

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

Simulação de um leito fluidizado aplicando a técnica CFD baseada na teoria cinética do escoamento granular

Autor: Fábio Marini

Orientador: Prof. Dr. Milton Mori

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Campinas - São Paulo
Fevereiro de 2008

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

M338s Marini, Fábio
Simulação de um leito fluidizado aplicando a técnica CFD baseada na teoria cinética do escoamento granular
Fábio Marini. - Campinas, SP: [s.n.], 2008.

Orientador: Milton Mori.
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Dinâmica dos fluidos. 2. Escoamento multifásico. 3. Leito fluidizado. 4. Simulação por computador. I. Mori, Milton. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título

Título em Inglês: Simulation of a fluidized bed applying the CFD technique based in the kinetic theory of granular flow

Palavras-chave em Inglês: Computational fluid dynamics, Multiphase flow, Fluidized bed, Numerical simulation

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

Titulação: Mestre em Engenharia Química

Banca examinadora: Waldir Pedro Martignoni e José Roberto Nunhez

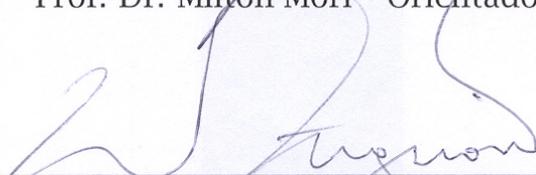
Data da defesa: 13/02/2008

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

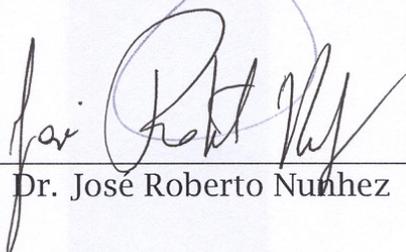
Dissertação de Mestrado defendida por Fábio Marini e aprovada em 13 de fevereiro de 2008 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. Milton Mori - Orientador

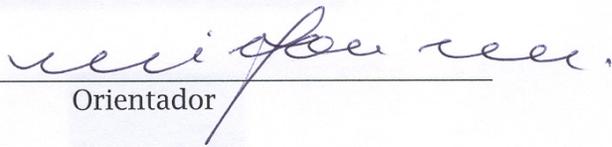


Prof. Dr. Waldir Pedro Martignoni



Prof. Dr. José Roberto Núñez

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química.


Orientador

Dedicatória

Dedico este trabalho aos meus pais Donizeti e Sirlei, pelo zelo e dedicação desvelados, e por sempre acreditarem na minha capacidade.

Agradecimentos

Gostaria de agradecer em primeiro lugar ao Professor Milton Mori, pela orientação, pelo apoio, mas especialmente pela confiança depositada no decorrer desses seis anos, dois no mestrado e quatro de iniciação científica.

Agradeço ao engenheiro José Mozart Fusco pela paciência e diligência ao me ajudar a desvendar os segredos da Teoria Cinética. Sem seu auxílio, o caminho percorrido teria sido mais penoso.

Agradeço à Graça por sua ajuda na elaboração deste trabalho, e pelos conselhos dados.

Agradeço aos amigos do PQGe, que tenho certeza levarei para o resto de minha vida, pela amizade, cooperação e momentos de descontração. Citá-los-ei em ordem alfabética, porque todos tem a mesma importância: Daniel, Graça, Leo, Jaci, Jhon, Marcela, Marcos, Max e Renato.

Finalmente, agradeço a todos os amigos e parentes, que apesar de não terem sido citados por nome contribuíram direta ou indiretamente, e tiveram sua parte nesta trajetória.

Epígrafe

Quem alcança seu ideal, vai além dele.
— Friedrich Nietzsche

Resumo

Os leitos fluidizados são amplamente utilizados em muitas operações nas indústrias químicas, agrícolas, bioquímicas, de geração de energia e em especial petroquímicas. Com o aumento na disponibilidade de computadores, a aplicação de modelos matemáticos para prever o comportamento de um leito fluidizado segue a mesma tendência, e vários modelos têm sido propostos. Neste trabalho foi abordada a modelagem matemática de simulação de um leito fluidizado. O modelo empregado é baseado na descrição euleriana (contínuo) de ambas as fases, e consiste num conjunto de equações de conservação de massa e momento para cada uma destas. Neste modelo estão contempladas a turbulência (modelo k-epsilon) e mistura multifásica. Para descrever o comportamento das muitas partículas em um contínuo foi utilizada a teoria cinética do escoamento granular, que vem se tornando uma aproximação típica para executar simulações eulerianas. A teoria cinética do escoamento granular é baseada na teoria cinética dos gases. Na teoria cinética do escoamento granular, as interações na fase particulada são levadas em conta, pela contribuição das colisões entre as partículas. Nesta teoria, as colisões são o principal mecanismo de transporte nas propriedades da fase particulada. A geometria e a malha numérica foram geradas utilizando o software *ANSYS ICEM CFD*. O conjunto de equações diferenciais parciais foi discretizado e resolvido utilizando o software *ANSYS CFX 10*. A KTGF foi implementada em subrotinas Fortran externas ao código comercial. Os resultados obtidos com as simulações foram por fim validados com os dados experimentais encontrados em SAMUELSBERG e HJERTAGER (1996).

Palavras chave: Dinâmica dos fluidos computacional. Escoamento multifásico. Leito fluidizado. Simulação numérica.

Abstract

Fluidized beds are widely used in many operations in chemical, metallurgical, energy generation and specially in petrochemical industries. With the increase in the availability of computers, the application of mathematical models to predict the behavior of a fluidized bed follows the same trend, and several models have been proposed. In this work, it has been studied mathematical modelling for the fluidized bed simulation. The model utilized is based in the Eulerian (continuum) description for both phases, and is composed of a set of mass conservation and momentum equations, for each phase. In this model are contemplated turbulence (k-epsilon model) and multifasic mixture. To describe the behavior of the several particles in a continuum, it has been used the kinetic theory of granular flow, that is becoming a typical approach to perform eulerian simulations. The kinetic theory of granular flow is based in the kinetic theory of gases. In the kinetic theory of granular flow, the interactions in the particulate phase are taking in account, by the contribution of the colisions between the particles. In this theory, collisions are the main mecanism of transport in the properties of the particulate phase. The geometry and numerical mesh were generated usins ANSYS ICEM CFD software. The set of partial differential equations was discretized and solved using ANSYS CFX 10 software. The KTGF was implemented by Fortran subroutines apart from the commercial code. The results achieved with simulations were validated with experimental data found in SAMUELSBERG and HJERTAGER (1996).

Keywords: Computational fluid dynamics. Multiphase flow. Fluidized bed. Numerical Simulation

Sumário

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xii
1 Introdução	1
1.1 A fluidodinâmica computacional	2
1.2 Objetivo	4
1.3 Apresentação	4
2 Fundamentação Teórica	6
2.1 Fluidização	6
2.2 Regimes de fluidização	7
2.3 Classificação clássica dos sólidos de Geldart	9
2.3.1 Grupo C	9
2.3.2 Grupo A	10
2.3.3 Grupo B	11
2.3.4 Grupo D	11
2.4 Comportamento pseudo-fluido	12
2.5 Revisão do escoamento gás-sólido	13
2.6 Teoria cinética do escoamento granular	17
2.7 Código CFD	21
2.7.1 Pré-processamento	21
2.7.2 Solver	22
2.7.3 Pós-processamento	23
3 Modelagem Matemática e Numérica	25
3.1 Modelos matemáticos	25
3.1.1 Equações de transporte	26
3.1.2 Turbulência	28
3.1.3 Equações de fechamento	30
3.1.4 Teoria cinética do escoamento granular	32
3.2 Método numérico	36
3.2.1 Método dos volumes finitos	38
3.2.2 Funções de interpolação	39
3.2.3 Acoplamento pressão-velocidade	40
3.3 Geometria e malha numérica	42

4 Resultados e Discussões	46
4.1 Teste de malhas	46
4.2 Simulações multifásicas	50
4.2.1 Subrotinas para implementação da KTGF	51
4.2.2 Resultados das simulações multifásicas	52
5 Conclusões e Sugestões	70
Referências Bibliográficas	71

Lista de Figuras

2.1	Diferentes regimes de fluidização.	8
2.2	Classificação de Geldart.	10
3.1	Função de Distribuição Radial	34
3.2	Viscosidade dinâmica adimensional, toda faixa de fração volumétrica, até empacotamento	36
3.3	Viscosidade dinâmica adimensional, detalhe para frações volumétricas baixas	37
3.4	Volume elementar e seus vizinhos, caso bidimensional	38
3.5	Desenho esquemático do CFB.	42
3.6	Dimensões da geometria utilizada no presente trabalho.	44
3.7	Malha gerada.	45
4.1	Velocidade radial do gás a 0,2 m.	47
4.2	Velocidade radial do gás a 0,4 m.	48
4.3	Velocidade radial do gás a 0,7 m.	48
4.4	Velocidade radial do gás a altura da entrada secundária.	49
4.5	Velocidade radial do gás na saída.	50
4.6	Expansão do leito em seus momentos iniciais, com velocidade superficial do gás de 1,42 m/s	53
4.7	Perfis de velocidade da fase particulada, com velocidade superficial do gás de 0,36 m/s, tempo de simulação de 11 s	55
4.8	Perfis de velocidade da fase particulada, com velocidade superficial do gás de 0,71 m/s, tempo de simulação de 8 s	56
4.9	Perfis de velocidade da fase particulada, com velocidade superficial do gás de 1,42 m/s, tempo de simulação de 7 s	57
4.10	Velocidade da fase particulada, velocidade do gás de 0,36 m/s	58
4.11	Velocidade da fase particulada, velocidade do gás de 0,71 m/s	58
4.12	Velocidade da fase particulada, velocidade do gás de 1,42 m/s	58
4.13	Fração volumétrica da fase particulada, velocidade do gás de 0,36 m/s	59
4.14	Fração volumétrica da fase particulada, velocidade do gás de 0,71 m/s	59
4.15	Fração volumétrica da fase particulada, velocidade do gás de 1,42 m/s	59
4.16	Perfis de (a) fração volumétrica, (b) temperatura granular e (c) viscosidade dinâmica para fase particulada a 0,16 m, a 0,36 m/s	64
4.17	Perfis de (a) fração volumétrica, (b) temperatura granular e (c) viscosidade dinâmica para fase particulada a 0,32 m, a 0,36 m/s	64

4.18 Perfis de (a) fração volumétrica, (b) temperatura granular e (c) viscosidade dinâmica para fase particulada a 0,48 m, a 0,36 m/s	64
4.19 Perfis de (a) fração volumétrica, (b) temperatura granular e (c) viscosidade dinâmica para fase particulada a 0,16 m, a 0,71 m/s	65
4.20 Perfis de (a) fração volumétrica, (b) temperatura granular e (c) viscosidade dinâmica para fase particulada a 0,32 m, a 0,71 m/s	65
4.21 Perfis de (a) fração volumétrica, (b) temperatura granular e (c) viscosidade dinâmica para fase particulada a 0,48 m, a 0,71 m/s	65
4.22 Perfis de (a) fração volumétrica, (b) temperatura granular e (c) viscosidade dinâmica para fase particulada a 0,16 m, a 1,42 m/s	66
4.23 Perfis de (a) fração volumétrica, (b) temperatura granular e (c) viscosidade dinâmica para fase particulada a 0,32 m, a 1,42 m/s	66
4.24 Perfis de (a) fração volumétrica, (b) temperatura granular e (c) viscosidade dinâmica para fase particulada a 0,48 m, a 1,42 m/s	66
4.25 Perfis de velocidade da fase particulada, com velocidade superficial do gás de 0,71 m/s, tempo de simulação de 12 s, utilizando função de parede <i>no slip</i>	68
4.26 Perfis de velocidade da fase particulada, com velocidade superficial do gás de 1,42 m/s, tempo de simulação de 12 s, utilizando função de parede <i>no slip</i>	69

Lista de Tabelas

2.1	Resumo dos grupos de Geldart.	12
2.2	Classificação de regimes para escoamentos duas-fases.	16
3.1	Constantes do Modelo $k - \epsilon$	30
4.1	Características das malhas.	47
4.2	Condições de contorno.	47
4.3	Condições de contorno.	51

Nomenclatura

Letras Latinas

B	Soma das forças de campo
C_d	coeficiente de arraste, $kg.m^3/s$
C	constante da correlação da viscosidade
d	diâmetro da partícula, m
e	coeficiente de restituição
g_0	distribuição radial
G	módulo de elasticidade
k	energia cinética turbulenta, m^2/s^2
p	pressão, Pa
P	produção de turbulência
S	termo fonte das equações de transporte, $[\phi]m^{-3}s^{-1}$
Re	número de Reynolds
S_{ij}	tensor da taxa de deformação
t	tempo, s
v	velocidade, m/s

Letras Gregas

β	coeficiente de transferência interfásico
δ_{ij}	delta de Kronecker
ϵ	taxa de dissipação de k , m^2/s^3
ε	fração volumétrica

λ	viscosidade de compressão
μ	viscosidade, $kg.m^{-1}.s^{-1}$
ϕ	variável genérica
ψ	esfericidade
ρ	massa específica, kg/m^3
σ	número de Prandtl turbulento
θ	temperatura granular, m^2s^{-2}
τ	taxa de cisalhamento

Superescritos

ef	efetivo
m	momento
t	turbulento
ρ	massa
ϕ	variável conservativa

Subscritos

cin	cinética
col	colisional
dil	diluído
g	fase gasosa
k	energia cinética turbulenta
x, y, z	direções no eixo cartesiano
p	partícula
s	fase sólida
ϵ	taxa de dissipação de k
<i>mu</i>	viscosidade

Símbolos e Operadores

$\nabla()$	operador gradiente
$\nabla \cdot ()$	operador divergente
$()^T$	transposição de matriz

Siglas

<i>const.</i>	constante
CFD	computational fluid dynamics
FCC	fluid catalytic craking
KTGF	kinetic theory of granular flow

Capítulo 1

Introdução

“A hora de chegada de uma sonda espacial viajando até Saturno pode ser prevista com mais precisão que o comportamento de um reator químico de leito fluidizado.” (GELDART, 1986, p. 11). Essa declaração continua sendo verdadeira, apesar de ter sido escrita há mais 20 anos e os leitos fluidizados serem amplamente utilizados em muitas operações nas indústrias químicas, petroquímicas, agrícolas, bioquímicas e de geração de energia.

A fluidização ganhou força durante a Segunda Guerra Mundial, momento em que os Estados Unidos demandavam uma grande quantidade de gasolina de aviação. Naquela época já estava disponível o processo Houdry. Contudo, por utilizar leito fixo de catalisadores de alumina, esse processo requeria operações intermitentes para regenerar o catalisador desativado, e por causa de arranjos complexos para controlar a temperatura, este processo não era muito apropriado para grande escala.

Então, a comunidade de engenharia química naquele país se engajou em encontrar novos meios para transformar querosene e gasóleo em gasolina. Neste ínterim, um grupo de pesquisadores do *Massachusetts Institute of Technology* propuseram e confirmaram experimentalmente que um circuito completamente pneumático de leitos fluidizados e linhas de transporte poderia operar estavelmente para o processo de FCC. Em paralelo com tais esforços, engenheiros da *Standard Oil Development Company* (atual Exxon), tentavam desenvolver um sistema de transporte pneumático para craqueamento catalítico do querosene em escala industrial. A importância do desenvolvimento do processo de FCC pode ser avaliada quando muitos especialistas que vivenciaram os acontecimentos naqueles dias afirmam que os Aliados venceram a Guerra por causa do FCC.

O marco da fluidização em escala industrial se deu em 1942, com a implantação da primeira unidade de FCC construída na refinaria Baton Rouge, Louisiana, EUA, e em 1960 com a introdução do transporte pneumático, e este tipo de reator permanece como fundamental e essencial no campo da engenharia de processos. Desde então a fluidização passou a ser utilizada em vários outros tipos de indústrias, como já citado (KUNII e LEVENSPIEL, 1990).

O movimento dos sólidos num leito fluidizado é bastante complexo, e depende de inúmeros parâmetros, tais como a geometria do leito e as propriedades das partículas. Pequenas diferenças nestes parâmetros podem causar uma drástica mudança em termos da eficiência dos reatores de leito fluidizado. Do ponto de vista da engenharia, os maiores problemas da fluidodinâmica são os efeitos dos fatores de projeto, tais como o diâmetro da coluna, forma da parede, distribuidor de gás, entrada de sólidos, estrutura da saída, separação dos sólidos e dispositivos de circulação, bem como as condições de operação. Para se ter certeza que um reator de leito fluidizado está num ponto ótimo de eficiência, normalmente é feito um modelo em escala de laboratório, ou em escala piloto, para investigar o leito fluidizado. Embora tais aparatos sejam de grande valia no entendimento do escoamento, nem sempre são acessíveis.

Desde que a disponibilidade de computadores tem aumentado significativamente, o uso de modelos matemáticos para prever a performance e a eficiência de um leito fluidizado também tem aumentado. Vários modelos matemáticos têm sido propostos para a modelagem de leitos fluidizados. A maior parte destes modelos são equações diferenciais baseadas nas equações de conservação.

Neste trabalho será abordada a modelagem matemática de simulação de um leito fluidizado. O modelo matemático empregado consiste num conjunto de equações de conservação de massa e momento para cada uma das fases. Neste modelo estão contempladas a turbulência e a mistura bifásica. Para descrever o comportamento das muitas partículas em um contínuo será utilizada a teoria cinética do escoamento granular (KTGF), que vem se tornando uma aproximação típica para executar simulações Eulerianas.

1.1 A fluidodinâmica computacional

O desenvolvimento da moderna fluidodinâmica computacional (CFD) começou com o advento do computador digital, nos primórdios da década de 1950. A partir da década de 1960 em diante, a indústria aeroespacial passou a integrar as

técnicas da fluidodinâmica computacional (CFD) no projeto, pesquisa, desenvolvimento e manufatura das aeronaves e motores a jato.

Entretanto, o uso da fluidodinâmica computacional para prever escoamentos internos e externos apresentou um grande crescimento a partir da década de 1980. Nesta década tal método passou a ser aplicado no projeto de motores a combustão interna, câmaras de combustão, turbinas a gás e fornos. Cada vez mais a CFD vem se tornando um componente vital no projeto de produtos industriais, e no projeto de processos industriais ou químicos. Os atuais desafios são os escoamentos gás-sólido, gás-líquido, gás-sólido-líquido e a turbulência.

Na década de 1980 a solução de problemas envolvendo escoamento de fluidos por meio da CFD era do domínio acadêmico; somente pesquisadores de pós-graduação, pós-doutorado ou especialistas bem treinados utilizavam a CFD. Na década de 1990, com o aumento da disponibilidade de estações de trabalho cada vez com maior poder computacional, algoritmos de solução mais eficientes e ferramentas de pré e pós-processamento sofisticadas habilitaram o uso de códigos comerciais por engenheiros para pesquisa, desenvolvimento e projetos na indústria.

Os códigos comerciais, desde então, passaram por inúmeros progressos, podendo ser extremamente poderosos. Entretanto, sua operação ainda requer um alto nível de entendimento do pesquisador para obter resultados significativos, principalmente em situações complexas. O longo tempo de aprendizagem exigido na década de 1980, chegando a 4 anos, muitas vezes dentro dos estudos de um doutorado, significava que os usuários naquela época, através de suas próprias experiências, eram muito conscientes das limitações da CFD. Atualmente, com a facilidade cada vez maior dos códigos CFD, tem se tornado cada vez mais comum encontrar usuários incautos sobre as armadilhas da CFD, o que frequentemente leva a falhas.

A CFD é muito poderosa e engloba um grande gama de áreas de aplicação industriais e não-industriais. Alguns exemplos de aplicação da CFD são (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995):

- Motores a combustão interna e turbinas a gás.
- Aerodinâmica de aeronaves e veículos.
- Hidrodinâmica de navios.
- Engenharia elétrica e eletrônica: equipamentos de resfriamento incluindo

microcircuitos.

- Engenharia de processos químicos: mistura, separação, escoamento multifásicos e reações químicas.
- Engenharia naval: estruturas de plataformas marítimas.
- Escoamentos em rios, estuários e oceanos.
- Previsão do tempo.
- Engenharia biomédica: fluxo sanguíneo através de artérias e veias.

1.2 Objetivo

Este trabalho teve como objetivo a simulação transiente de um escoamento multifásico tridimensional gás-sólido via fluidodinâmica computacional, utilizando a Teoria Cinética do Escoamento Granular.

1.3 Apresentação

Uma apresentação do que será exposto em cada capítulo encontra-se a seguir.

Capítulo 2 É feita a revisão bibliográfica acerca dos modelos de fluidização e suas principais características. É discutida uma coletânea de trabalhos publicados com a teoria cinética do escoamento granular e abordada a fluidodinâmica computacional.

