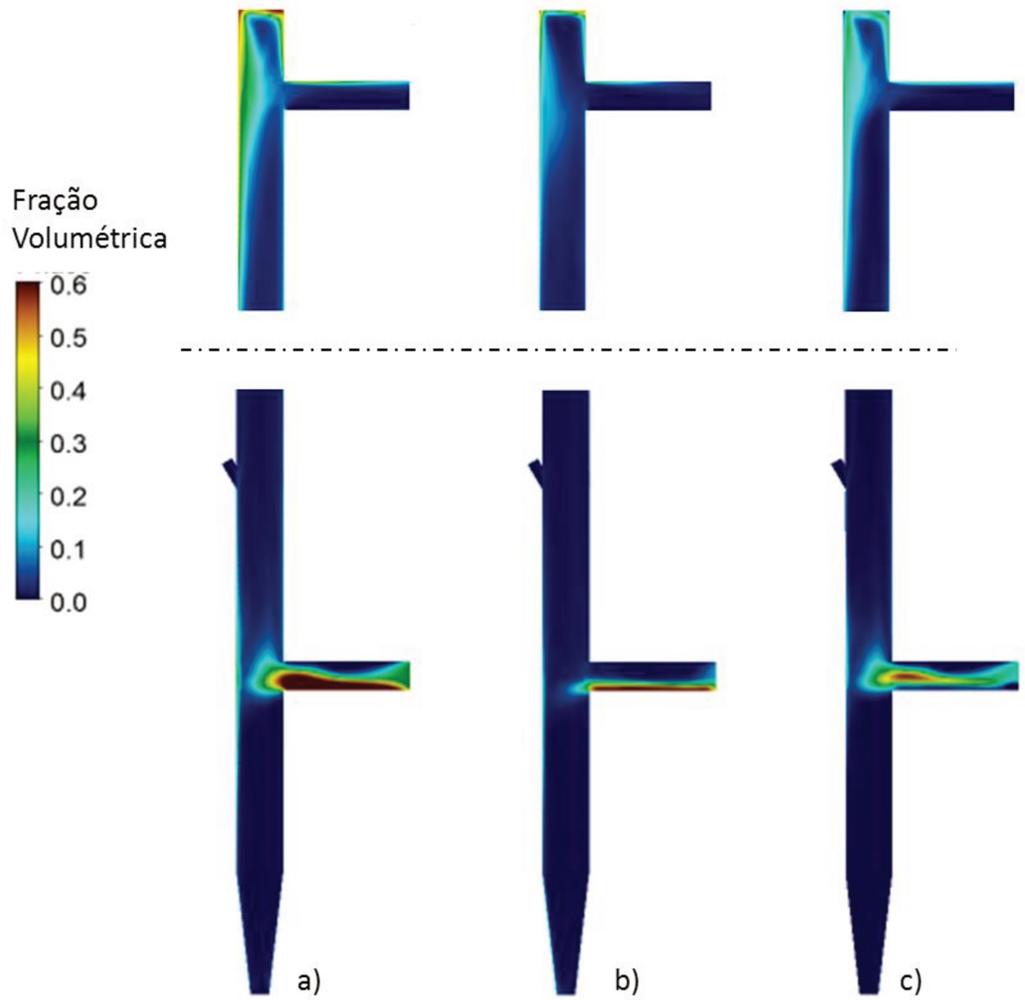


Figura 68. Campos médios da fração volumétrica da fase dispersa do topo e base do leito fluidizado para: a) Caso G; b) Caso B; c) Diferença entre os casos.