Capítulo 3 São mostradas as equações de transporte, de turbulência, de fechamento e é apresentada a teoria cinética do escoamento granular. São mostrados também o método dos volumes finitos, a geometria e malha numérica geradas.

Capítulo 4 São apresentados os resultados das simulações realizadas. É mostrado o teste de malhas, que ajudou na escolha da malha a ser utilizada. Também são mostrados os resultados para as simulações multifásicas, comparando-se as simulações utilizando-se o modelo da KTGF, com as que não o usaram e com dados experimentais.

Capítulo 5 Neste capítulo são apresentadas as conclusões e apontadas as sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Fundamentação Teórica

Neste capítulo é feita a revisão bibliográfica acerca dos modelos de fluidização e suas principais características. As equações relevantes encontradas nesta revisão podem ser encontrados no Capítulo 3. Em seguida será discutida uma coletânea de trabalhos publicados com a teoria cinética do escoamento granular (KTGF). Por último é abordada a fluidodinâmica computacional (CFD).

2.1 Fluidização

Fluidização é a operação pela qual partículas sólidas são transformadas em um estado similar a um líquido. Isto é conseguido por se bombear um fluido, um gás ou um líquido, ascendentemente através do leito a uma taxa que seja suficiente para exercer uma força nas partículas que contrabalançam seus pesos. Desta maneira, em vez de ser mantida uma estrutura rígida por meio das forças gravitacionais e de contato, o leito adquire propriedades similares a um fluido, com as partículas podendo se mover relativamente livres com respeito uma a outra.

Um conjunto de partículas em uma coluna é chamado de leito de partículas. Quando um fluido é injetado na parte inferior desta coluna, este escoamento exerce uma força em cada partícula individual. Na fluidização, a força da gravidade agindo nas partículas é compensado pelas forças de arraste exercidas pelo escoamento local do fluido. O escoamento local do fluido é diferente para cada partícula, fazendo o comportamento de cada partícula único (GIBILARO, 2001).

A fluidização é provavelmente a aplicação industrial mais importante envolvendo escoamentos gás-sólido, devido à excelente troca de calor proporcionada e

facilidade no manuseio dos sólidos. Existem diversos regimes de fluidização, cada um consistindo de diferentes comportamentos das fases gasosa e sólida.

2.2 Regimes de fluidização

Se um fluido ascendente passa através de um leito de partículas finas, a uma baixa velocidade, o fluido percola através dos espaços vazios entre as partículas estacionárias. Isto caracteriza um *leito fixo*, como mostrado pela Figura 2.1(a). Conforme aumenta a velocidade do fluido as partículas se separam e começam a vibrar e se movimentar em pequenas regiões.

Numa velocidade ainda mais alta, um ponto é alcançado onde todas as partículas estão suspensas pelo gás escoante. Neste ponto as forças entre as partículas e o fluido contrabalançam o peso das partículas, a componente vertical das forças de compressão entre partículas adjacentes desaparece, e a queda de pressão através de qualquer seção do leito é igual ao peso do fluido e das partículas naquela seção. O leito é considerado recém fluidizado, e é referido como estando na *mínima fluidização*.

Um pequeno aumento na velocidade do gás acima da mínima fluidização pode resultar numa progressiva expansão. Assim as instabilidades são amortecidas e permanecem pequenas, e heterogeneidades não são observadas. Tal leito é chamado como *leito fluidizado particulado* ou *leito fluidizado homogêneo*. Este regime é mostrado na Figura 2.1(b). Esta condição geralmente é conseguida somente sob condições especiais de partículas leves e finas com gases densos a altas pressões.

Geralmente, em sistemas gás-sólido, com o aumento na velocidade do gás além da mínima fluidização, grandes instabilidades como borbulhamento e canalização são observadas. A altas taxas de escoamento, a agitação se torna mais violenta e o movimento dos sólidos se torna mais vigoroso. Adicionalmente, o leito não se expande muito além de seu volume na mínima fluidização. Este leito é chamado de *leito fluidizado agregativo*, *leito fluidizado heterogêneo* ou *leito fluidizado borbulhante*, tal como mostrado na Figura 2.1(c).

Ambos os leitos fluidizados são considerados como sendo *leitos fluidizados com fase densa*, desde que haja um claro limite superior definido pela superfície do leito.

Em sistema gás-sólido, bolhas de gás coalescem e crescem conforme elas sobem, e num leito suficientemente profundo elas podem ser tornar grandes o sufi-

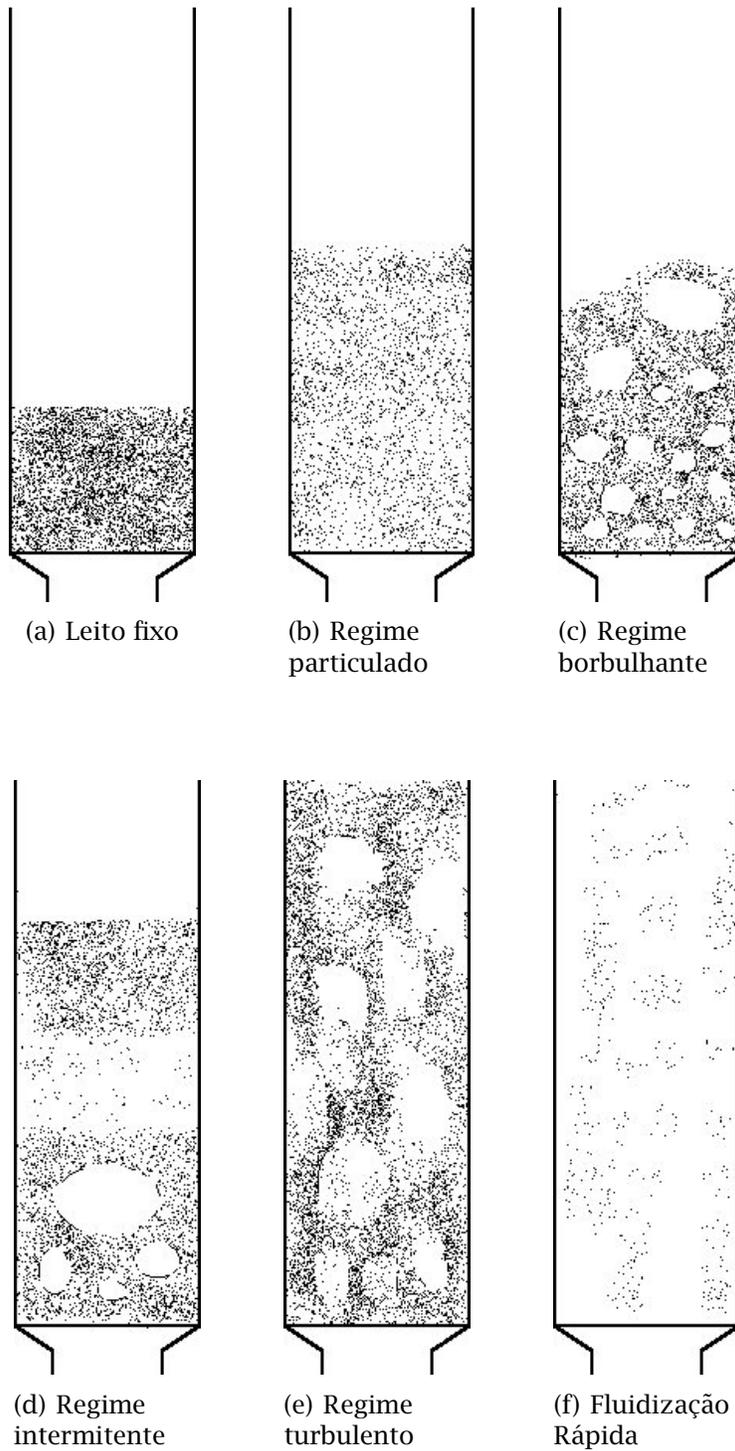


Figura 2.1: Diferentes regimes de fluidização com o aumento da velocidade. Adaptado de (KUNII e LEVENSPIEL, 1990).

ciente e se espalhar através do vaso. No caso de partículas finas, elas escoam para baixo ao redor de bolhas de gás ascendentes e próximas à parede. Para partículas mais grosseiras, a porção de leito acima da bolha é empurrada para cima, como em um pistão. A Figura 2.1(d) exemplifica este regime de fluidização, chamado de *fluidização intermitente*.

Quando partículas finas são fluidizadas a velocidades suficientemente altas de gás, a velocidade terminal dos sólidos é excedida, a superfície superior do leito desaparece, o transporte se torna apreciável, e ao em vez de bolhas, se observa o movimento turbulento de *clusters* de sólidos e espaços sem partículas de vários tamanhos e formas. Isto caracteriza a *fluidização turbulenta* e é mostrado na Figura 2.1(e).

Com o aumento na velocidade do gás, sólidos são carregados do leito com o gás. Neste caso tem-se um *leito fluidizado disperso* ou *diluído* com *transporte pneumático dos sólidos*, (Figura 2.1(f)).

Em ambas fluidizações turbulenta ou diluída, grandes quantidades de partículas são carregadas, tornando impossível o estado estacionário. Para tornar possível um regime desenvolvido nestes modos de contato, as partículas transportadas tem que ser coletadas por ciclones e retornadas ao leito.

2.3 Classificação clássica dos sólidos de Geldart

Para prever o modo e a transição entre diferentes modos de fluidização, GELDART (1973) focou nas características das partículas. Sua aproximação é simples, tem grande poder de generalização e é bastante útil.

Por cuidadosa observação de fluidizações de vários tipos e tamanhos de sólidos, foi sugerido por GELDART (1973) quatro tipos de comportamento de partículas. Os grupos são discutidos em ordem crescente de tamanho de partículas.

2.3.1 Grupo C

Partículas que são coesivas, ou muito finas pertencem a esta categoria. A fluidização neste caso é extremamente difícil para estes sólidos, sendo que para leitos com diâmetros pequenos, os sólidos tendem a subir como um pistão, enquanto que para leitos com diâmetros maiores, ocorrem canalizações do gás do distribuidor até a superfície do leito, sem acontecer nenhuma fluidização de sólidos.

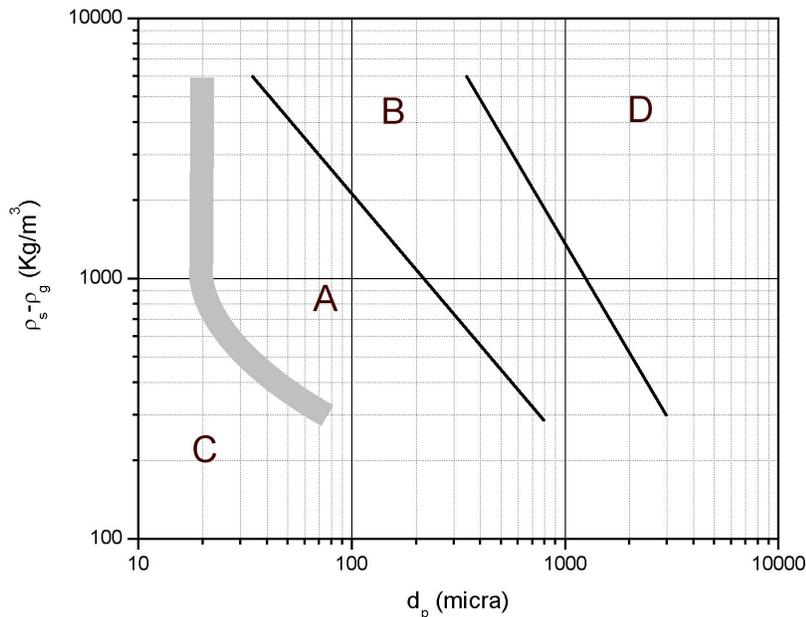


Figura 2.2: Classificação de Geldart; adaptado de (GELDART, 1986).

Estas dificuldades ocorrem porque as forças interpartículas são maiores que aquelas resultantes da ação do gás, e estas forças são resultantes do tamanho muito pequeno das partículas, geralmente menor que $20 \mu\text{m}$, fortes cargas eletrostáticas, umidade, sólidos flexíveis ou partículas tendo formas irregulares.

A queda de pressão através do leito é, num todo, menor que o valor teórico. A mistura das partículas e, conseqüentemente, a transferência de calor entre a superfície e o leito é muito mais deficiente que com os sólidos dos grupos A e B. A dureza da partícula também tem forte influência, porque materiais flexíveis são mais coesivos uma vez que eles deformam facilmente e proporcionam uma área maior para os contatos entre as partículas.

Pode-se processar estes sólidos pelo uso de agitadores mecânicos ou vibradores que quebram as canalizações, ou em outros casos introduzi-los em um leito do mesmo material, mas maiores, preferencialmente do grupo B.

2.3.2 Grupo A

Uma quantidade considerável de pesquisa tem sido devotada para este grupo, principalmente porque a maior parte dos reatores catalíticos de leito fluidizado usa partículas deste grupo. Fazem parte deste grupo partículas que tem pequeno

tamanho e/ou baixa densidade ($< \sim 1,4 \text{ g/cm}^3$). Nos sólidos deste grupo as forças entre as partículas estão presentes.

Estes sólidos fluidizam facilmente, com fluidização particulada a baixas velocidades do gás e borbulhamento controlado com pequenas bolhas a velocidades de gás mais altas. Quando estes sólidos são fluidizados, o leito expande consideravelmente antes das bolhas aparecerem, isto é, não são formadas bolhas imediatamente após excedida a velocidade de mínima fluidização. Outra característica é que quando o suprimento de gás é cortado, o leito colapsa, ou defluidiza, lentamente.

2.3.3 Grupo B

Este grupo contém a maior parte das partículas de tamanho entre 40 e 500 μm e massa específica entre 1,4 e 4 g/cm^3 . Em contraste com os grupos anteriores, as forças entre as partículas são desprezíveis e o borbulhamento começa a se formar na velocidade de mínima fluidização, ou pouco acima desta. A maior parte das bolhas sobem mais rapidamente que a velocidade intersticial do gás e o tamanho da bolha aumenta com a altura do leito e o excesso de velocidade, isto é, a diferença entre a velocidade do gás e a velocidade de mínima fluidização. A coalescência é o fenômeno predominante. Os tamanhos das bolhas são independentes do tamanho médio das partículas e a distribuição do tamanhos.

2.3.4 Grupo D

Partículas grandes e/ou densas. Leitos muito profundos destes sólidos são muito difíceis de fluidizar. Se comportam erraticamente, produzindo grandes bolhas e ou severa canalização, ou até mesmo comportamento de jorro se a distribuição do gás é irregular. Grandes quantidades de gás são necessárias para fluidizar este sólidos.

Um resumo qualitativo destas propriedades é dado na Tabela 2.1.

Tabela 2.1: Resumo dos grupos de Geldart, adaptado de (GELDART, 1986).

	Grupo C	Grupo A	Grupo B	Grupo D
Característica mais relevante	Coesivo, difícil fluidização	Faixa livre de bolhas	Começa a borbulhar na mínima fluidização	Sólidos mais grosseiros
Propriedade				
Expansão do leito	Baixa quando há canalização, pode ser alta quando fluidizado	Alta	Moderada	Baixa
Taxa defluidização	Inicialmente rápida	Lenta	Rápida	Rápida

2.4 Comportamento pseudo-fluido

Um leito fluidizado com injeção de gás e com fase densa se parece muito com um líquido em ebulição e em muitos casos exibe um comportamento similar a um fluido. Este comportamento é chamado de pseudo-fluido. Estes sistemas gás-sólido possuem outras propriedades de um líquido. Objetos leves flutuam facilmente na superfície do leito, enquanto que objetos densos afundam. Quando o vaso é inclinado, a superfície superior do leito permanece horizontal, e quando dois leitos são interconectados seus níveis se tornam iguais. Se há um buraco na lateral do vaso, as partículas escoam como um jato líquido. Um leito fluidizado pode ser agitado facilmente. A diferença de pressão entre dois pontos num leito é praticamente igual à pressão estática do leito entre aqueles dois pontos.

Este comportamento pseudo-fluido permite que vários esquemas de contato sejam planejados. Estes esquemas incluem contato contracorrente em um vaso contendo pratos perfurados e *downcomers* e circulação de sólidos entre dois leitos.

A aproximação do comportamento pseudo-fluido é importante do ponto de vista matemático, uma vez que com esta hipótese é possível aplicar as equações de Navier-Stokes para a fase particulada, tratando a fase particulada como um contínuo, e sujeita às equações de conservação análogas às do meio fluido (BASTOS, 2005). É possível, a princípio, resolver o problema empregando-se as equações de Navier-Stokes para a fase gás e as equações das leis de Newton para cada partícula em suspensão. Entretanto isto acarretaria um número muito grande de equações, devido ao grande número de partículas, tornando esta uma solução inviável com os computadores existentes (ROSA, 2002).

DAVIDSON et al. (1977) estudaram o comportamento pseudo-fluido em leitos fluidizados. No primeiro experimento de seu trabalho verificou-se que a aparência e as propriedades das bolhas de gás em leitos fluidizados têm similaridades qualitativas àquelas de bolhas de gás em líquidos. No segundo, foi discutido como

certas propriedades da bolha, particularmente sua forma, ajudam a explicar a viscosidade da fase particulada de um leito fluidizado.

Em seu trabalho, DAVIDSON et al. (1977) fizeram uma revisão da teoria para o movimento de uma bolha em um líquido viscoso e a estenderam para prover uma adequada descrição de uma bolha de gás em um leito fluidizado. A seguir, esta revisão foi estendida para que o movimento das partículas e o fluido intersticial pudessem ser descritos pelo tratamento da fase particulada como um líquido invíscido, isto é, com viscosidade desprezível, e conseguiu-se as equações gerais para o movimento das partículas e do fluido. Concluiu-se então, da comparação da teoria e dos experimentos, que as colisões das partículas fornecem a maior contribuição para a viscosidade do leito fluidizado.

Um leito fluidizado com gás consiste de ambas as fases, de bolha e particulada, mas as bolhas são geralmente livres de partículas, as forças interparticulares que geram as tensões de cisalhamento estão efetivamente confinadas na fase particulada. Assim, faz sentido falar em viscosidade da fase particulada, a qual é assumida com sendo um contínuo na escala macroscópica.

2.5 Revisão do escoamento gás-sólido

Sistemas de escoamento gás-sólido são partes essenciais de inúmeros processos químicos, e nas últimas décadas diversos pesquisadores têm contribuído para um melhor entendimento do comportamento de tal escoamento. Geralmente é atribuído a DAVIDSON (1961) o primeiro passo no entendimento dos fundamentos da fluidização, devido a sua análise do movimento de uma bolha em um leito fluido infinito usando duas equações da continuidade e uma expressão para cálculo das velocidades relativas em função da lei de Darcy para escoamentos em meios porosos.

Na segunda metade da década de 60, ANDERSON e JACKSON (1967) começaram o desenvolvimento da modelagem do escoamento multifásico gás-sólido. A partir de equações do movimento de uma única partícula sólida e as equações de Navier-Stokes para o movimento do fluido, um conjunto de equações foi desenvolvido para um sistema de partículas fluidizadas. Como aproximação, foi utilizada uma definição matemática formal de variáveis locais médias para traduzir as equações de Navier-Stokes em um ponto para o fluido e as equações do movimento de Newton para as partículas, em equações representando o balanço de momento para as fases sólida e fluida.

KUNII e LEVENSPIEL (1968) propuseram um modelo para o escoamento de gás através de um leito fluidizado. Este modelo contém um parâmetro, o tamanho efetivo da bolha, e todos escoamentos internos e transferências no leito são derivados deste parâmetro. Este trabalho manteve seu foco apenas na região densa de um leito fluidizado, região esta que consiste de uma fase contínua, chamada emulsão, através da qual sobem bolhas que são geralmente circundadas e acompanhadas por uma nuvem de gás ascendente.

Um estudo acerca de leitos fluidizados de alta velocidade foi realizado por YERUSHALMI e CANKURT (1978). Existem dois tipos de leitos fluidizados com alta velocidade: o leito de fluidização rápida e o leito de fluidização turbulenta, sendo este último intermediário entre a fluidização borbulhante e a fluidização rápida. Os autores determinaram que a velocidade superficial do gás no leito fosse usada como um critério de transição entre os regimes de leito borbulhante, fluidização turbulenta e fluidização rápida. Foi constatado que os leitos fluidizados de alta velocidade oferecem diversas vantagens sobre os leito borbulhantes, tais como: maior capacidade de processo, maior eficiência e contato mais íntimo entre o gás e o sólido, além da capacidade de receber e lidar com sólidos coesivos.