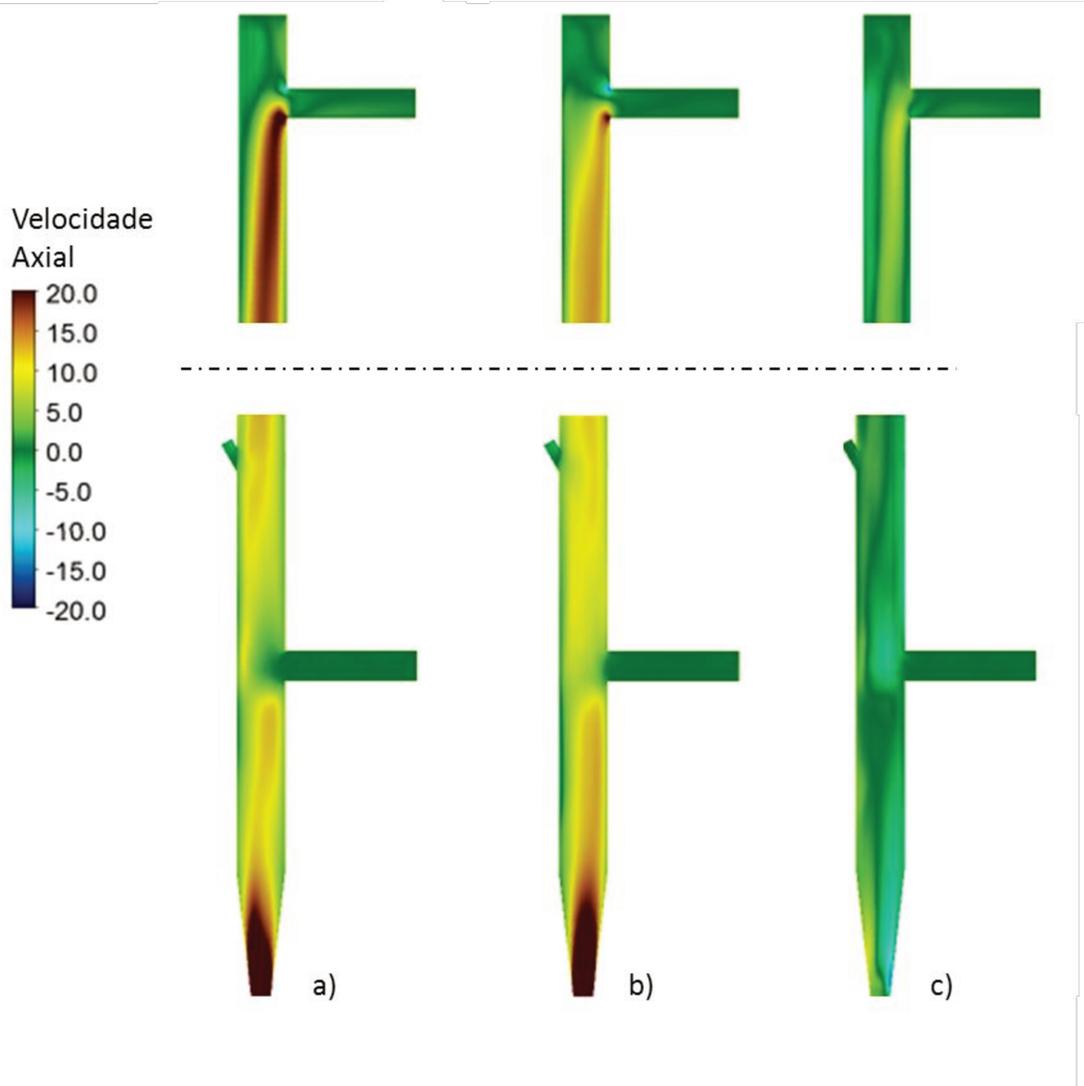


Figura 69. Campos médios da velocidade axial da fase contínua do topo e base do leito fluidizado para: a) Caso G; b) Caso B; c) Diferença entre os casos.

Já a consequência da alteração da fluidodinâmica para a fase discreta é percebida pela Figura 70, que mostra a distribuição do tempo de residência das partículas de carvão para o caso G. Nota-se que o tempo máximo passou de 5,35 para 8,29 segundos e o tempo médio de 1,55 para 1,84 segundos para os casos B e G respectivamente.

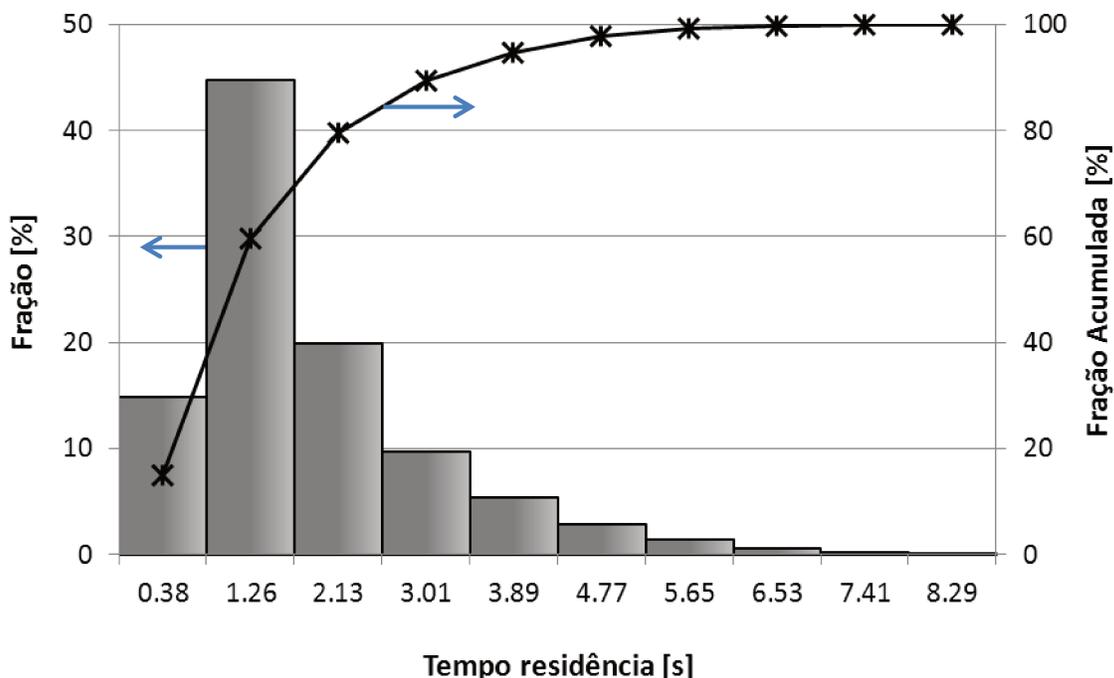


Figura 70. Histograma da distribuição percentual do número de partículas discretas (carvão) pelos seus respectivos tempos de residência medido na saída do leito fluidizado para o caso G.

Baseado nos resultados obtidos pela comparação do inventário de sólidos pode-se afirmar que a quantidade de material sólido presente no sistema é importante para a determinação da simulação numérica de leitos fluidizados. As diferenças encontradas nos perfis de temperatura e composição mostraram que tanto o caso B como o caso G retratam com proximidade a condição de operação experimental, porém os desvios em relação aos pontos medidos indicam que ainda há aspectos do escoamento a serem identificados e incluídos na modelagem do problema.

Assim conclui-se o estudo do processo de queima de carvão mineral em uma unidade de CFBC. Esta investigação englobou a análise de alguns aspectos da modelagem do problema, na qual procurou-se retratar todos os fenômenos de transferência de massa, quantidade de movimento e energia envolvidos no escoamento multifásico turbulento. As condições de temperatura e concentração dos gases encontrados foram coerentes com os dados da planta piloto para todas as investigações realizadas, de modo que o processo como um todo foi descrito com sucesso pela metodologia proposta.

## **5 Conclusões e Sugestões**

Em posse de todos os resultados obtidos para as diferentes modelagens aplicadas, chega-se ao ponto em que as conclusões do trabalho possam ser obtidas e, baseando-se nos objetivos previstos no início do estudo, avaliar o desempenho do mesmo.

## 5.1 Conclusões

A modelagem e simulação de um leito fluidizado de uma unidade de LFC projetada para atuar com o processo de queima de carvão mineral foi realizada com êxito. Este trabalho foi dividido em duas etapas, a primeira considerando a unidade como um leito fluidizado não isotérmico a altas temperaturas e a segunda incluindo neste leito a combustão de carvão.

A modelagem do escoamento a quente mas sem reações químicas foi necessária para a determinação dos modelos de escoamentos multifásicos e para implementar as condições de contorno que melhor se adequaram ao problema. Nesta etapa surgiu a questão da determinação do inventário de sólidos que estariam presentes apenas no leito fluidizado e não no circuito completo. Uma solução foi encontrada, possibilitando a simulação do sistema partindo já de uma condição inicial que permitiu alcançar o estado pseudo-estacionário com rapidez.

A simulação trifásica e transiente do processo de queima de carvão mineral foi investigada e diversos aspectos da modelagem foram estudados. Os principais desafios encontrados nesta etapa foram a complexidade dos fenômenos envolvidos e a incerteza relacionada a algumas informações físicas e operacionais necessárias como dados de entrada para o problema.

Dentre os modelos utilizados para representar a combustão heterogênea do coque resultante após a devolatilização do carvão, aqueles que consideram tanto a difusão como a cinética se mostraram mais adequados. Nesta categoria, tanto o modelo de difusão/cinética como o intrínseco produziram resultados similares. Apesar do modelo intrínseco ser mais completo, por levar em consideração a difusão dos reagentes e produtos nos poros da partícula, este requer mais informações empíricas, que nem sempre podem estar prontamente disponíveis.

A determinação da variação do diâmetro das partículas de carvão ao longo do processo de combustão ainda requer modelos que consigam efetivamente representar o comportamento destas. A relação algébrica constante testada para relacionar a variação do diâmetro e da massa específica em função da massa da partícula produziu resultados ligeiramente mais afastados dos experimentais que a consideração de diâmetro constante ao longo do processo de queima.

A modelagem da combustão através da representação da reação heterogênea incompleta em LFCs se mostrou mais realista que a adoção da combustão completa no processo de conversão do carbono sólido. Apesar da unidade ter sido projetada para operar com excesso de ar, a reação na superfície da partícula gera em sua maioria CO a altas temperaturas. Este CO é posteriormente oxidado a CO<sub>2</sub> na fase gasosa por meio de uma reação homogênea. Esta abordagem em duas etapas conseguiu representar com maior exatidão o processo de queima estudado.

Já a condição de parede mostrou ter pouca influência no balanço térmico do sistema. A consideração de uma temperatura constante ou um fluxo de calor negativo produziram resultados similares. Ainda assim, estas condições são aproximações por utilizarem valores constantes em todas as paredes do leito fluidizado. Mesmo com a variação desta condição não foram encontradas diferenças significativas, portanto ambas são adequadas para utilização como condição de contorno.

Por fim, a determinação do inventário de sólidos inertes do processo de combustão mostrou ser o aspecto fundamental para uma predição mais acurada do escoamento. Na planta piloto, os resultados experimentais são retirados após o leito estar em operação por um longo período de tempo (horas), para que seja alcançada uma condição quase estacionária. Por outro lado, a simulação CFD é capaz de representar apenas alguns segundos de tempo real, de modo que a condição inicial do sistema escolhido para o estudo numérico deve ser o mais próximo possível do estado estável da planta. Por esta razão a determinação do inventário de sólidos medida ao final do experimento, composto por areia e cinzas, se mostrou mais próxima da condição real de operação do que o inventário inicial de sólidos inertes. Entretanto, deve-se salientar que para o caso G a fase dispersa representa dois materiais sólidos distintos que foram agrupados numa fase e descritos através de suas propriedades médias. Para uma representação mais realista seria necessário separá-las em duas fases Eulerianas distintas, porém o custo computacional foi considerado demasiado elevado para a execução desta abordagem.

Como as predições das simulações dos perfis de temperatura e composição foram coerentes com os dados experimentais para todos os casos testados em maior ou menor grau, pode-se afirmar que a modelagem empregada é adequada para representar a queima de carvão mineral no sistema. Especialmente pelo fato de apenas uma parte do circuito do CFBC ter sido simulado (leito fluidizado), as condições de contorno calculadas foram tão importantes como a definição dos mecanismos da combustão.

Encontrar trabalhos na literatura que incluam uma terceira fase para representar o material reativo é muito raro em estudos de CFD sobre combustão de carvão. Devido a baixa fração mássica do carvão em relação aos sólidos inertes, esta abordagem mostrou-se viável e produziu resultados satisfatórios.

Uma das principais vantagens resultantes deste estudo reside na obtenção de informações detalhadas de todo o volume do leito fluidizado durante o processo de queima de carvão, que podem servir para otimizar o projeto ou operação deste, pelo entendimento da fluidodinâmica do

escoamento multifásico, térmico e reacional. Outra vantagem das informações obtidas pela simulação reside na possibilidade de identificar adequadamente pontos para monitoramento durante a operação do equipamento.

## 5.2 Sugestões

Como direção para trabalhos futuros, sugere-se aprimorar a modelagem da fase discreta. Algumas simplificações foram efetuadas no presente trabalho, mas que merecem ser analisadas em maiores detalhes. O diâmetro das partículas é uma variável que requer atenção especial. Ela pode variar devido a uma variedade de fatores. O diâmetro pode aumentar devido ao processo de mudança de fase e liberação do material volátil no interior do carvão, de modo que a partícula se torna mais porosa. Também pode sofrer redução do diâmetro em função da queima do coque, que conforme a literatura, não varia linearmente com a variação da massa específica. Há ainda a quebra e fracionamento que ocorrem devido ao choque com outras partículas ou com o equipamento. Todas estas formas de variação do diâmetro são dependentes da configuração geológica do carvão e também do processo de queima ao qual são submetidos. Poucos trabalhos na literatura apresentam propostas para a modelagem destes problemas, de modo que dados empíricos se tornam necessários.

Outro ponto que pode ser melhorado na modelagem do problema refere-se a descrição da interação da fase discreta com a fase dispersa. A influência que o sólido inerte tem sobre o carvão só foi determinada indiretamente, pelo efeito de ambas as fases sobre a fase contínua. Uma representação mais realista deveria incluir o acoplamento total entre as fases, porém o tempo computacional ainda apresenta-se como uma restrição a esta alternativa.