ARASTOPOUR e GIDASPOW (1979) calcularam a queda de pressão no transporte vertical de sólidos usando quatro modelos hidrodinâmicos previamente propostos. Os cálculos foram feitos utilizando correlações de fatores de atrito da literatura. Três destes predizem um mínimo na queda de pressão versus a velocidade superficial do gás. Os três modelos - um modelo de velocidade relativa, um modelo com queda de pressão nas fases gás e sólida e um modelo com a queda de pressão somente na fase gás - predizem o comportamento de choque entre as partículas associado com o escoamento reverso das partículas. Foi constatado que o modelo de velocidade relativa se ajustou melhor aos dados experimentais com a entrada à fração volumétrica constante.

GIDASPOW e ETTEHADIEH (1983) desenvolveram um modelo hidrodinâmico, usando os princípios da conservação de massa, momento e energia, para escoamentos gás-sólido, verificado experimentalmente. Os autores desenvolveram um código bidimensional que fornecia as velocidades do gás e do sólido, frações volumétricas e a pressão no leito. GIDASPOW et al. (1984) utilizaram este modelo em um processo de gaseificação do carvão, envolvendo transferência de calor. Concluiu-se que o modelo hidrodinâmico proposto se mostrou apropriado para prever o comportamento de leitos fluidizados, mesmo em casos envolvendo transferência de calor.

Uma revisão dos modelos hidrodinâmicos foi apresentada por GIDASPOW (1986). Três modelos foram programados em supercomputadores para prever a variação das frações volumétricas, pressão e velocidades do gás e do sólido em função da posição e do tempo. Os modelos utilizados foram o proposto por ANDERSON e JACKSON (1967), uma variação deste que utiliza a lei de Darcy no lugar do balanço de momento, e por fim o modelo JAYCOR, que não usa a aproximação convencional que envolve frações volumétricas com variável dependente, mas antes o número de partículas numa célula unitária.

DASGUPTA et al. (1994) estenderam o modelo gás laminar - sólido laminar de SINCLAIR e JACKSON (1989) a um modelo de tipo gás turbulento - sólido turbulento. O foco do trabalho foi limitado ao caso de partículas pequenas e carregamento de grandes massas de sólidos. O problema foi tratado como um escoamento plenamente desenvolvido em um tubo vertical. Constatou-se que a grandes carregamentos de sólidos, a turbulência na suspensão é completamente dominada pelas contribuições da fase particulada.

ENWALD et al. (1996) discutiram uma classificação geral para escoamentos bifásicos, como visto na Tabela 2.2, assim como novas maneiras possíveis para formular modelos com dois fluidos. Os autores adotaram o modelo de dois fluidos. As equações locais instantâneas de massa e quantidade de movimento para ambas as fases foram derivadas, juntamente com as suas condições de contorno. Segundo os autores, para modelar o escoamento de dois fluidos é necessário formular os balanços integrais para a massa, momento e energia, usando um volume de controle fixo que contenha ambas as fases. Em seguida, estas equações são reduzidas a dois tipos de equações locais: instantâneas para cada fase e suas respectivas equações de transição (interação entre as fases). As equações instantâneas locais devem ser calculadas com base nas médias temporais e espaciais, que permitem a utilização de malhas menos refinadas e maiores passos de tempo. Todavia, introduzem-se novas incógnitas e torna-se necessário o emprego das chamadas equações de fechamento. Estas equações de fechamento podem ser de três tipos: constitutivas, de transferência e topológicas.

Um resumo do estado da arte da modelagem gás-sólido turbulenta e em particular sua aplicação em leitos fluidizados circulantes foi feito por PEIRANO e LECKNER (1998). Foi mostrado que escoamentos gás-sólido sem reações turbulentas podem ser modelados pelas equações clássicas de transporte, equações da continuidade e momento. ZHANG e REESE (2001) propuseram um novo modelo de dois-fluidos para escoamentos gás-sólido incorporando a influência da turbulência da fase gasosa no movimento aleatório das partículas. Mostrou-se por

Tabela 2.2: Classificação de regimes para escoamentos duas-fases ENWALD et al. (1996).

Classe	Regimes típicos	Configuração	Exemplos
Escoamentos Separados	Escoamento filme	Filme líquido em gás	Resfriamento de filmes
		Filme gasoso em líquido	Aquecimento de filmes
	Escoamentos anelares	Núcleo líquido e filme gasoso	Aquecimento de filmes
		Núcleo gasoso e filme líquido	Condensadores
	Escoamentos em jatos	Jato líquido em gás	Atomização
		Jato gasoso em líquido	Condensador a jato
Escoamentos misto ou de transição	Slug ou plug flow	Gás em líquido	Vaporização de sódio em convecção forçada
	Escoamento anelar de bolhas	Bolhas gasosas em líquido	Evaporadores com nucleação nas paredes
		Filme com núcleo gasoso	
	Escoamento anelar de gotículas	Núcleo gasoso com gotículas e filme líquido	Gerador a vapor
	Escoamento anelar de bolhas e gotículas	núcleo gasoso com gotículas e filme líquido com bolhas de gás	Canal evaporador de reator nuclear
Escoamentos dispersos	Escoamentos em bolhas	Bolhas de gás em líquido	Reatores químicos
	Escoamentos de gotas	Gotas líquidas em gás	Resfriadores em sprays
	Escoamentos particulados	Partículas sólidas em gás ou líquido	Transporte de material

este trabalho que mesmo a escoamentos relativamente diluídos, a influência da turbulência da fase gasosa no movimento microscópico das partículas não pode ser desprezada. ZHANG e REESE (2003) estudaram a influência da fase particulada na turbulência da fase gasosa, estando esta associada ao trabalho das forças de arraste e o espaço ocupado pelas partículas. Concluiu-se neste trabalho que a distância interpartícula tem um efeito significativo na turbulência da fase gasosa, e deve ser incorporada ao modelo de turbulência. O trabalho devido à força de arraste é responsável pelo aumento da turbulência da fase gasosa. A turbulência da fase gasosa desempenha um papel importante na determinação da tensão na partícula, então ignorar o transporte do gás nas equações constitutivas para a fase particulada não é apropriado.

O Laboratório de Pesquisa em Processos Químicos e Gestão Empresarial (PQGe) tem diversos trabalhos na área de fluidização, contribuindo, deste modo, para uma melhor compreensão deste fenômeno. ROSA (2002) simulou o escoamento multifásico em um *riser*¹, com reações químicas e transferência de calor. MOREIRA (2002) simulou a fluidodinâmica e a cinética de combustão de um regenerador de uma unidade FCC. Mais tarde, DECKER (2003) simulou o escoamento gás-sólido tridimensional, incluindo um estudo de caso envolvendo um calcinador da indústria de cimento. Recentemente, BASTOS et al. (2008) apresentou a modelagem matemática e a simulação tridimensional de uma operação de fluidização rápida em um duto cilíndrico vertical.

2.6 Teoria cinética do escoamento granular

Duas classes de modelos podem ser distinguidas na modelagem de escoamentos gás-sólido: os modelos Eulerianos (contínuo) e Lagrangeanos (partículas discretas).

Os modelos Lagrangeanos resolvem as equações do movimento de Newton para cada partícula individual, levando em consideração os efeitos das colisões das partículas e as forças do gás que agem sobre as partículas. As colisões das partículas são descritas pelas leis das colisões, regidas pela conservação do momento linear, momento angular e energia. A dissipação de energia neste caso é contemplada por meios de coeficientes de restituição e fricção empíricos.

Os modelos Eulerianos consideram todas as fases como um contínuo e com-

¹Reator de leito fluidizado onde ocorre craqueamento catalítico.

pletamente interpenetrantes. As equações empregadas são generalizações das equações de Navier-Stokes para as interações do contínuo. Possuindo uma representação contínua das fases particuladas, os modelos Eulerianos requerem leis de fechamento adicionais para descrever a reologia das partículas fluidizadas.

Nos modelos contínuos mais recentes, equações constitutivas de acordo com a teoria cinética do escoamento granular, são incorporadas. Esta teoria é praticamente uma extensão da teoria cinética dos gases clássica, a qual fornece equações de fechamento que consideram a dissipação de energia devido as colisões partícula-partícula não ideais por meio do coeficiente de restituição. Esta teoria é baseada na teoria cinética de gases densos, como apresentado por CHAPMAN e COWLING (1970, Cap. 16).

Um dos trabalhos pioneiros na teoria cinética do escoamento granular é o de JENKINS e SAVAGE (1983). Este estudo foi baseado na suposição de que, sob certas condições de escoamento, as colisões entre as partículas fornecem o principal mecanismo para o transporte de propriedades, tais como momento e energia. A atenção foi focalizada em um material granular formado por partículas idênticas, lisas, aproximadamente elásticas ($e \approx 1$) e esféricas, cujo escoamento se dá a tal concentração e taxa de deformação que as partículas interagem somente através de colisões binárias com as vizinhanças. Devido a isso, as forças de impulso nas colisões entre pares de partículas vizinhas são responsáveis pela transferência de momento no material escoante.

Com a utilização das equações de transferência de Maxwell, usando formas gerais de funções de distribuição de probabilidade para a velocidade de uma única partícula e a probabilidade de colisões binárias, foi possível derivar as leis de conservação de massa, momento linear e flutuação de energia cinética. A teoria apresentada por JENKINS e SAVAGE (1983) não leva em conta as propriedades inerciais e viscosas do fluido escoante, antes, considera que o movimento das partículas é independente destas propriedades.

LUN et al. (1984) deram prosseguimento aos trabalhos sobre a teoria cinética do escoamento granular. Seu trabalho consistia em aprimorar a teoria desenvolvida por JENKINS e SAVAGE (1983), cujo trabalho, segundo LUN et al. (1984), apresentava manipulações de integrais de colisão inapropriadas e com alguns termos de alta ordem desprezados.

Em seu trabalho, LUN et al. (1984) fornecem uma derivação mais cuidadosa das integrais de colisão, apesar de ainda seguirem de perto os passos seguidos por JENKINS e SAVAGE (1983). Além disso, foi obtida uma relação do coeficiente de

restituição e , com a taxa de deformação e a média quadrática das flutuações da velocidade.

A teoria de JENKINS e SAVAGE (1983) seguiu a aproximação da teoria cinética dos gases. Com isso a teoria é válida para situações onde $1 - e \ll 1$. LUN et al. (1984) avaliaram para qual valor de e os parâmetros calculados começariam a se afastar significativamente dos parâmetros com valores exatos, uma vez que este tipo de aproximação é bastante exata quando usando a teoria cinética dos gases, entretanto isso pode não ser verdadeiro para materiais granulares.

Foi mostrado que não há diferenças nas magnitudes das tensões normais, parâmetro escolhido pelos autores para efetuar as comparações, encontradas pela teoria de JENKINS e SAVAGE (1983) e LUN et al. (1984) Somente pequenas diferenças nas tensões normais são encontradas a baixos coeficientes de restituição. Assim foi encontrado que apesar de o trabalho de LUN et al. (1984) avaliar as integrais de colisões mais exatamente, os dois trabalhos apresentam aproximações que produzem resultados muito próximos, mesmo para coeficientes de restituição baixos.

Naquela mesma década, JENKINS e RICHMAN (1985) mostraram como o método dos momentos de Grad, utilizado para determinar a função distribuição de velocidade de uma única partícula, poderia ser estendido a sistemas densos com partículas inelásticas. Essa aproximação representou um avanço na determinação da função de probabilidade das colisões binárias.

A teoria desenvolvida por LUN et al. (1984) foi estendida para o caso onde o coeficiente de restituição de materiais granulares depende da velocidade de impacto durante uma colisão binária entre partículas esféricas, lisas e inelásticas por LUN e SAVAGE (1986). Foi assumido que o coeficiente de restituição decai exponencialmente com o aumento da velocidade de impacto, tendência essa indicada pela maioria dos dados experimentais obtidos na literatura, utilizando diferentes materiais. A baixas velocidades de impacto, onde a deformação da partícula é essencialmente elástica e a energia dissipada é pequena, o coeficiente de restituição tem valores próximos de um. A altas velocidades de impacto, onde o efeito da deformação plástica e a dissipação de energia são significantes, o coeficiente de dissipação é pequeno em comparação com a unidade.

O trabalho pioneiro a aplicar a teoria cinética do escoamento granular em dutos verticais foi o de SINCLAIR e JACKSON (1989). Com este trabalho verificou-se que a teoria cinética conseguia prever os efeitos coletivos devido às interações entre partículas e observados nos experimentos, efeitos estes que não haviam sido observados em modelos que assumiam distribuição uniforme de concentração de

partículas ou que impunham distribuições arbitrárias.

Até então, os modelos desenvolvidos para a KTGF consideravam que a fase particulada era formada apenas por partículas de um único tamanho. JENKINS e MANCINI (1989) utilizando o procedimento de solução de Chapman-Enskog para misturas binárias de esferas perfeitamente elásticas (CHAPMAN e COWLING, 1970), estenderam-no para esferas levemente dissipativas. Assim foi possível definir como o escoamento é afetado pelas propriedades dos dois tipos de partículas e prever sob que condições a separação das duas espécies, principalmente aquela regida pela diferença do tamanho das partículas, ocorre.

No fim da década de 1980, DING e GIDASPOW (1990) desenvolveram um modelo preditivo bifásico para a teoria cinética, uma vez que os trabalhos até então sobre o assunto eram uma aproximação que não considerava o fluido intersticial. Foi constatado que a altas concentrações de sólidos, nas quais as tensões por colisões são dominantes, os modelos de JENKINS e SAVAGE (1983), LUN et al. (1984) e DING e GIDASPOW (1990) produzem resultados muito semelhantes. A baixas concentrações, nas quais as tensões por colisões são desprezíveis quando comparada com outras tensões, o modelo do trabalho de DING e GIDASPOW (1990) se mostrou mais apropriado.

Desde então, diversos grupos têm feito trabalhos utilizando a teoria cinética. NERI e GIDASPOW (2000) estudaram o comportamento dinâmico de um riser utilizando a KTGF e o comparou com dados experimentais. HUILIN e GIDASPOW (2003) propuseram um novo modelo onde, em sistemas binários, a temperatura granular era calculada separadamente para cada fase. GIDASPOW et al. (2004) fizeram uma extensa revisão da literatura da hidrodinâmica da fluidização usando a teoria cinética. Ainda neste grupo, JIRADILOK et al. (2006), utilizaram uma correlação de arraste corrigida para a formação de clusters juntamente com a KTGF, conseguindo assim prever regiões densas.

SAMUELSBERG e HJERTAGER (1996) fizeram um estudo experimental de um CFB, comparando-o com a simulação numérica utilizando a KTGF, a várias velocidades superficiais, a fim de avaliar seu efeito. MATHIESEN et al. (2000), utilizando o mesmo aparato experimental de SAMUELSBERG e HJERTAGER (1996), avaliaram uma mistura binária de partículas.

ALVES e MORI (1998) propuseram um modelo fluidodinâmico bidimensional para o escoamento particulado em um reator de leito fluidizado circulante do tipo riser, considerando-se a KTGF. Os autores verificaram uma não concordância na predição de perfis de concentração e velocidade axial próximos à parede do reator,

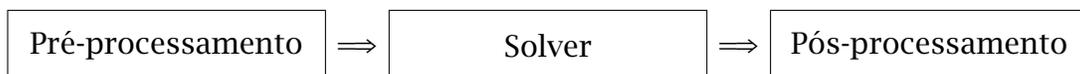
quando da utilização do modelo invíscido. Com a KTGF, os autores verificaram consistência e concordância entre resultados numéricos e experimentais.

GOLDSCHMIDT et al. (2001) avaliaram a influência do coeficiente de restituição na dinâmica dos leitos, demonstrando que os leitos fluidizados dependem grandemente deste parâmetro. GOLDSCHMIDT et al. (2004) fizeram uma comparação entre dois modelos CFD, um que aplicava a KTGF e outro que não a aplicava e dados experimentais. BENYAHIA et al. (2005) fizeram uma avaliação acerca das condições de contorno para sistemas gás-sólido turbulentos utilizando a KTGF.

Em sua grande parte, os trabalhos destacados utilizaram geometrias bidimensionais. O presente trabalho utilizou a Teoria Cinética do Escoamento Granular numa simulação tridimensional, o que aumenta consideravelmente o tempo computacional, em virtude do grande número de volumes de controle da malha numérica gerada.

2.7 Código CFD

Códigos CFD são estruturados sobre algoritmos numéricos que podem lidar com problemas de escoamentos de fluidos. Para fornecer fácil acesso a seu poder de resolução, todos pacotes comerciais de CFD incluem sofisticadas interfaces ao usuário para a entrada dos parâmetros do problema e para o exame dos resultados. Um código CFD geralmente contém três principais elementos: um pré-processador, um solver e um pós-processador. A seguir é feita uma breve análise das funções de cada um desses elementos, sendo que o código CFD tem a seguinte configuração:



2.7.1 Pré-processamento

O pré-processamento consiste da entrada de um problema de escoamento em um programa CFD por meio de uma interface com o usuário e a subsequente transformação desta entrada em uma forma apropriada para o uso do *solver*. As atividades do pré-processamento incluem:

- Definição da geometria da região de interesse: o *domínio*.

- A geração da grade, ou malha – a subdivisão do domínio em um número de subdomínios menores: uma *malha de volumes de controle*.
- Seleção dos fenômenos físicos ou químicos que precisam ser modelados.
- Definição das propriedades do fluido.
- Especificação das condições de contorno apropriadas.
- Especificação dos parâmetros numéricos.

A solução para um problema de escoamento (velocidade, pressão, temperatura, etc.) é definida nos *nós* dentro de cada volume de controle. A precisão de uma solução por CFD é regida pelo número de volumes de controle na malha. Em geral, quanto maior o número destes, melhor a precisão da solução. Entretanto, não só a precisão da solução, mas também o custo computacional e o tempo de cálculo são dependentes do refinamento da malha. Boas malhas são freqüentemente não uniformes: são mais refinadas em áreas onde ocorrem grandes variações de ponto a ponto e mais grosseiras em regiões com relativamente menores mudanças. Portanto, é necessário conciliar a precisão desejada com o custo computacional na geração de malhas.

No caso deste trabalho, para geração da malha foi utilizado o software comercial *Icem CFD* (ANSYS, 2005). Com este foi possível criar a geometria, e no mesmo software gerar a malha hexaédrica necessária para este trabalho. A entrada dos modelos e condições iniciais e de contorno foi realizada no ambiente *CFX 10 Pre*, do software comercial *CFX 10* (ANSYS, 2006). Ambos os softwares citados são de propriedade da ANSYS.

2.7.2 Solver

A principal técnica de solução numérica empregada na CFD é o método dos volumes finitos. Há ainda outras técnicas que podem ser empregadas tais como diferenças finitas e elementos finitos. Entretanto o método dos volumes finitos é utilizado na maioria dos códigos comerciais de CFD. O algoritmo numérico deste método consiste dos seguintes passos:

- Integração formal das equações governantes do escoamento do fluido sobre todos os volumes de controle do domínio de solução.

- Discretização envolve a substituição de uma variedade de aproximações do tipo de diferenças finitas por termos nas equações integradas representando o processos de escoamento tais como convecção, difusão e termos fonte. Isto converte equações integrais num sistema de equações algébricas.
- Solução das equações algébricas por método iterativo.

O primeiro passo, distingue o método dos volumes finitos de todos os outros métodos. Este passo tem como resultado a conservação de propriedades relevantes para cada volume de controle finito para equações elípticas. Esta clara relação entre o algoritmo numérico e o princípio físico da conservação forma um dos principais atrativos do método dos volumes finitos. A conservação de uma variável genérica ϕ , dentro de um volume de controle finito pode ser expressa como um balanço de vários processos tendendo a aumentar ou diminuir. Isto é:

$$\left[\begin{array}{l} \text{Taxa de mudança} \\ \text{de } \phi \text{ no volume} \\ \text{de controle com} \\ \text{relação ao tempo} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{Fluxo líquido de} \\ \phi \text{ devido à con-} \\ \text{vecção no volume} \\ \text{de controle} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{Fluxo líquido de } \phi \\ \text{devido à difusão} \\ \text{no volume de con-} \\ \text{trole} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{Taxa líquida de} \\ \text{criação de } \phi \text{ no} \\ \text{volume de con-} \\ \text{trole} \end{array} \right]$$

Este trabalho utilizou o solver *CFX 10 Solver*, do software comercial *CFX 10*, de propriedade da ANSYS.

2.7.3 Pós-processamento

Como no pré-processamento um grande trabalho de desenvolvimento tem ocorrido no campo do pós-processamento. O aumento do poder computacional, juntamente com a excelente capacidade gráfica dos computadores atuais, os pacotes CFD são equipados com ferramentas versáteis de ferramentas de visualizações. Estas incluem:

- Gráficos vetoriais.
- Gráficos de contornos.
- Gráficos de superfícies.
- Rastreamento de partícula.
- Saída em cores dos dados.
- Animações para resultados dinâmicos.

Além disso é possível exportar dados para manipulação externa ao código. Devido a todas essas ferramentas, os códigos CFD revolucionaram a comunicação de idéias com as pessoas que não são especialistas na área.