Tentativas foram realizadas no sentido de modelar, em conjunto com a combustão do carvão mineral, a calcinação e sulfatação do calcário, porém estas não obtiveram sucesso. As partículas de calcário também foram descritas pela abordagem Lagrangeana, porém a reação de superfície de sulfatação não ocorreu em conjunto com a combustão do coque. Próximos trabalhos podem procurar incluir estas reações e assim realizar o balanço de  $\text{SO}_2$  no sistema.

Ainda, aconselha-se a incluir na modelagem do problema reativo a transferência de calor por radiação. A adição deste mecanismo tornará o problema mais completo, principalmente para uma melhor descrição da fase discreta.

Finalmente sugere-se que a modelagem utilizada seja implementada em outras configurações de LFCs com outras condições operacionais, ou mesmo outras tecnologias, como regeneradores de FCC por exemplo, visando enriquecer o estudo da modelagem trifásica com combustão.

## 6 Referências Bibliográficas

ALVES, J. J. N.; MEIER, H. F.; MARTIGNONI, W. P.; MORI, M. Prediction of the fluid dynamics of circulating fluidized bed reactors by numerical simulation. Rio Oil&Gas Expo and Conference, Rio de Janeiro, Outubro 2000.

ANDERSON, J. D. Computational Fluid Dynamics: the basics with applications. Mechanical Engineering Series. McGraw-Hill, New York, 1995.

ANNAMALAI, K.; RAYN, W. Interactive process in gasification and combustion II – Isolated carbon, coal and porous char particles. Prog. Energy Combustion, v. 19, p. 383-446, 1993.

ANSYS FLUENT (diversos autores). Manuais Fluent 12, arquivos on-line, 2009.

ASOTANI, T.; YAMASHITA, T.; TOMINAGA, H.; UESUGI, Y.; ITAYA, Y.; MORI, S. Prediction of ignition behavior in a tangentially fired pulverized coal boiler using CFD. Fuel, v. 87, p. 482-490, 2008.

BALANÇO ENERGÉTICO NACIONAL 2011 – Ano base 2010. Ministério de Minas e Energia, Brasil. Disponível em <[https://ben.epe.gov.br/downloads/Relatorio\\_Final\\_BEN\\_2011.pdf](https://ben.epe.gov.br/downloads/Relatorio_Final_BEN_2011.pdf)>. Acesso em 26 de Janeiro 2012.

BASTOS, J. C. C. MORI, M. ; ROSA, L. M.; MARINI, F.; MARTIGNONI, W. P. Modelling and simulation of a gas–solids dispersion flow in a high-flux circulating fluidized bed (HFCFB) riser. Catalysis Today, v. 130, p. 462-470, 2008.

BAUM, M. M.; STREET, P. J. Predicting the combustion behavior of coal particles. Combustion Science Technology, v. 3(5), p. 231-243, 1971.

BENIM, A. C.; STEGELITZ, P.; EPPLE, B. Simulation of two-phase flow in a laboratory coal pulverizer. Forsch. Ingenieurwes., v. 69, p. 197-204, 2005.

BENYAHIA, S.; ARASTOPOUR, H.; KNOWLTON, T. M.; MASSAH, H.: Simulation of particles and gas flow behavior in the riser section of a circulating fluidized bed using kinetic theory approach for the particulate phase. Powder Technology. v. 112, p. 24-33, 2000.

BENYAHIA, S.; SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T. J.: Evaluation of boundary conditions used to model dilute, turbulent gas-solid flows in a pipe. Powder Technology. v. 156, p. 62-72, 2005.

BENYAHIA, S.; SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T. J.: Study of the ability of multiphase continuum models to predict core-annulus flow. Particle Technology and Fluidization. v. 53, n. 10, p. 2549-2568, 2007.

BERMÚDEZ, A.; FERRÍN, J. L.; LIÑÁN, A.; SAAVEDRA, L. Numerical simulation of group combustion of pulverized coal. *Combustion and Flame*, v. 158, p. 1852-1865, 2011.

BOYD, R. K.; KENT, J. H. Three-dimensional furnace computer modeling. *Twenty-first Symposium (Int.) on Combustion*. The Combustion Institute, p. 265-274, 1986.

CASTILHO, G. J. Análise de caos em leito fluidizado circulante. Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP, 2011.

CHANG, J.; WANG, G.; GAO, J.; ZHANG, K.; CHEN, H.; YANG, Y. CFD modeling of particle-particle heat transfer in dense gas-solid fluidized beds of binary mixture. *Powder Technology*, v. 217, p. 50-60, 2012.

CHERN, J-S.; HAYHURST, A. N. Does a large coal particle in a hot fluidized bed lose its volatile content according to the shrinking core model? *Combustion and Flame*, v. 139, p. 208-221, 2004.

COSTA, V. J. Modelo matemático para a combustão de carvão pulverizado e sua interação com água. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2002.

CROWE, C. T.; SOMMERFELD, M.; TSUJI, Y. *Multiphase flow with droplets and particles*, Boca Raton CRC Press, 1998.

DAS, M.; BANDYOPADYAY, A.; MEIKAP, B. C.; SAHA, R. K. Axial voidage profiles and identification of flow regimes in riser of a circulating fluidized bed. *Chemical Engineering Journal*, v. 145, p. 249-258, 2008.

DENNIS, J. S.; HAYHURST, A. N.; SCOTT, S. A. The combustion of large particles of char in bubbling fluidized beds: The dependence on Sherwood number and the rate of burning on particle diameter. *Combustion and Flame*, v. 147, p. 185-194, 2006.

DIAS, D. B.; MORI, M. ; MARTIGNONI, W. P. . Study of Different Approaches for Modeling Cyclones Using CFD. In: 2008 AIChE Annual Meeting, Filadélfia. 2008 AIChE Annual Meeting Conference Proceedings, 2008.

DU, X.; ANNAMALAI, K. The transient ignition of isolated coal particle. *Combustion and Flame*, v. 97, p. 339-354, 1994.

DU, B.; WARSITO, W.; FAN, L.-S. Bed nonhomogeneity in turbulent gas-solid fluidization. *AIChE Journal*, v. 49, n. 5, p. 1109-1126, 2003.