O *CFX 10* possui o *CFX 10 Post*, que é o pós-processador desse pacote, e permitiu a manipulação dos resultados deste trabalho.

Capítulo 3

Modelagem Matemática e Numérica

Neste capítulo são mostradas as equação de transporte (conservação de massa e de quantidade de movimento), turbulência (modelo k-epsilon), de fechamento e por fim é apresentada a teoria cinética do escoamento granular. São mostrados também o método dos volumes finitos, e a geometria e malha numérica geradas.

3.1 Modelos matemáticos

A obtenção da solução numérica de qualquer problema físico requer inicialmente a habilidade da criação do modelo matemático correspondente. O modelo matemático deve ser tal que possa ser resolvido com tempos de computação não-proibitivos e que os resultados representem adequadamente o fenômeno físico em consideração (MALISKA, 2004).

Em um escoamento gás-sólido, duas classes de modelos podem ser distinguidas: os modelos Eulerianos (contínuo) e Lagrangeanos (partículas discretas). Os modelos Lagrangeanos resolvem as equações do movimento de Newton para cada partícula individual, levando em consideração os efeitos das colisões das partículas e as forças do gás que agem sobre as partículas. Entretanto, devido ao grande número de partículas, a quantidade de equações seria muito grande para permitir uma solução com os computadores disponíveis.

Portanto, o mais comum é considerar a fase particulada como um contínuo, isto é, utilizar o modelo euleriano. Os modelos Eulerianos consideram todas as fases como um contínuo e completamente interpenetrantes. As equações empregadas são generalizações das equações de Navier-Stokes para as interações do contínuo.

A seguir são apresentadas as equações referentes ao modelo matemático utilizado neste trabalho.

3.1.1 Equações de transporte

As equações transientes, tridimensionais da conservação de massa, ou equações da continuidade, em um ponto em um fluido incompressível são dadas abaixo.

Equação de conservação de massa, para a fase gasosa.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_g \rho_g) + \frac{\partial}{\partial x} (\varepsilon_g \rho_g v_{g,x}) + \frac{\partial}{\partial y} (\varepsilon_g \rho_g v_{g,y}) + \frac{\partial}{\partial z} (\varepsilon_g \rho_g v_{g,z}) = S_g^\rho \quad (3.1)$$

Equação de conservação de massa, para a fase particulada.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s) + \frac{\partial}{\partial x} (\varepsilon_s \rho_s v_{s,x}) + \frac{\partial}{\partial y} (\varepsilon_s \rho_s v_{s,y}) + \frac{\partial}{\partial z} (\varepsilon_s \rho_s v_{s,z}) = S_s^\rho \quad (3.2)$$

Nas equações acima descritas, ε_g é a fração volumétrica da fase gasosa e ε_s é a fração volumétrica da fase particulada. A massa específica é dada por ρ . A velocidade é dada por \vec{v} , e pode ser decomposta em v_x , v_y e v_z . O termo fonte é representado para cada fase por S_i^ρ . O termo fonte está presente em sistema onde ocorre transferência de massa. Como este não é caso deste estudo, pode-se dizer que são nulos:

$$S_g^\rho = S_s^\rho = 0 \quad (3.3)$$

A seguir, estão descritas as equações da quantidade de movimento, para as fases gasosa e particulada.

Equação da quantidade de movimento, para a fase gasosa, na direção x

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_g \rho_g v_{g,x}) + \sum_{\xi=x,y,z} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\varepsilon_g \rho_g v_{g,x} v_{g,\xi} - \varepsilon_g \mu_g \left(\frac{\partial v_x}{\partial \xi} + \frac{\partial v_\xi}{\partial x} \right) \right) = S_{g,x}^m \quad (3.4)$$

com

$$S_{g,x}^m = \beta_{gs}^m (v_{s,x} - v_{g,x}) + \varepsilon_g \rho_g g_x - \frac{\partial p_g}{\partial x} \quad (3.5)$$

Equação da quantidade de movimento, para a fase gasosa, na direção y

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_g \rho_g v_{g,y}) + \sum_{\xi=x,y,z} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\varepsilon_g \rho_g v_{g,y} v_{g,\xi} - \varepsilon_g \mu_g \left(\frac{\partial v_y}{\partial \xi} + \frac{\partial v_\xi}{\partial y} \right) \right) = S_{g,y}^m \quad (3.6)$$

com

$$S_{g,y}^m = \beta_{gs}^m (v_{s,y} - v_{g,y}) + \varepsilon_g \rho_g g_y - \frac{\partial p_g}{\partial y} \quad (3.7)$$

Equação da quantidade de movimento, para a fase gasosa, na direção z

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_g \rho_g v_{g,z}) + \sum_{\xi=x,y,z} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\varepsilon_g \rho_g v_{g,z} v_{g,\xi} - \varepsilon_g \mu_g \left(\frac{\partial v_z}{\partial \xi} + \frac{\partial v_\xi}{\partial z} \right) \right) = S_{g,z}^m \quad (3.8)$$

com

$$S_{g,z}^m = \beta_{gs}^m (v_{s,z} - v_{g,z}) + \varepsilon_g \rho_g g_z - \frac{\partial p_g}{\partial z} \quad (3.9)$$

Neste caso, tem-se que μ_g é a viscosidade da fase gasosa e S_g^m representa a geração de momento na fase gasosa.

O termo de arraste entre as fases é representado pelo produto do coeficiente e da diferença de velocidade entre as fases $\beta_{gs}^m (v_g - v_s)$. O modelo para o coeficiente de arraste será melhor explicado na Seção 3.1.3.

Equação da quantidade de movimento, para a fase particulada, na direção x

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s v_{s,x}) + \sum_{\xi=x,y,z} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\varepsilon_s \rho_s v_{s,x} v_{s,\xi} - \varepsilon_s \mu_s \left(\frac{\partial v_x}{\partial \xi} + \frac{\partial v_\xi}{\partial x} \right) \right) = S_{s,x}^m \quad (3.10)$$

com

$$S_{s,x}^m = \beta_{gs}^m (v_{g,x} - v_{s,x}) + \varepsilon_s \rho_s g_x - G \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial x} \quad (3.11)$$

O termo $G \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial x}$, da Equação 3.11, é um modelo para o ajuste de pressão de sólidos, próprio para o caso de leitos fluidizados. O módulo de elasticidade, G , pode ser expresso como segue:

$$G = G_0 e^{(-k(\varepsilon_s - \varepsilon_{s,max}))} \quad (3.12)$$

Os valores típicos para este caso são: $k = 600$, $G_0 = 1,0$ e $\varepsilon_{s,max} = 0,62$

As demais equações da quantidade de movimento para a fase particulada são dadas a seguir.

Equação da quantidade de movimento, para a fase particulada, na direção y

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s v_{s,y}) + \sum_{\xi=x,y,z} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\varepsilon_s \rho_s v_{s,y} v_{s,\xi} - \varepsilon_s \mu_s \left(\frac{\partial v_y}{\partial \xi} + \frac{\partial v_\xi}{\partial y} \right) \right) = S_{s,y}^m \quad (3.13)$$

com

$$S_{s,y}^m = \beta_{gs}^m (v_{g,y} - v_{s,y}) + \varepsilon_s \rho_s g_y - G \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial y} \quad (3.14)$$

Equação da quantidade de movimento, para a fase particulada, na direção z

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s v_{s,z}) + \sum_{\xi=x,y,z} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\varepsilon_s \rho_s v_{s,z} v_{s,\xi} - \varepsilon_s \mu_s \left(\frac{\partial v_z}{\partial \xi} + \frac{\partial v_\xi}{\partial z} \right) \right) = S_{s,z}^m \quad (3.15)$$

com

$$S_{s,z}^m = \beta_{gs}^m (v_{g,z} - v_{s,z}) + \varepsilon_s \rho_s g_z - G \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial z} \quad (3.16)$$

3.1.2 Turbulência

Todos os escoamentos encontrados na engenharia, se tornam instáveis acima de um certo número de Reynolds. A baixos números de Reynolds, os escoamentos são laminares. A altos números de Reynolds, os escoamentos tornam-se turbulentos. Um estado caótico e aleatório de movimento se desenvolve, no qual a velocidade e a pressão se alteram continuamente com o tempo.

A maior parte dos escoamentos na engenharia são turbulentos. Portanto, o regime de escoamento turbulento não é só de interesse teórico. No estudo de mecânica dos fluidos é necessário acesso a ferramentas capazes de representar os efeitos da turbulência. Logo, se faz necessário conhecer a física da turbulência e sua modelagem.

A principal diferença entre os escoamentos laminar e turbulento é o aparecimento de turbilhões de uma grande variedade de escalas de tamanho em escoamentos turbulentos. Com o presente poder computacional e os atuais teorias do fenômeno da turbulência, é uma tarefa muito difícil a solução direta das equações de Navier-Stokes para escoamentos plenamente turbulentos.

Assim, um procedimento computacional que é prática comum para obter equações de conservação válidas para escoamentos turbulentos tem sido a aplicação de uma *média de Reynolds* sobre as equações de transporte básicas. Tais modelos são chamados RANS, e são os chamados modelos clássicos. Entre tais modelos podem ser citados os modelos *zero-equation* e *two-equation*. Os modelos de dois parâmetros conhecidos são o $k - \epsilon$ e o $k - \omega$.

O modelo $k - \epsilon$ permite descrever os efeitos das propriedades da turbulência no transporte, além da produção e destruição da turbulência. As duas equações de transporte, uma para a energia cinética turbulenta k e outra para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta ϵ são resolvidas. A energia cinética turbulenta k é definida como a variação das flutuações na velocidade. A dissipação turbulenta ϵ é definida como a taxa que as flutuações da velocidade se dissipam.

O modelo $k - \epsilon$ emprega a hipótese do gradiente de difusão, para relacionar as tensões de Reynolds aos gradientes médios de velocidade e à viscosidade turbulenta. Esta é modelada como o produto de uma velocidade turbulenta e de uma escala turbulenta de comprimento. A escala da velocidade turbulenta é computada da energia cinética turbulenta, que é obtida da solução da equação de transporte.

O modelo $k - \epsilon$ gera algumas modificações nas equações de transporte, como pode ser visto a seguir:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\epsilon_g \rho_g) + \nabla \cdot (\epsilon_g \rho_g \vec{v}_g) = 0 \quad (3.17)$$

A Equação 3.17 difere da 3.1 porque na primeira é empregada a velocidade média, enquanto que na segunda utiliza-se a velocidade instantânea.

A equação de conservação do momento no modelo $k - \epsilon$, por sua vez, é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\epsilon_g \rho_g \vec{v}_g) + \nabla \cdot (\epsilon_g \rho_g \vec{v}_g \vec{v}_g) - \nabla \cdot (\epsilon_g \mu_g^{ef} \nabla \vec{v}_g) = \nabla p' + \nabla \cdot (\epsilon_g \mu_g^{ef} \nabla \vec{v}_g)^T + B \quad (3.18)$$

O termo da pressão p' é modificado por:

$$p'_g = p_g + \frac{2}{3} \rho_g k \quad (3.19)$$

A viscosidade efetiva é a soma das viscosidades dinâmica e turbulenta, como

segue:

$$\mu_g^{ef} = \mu_g + \mu_g^t \quad (3.20)$$

Pelo modelo, a viscosidade turbulenta está ligada à energia e à dissipação cinética turbulenta, de acordo com a equação:

$$\mu_g^t = C_\mu \rho_g \frac{k^2}{\epsilon} \quad (3.21)$$

A constante C_μ tem o valor 0,09.

As equações diferenciais que geram os valores de k e ϵ são como se segue:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\epsilon_g \rho_g k) + \nabla \cdot (\epsilon_g \rho_g \vec{v}_g k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu_g + \frac{\mu_g^t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \epsilon_g \rho_g \epsilon \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\epsilon_g \rho_g \epsilon) + \nabla \cdot (\epsilon_g \rho_g \vec{v}_g \epsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\mu_g + \frac{\mu_g^t}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right] + \frac{\epsilon}{k} (C_{\epsilon 1} P_k - C_{\epsilon 2} \epsilon_g \rho_g \epsilon) \quad (3.23)$$

A Tabela 3.1, traz os valores das constantes do modelo $k - \epsilon$.

Tabela 3.1: Constantes do Modelo $k - \epsilon$.			
$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	σ_k	σ_ϵ
1,44	1,92	1,0	1,3

A produção turbulenta P_k devido às forças viscosas e às de empuxo é expressa como:

$$P_k = \mu_g^t \nabla \mathbf{u}_g \cdot (\nabla \vec{v}_g + \nabla \vec{v}_g^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v}_g (3\mu_g^t \nabla \cdot \vec{v}_g + \epsilon_g \rho_g k) + P_{kb} \quad (3.24)$$

O termo P_{kb} é a produção de turbulência pelo empuxo, e é considerado nulo.

3.1.3 Equações de fechamento

Os modelos Eulerianos consideram todas as fases como um contínuo e completamente interpenetrantes. Possuindo uma representação contínua das fases particuladas, os modelos Eulerianos requerem leis de fechamento adicionais para descrever a reologia das partículas fluidizadas.

A continuidade entre as fases é uma dessas equações de fechamento, sendo:

$$\sum_i \varepsilon_i = \varepsilon_g + \varepsilon_s = 1 \quad (3.25)$$

Ainda como equações de fechamento, têm-se as correlações para o coeficiente de transferência de momento entre as fases. Os coeficientes de atrito entre o fluido e o sólido são obtidos de correlações padrões com aceleração desprezível. Sem aceleração, atrito na parede, ou gravidade, o balanço de momento para o gás é:

$$\varepsilon_g \frac{\partial \rho_g}{\partial x} - \beta_{gs}^m (v_g - v_s) = 0 \quad (3.26)$$

Esta equação é a lei de Darcy onde β_{gs}^m é a permeabilidade dividida pela viscosidade do fluido.

O coeficiente β_{gs}^m é então obtido por se comparar a Equação 3.26 com a equação de Ergun, a seguir:

$$\frac{\Delta p}{\Delta x} = 150 \frac{\varepsilon_s^2 \mu_g U}{\varepsilon_g^3 (\psi_s d_p^2)} + 1,75 \frac{U^2 \varepsilon_s \rho_g}{\varepsilon_g^3 (\psi_s d_p^2)} \quad (3.27)$$

onde U vem a ser a velocidade superficial:

$$U = \varepsilon_g (v_g - v_s)$$

Uma comparação entre as Equações 3.26 e 3.27, mostra que para regimes densos:

$$\beta_{gs}^m = 150 \frac{\varepsilon_s^2 \mu_g}{\varepsilon_g d_p^2} + 1,75 \frac{|\vec{v}_s - \vec{v}_g| \varepsilon_s \rho_g}{d_p} \quad \text{para } \varepsilon_g < 0,8 \quad (3.28)$$

Para frações volumétricas de gás maiores que 0,8, tem-se a expressão de Wen e Yu:

$$\beta_{gs}^m = \frac{3}{4} C_d \frac{|\vec{v}_s - \vec{v}_g| \varepsilon_s \rho_g}{d_p} f(\varepsilon_g) \quad (3.29)$$

onde C_d , o coeficiente de arraste, é relacionado com o número de Reynolds por

$$C_d = \varepsilon_g^{-1,65} \max \left[\frac{24}{Re_p \varepsilon_g} \left(1 + 0,15 (Re_p \varepsilon_g)^{0,687} \right) \right] \quad \text{para } Re_p < 1000 \quad (3.30)$$

$$C_d = 0,44 \quad \text{para} \quad Re_p \geq 1000 \quad (3.31)$$

onde o Reynolds da partícula é

$$Re_p = \frac{|\vec{v}_s - \vec{v}_g| \rho_g d_p}{\mu_g} \quad (3.32)$$

Na Equação 3.29 o termo $f(\varepsilon_g)$ mostra o efeito devido à presença de outras partículas no fluido e age como uma correção da lei de Stokes para a queda livre de uma única partícula. GIDASPOW e ETTEHADIEH (1983) usaram

$$f(\varepsilon_g) = \varepsilon_g^{-2,65} \quad (3.33)$$

embora esta correção seja geralmente pequena.

3.1.4 Teoria cinética do escoamento granular

Quando no movimento das partículas há contribuição de interações colisionais, conceitos da teoria cinética dos gases (CHAPMAN e COWLING, 1970), podem ser usados para descrever as tensões efetivas na fase sólida, resultante de uma contribuição cinética e uma colisional.

Nesta seção é apresentada a modelagem matemática da KTGF. A modelagem apresentada foi implementada no CFX utilizando-se subrotinas para cada parâmetro. Uma explicação mais detalhada sobre as subrotinas pode ser encontrada na Seção 4.2.1.

Análoga à temperatura termodinâmica dos gases, a temperatura granular pode ser introduzida como uma medida das flutuações de velocidade da partícula.

$$\theta = \frac{1}{3} \langle c^2 \rangle \quad (3.34)$$

Uma vez que a tensão na fase sólida depende da magnitude das flutuações da velocidade daquelas partículas, um balanço da energia granular associada com aquelas flutuações de velocidade das partículas é requerido para suplementar a continuidade e o balanço de momento para ambas as fases. Este balanço é dado

por:

$$\tau_{sij} = -p_s \delta_{ij} + \mu_s \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) + \lambda_s \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (3.35)$$

DING e GIDASPOW (1990) propuseram a seguinte expressão para a determinação da temperatura granular:

$$\theta = \frac{1}{15(1-e)} d_p^2 S_{ij}^2 \quad (3.36)$$

onde, para a fase particulada

$$S_{ij}^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)^2 \quad (3.37)$$

Para o termo da pressão devido à colisão e flutuação turbulenta da fase particulada, de acordo com o modelo de LUN et al. (1984), tem-se:

$$p_s^{c+t} = \rho_s \varepsilon_s [1 + 2(1+e)\varepsilon_s g_0] \theta \quad (3.38)$$

A primeira parte da Equação 3.38 (dentro dos colchetes) representa a contribuição cinética, e a segunda parte representa a contribuição colisional.

Em regimes de elevada concentração da fase particulada, contatos sucessivos contribuem para um regime de colisão-fricção e elevada pressão. Para esta condição adota-se o modelo de JOHNSON e JACKSON (1987):

$$p_s^f = Fr \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_{s,min})^n}{(\varepsilon_{s,max} - \varepsilon_s)^p} \quad (3.39)$$

Adotou-se para as constantes os seguintes valores, de acordo com VANWACHEN (1998): $Fr = 0,05$; $n = 2$; $p = 3$; $\varepsilon_{s,min} = 0,55$ e $\varepsilon_{s,max}$.

Portanto a pressão total da fase particulada compreende os seguintes termos:

$$p_s = p_s^{c+t} + p_s^f \quad (3.40)$$

As expressões para a função de distribuição radial encontradas em LUN e SAVAGE (1986) e GIDASPOW (1994) tendem a um limite correto em grandes empacotamentos. As expressões da função de distribuição radial estão a seguir.

LUN e SAVAGE (1986)

$$g_0 = \left(1 - \frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{s,max}}\right)^{-2,5\varepsilon_{s,max}} \quad (3.41)$$

GIDASPOW (1994)

$$g_0 = \left[1 - \left(\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{s,max}}\right)^{1/3}\right]^{-1} \quad (3.42)$$

A expressão da Equação 3.42, de GIDASPOW (1994), é a que mais se adequa em toda a faixa de fração volumétrica da fase particulada, conforme VANWACHEN (1998). Entretanto, esta equação não se aproxima do limite correto, sendo este a unidade, quando a fração volumétrica se aproxima de zero.

No presente trabalho, foi preferível utilizar a expressão de LUN e SAVAGE (1986), dada pela Equação 3.41, uma vez que se trabalhou com um regime diluído, portanto, com frações volumétricas abaixo de 0,2.

O comportamento de ambas expressões para a função de distribuição radial podem ser observadas no gráfico da Figura 3.1.