ENWALD, H.; PEIRANO, E.; ALMSTEDT, A. E. Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. *Int. J. Multiphase Flow*, v. 22, p. 21-66, 1996.

FERZIGER, J. H.; PERIC, M. Computational Methods for Fluid Dynamics. 3. Ed. Berlin, Germany: Springer, p. 583, 2002.

FIELD, M. A. Rate of combustion on sized grade fractions of char from low rank coal between 1200 K and 2000 K. *Combustion and Flame*, v. 13, p. 237-252, 1969.

FILKOSKI, R. V.; BELOSEVIC, S. V.; PETROVSKI, I. J.; OKA, S. N.; SIJERCIC, M. A. Computational fluid dynamics techniques as a tool for description of the phenomena occurring in pulverized coal combustion systems. *Journal of Power and Energy*, v. 221, p. 399, 2006.

FÖRTSCH, D.; KLUGER, F.; SCHNELL, U.; SPLIETHOFF, H.; HEIN, K. R. G. A kinetic model for the prediction of NO emissions from staged combustion of pulverized coal. *Proceedings of the 27<sup>th</sup> Symposium on combustion*, p. 3037-3044, 1998.

FOX, R. O. Computational Models for Turbulent Reacting Flows. Cambridge University Press, Cambridge, 2003.

GARDE, R. J. Turbulent Flow. India: Wiley and Sons, 1994.

GELDART, D. Types of gas fluidization. *Powder Technology*, v. 7, p. 285-292, 1973.

GENG, Y.; CHE, D. An extended DEM-CFD model for char combustion in a bubbling fluidized bed combustor of inert sand. *Chemical Engineering Science*, v. 66, p. 207-219, 2011.

GHAREBAGHI, M.; IRONS, R.M.A.; POURKASHANIAN, M.; PRANZITELLI, A. Large Eddy Simulation of oxy-coal combustion in an industrial combustion test facility. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, v. 5, p. 100-110, 2011.

GIDASPOW, D. Multiphase Flow and Fluidization. Academic Press Inc, San Diego, California, 1994.

GLICKSMAN, L. R. Heat transfer in circulating fluidized beds. In: GRACE, J. R.; AVIDAN, A. A.; KNOWLTON, T. M. *Circulating fluidized beds*. Blackie Academic&Professional, 1997, 583p.

GOOSSENS, W. R. A. Classification of fluidized particles by Archimedes number. *Powder Technology*, v. 98, p. 48, 1998.

GÖRNER, K. Technische Verbrennung. Springer Verlag. Berlin Heidenberg 1991.

GRÄBNER, M.; OGRISECK, S.; MEYER, B. Numerical simulation of coal gasification at circulating fluidized bed conditions. *Fuel Processing Technology*, v. 88, p. 948-958, 2007.

GRACE, J. R.; AVIDAN, A. A.; KNOWLTON, T. M. *Circulating fluidized beds*. Blackie Academic&Professional, 1997, 583p.

GRIFFITHS, J. F. Reduced kinetic models and their application to practical combustion systems. *Prog. Energy Combust. Sci.* v. 21, p. 25-107, 1995.

HANNES, J. P. Mathematical modeling of circulating fluidized bed combustion. Tese de Doutorado, Universidade RWTH Aachen, Aachen, 1996.

HARTGE, E. U.; RENSNER, D. WERTHER, J. Solids concentration and velocity patterns in circulating fluidized beds, in *Circulating Fluidized Bed Technology II*, Pergamon Press, Oxford, p. 165-180, 1988.

HASHIMOTO, N.; KUROSE, R.; HWANG, S.-M.; TSUJI, H.; SHIRAI, H. A numerical simulation of pulverized coal combustion employing a tabulated-devolatilization-process model (TDM model). *Combustion and Flame*, v. 159, p. 353-366, 2012.

HAYHURST, A. N.; PARMAR, M. S. Does solid carbon burn in oxygen to give gaseous intermediate CO or produce CO<sub>2</sub> directly? Some experiments in a hot bed of sand fluidized by air. *Chemical Engineering Science*, v. 53, p. 427-438, 1998.

HAYHURST, A. N.; PARMAR, M. S. Measurements of the mass transfer coefficient and Sherwood number for carbon spheres burning in a bubbling fluidized bed. *Combustion and Flame*, v. 130 p. 361-375, 2002.

HIGUERA, F. J. Combustion of a coal char particle in a stream of dry gas. *Combustion and Flame*, v. 152, p. 230-244, 2008.

HODAPP, M. J. Modelagem e Simulação de um leito fluidizado: um estudo comparativo. Dissertação de Mestrado. Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2009.

HODAPP, M. J.; RAMIREZ-BEHAINNE, J. J.; MORI, M.; GOLDSTEIN, L. Numerical Studies of the gas-solid hydrodynamics at high temperature in the riser of a bench-scale circulating fluidized bed. *International Journal of Chemical Engineering*, In Press, 2012.

HORIO, M.; KAJIKAWA, S. DEM simulation of industrial issues in fluidized bed reactors, In: A. Levy and H. Kalman, Editor(s), *Handbook of Powder Technology*, Elsevier Science B.V., v. 10, p. 547-559, 2001.

HOWARD, J. B. and SAROFIM, A. F., Gasification of coal char with carbon dioxide and steam at 1200-1800 C, Energy Laboratory Report, Dept. of Chem. Eng., Massachusetts Institute of Technology (1978).

HU, N.; LI, Z.; YANG, H.; ZHANG, H.; YUE, G. Development and validation of a 1D CFB boiler combustion model. In: Proceedings of the 21<sup>st</sup>. International Conference on Fluidized Bed Combustion, Naples, June 2012.

HUILIN, L.; GUANGBO, Z.; RUSHAN, B.; YONGJIN, C.; GIDASPOW, D. A coal combustion model for circulating fluidized bed boilers. *Fuel*, n. 79, p. 165-172. 2000.

INCROPERA, F. P.; DEWITT, D. P. Fundamentals of heat and mass transfer. 5th ed. New York, N.Y.: J. Wiley, p. 981, 2002.

JIN, Y.; YU, Z.; QI, C.; BAI, D. The influence of exit structures on the axial distribution of voidage in fast fluidization bed. Science Press, p. 165-173, 1988.

JIRADILOK, V.; GIDASPOW, D.; DAMRONGLERD, S.; KOVES, W. J.; MOSTOFI, R. Kinetic theory based CFD simulation of turbulent fluidization of FCC particles in a riser. *Chemical Engineering Science*, v. 61, p. 5544-5559, 2006.

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

JOOS, F. *Technische Verbrennung*. Springer Verlag. Berlin Heidenberg 2006.

KARRI, S. B. R.; KNOWLTON, T. M.: A comparison of annulus solids flow direction and radial solids mass flux profiles at low and high mass fluxes in a riser. Proceedings of the 6th International Conference on Circulating Fluidized Beds, Germany, 1999, p. 71-76.

KNOWLTON, T. M. Experimental modeling of gas-solid flow systems. In: *Workshop Latino Americano de CFD Aplicado À Indústria de Petróleo (CFD OIL)*. Rio de Janeiro, 2005.

KRUSE, M.; WERTHER, J. 2D gas and solids flow prediction in circulating fluidized beds based on suction probe and pressure profile measurements. *Chemical Engineering and Processing*, v. 34, p. 185-203, 1995.

KUNII, D.; LEVENSPIEL, O. *Fluidization Engineering*. John Wiley & Sons, 1969, 534p.

KUO, K. K. Y. *Principles of Combustion - 2<sup>nd</sup> Ed.* Jhon Wiley, New York, 2005.

LAN, X.; XU, C.; WANG, G.; WU, L.; GAO, J. CFD modeling of gas-solid flow and cracking reaction in two-stage riser FCC reactors. *Chemical Engineering Science*, v. 64, p. 3847-3858, 2009.

LAURENDEAU, N. M. Heterogeneous Kinetics of Coal Char Gasification and Combustion. *Progress in Energy Combustion Science*, v. 4, p. 221-270, 1978.

- LI, Z. Q.; WEI, F.; JIN, Y. Numerical simulation of pulverized coal combustion and NO formation. *Chem. Eng. Sci.*, v. 58, p.5161-5171, 2003.
- LIM, K. S.; ZHU, J. X.; GRACE, J. R. Hydrodynamics of gas-solid fluidization. *Int. J. Multiphase Flow*, v. 21, p. 141-193, 1995.
- LIXING, Z. Theory and numerical modeling of turbulent gas-particle flows and combustion. Science Press and CRC Press Inc. China, 1993.
- LO, H. Y.; CARROLL, D. L.; STIEL, L. I. Viscosity of gaseous air at moderate and high pressures. *Journal of Chemical and Engineering Data*, v. 11, p. 540-544, 1966.
- LOEFFLER, G.; HOEFBAUER, H. Does CO burn in fluidized beds? - A detailed chemical kinetic modeling study. *Combustion and Flame*. v. 129, p. 439-452. 2002.
- LOPES, G. C.; ROSA, L. M.; MORI, M.; MARTIGNONI, W. P. Three-Dimensional Modeling of Fluid Catalytic Cracking Industrial Riser Flow and Reactions. *Computers & Chemical Engineering*, v. 35, p. 2159-2168, 2011.
- LOPES, G. C. ; ROSA, L. M. ; MORI, M. ; NUNHEZ, J. R. ; MARTIGNONI, W. P. . Simulation of a three-phase three-dimensional reacting flow in an FCC industrial riser. *Boletim Técnico da Petrobrás*, v. 54, p. 117-129, 2011.
- LUN, C. K. K.; SAVAGE, S. B.; JEFFREY, D. J.; CHEPURNIY, N. Kinetic theories for granular flow: inelastic in couette flow and slightly inelastic particles in a general flow. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 140, p. 223-256, 1984.
- MAGNUSSEN, B. F.; HJERTAGER, B. H. On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. *Symposium (International) on Combustion*, v. 16, p. 719-729, 1977.
- MALCUS, S.; CHAPLIN, G.; PUGSLEY, T. The hydrodynamics of high-density zone in a CFB riser analyzed by means of electrical capacitance tomography (ECT). *Chemical Engineering Science*, v. 55, p. 4129-4138, 2000.
- MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, Livros técnicos e científicos editora, 2ª. Ed. 2004.
- MASTELLONE, M. A.; ARENA, U. The effect of particle size and density on solid distribution along the riser of a circulating fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, v. 54, p. 5383-5391, 1999.

MATSUI, K., TSUJI, H. and MAKINO, A., Estimation of the relative rates of C-O<sub>2</sub> and C-H<sub>2</sub>O reactions, *Carbon*, v. 21(3), p.320-321, 1983.

McCOMB, W. D. *The Physics of fluid turbulence*. Oxford, UK: Oxford Science Publications, 1990.

MEIER, H. F. *Modelagem Fenomenológica e Simulação Bidimensional de Ciclones por Técnicas de Fluidodinâmica Computacional*. Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP, 1998.

MIHÁLYKÓ, C. S.; LAKATOS, B. G.; MATEJDESZ, A.; BLICKLE, T. Population balance model for particle-to-particle heat transfer in gas–solid systems, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 47, i. 6–7, p. 1325-1334, 2004.

MILIOLI, C. C.; MILIOLI, F. E. Two-fluid simulation of desulfurization in a circulating fluidized bed. XVI Congresso Brasileiro de Engenharia Química, 2006.

MITCHELL, R. E.; AKANETUK, A. E. The impact of fragmentation on char combustion during pulverized coal combustion. *Proceedings of the 26<sup>th</sup> symposium on combustion*, p. 3137-44, 1996.

MITCHELL, R.; MA, L. Burning behavior of pulverized coal and Biomass Char. Presented at the 2005 ACERC Conference, Brigham Young University, 2005.

MITCHELL, R. E.; MA, L.; KIM, B. J. On the behavior of pulverized coal chars. *Combustion and Flame*, v. 151, p. 426-436, 2007.