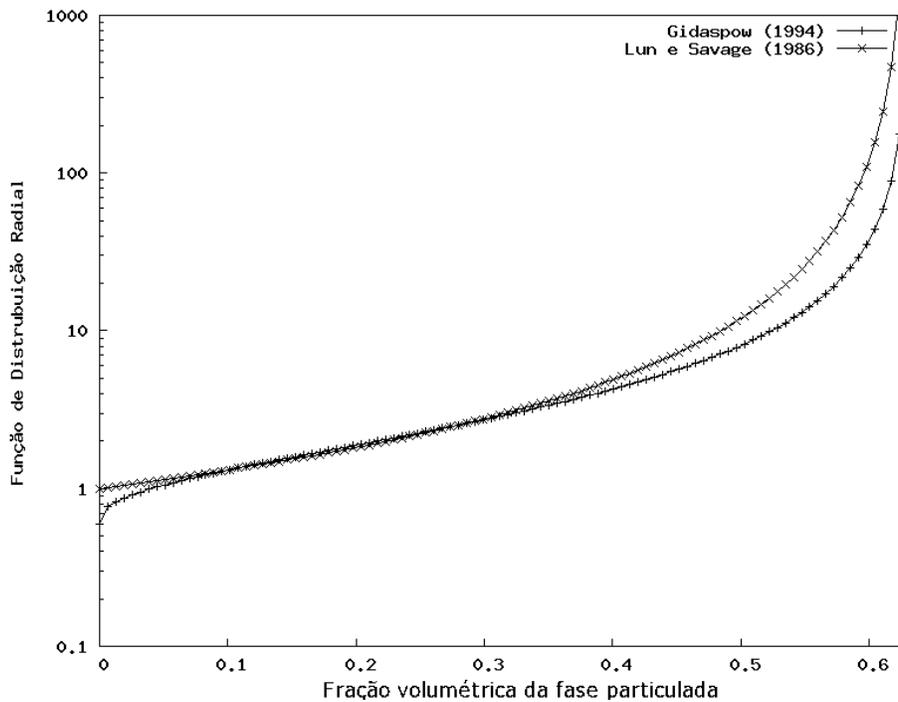


Figura 3.1: Função de Distribuição Radial

A viscosidade de compressão descreve a resistência da fase particulada contra

a compressão. A forma desta equação é, segundo LUN et al. (1984):

$$\lambda_s = \frac{4}{3} \varepsilon_s^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} \quad (3.43)$$

A viscosidade dinâmica pode ser descrita pelas seguintes expressões, segundo diferentes autores.

LUN e SAVAGE (1986)

$$\mu_s = \frac{5\sqrt{\pi\theta}}{96} \rho_s d_s \left[\left(\frac{1}{\eta g_0} + \frac{8\varepsilon_s}{5} \right) \left(\frac{1 + \frac{8}{5}\eta(3\eta - 2)\varepsilon_s g_0}{2 - \eta} \right) + \frac{768}{25\pi} \eta \varepsilon_s^2 g_0 \right] \quad (3.44)$$

GIDASPOW (1994)

$$\mu_s = \frac{4}{5} \varepsilon_s^2 \rho_s d_s g_0 (1 + e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + \frac{\varepsilon_s d_s \rho_s \sqrt{\pi\theta}}{6(3 - e)} \left[1 + \frac{2}{5} (1 + e) (3e - 1) \varepsilon_s g_0 \right] \quad (3.45)$$

HRENYA e SINCLAIR (1997)

$$\mu_s = \frac{5\sqrt{\pi\theta}}{96} \rho_s d_s \left[\left(\frac{1}{1 + \frac{\lambda_{mfp}}{R}} \frac{1}{\eta g_0} + \frac{8\varepsilon_s}{5} \right) \left(\frac{1 + \frac{8}{5}\eta(3\eta - 2)\varepsilon_s g_0}{2 - \eta} \right) + \frac{768}{25\pi} \eta \varepsilon_s^2 g_0 \right] \quad (3.46)$$

Onde:

$$\eta = \frac{1}{2(1 + e)} \quad (3.47)$$

$$\lambda_{mfp} = \frac{d_p}{6\sqrt{2}\varepsilon_s} \quad (3.48)$$

As equações de GIDASPOW (1994) e LUN et al. (1984) não levam em consideração a contribuição da natureza inelástica das partículas na pressão total, alegando que essa correção é desprezível. HRENYA e SINCLAIR (1997) segue este mesmo caminho, mas limita o caminho livre médio da partícula por uma dimensão característica do sistema físico real.

As teorias de LUN et al. (1984) e GIDASPOW (1994) fazem com que a viscosidade dinâmica da fase particulada tenda a um valor finito não-nulo, quando a fração volumétrica daquela fase tendendo a zero. Por HRENYA e SINCLAIR (1997) limitar

o caminho livre médio, a expressão utilizada corretamente tende a zero quando a fração volumétrica tende a zero, o que a torna mais vantajosa.

As Figuras 3.2 e 3.3 mostram uma comparação entre as viscosidades dinâmicas de LUN et al. (1984), GIDASPOW (1994) e HRENYA e SINCLAIR (1997). Foi utilizado a fim de comparação um coeficiente de restituição $e = 0,9$ e uma fração volumétrica máxima $\varepsilon_{s,max} = 0,65$. Foi empregada uma viscosidade dinâmica adimensional, dada pela expressão abaixo abaixo:

$$\mu_s \rho_s^{-1} d_s^{-1} \theta^{-1/2}$$

Nota-se pela Figura 3.3 que a expressão de HRENYA e SINCLAIR (1997) tende corretamente para zero quando a fração volumétrica tende a zero. Portanto essa expressão se mostrou mais apropriada para este trabalho.

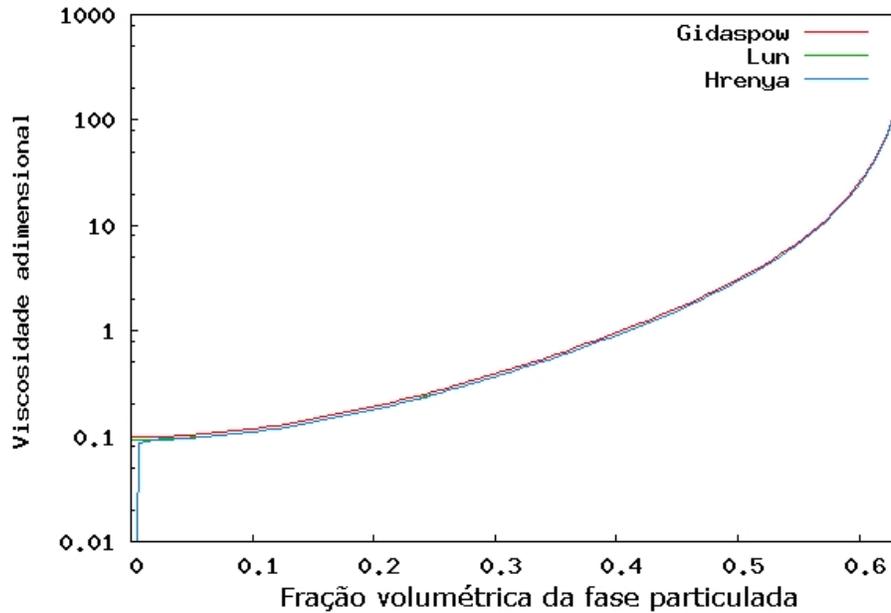


Figura 3.2: Viscosidade dinâmica adimensional, toda faixa de fração volumétrica, até empacotamento

3.2 Método numérico

O método numérico tem como função resolver uma ou mais equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes por expressões algébricas que envolvem a função incógnita. Quando não é possível se obter uma solução analítica, recorre-se a um método numérico, utilizando-se um número discreto de pontos. Ao se

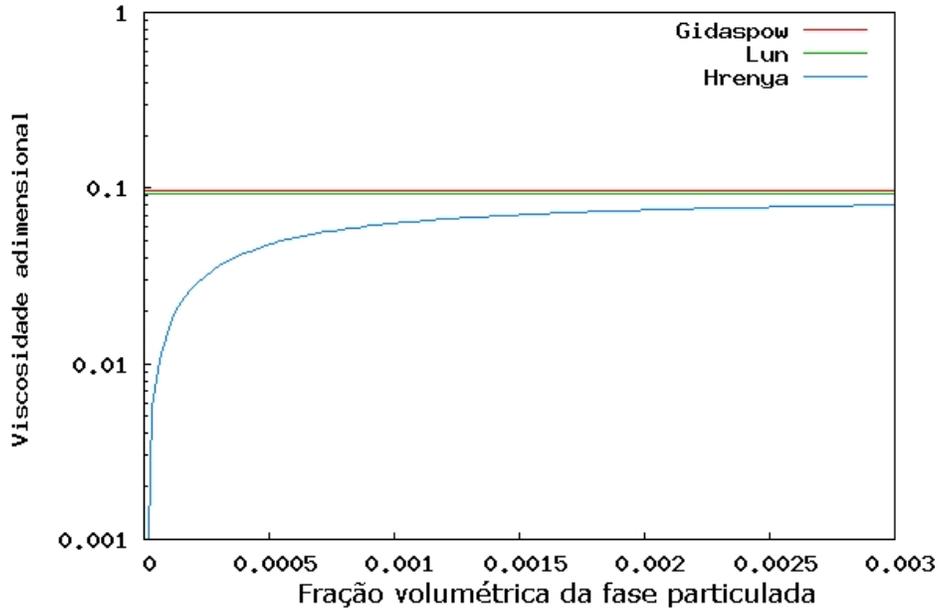


Figura 3.3: Viscosidade dinâmica adimensional, detalhe para frações volumétricas baixas

fazer essa discretização, há um determinado erro que, espera-se, será menor com o aumento do número de pontos utilizados, ficando a solução numérica mais próxima da exata. A ortogonalidade das malha é outro parâmetro de importância no método dos volumes finitos, o que raramente acontece, sendo os volumes quase ortogonais na realidade. Isso em si já introduz resultados menos exatos.

O método numérico transforma uma equação diferencial em um sistema de equações algébricas. Para isso, as derivadas da função existentes na equação diferencial devem ser substituídas pelos valores discretos da função. As diversas maneiras de transformar as derivadas em termos que contêm a função por meio de uma integração é o que caracteriza o método numérico. No presente trabalho, foi utilizado o método dos volumes finitos (MALISKA, 2004).

Na equação genérica para as equações de transporte:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\phi - \Gamma^\phi\nabla\phi) = S^\phi \quad (3.49)$$

onde Γ^ϕ é a difusividade de ϕ , a variável genérica transportada; ϕ deve ser conservada em cada um dos volumes de controle da geometria discretizada. Discretizando essa equação para um volume de controle, obtemos

$$\frac{\delta}{\delta t}(\rho\phi) + \frac{\delta}{\delta x_l} \left(\rho\vec{v}_l\phi - \Gamma^\phi \frac{\delta\phi}{\delta x_l} \right) = S^\phi \quad (3.50)$$

onde δx_l são as dimensões do volume de controle, e δt é o passo no tempo da iteração (para o caso de um problema transiente).

3.2.1 Método dos volumes finitos

Todo método que, para obter as equações aproximadas, satisfaz a conservação da propriedade em nível de volumes elementares é um método de volumes finitos. Tal método é descrito na literatura por PATANKAR (1980) e MALISKA (2004).

No método dos volumes finitos, o domínio de cálculo é subdividido em volumes de controle que contêm os nós. Estes volumes não são sobrepostos, ou seja, cada volume de controle representa somente um nó. Uma representação bidimensional pode ser vista na Figura 3.4.

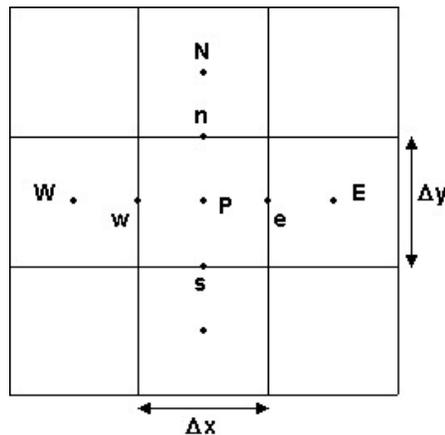


Figura 3.4: Volume elementar e seus vizinhos, caso bidimensional

Assume-se que cada fase está presente em cada volume de controle, atribuindo-se um valor de fração volumétrica para cada fase. Todas as variáveis são definidas no centro dos volumes de controle, os quais preenchem os domínios físicos a serem considerados. Cada equação é integrada sobre cada volume de controle para obter uma equação discreta a qual conecta as variáveis no centro do volume de controle com sua vizinhança. Dessa maneira, a conservação de massa é satisfeita para cada volume de controle.

Neste método, a forma integral das equações de conservação é aplicada em cada volume de controle. A forma integral é dada a seguir:

$$\int_S \rho \phi \vec{v} \cdot \vec{n} dS = \int_S \Gamma \phi \nabla \phi \cdot \vec{n} dS + \int_V S \phi dV \quad (3.51)$$

Se as equações de todos os volumes de controle forem somadas, obtém-se a

equação de conservação global.

O fluxo líquido através do volume de controle é a soma das integrais sobre as superfícies:

$$\int_S \rho \phi \vec{v} \vec{n} dS = \sum_l \int_{S_l} \rho \phi \vec{v} \vec{n} dS \quad (3.52)$$

$$\int_S \Gamma^\phi \nabla \phi \vec{n} dS = \sum_l \int_{S_l} \Gamma^\phi \nabla \phi \vec{n} dS \quad (3.53)$$

Para solucionar estas integrais de superfície nas Equações 3.52 e 3.53 exatamente, deve-se conhecer o valor do integrando ao longo de toda a superfície S ; como esta informação não é disponível, já que apenas o valor no centro do volume de controle é calculado, utiliza-se uma aproximação através de funções de interpolação.

3.2.2 Funções de interpolação

Os fluxos advectivos e convectivos devem ser avaliados nas fronteiras do volume de controle, uma vez que os métodos falham na aplicação nestas situações. O cálculo desses fluxos deve ser realizado em função dos valores da função nos pontos nodais, ou seja, a função de interpolação tem o papel de conectar os pontos nodais.

A tentativa é sempre propor uma função de interpolação com menor erro possível e que, ao mesmo tempo, não envolva muitos pontos nodais para não criar uma matriz com estrutura muito complexa.

Existem diversas funções de interpolação, entre elas:

Diferenças Centrais: O esquema de diferenças centrais (CDS, do inglês *Central Differencing Scheme*), usa uma interpolação linear. No ponto e da malha (Figura 3.4) tem-se:

$$\phi_e = \phi_E \lambda_e + \phi_P (1 - \lambda_e) \quad (3.54)$$

Sendo que o fator de interpolação linear λ_e é dado por:

$$\lambda_e = \frac{x_e - x_P}{x_E - x_P} \quad (3.55)$$

Conseqüentemente, a derivada é:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_e = \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P} \quad (3.56)$$

Esta é uma função de interpolação de segunda ordem.

Upwind: Para evitar oscilações numéricas utiliza-se o método *upwind* (UDS). Assim, tem-se:

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_P & \text{se } (\vec{v}\vec{n}) > 0 \\ \phi_E & \text{se } (\vec{v}\vec{n}) < 0 \end{cases} \quad (3.57)$$

Isto é, o valor de ϕ vai depender da direção do escoamento.

O termo difusivo continua sendo aproximado por diferenças centrais, e as derivadas obtidas por:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_e = \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P} \quad (3.58)$$

Higher upwind: Este esquema é de segunda ordem. Neste, está presente um termo a mais na aproximação da série de Taylor, o que implica utilizar uma célula anterior a W e posterior a E . Assim:

$$\phi_w = \phi_W + \frac{1}{2} (\phi_W - \phi_{WW}) \quad (3.59)$$

$$\phi_e = \frac{3}{2} \phi_P - \frac{1}{2} \phi_W \quad (3.60)$$

3.2.3 Acoplamento pressão-velocidade

O acoplamento pressão-velocidade é necessário quando a massa específica não depende mais da pressão quando da utilização da solução segregada. Essa situação é chamada de formulação incompressível. Ressalte-se que, escoamentos onde a massa específica varia apenas com a temperatura, pertencem à classe de formulação incompressível.

Se o escoamento é incompressível, a massa específica é constante, e então por

definição não vinculada à pressão. Neste caso, o acoplamento entre a pressão e a velocidade introduz uma restrição na solução do campo do escoamento: se o correto campo de pressão é aplicado nas equações do momento, o campo de velocidade resultante deve satisfazer a continuidade.

Para a conservação da massa ser satisfeita, alguns modelos foram propostos para determinar uma equação (derivada da própria conservação da massa onde um termo de pressão apareça) capaz de acoplar a pressão e a velocidade.

Um destes é o método SIMPLE, desenvolvido por Patankar e Spalding. Ele é baseado nas idéias de Chorin para escoamentos incompressíveis. Nesse procedimento, a pressão é escrita como a soma da melhor estimativa da pressão disponível, mas uma correção, que é calculada de maneira a satisfazer a equação da continuidade.

Este método envolve dois passos distintos:

- i. As velocidades são corrigidas de maneira a satisfazer a equação da conservação de massa.
- ii. As pressões são avançadas para completar o ciclo iterativo.

O método SIMPLEC tem o procedimento idêntico ao SIMPLE, diferindo apenas nas equações de correção da velocidade.

No método PRIME, a motivação principal é a realização da correção da velocidade e cálculo da pressão de uma só vez. Isso é conseguido utilizando-se as equações do movimento também como equações de correção.

O CFX utiliza uma única célula, desestruturada, a fim de superar o desacoplamento da pressão da velocidade. A representação unidimensional da conservação de massa pode ser escrita:

$$\left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)_i + \frac{\Delta x^3 A}{4\dot{m}} \left(\frac{\partial^4 P}{\partial x^4}\right)_i = 0 \quad (3.61)$$

onde

$$\dot{m} = \rho v_j \Delta n_j$$

A equação da continuidade é uma aproximação de segunda ordem para a derivada primeira na velocidade modificada por uma derivada quarta na pressão que

age para redistribuir a influência da pressão.

3.3 Geometria e malha numérica

Em processos industriais, a geometria do equipamento exerce significativa influência sobre escoamentos multifásicos. Por isso, além da definição do modelo correto, faz-se necessário assegurar uma geometria que em conjunto com aquele, assegure resultados mais corretos possíveis, isso porque a geometria vai afetar diretamente na ortogonalidade da malha. E a malha é de suma importância nas simulações, haja vista sua relação direta com o tempo computacional e possível convergência, de acordo com o detalhamento da mesma.

A geometria utilizada neste trabalho foi baseada no equipamento experimental utilizado por SAMUELSBERG e HJERTAGER (1996), e posteriormente por MATHIESEN et al. (2000). O equipamento é um leito fluidizado circulante, como esquematizado na Figura 3.5. O riser tem um diâmetro interno de 0,032 m e 1 m de altura. A entrada de gás primário é localizada no fundo do riser, e para promover uma velocidade uniforme de gás à entrada, foi utilizado um distribuidor de ar.

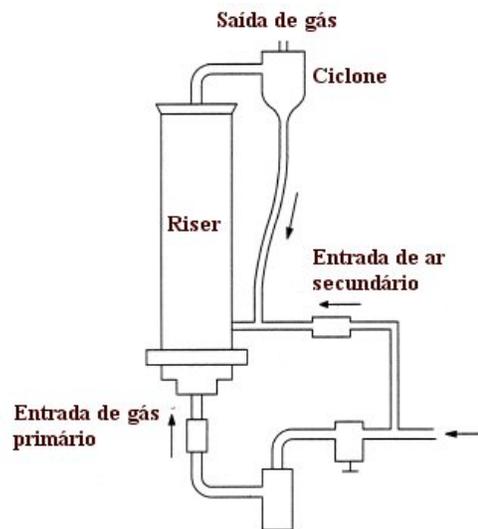


Figura 3.5: Desenho esquemático do CFB.

No topo do riser, as partículas suspensas entram em um ciclone onde os sólidos são separados do gás e reciclados por meio de um retorno. Um suprimento de ar secundário, posicionado a 0,05 m acima do distribuidor de ar alimenta o sólido de volta ao riser.

O interesse do presente trabalho está no riser, de onde foram tirados os dados acerca do escoamento. Portanto a geometria foi construída levando-se em consideração apenas aquela seção do CFB, ignorando-se o ciclone e o retorno. Apesar de não haver a seção por onde retornam os sólidos, estes saíram pelo topo e retornaram pela entrada secundária, lançando-se mão para isso de funções implementadas no CFX. A Figura 3.6 mostra a geometria utilizada, bem como suas cotas, em milímetros. Ressalte-se que a altura de 1000 mm não está na mesma escala que as outras cotas, por questão de visualização na página.

De posse das dimensões da geometria foi possível construí-la utilizando um programa CAD. Para tanto foi utilizado o software *Icem CFD*, da ANSYS. Este programa foi preferido por incorporar um gerador de malhas numéricas, e devido à sua integração com o código CFD *CFX 10*, também da ANSYS.

Como salientado anteriormente, a malha é parte vital em uma simulação numérica, tanto pela precisão dos dados obtidos numericamente, como pelo tempo computacional requerido. Portanto, com isso em vista, tem-se por objetivo encontrar um equilíbrio entre precisão e tempo computacional.

Com base na geometria construída, foram geradas as malhas numéricas, que serviram de base para a investigação da dependência do escoamento com o número de volumes de controle. O procedimento está descrito na Seção 4.1. Para tal tarefa, foi utilizado, como já mencionado, o software comercial *Icem CFD*. As malhas geradas foram hexaédricas, que apresentam melhores resultados que malhas tetraédricas. A malha escolhida para dar prosseguimento aos trabalhos, segundo os critérios estabelecidos na Seção 4.1, pode ser vista na Figura 3.7, e corresponde à malha de 300 mil volumes de controle.