MOREIRA, D. R. R. *Simulação não isotérmica de um regenerador FCC usando a fluido dinâmica computacional*. Dissertação de Mestrado, UNICAMP, Campinas, 2002.

MORITA, E. S. *Estudo experimental das emissões de NO<sub>x</sub> na combustão de carvão mineral brasileiro em leito fluidizado rápido*. Dissertação de Mestrado. UNICAMP, Campinas, 2009.

MORSI, S. A.; ALEXANDER, A. J. An investigation of particle trajectories in two-phase flow systems. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 55, p. 193-208, 1972.

MULCAHY, M. F. R.; SMITH, I. W. 1969 apud HAYHURST, A. N.; PARMAR, M. S. Does solid carbon burn in oxygen to give gaseous intermediate CO or produce CO<sub>2</sub> directly? Some experiments in a hot bed of sand fluidized by air. *Chemical Engineering Science*, v. 53, p. 427-438, 1998.

MURPHY, J. J.; SHADDIX, C. R. Combustion kinetics of coal chars in oxygen-enriched environments. *Combustion and Flame*, v. 144, p. 710-729, 2006.

NIKOLOPOULOS, A.; NIKOLOPOULOS, N.; CHARITOS, A.; GRAMMELIS, P.; KAKARAS, E.; BIDWE, A.R.; VARELA, G.; ZIEBA, M.; SCHEFFKNECHT, G. Numerical investigation and experimental validation of an isothermal CFD model developed for a CFB carbonator. In: 21<sup>st</sup> International Conference on Fluidized Bed Combustion, Naples, June 2012.

OGAWA, S.; UMEMURA, A.; OSHIMA, N. On the equation of fully fluidized granular materials. J. Appl. Math. Phys., v. 31, p.483, 1980.

ORTEGA, E. Movimento de partículas em fluidos. Notas de aula, disciplina de Operações Unitárias da Faculdade de Engenharia de Alimentos da Unicamp. Acesso em: 07 de Março de 2012. Disponível em: <<http://www.unicamp.br/fea/ortega/aulas/index631.htm>>

PALLARES, D.; JOHNSON, F. Modeling of fuel mixing in fluidized bed combustors. Chemical Engineering Science, v. 63, p. 5663-5671, 2008.

PAPADIKIS, K.; BRIDGWATER, A. V.; GU, S. CFD modeling of the fast pyrolysis of biomass in fluidized bed reactors, part A: Eulerian computation of momentum transport in bubbling fluidized beds. Chemical Engineering Science, v. 63, p. 4218-4227, 2008.

PEIRANO, E.; LECKNER, B. Fundamentals of turbulent gas-solid flows applied to circulating fluidized bed combustion. Progress in Energy Combustion Science, v. 24, p. 259-296, 1998.

PELTOLA, J. Dynamics in a circulating fluidized bed: experimental and numerical study. Master of Science Thesis, Tampere University of Technology, Finland, 2009.

PROSPERETTI, A.; TRYGGVASON, G. Computational Methods for Multiphase Flow, Cambridge University Press, UK, p351, 2007.

RAMIREZ-BEHANINNE, J. J. Estudo das emissões de mercúrio na combustão de carvão mineral brasileiro em leito fluidizado rápido. Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP, 2007.

RHODES, M. Modeling the flow structure of upward-flowing gas-solid suspensions. Powder Technology, v. 60, p. 27-38, 1990.

ROSA, L. M. ; BASTOS, J. C. S. C. ; MORI, M. ; MARTIGNONI, W. P. Simulation of a High-Flux Riser-Reactor using CFD Techniques. In: AIChE Annual Meeting, Philadelphia - PA. Annals, 2008.

ROSA, L. M. Aplicação de técnicas de CFD para cálculo de escoamento em meio reativo em Leito fluidizado. Tese de Doutorado. UNICAMP, Campinas, 2008.

SALVATERA, A.; GELDART, D.; OCONE, R. Solid flux in a circulating fluidized bed riser. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 83, p. 24-29, 2005.

SCALA, F. Mass transfer in active particles in fluidized beds. In: EL-AMIN, M. *Mass Transfer in Multiphase Systems and its Applications*, InTech, DOI: 10.5772/594, 2011.

SCHICHTHAERLE, P.; WERTHER, J. Axial pressure profiles and solids concentration distribution in the CFB bottom zone. In: WERTHER, J.; NOWAK, W.; WIRTH, K. E.; HARTGE, E. U. *Proceeding of the Circulating Fluidized Bed Technology IX*, Hamburg, May 13-16, 2008.

SCHWEINFURTH, S. Coal, a complex natural resource. U.S. Geological Survey, 2004. Disponível em: <[pubs.usgs.gov/circ/c1143/html/text/html](http://pubs.usgs.gov/circ/c1143/html/text/html)>, Acesso em: 17/01/2012.

SHENG, C.; MOGHADDERI, B.; GUPTA, R.; WALL, T. F. A computational fluid dynamic based study of the combustion characteristics of coal blends in pulverized coal-fired furnace. *Fuel*, v. 83, p. 1543-1552, 2004.

SILVA FILHO, C. G.; MILIOLI, F. E. A thermogravimetric analysis of the combustion of a brazilian mineral coal. *Quimica Nova*, v. 31, p. 98-103, 2008.

SIMONIN, C.; VIOLLET, P. L.: Predictions of an Oxygen Droplet Pulverization in a Compressible Subsonic Coflowing Hydrogen Flow. *Numerical Methods for Multiphase Flows*. FED91, p. 65-82, 1990.

SIMSEK, E.; SUDBROCK, F. WIRTZ, S.; SCHERER, V. Influence of particle diameter and material properties on mixing of monodispersed spheres on grate: Experiment and discrete element simulation. *Powder Technology*, v.221, p. 144-154, 2012.

SINCLAIR, J. C. Effects of Stokes number on turbulent fluid-solid flows. *Proceedings of the NETL 2011 Workshop on Multiphase Flow Science*, NETL, August 2011.

SMITH, I. W. The combustion rates of coal chars: a review. In 19<sup>th</sup> Symp. (Int'l.) on combustion. The Combustion Institute, p. 1045-1065, 1982.