Como se pode notar pela Figura 3.7, foi dada a devida atenção às regiões que apresentam grandes gradientes, isto é, regiões com grandes perturbações. Uma delas é na zona de introdução da alimentação secundária no riser. Ali é previsto que haja grandes gradientes, principalmente ao fato da alimentação secundária ser injetada na direção perpendicular ao escoamento no riser. Com efeito, essa região teve um maior refinamento.

Outra região de interesse é à saída do riser. Ali há uma contração na área de escoamento, o que provoca o aparecimento de grandes gradientes, sendo necessário despender maior atenção a essa região, e empregar o refinamento necessário. Na parede, que é outra região de interesse, também foi dada a devida atenção, tendo-se volumes de largura da ordem de 0,8 mm, para atender a exigência de um y^+ aproximadamente igual a 11, requerido para simulações de *risers* utilizando

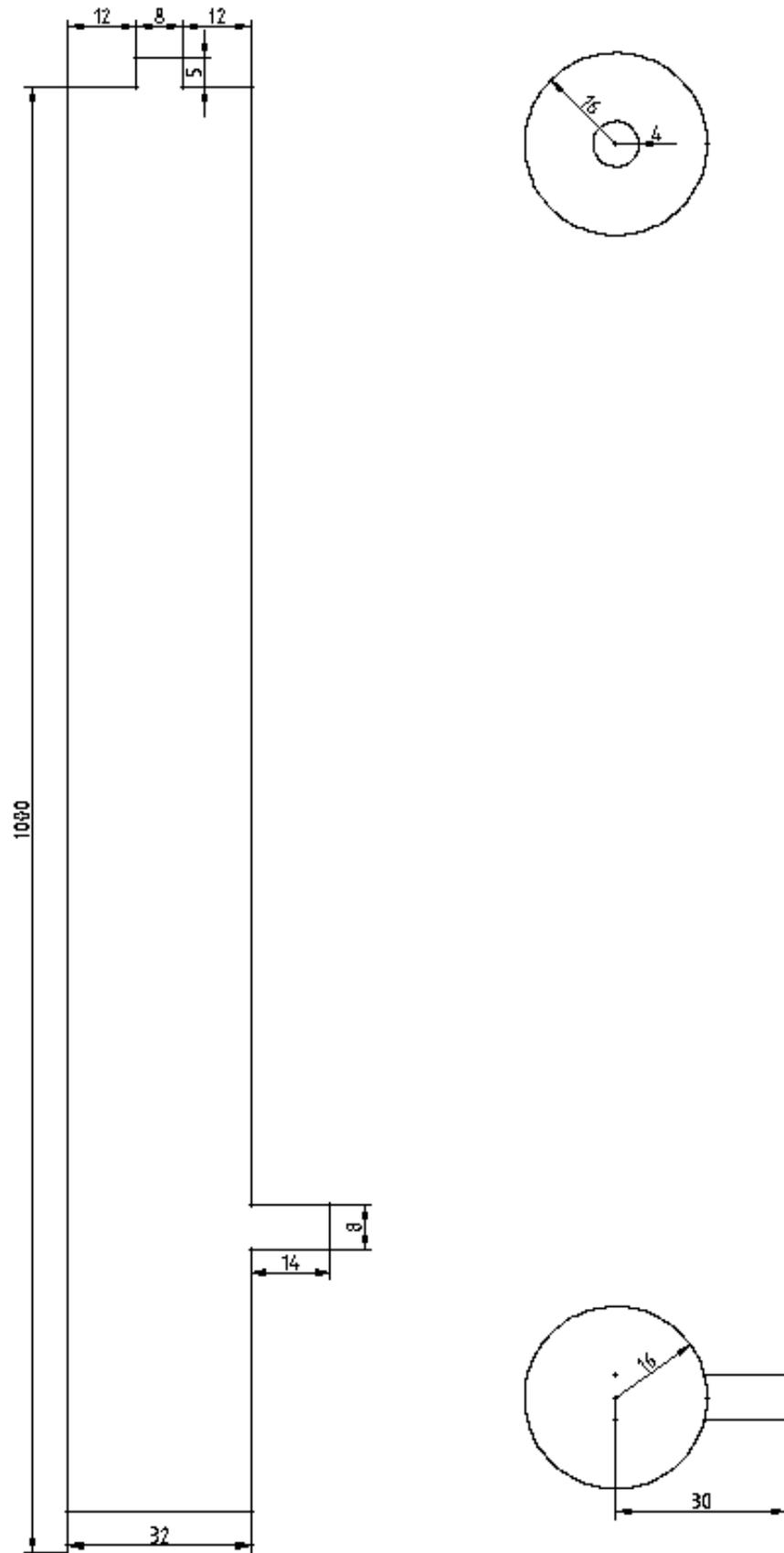


Figura 3.6: Dimensões da geometria utilizada no presente trabalho.

o modelo de turbulência $k - \epsilon$. O y^+ é a distância adimensional da parede. É utilizado para avaliar a localização do primeiro nó a partir da parede. É mais importante quando utilizando-se funções de parede.

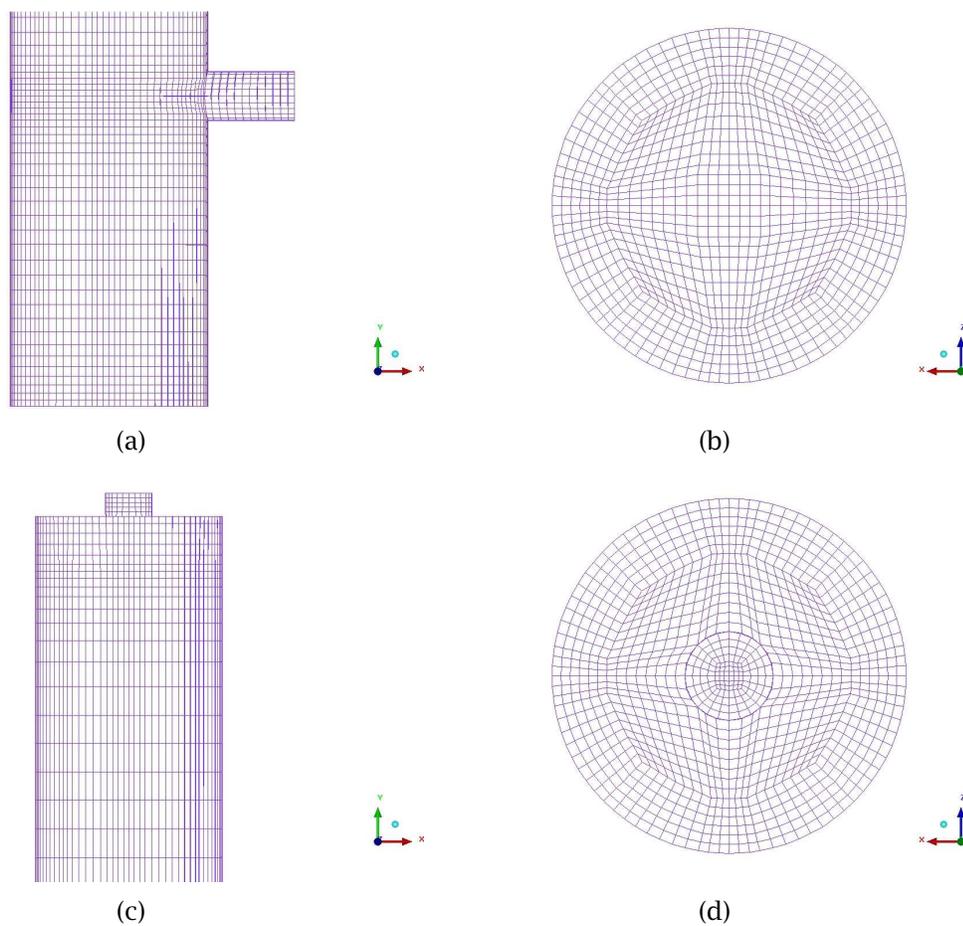


Figura 3.7: Malha gerada. (a) Vista do fundo. (b) Seção transversal no fundo. (c) Vista do topo. (d) Seção transversal no topo.

Capítulo 4

Resultados e Discussões

Neste capítulo são apresentados os resultados das simulações realizadas. Primeiramente é mostrado o teste de malhas, que ajudou na escolha da malha a ser utilizada. Posteriormente foram mostrados os resultados para as simulações multifásicas, comparando-se as simulações utilizando-se o modelo da KTGF, com as que não o usaram e com dados experimentais.

4.1 Teste de malhas

O refinamento da malha numérica é de extrema importância para se determinar corretamente o comportamento do escoamento. Para se avaliar a dependência deste com o número de volumes de controle da malha foram testadas sete malhas, como mostrado na Tabela 4.1. Convencionou-se ali aplicar um valor nominal a fim de facilitar a leitura dos gráficos. O valor nominal é um valor arredondado do valor real de volumes de controle da malha. O que vêm ser os volumes de controle foi explicado na Seção 3.2.

Para o teste de malhas foram feitas simulações monofásicas, utilizando escoamento gasoso e o fluido escoante foi o ar. As condições de contorno dessas simulações estão na Tabela 4.2. Por meio destas simulações pôde-se determinar a partir de qual número de volumes de controle este não exerce grande influência no comportamento do escoamento. Quando isso acontecer, pode-se dizer que um maior refinamento não trará grandes alterações no resultado final. As Figuras 4.1, 4.2, 4.3, 4.4 e 4.5 mostram como o comportamento sofre influência do número de volumes de controle a diversas alturas no leito fluidizado.

Nas Figuras 4.1, 4.2 e 4.3 não se percebe grande influência do refinamento da

Tabela 4.1: Características das malhas.

Malha (nominal)	Volumes de controle	Qualidade	
		Determinante	Ângulo
100 mil	96 944	0,29	29
150 mil	154 282	0,29	29
200 mil	204 066	0,29	29
300 mil	278 148	0,34	30
400 mil	382 119	0,34	30
500 mil	498 552	0,34	30
600 mil	629 535	0,34	30

Tabela 4.2: Condições de contorno.

Entrada primária	Velocidade do gás de 0,8 m/s
Entrada secundária	Velocidade do gás de 0,3 m/s
Saída	Vazão mássica de $7,80 \cdot 10^{-4}$ kg/s
Parede	Não deslizamento
Critério de convergência	Tipo residual - RMS com alvo residual de 10^{-4}

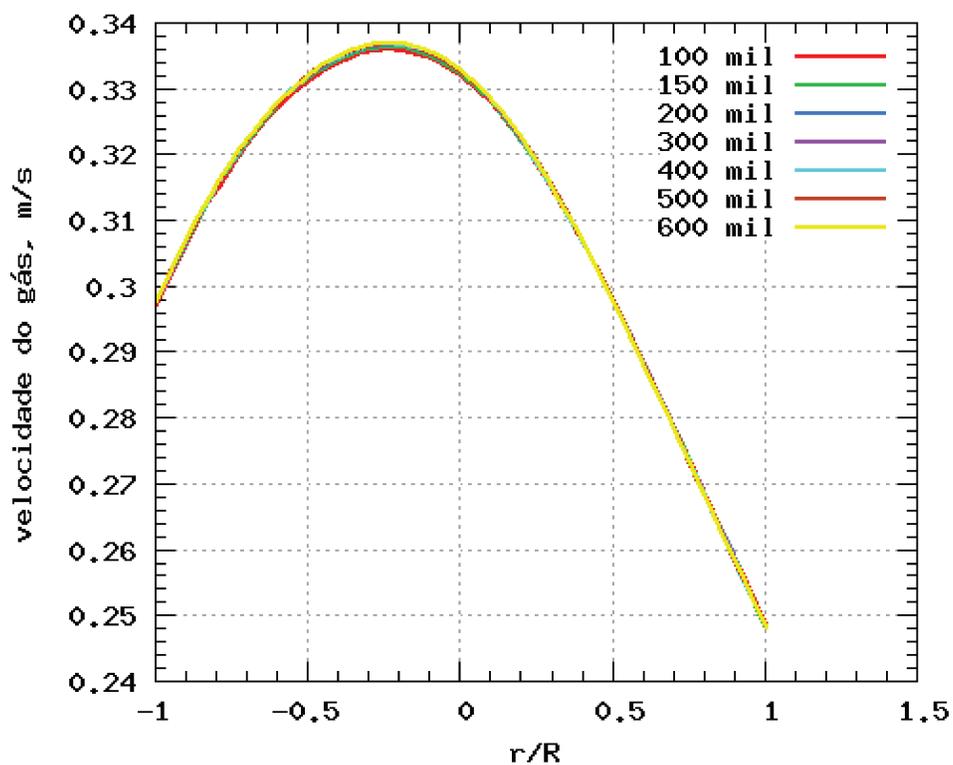


Figura 4.1: Velocidade radial do gás a 0,2 m.

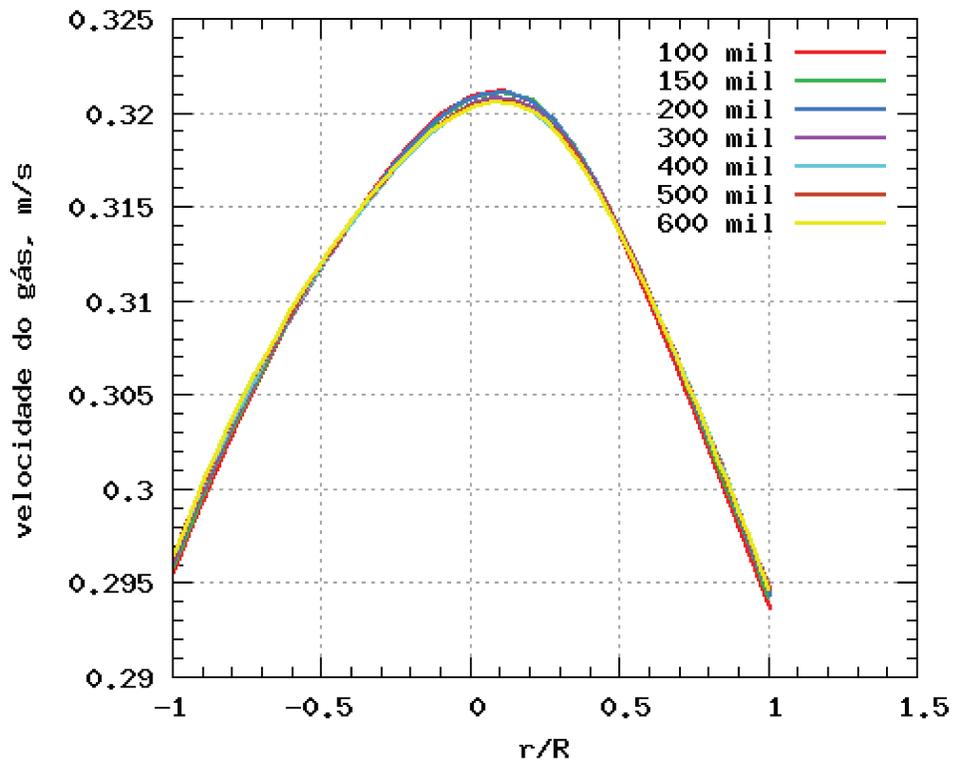


Figura 4.2: Velocidade radial do gás a 0,4 m.

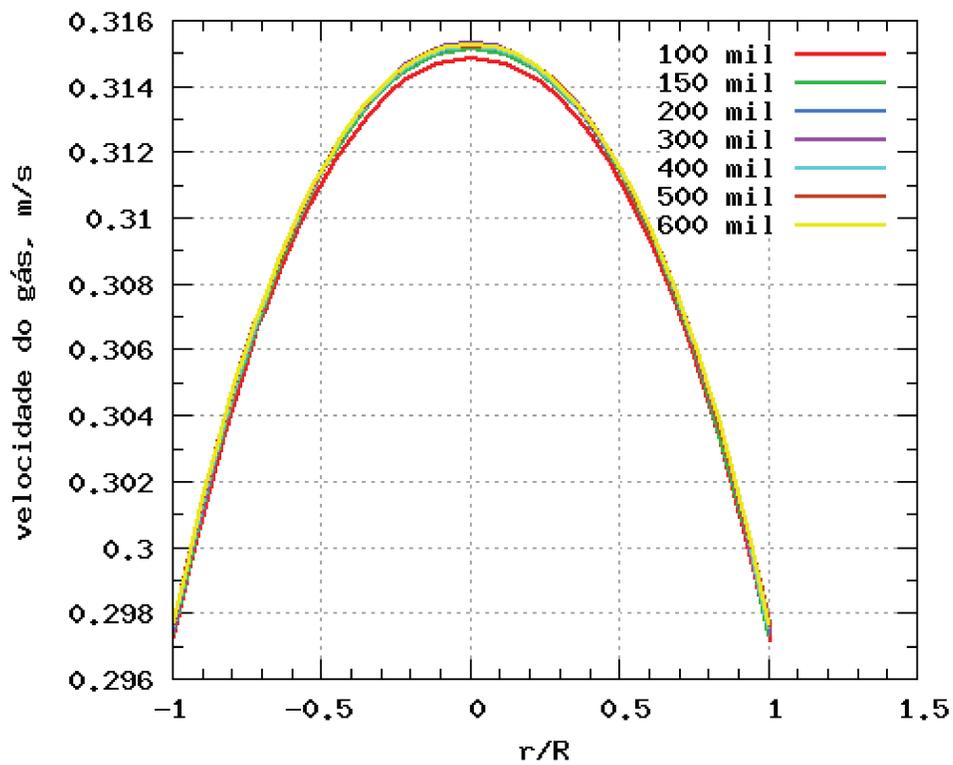


Figura 4.3: Velocidade radial do gás a 0,7 m.

malha no escoamento, sendo as diferenças pequenas quando comparadas com a Figura 4.5. Apenas na Figura 4.3, que corresponde à altura de 0,7m a partir da base, se nota uma pequena variação, para a malha com 100 mil elementos. Mas isso se deve a essa malha estar extremamente grosseira. Nas malhas mais refinadas esta variação é desprezível.

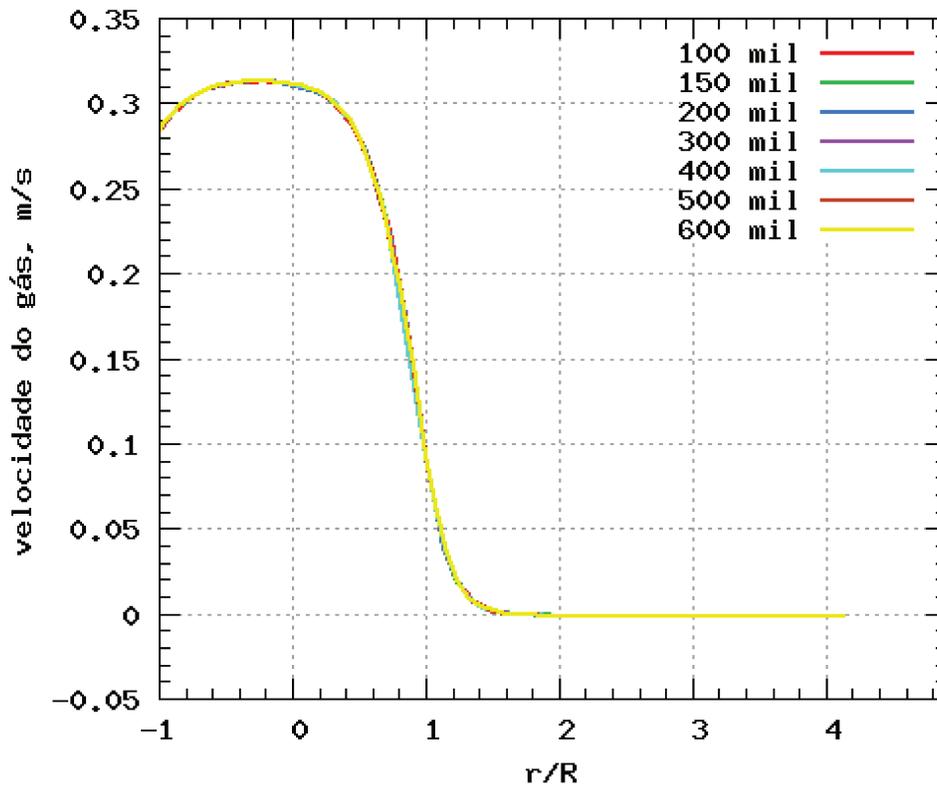


Figura 4.4: Velocidade radial do gás a altura da entrada secundária.

Outro ponto de importância é à altura da entrada secundária (Figura 4.4), uma vez ser uma zona de contato entre duas correntes. Nesta posição não se nota grande influência do refinamento da malha.

A saída também é uma posição de importância, uma vez que há um contração da área de escoamento. Assim é de se esperar que haja grandes gradientes nessa região, e o refinamento da malha é essencial para descrevê-los. Na Figura 4.5 pode-se notar essa dependência. Contudo, deve-se ter em mente que há um aumento na velocidade devido à diminuição da área de escoamento, portanto deve-se atentar para a variação da velocidade com o número de volumes de controle de maneira relativa, uma vez que um desvio de mesma intensidade a baixas velocidades pode ser imperceptível, entretanto a velocidades mais altas ele se torna mais discrepante em um gráfico. Assim um desvio que possa parecer grande visualmente em um gráfico, não apresenta grandes problemas.

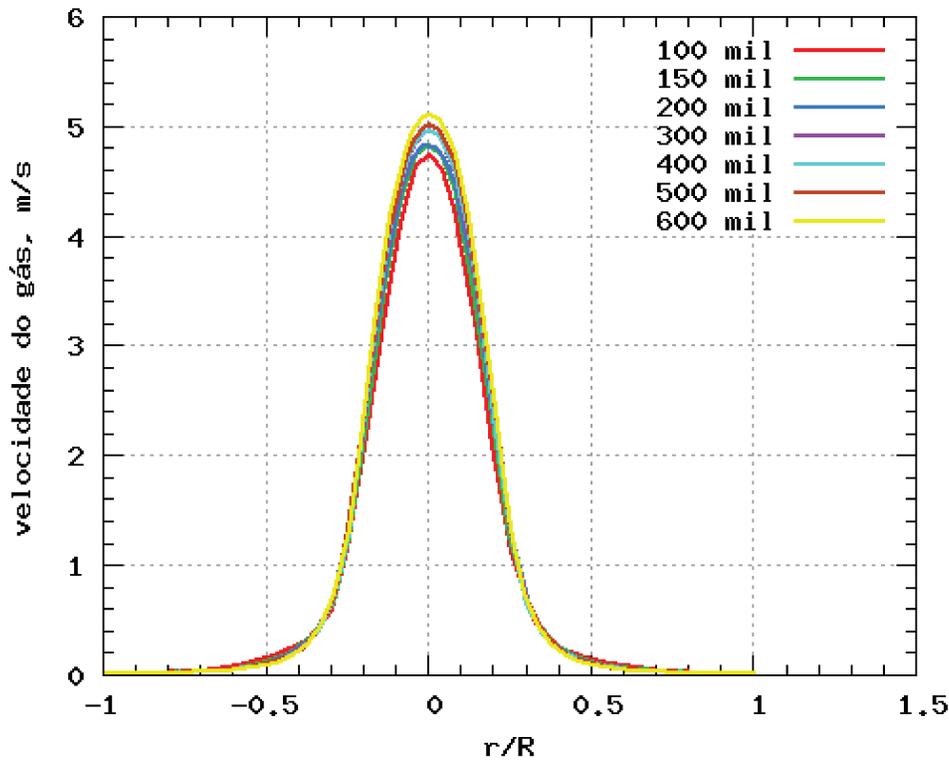


Figura 4.5: Velocidade radial do gás na saída.

Analisando os gráficos, foi constatado que a partir da malha de 300 mil não houve grandes desvios no comportamento do escoamento. Assim, optou-se por esta malha para as simulações envolvendo escoamento gás-sólido.

4.2 Simulações multifásicas

As simulações multifásicas realizadas no presente trabalho, foram baseadas no trabalho de SAMUELSBERG e HJERTAGER (1996). Como já citado anteriormente, a geometria construída foi baseada no aparato experimental utilizado naquele trabalho. E os resultados obtidos no presente trabalho foram validados utilizando-se os dados experimentais colhidos pelo mesmo. Os dados experimentais foram obtidos utilizando-se três velocidades superficiais do gás distintas. Essas são 0,36, 0,71 e 1,42 m/s. Os dados experimentais foram retirados às alturas, contadas a partir da entrada primária de gás, de 0,16, 0,32 e 0,48 m/s.

Como condição inicial, o duto foi preenchido com um leito de 0,05 m de altura e fração volumétrica igual a 0,61 da fase particulada. O particulado utilizado tem massa específica 1600 kg/m^3 e o diâmetro das partículas é de $60 \mu\text{m}$. O coeficiente de restituição utilizado para a fase particulada foi de 0,95. Todas as propriedades

físicas da fase particulada foram as mesma utilizadas por SAMUELSBERG e HJERTAGER (1996). A fase gasosa tem como propriedades físicas massa específica de $1,185 \text{ kg/m}^3$ e viscosidade de $1,831 \cdot 10^{-5} \text{ kg/m s}$. As condições de contorno estão na Tabela 4.3.

Tabela 4.3: Condições de contorno.

Entrada primária	gás	velocidade superficial, fração volumétrica 1
	particulado	não há entrada de particulado
Entrada secundária	gás	velocidade de 0,05 m/s, fração volumétrica 0,6
	particulado	vazão mássica da saída ¹ , fração volumétrica 0,4
Saída		opening, pressão atmosférica
Parede	gás	não deslizamento
	particulado	deslizamento livre

Foram utilizados dois modelos diferentes nas simulações multifásicas, para cada velocidade superficial, um utilizando a teoria cinética do escoamento granular, e outro sem a implementação desta. Com isso foi possível avaliar a influência desta na simulação do escoamento multifásico.

O modelo utilizado para a simulação sem a KTGF está no Capítulo 3. A conservação de massa é dada pelas Equações 3.1 e 3.2. As equações da quantidade de movimento são as Equações 3.4 a 3.16. A turbulência foi modelada utilizando o modelo k-epsilon, segundo as Equações 3.17 a 3.24. Por fim o arraste é dado pelas Equações 3.27, 3.29 e 3.33.

Para a simulação utilizando a KTGF, as equações utilizadas são as mesmas das anteriores, acrescentando-se equações para a determinação da viscosidade dinâmica, viscosidade de compressão e pressão dos sólidos, como explicado na Subseção 4.2.1.

4.2.1 Subrotinas para implementação da KTGF

A KTGF teve sua implementação neste trabalho através de subrotinas em Fortran externas ao código do CFX. A princípio, a KTGF está presente no código do CFX, entretanto, ao se utilizar o modelo já implementado no código comercial, não se apresentou convergência.

Por não haver convergência utilizando-se a KTGF presente no CFX, se constatou a necessidade de implementar subrotinas em Fortran para a utilização deste

¹Essa condição de contorno foi feita utilizando uma função onde todo o particulado que deixasse o leito pela saída retornasse pela entrada secundária.

modelo, sendo a modelagem realizada externamente ao código comercial.

Para a implementação da KTGF, foram criadas subrotinas em Fortran para o cálculo das variáveis como explicado a seguir:

Função de distribuição radial Esta subrotina emprega a Equação 3.41. A função de distribuição radial é a unidade quando o escoamento é muito diluído e se torna infinito quando o escoamento é tão denso que o movimento é impossível, no modelo utilizado para esta subrotina.

Temperatura Granular A Equação 3.36. A temperatura granular é relacionada com a energia cinética turbulenta do movimento da partícula.

Pressão por colisão e flutuação turbulenta Para esta subrotina foi utilizada a Equação 3.38. Esta inclui a pressão devido às colisões e flutuação turbulenta.

Pressão por colisão-fricção Em regimes de elevada fração volumétrica da fase particulada, contatos sucessivos contribuem para um regime de colisão-fricção e maior pressão. Para isso, esta subrotina utiliza a Equação 3.39.

Viscosidade de compressão Esta subrotina é baseada na Equação 3.43. A viscosidade de compressão é devida à colisão entre as partículas.

Viscosidade dinâmica A viscosidade dinâmica calculada nessa subrotina é dada pela Equação 3.46.

4.2.2 Resultados das simulações multifásicas

As primeiras simulações multifásicas foram realizadas utilizando-se uma malha com 300 mil volumes de controle. Julgou-se ser essa malha apropriada, com a análise feita no teste de malhas, uma vez que foi constatado que a partir desta malha não houve grandes desvios no comportamento do escoamento, como explicado na Seção 4.1.

As simulações realizadas foram transientes, e foi feita uma média temporal da velocidade da fase particulada até o tempo de 11 s, 8 s e 7 s, respectivamente para as velocidades superficiais de gás de 0,36 m/s, 0,71 m/s e 1,42 m/s, com passo de tempo de 10^{-3} s. Optou-se por um maior tempo de simulação para os casos de menor velocidade, uma vez que o desenvolvimento do escoamento se dá de forma mais lenta a baixas velocidades, sendo que o desenvolvimento aqui descrito é quando a vazão mássica na saída se torna praticamente constante. Os

resultados da simulações foram retirados das seções transversais a 0,16, 0,32 e 0,48 m, contando-se a partir da entrada primária de gás.

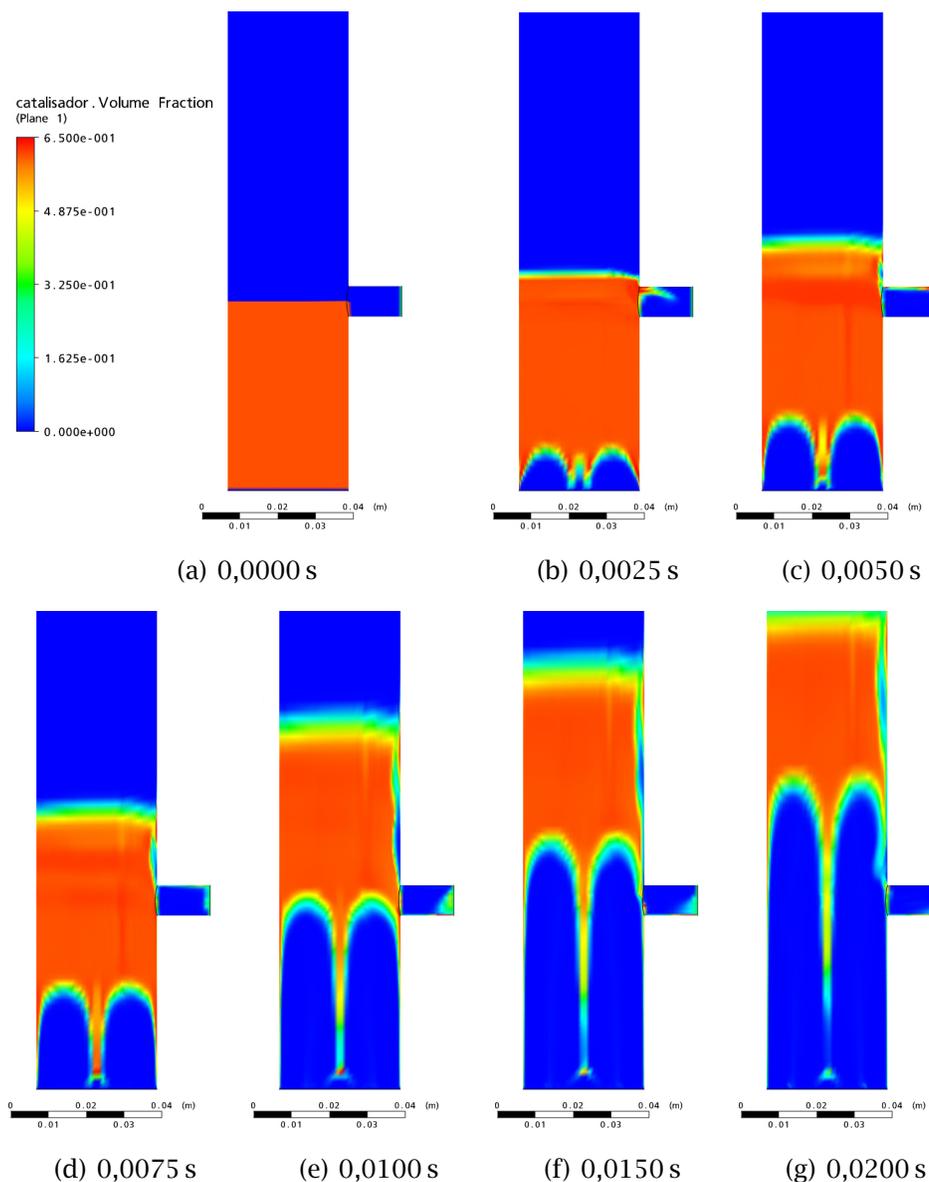


Figura 4.6: Expansão do leito em seus momentos iniciais, com velocidade superficial do gás de 1,42 m/s

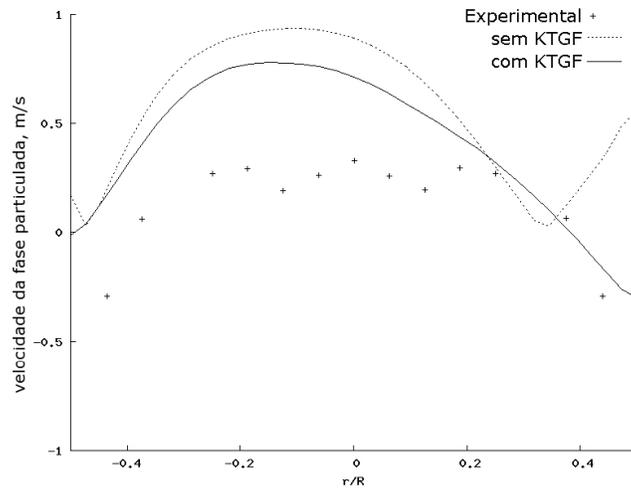
A expansão do leito em seus momentos iniciais pode ser vista na Figura 4.6. Ali se pode ver desde o tempo inicial até um tempo de 0,02 s. Por este momentos iniciais, nota-se que o leito sofre uma rápida expansão.

Durante essa expansão do leito, utilizou-se passos de tempo da ordem de 10^{-5} s, aumentando-se gradativamente até 10^{-4} s. Quando se observou que o regime já havia atingido um certo grau de desenvolvimento, observado pelo mo-

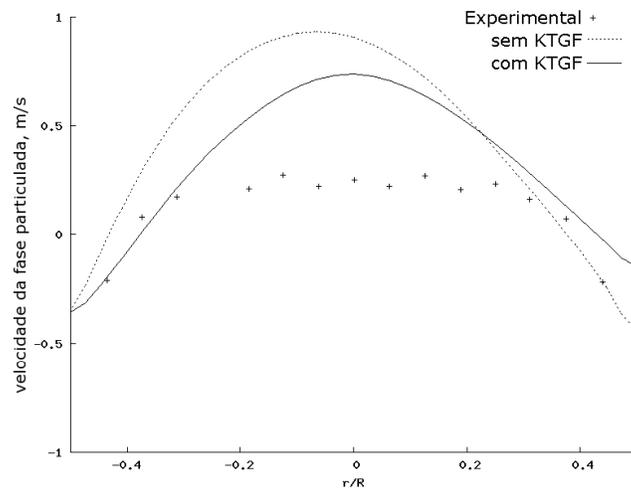
nitoramento da vazão mássica de particulado na saída, até que essa atingisse um valor médio praticamente constante, o passo de tempo foi aumentado, mais uma vez gradualmente, até 10^{-3} s. Isso se deu por volta dos 2 s.

Os resultados das simulações podem ser vistos nas Figuras 4.7, 4.8 e 4.9. Ali tem-se os resultados obtidos com os modelos sem, e com, a KTGF para a velocidade da fase particulada. Estes foram comparados com os dados experimentais de SAMUELSBERG e HJERTAGER (1996). Os gráficos daquelas figuras mostram o perfil de velocidade da fase particulada em função do raio do duto.

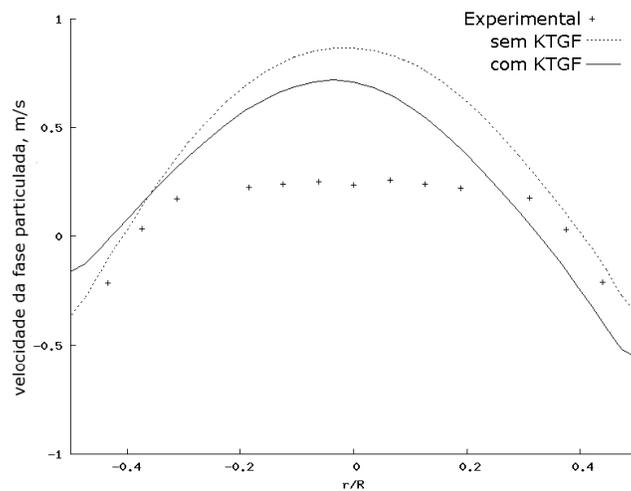
Nas Figuras 4.10 a 4.12 pode-se ver os perfis de velocidade, em cortes transversais, da fase particulada a diferentes alturas. Os perfis de fração volumétrica são vistos nas Figuras 4.13 a 4.15. Todos os casos são médias temporais, para cada variável.



(a) 0,16 m

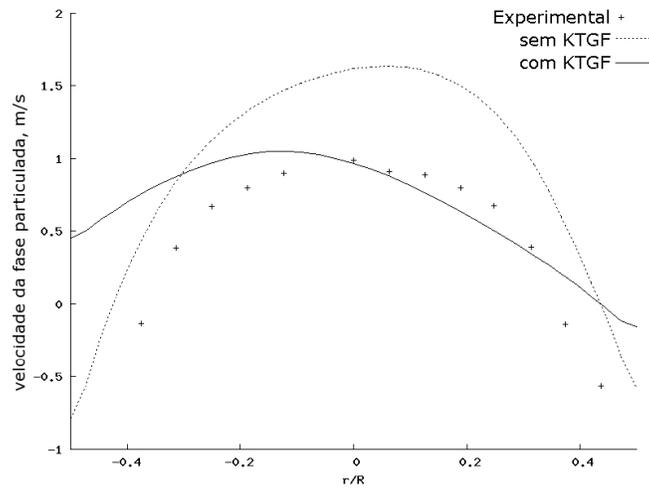


(b) 0,32 m

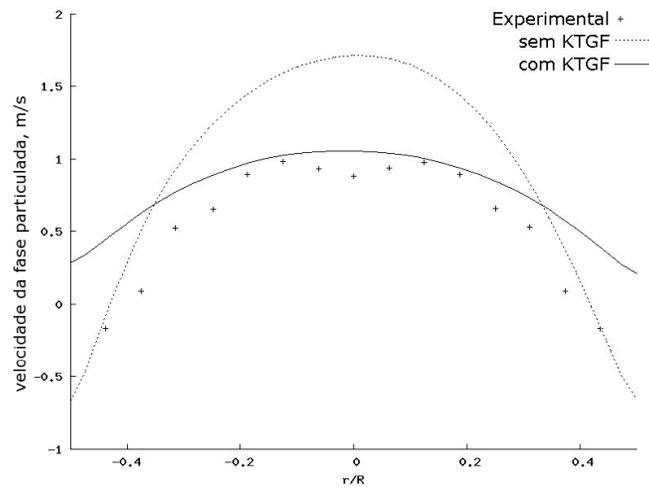


(c) 0,48 m

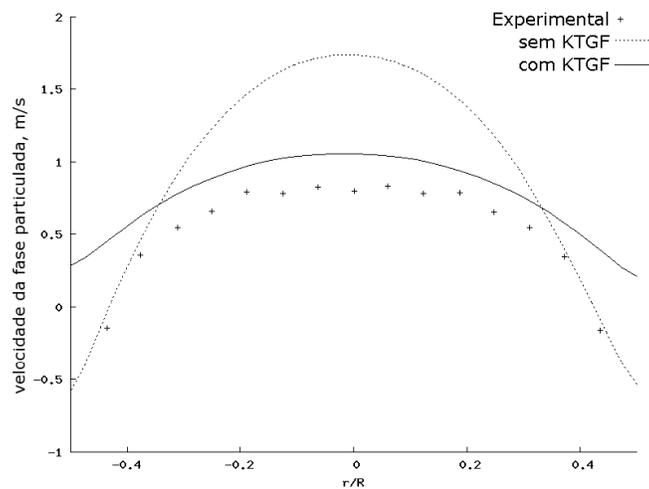
Figura 4.7: Perfis de velocidade da fase particulada, com velocidade superficial do gás de 0,36 m/s, tempo de simulação de 11 s