SMITH, I. W. The kinetics of combustion of pulverized semi-anthracite in the temperature range of 1400 to 2200 K. *Combustion and Flame*, v. 17, p. 421-428, 1971.

SMOOT, L. D.; SMITH, P. J. *Coal Combustion and Gasification*. Plenum Press, New York, 1985.

SOTUDEH-GHAREBAAGH, R.; LEGROS, R.; CHAOUKI, J.; PARIS, J. Simulation of circulating fluidized bed reactors using Aspen Plus. *Fuel*, v. 77, n. 4, p. 327-337, 1998.

SOUNDARRAJAN, N.; ROZELLE, P. L.; PISUPATI, S. V. Development and use of a method for prediction of ash split in a CFBC boiler to improve the energy efficiency. *Fuel*, DOI: 10.1016/j.fuel.2008.04.040. 2008.

STURM, M.; WIRTZ, S.; SCHERER, V.; DENECKE, J. Coupled DEM-CFD simulation of pneumatically conveyed granular media. *Chemical Engineering Technology*, v. 33, p. 1184-1192, 2010.

SUTHERLAND, B. P.; MAASS, O. Measurement of the viscosity of gases over a large temperature range. *Can. J. Research*. v. 6, p. 428, 1932.

SYRED, N.; KURNIAWAN, K.; GRIFFITHS, T.; GRALTON, T.; RAY, R. Development of fragmentation models for solid fuel combustion and gasification as subroutines for inclusion in CFD codes. *Fuel*, v. 86, p. 2221-31, 2007.

TOGNOTTI, L.; LONGWELL, J. P.; SAROFIM, A. F. *Proc. Combust. Inst.*, v. 23, p. 1207-1213, 1990.

VAN WACHEN, B. G. M. Derivation, implementation and validation of computer simulation models for gas-solid fluidized beds. Tese de Doutorado, Delft University of Technology, Holanda, 2000.

WANG, X.; JIN, B.; ZHOUNG, W. Three-dimensional simulation of fluidized bed coal gasification. *Chemical Engineering and Processing*, v. 48, p. 695-705, 2009.

WANG, X.; JIN, B.; ZHOUNG, W.; XIAO, R. Modeling on the hydrodynamics of a high-flux circulating fluidized bed with Geldart group A particles by the kinetic theory of granular flow. *Energy Fuels*, v. 24, p. 1242-1259, 2010a.

WANG, X.; LIAO, L.; FAN, B.; JIANG, F.; XU, X.; WANG, S.; XIAO, Y. Experimental validation of gas-solid flow in CFB. *Fuel Processing Technology*, v.91, p. 927-933, 2010b.

WENDT, C. Theoretische und experimentelle Untersuchungen zur Zündung einzelner Kohlepartikel. Dissertation, Universität Bremen, Deutschland, 2004.

WISCHNEWSKI, R.; RATSCHOW, L.; HARTGE, E. U.; WERTHER, J. Reactive gas-solid flows in large volumes – 3D modeling of industrial circulating fluidized bed combustors. *Particuology*, v. 8, p. 67-77, 2010.

WU, X.; JIANG, F.; XU, X.; XIAO, Y. CFD simulation of smooth and T-abrupt exits in circulating fluidized bed riser. *Particuology*, v.8, 343-350, 2010.

YAKHOT, V.; ORSZAG, S.A.; THANGAM, S.; GATSKI, T.B.; SPEZIALE, C.G. Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique, *Physics of Fluids A*, v. 4, n. 7, p. 1510-1520, 1992.

YANG, W-C. Modification and re-interpretation of Geldart's classification of powders. Powder Technology, v. 171, p. 69-74, 2007.

ZHANG, Y.; REESE, J. M. Gas turbulence modulation in a two-fluid model for gas-solid flows. Particle technology and fluidization – AIChE Journal. v. 49, n. 12, p. 3048-3065, 2003.

ZHOU, H.; FLAMANT, G.; GAUTHIER, D. DEM-LES of coal combustion in a bubbling fluidized bed. Part 2: coal combustion at the particle level. Chemical Engineering Science. v. 59, p. 4205-4215, 2004b.

ZHOU, W.; ZHAO, C. S.; DUAN, L. B.; CHEN, X. P.; LIANG, C. Two-dimensional computational fluid dynamics simulation of nitrogen and sulfur oxides emissions in a circulating fluidized bed combustor. Chemical Engineering Journal, v. 173, p. 564-573, 2011.

## **7 Publicações Associadas à Tese**

### **7.1 Trabalhos Publicados**

HODAPP, M. J.; RAMIREZ-BEHAINNE, J. J.; MORI, M.; GOLDSTEIN, L. Numerical Studies of the gas-solid hydrodynamics at high temperature in the riser of a bench-scale circulating fluidized bed. *International Journal of Chemical Engineering*, In Press, 2012.

### **7.2 Trabalhos Apresentados**

HODAPP, M. J. ; BEHAINNE, J. J. R. ; MORI, M. ; WIRTZ, S. ; SCHERER, V. Euler-Euler-Lagrange Simulation of Coal Combustion in a Circulating Fluidized Bed. In: 21st International Conference on Fluidized Bed Combustion, 2012, Naples.

HODAPP, M. J. ; BEHAINNE, J. J. R. ; MORI, M. ; WIRTZ, S. ; SCHERER, V. Three-Phase Modeling and Simulation of a CFBC Riser. In: 25. Deutscher Flammentag, 2011, Karlsruhe.

HODAPP, M. J.; SILVA, M. G. E.; MARINI, F.; MORI, M. Three-Dimensional Computational Fluid Dynamic Study of a Gas-Solid Riser Based on the Kinetic Theory of Granular Flow. In: 2009 AIChE Annual Meeting, 2009, Nashville.

### **7.3 Trabalhos em Preparação**

HODAPP, M. J. ; BEHAINNE, J. J. R. ; MORI, M. ; WIRTZ, S. ; SCHERER, V. Three-Phase Modeling and Simulation of Brazilian Coal Combustion in a Circulating Fluidized Bed Riser.