(a) 0,16 m

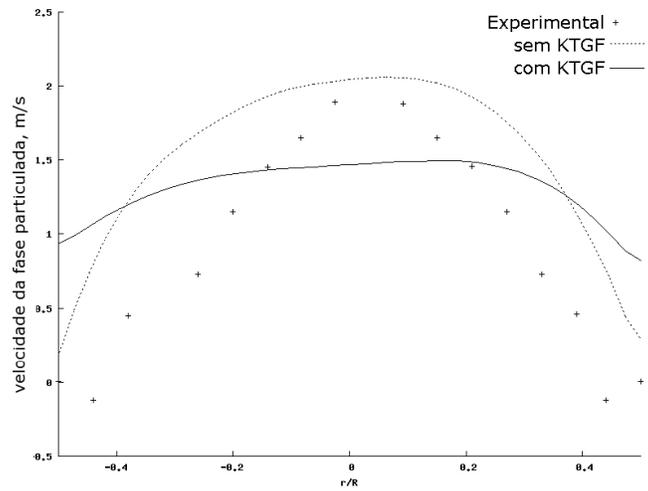


(b) 0,32 m

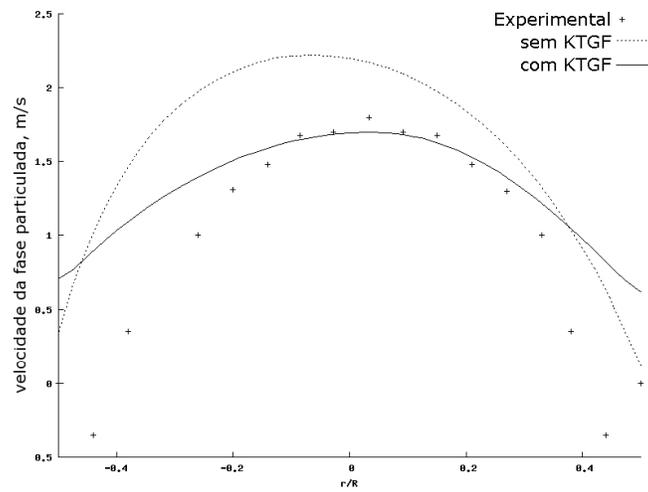


(c) 0,48 m

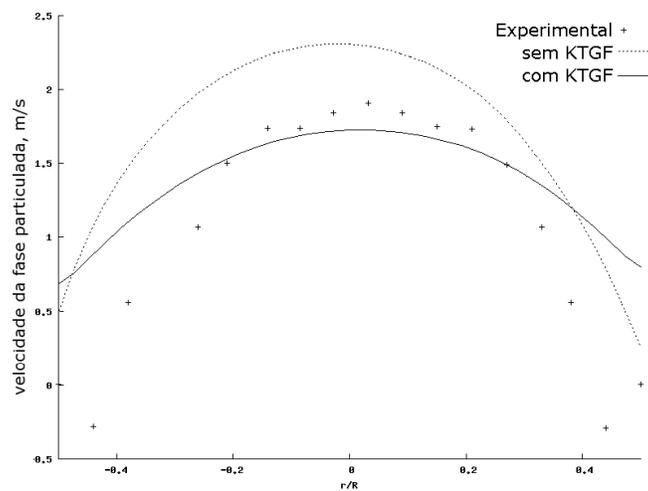
Figura 4.8: Perfis de velocidade da fase particulada, com velocidade superficial do gás de 0,71 m/s, tempo de simulação de 8 s



(a) 0,16 m



(b) 0,32 m



(c) 0,48 m

Figura 4.9: Perfis de velocidade da fase particulada, com velocidade superficial do gás de 1,42 m/s, tempo de simulação de 7 s

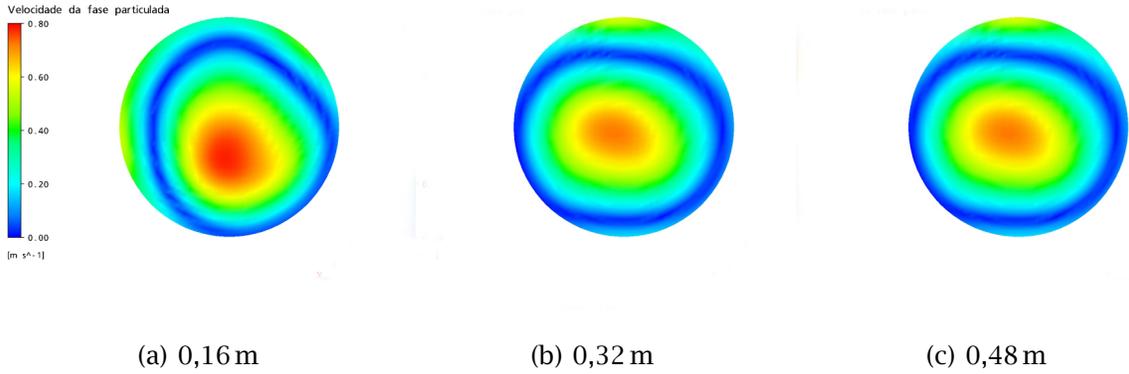


Figura 4.10: Velocidade da fase particulada, velocidade do gás de 0,36 m/s

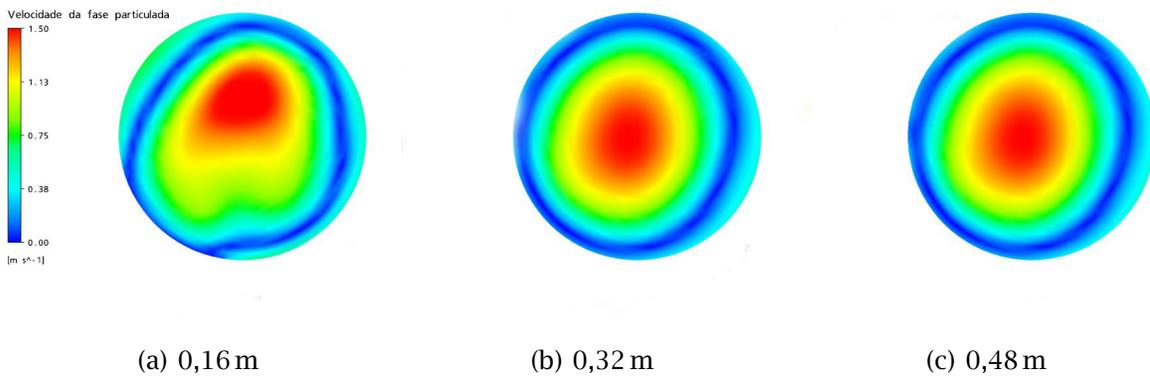


Figura 4.11: Velocidade da fase particulada, velocidade do gás de 0,71 m/s

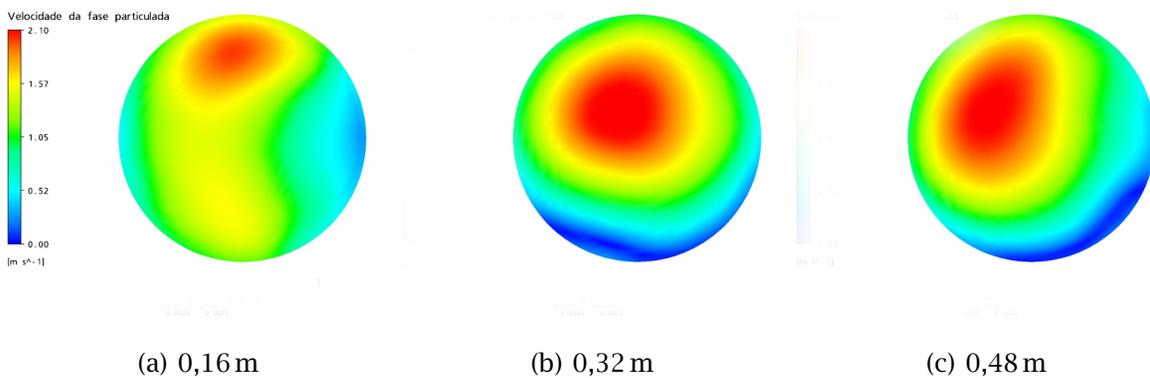


Figura 4.12: Velocidade da fase particulada, velocidade do gás de 1,42 m/s

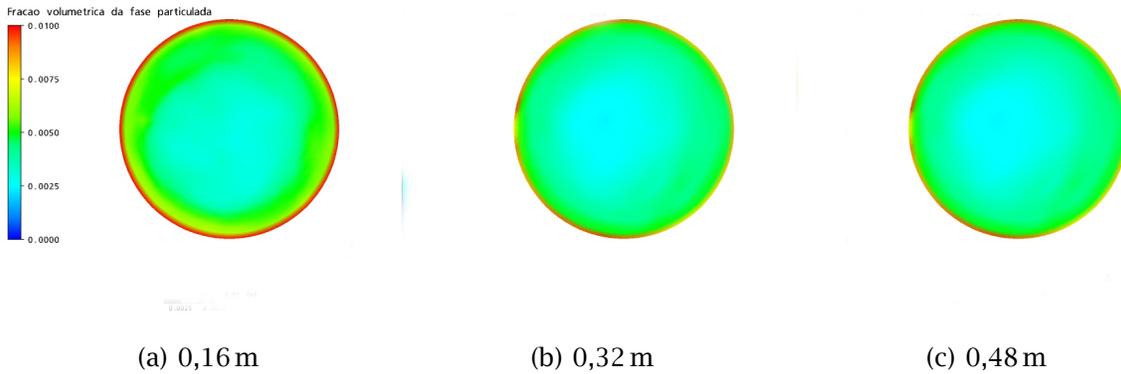


Figura 4.13: Fração volumétrica da fase particulada, velocidade do gás de 0,36 m/s

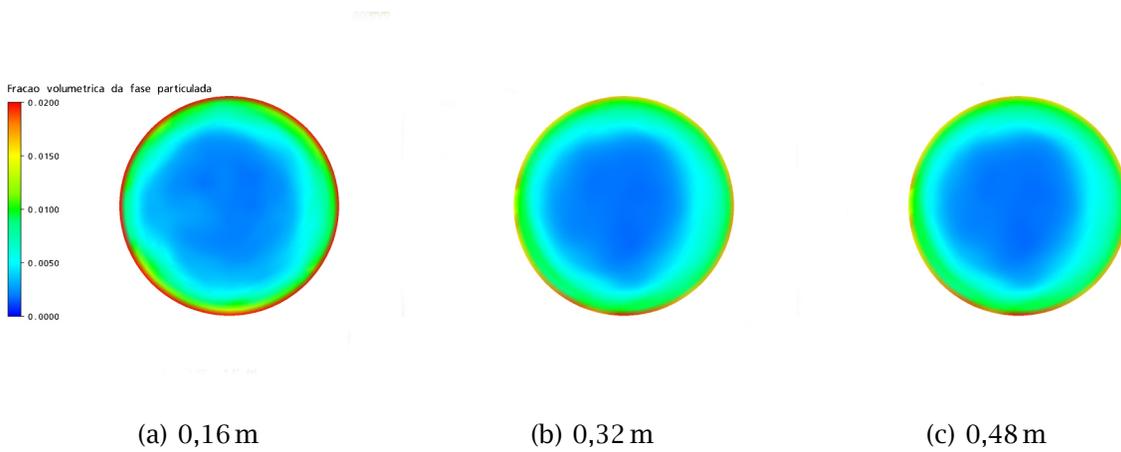


Figura 4.14: Fração volumétrica da fase particulada, velocidade do gás de 0,71 m/s

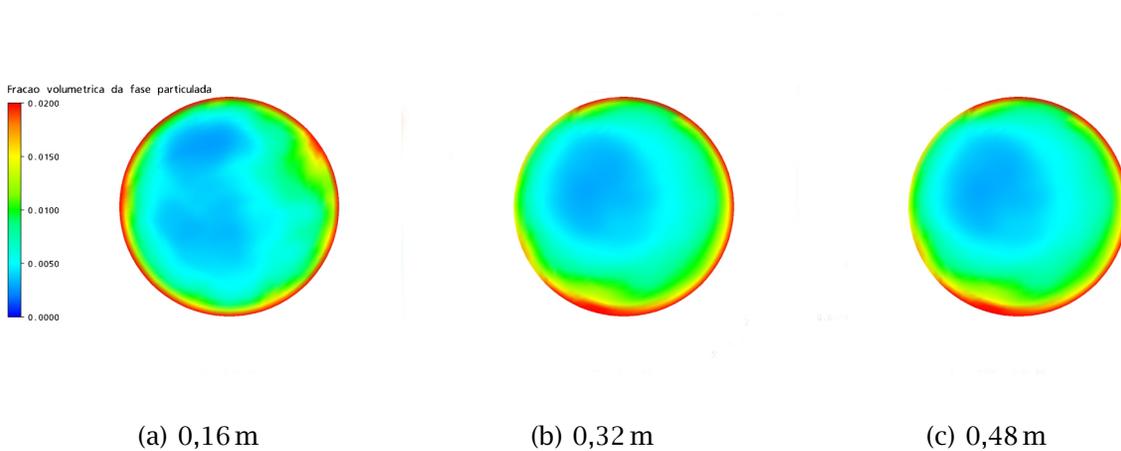


Figura 4.15: Fração volumétrica da fase particulada, velocidade do gás de 1,42 m/s

Um primeiro ponto a ser discutido pode ser sobre os dados experimentais. Como já explicado anteriormente, esse foram retirados do trabalho de SAMUELSBERG e HJERTAGER (1996). Pode-se observar das Figuras 4.7, 4.8 e 4.9 que, em velocidades superficiais mais baixas, os pontos experimentais tendem a ficar mais achatados na região central. Isso fica bem evidente comparando-se as Figuras 4.7 e 4.9, principalmente.

Pode-se observar também, analisando-se estes pontos experimentais, que na Figura 4.7 a velocidade máxima da fase particulada é menor que a velocidade superficial do gás, sendo a velocidade superficial média do gás igual a 0,36 m/s e a velocidade máxima da fase particulada 0,31 m/s. Já nas Figuras 4.8 e 4.9, a velocidade máxima da fase particulada é maior que a velocidade superficial da fase gasosa, sendo respectivamente para a velocidade superficial média da fase gás 0,71 m/s e 1,42 m/s e a velocidade máxima da fase particulada 0,99 m/s e 1,90 m/s.

Para a fase gás, realmente seria esperada uma velocidade maior na região central, devido ao princípio da aderência na parede. Esse perfil de escoamento já é de longa data conhecido pela literatura. Assim, uma maior velocidade na região central da fase gás, aumentaria o arraste deste sobre a fase particulada, esperando-se assim também uma velocidade máxima maior, como visto nas Figuras 4.7 e 4.9. Essa diferença de comportamento entre velocidades superficiais mais altas e mais baixas, poderia ser explicada devido a uma maior interação entre as partículas em velocidades mais baixas, ou mesmo erros na medida experimental do trabalho utilizado como base.

Tendo-se discutido os pontos experimentais, e seu comportamento, passemos agora a uma discussão acerca das simulações realizadas. Como já explanado, foram realizadas, para cada caso distinto de velocidades superficiais, simulações sem e com o modelo da KTGF. Os resultados de ambas as simulações foram esboçados no mesmo gráfico, a fim de facilitar a comparação entre os casos estudados. Convencionou-se utilizar uma linha tracejada para as simulações que não utilizavam o modelo da KTGF e para as que utilizavam a KTGF, utilizou-se a linha contínua.

Uma primeira análise pode ser feita com as Figuras 4.7(a), 4.8(a) e 4.9(a). Estas mostram os resultados à altura de 0,16 m. As simulações ali tendem a um perfil com um desvio da simetria, encontrada nos pontos experimentais. Pode-se encontrar uma explicação para este desvio no fato de que a região em questão apresenta grandes perturbações, devido à proximidade com a entrada secundária, por onde

os sólidos que deixam o leito retornam ao mesmo. Apesar de uma velocidade baixa da fase gás, cerca de 0,05 m/s, necessária apenas para haver um arraste da fase particulada até o leito, essa já é suficiente para introduzir perturbações ao sistema. Outra explicação seria a necessidade de um maior refino da malha na região de entrada, a fim de captar melhor estas perturbações. Ou ainda o modelo não é complexo o suficiente para captar os fenômenos ocorridos ali.

Nas Figuras 4.7(b), 4.8(b), 4.9(b), que mostra os resultados à altura de 0,32 m e 4.7(c), 4.8(c) e 4.9(c), a 0,48 m, já se observa uma maior simetria da curva obtida pelas simulações, provavelmente conseqüência da distância maior da entrada secundária de gás.

Na Figura 4.7 estão os resultados para as alturas 0,16 m, 0,32 m e 0,48 m respectivamente, à velocidade de 0,36 m/s. Nestes gráficos, as simulações apresentam uma considerável discrepância com os dados experimentais, para ambos os casos, isto é, sem e com a KTGF. Prováveis motivos já foram discutidos anteriormente nesta mesma Seção, ao serem analisados os dados experimentais. Mesmo os dados experimentais, a esta velocidade, apresentam diferença do comportamento observado nas outras velocidades superficiais superiores. As possíveis causas dessas diferenças foram discutidas anteriormente.

As simulações que obtiveram maior êxito na aproximação dos dados experimentais foram aquelas com velocidade superficial de 0,71 m/s e 1,42 m/s. Estas estão nas Figuras 4.8 e 4.9. As simulações que utilizaram a KTGF apresentaram melhores resultados na região central do duto, em detrimento da região mais próxima à parede. Mais adiante será feita uma discussão acerca disso, e quais seriam algumas das possíveis soluções.

Nas Figuras 4.8(b), 4.8(c), 4.9(b) e 4.9(c), estão os melhores resultados obtidos pelas simulações numéricas. Ali, as simulações utilizando-se o modelo da KTGF tiveram sucesso nas predições do comportamento do escoamento, uma vez que comparando-se a curva obtida por meio das simulações utilizando a KTGF com os dados experimentais observa-se que não houve grandes desvios para este caso. Inclusive, como no caso das Figuras 4.8(b) e 4.9(b), a curva se sobrepõe aos dados experimentais.

Outrossim, comparando-se a simulação envolvendo a KTGF (representada por uma linha contínua), e a simulação sem a utilização desta (linha tracejada), observa-se que a primeira apresentou maior sucesso na predição do comportamento do escoamento, em especial na região central do leito fluidizado. A segunda apresentou grandes desvios com relação aos pontos experimentais nesta região do leito,

se comparada com a primeira.

Na região próxima à parede, observa-se um desvio dos resultados das simulações envolvendo a KTGF. Ali, as simulações que não utilizaram este modelo apresentaram melhores resultados. Como se pode observar, a curva contínua (simulação com a KTGF) na região da parede tende a se desviar do comportamento real do escoamento, apesar de, na região central a simulação apresentar bons resultados. Uma explicação para este comportamento reside no fato de que a condição de deslizamento livre para a fase particulada não é completamente correta para este caso, bem como não o é a condição de não-deslizamento na parede. O correto seria a utilização de uma função de parede intermediária a estas duas.

Segundo ALVES (1998), para o modelo invíscido e para o newtoniano com viscosidade constante para a fase particulada, assume-se a condição de deslizamento livre, e para o modelo da KTGF a função de parede pode ser obtida de um balanço para a taxa de transferência de tensão viscosa para a parede pelas partículas que colidem com esta. Do ponto de vista numérico, para malhas infinitamente refinadas, esta modificação não traz benefícios, porém, para os demais tipos de malha essa abordagem traz um valor melhor para aquele ponto.

Dos perfis de velocidade da fase particulada, feitos a partir dos cortes das seções transversais a diferentes velocidades (Figuras 4.10 a 4.12), pode-se notar que a velocidade da fase particulada tende a ser maior no centro do duto. Esse resultado já era esperado, por ser bastante documentado na literatura que para um gás, a velocidade no centro de um duto é maior do que na região mais próxima da parede. Uma vez que a fase particulada sofre um arraste da fase gasosa, supunha-se comportamento semelhante.

Nas Figuras 4.13 a 4.15 encontramos os perfis de fração volumétrica, para os mesmos cortes utilizados para os perfis de velocidade da fase particulada. Os perfis ali encontrados estão de acordo com o comportamento também documentado na literatura, conhecido como regime de escoamento “*core-annular*”, como encontrado em MILLER e GIDASPOW (1992). Tal regime de escoamento consiste de um centro mais diluído e uma região anular, próxima à parede, mais densa.

Nas Figuras 4.16 a 4.24 encontramos os gráficos das frações volumétricas, temperaturas granulares e viscosidades dinâmicas da fase particulada, a diferentes velocidades e alturas. Nas Figuras 4.16 a 4.18 encontram-se os gráficos para as alturas de 16, 32 e 48 cm respectivamente, para a velocidade de 0,36 m/s. Para a velocidade de 0,71 m/s, nas mesmas alturas, os gráficos estão nas Figuras 4.19 a 4.21. Por fim temos os gráficos das Figuras 4.22 a 4.24, para a velocidade de

1,42 m/s.

Os gráficos encontrados nas Figuras 4.16 a 4.24 não são médias temporais, e sim valores instantâneos de fração volumétrica, temperatura granular e viscosidade dinâmica da fase particulada. A média temporal era importante para a validação com os dados experimentais, e só se possuía os dados experimentais para a velocidade da fase particulada e para a fração volumétrica.

Observa-se pelos gráficos que as partículas tendem a se concentrar em regiões de maiores temperaturas granulares. Também observa-se que a viscosidade dinâmica da fase particulada também atinge maiores valores onde há maior concentração de partículas, de modo que estas, por estarem muito próximas, têm a sua mobilidade restringida.

Tendo-se realizado as simulações com a função de parede com condição de deslizamento livre, resolveu-se testar outro caso, o de não-deslizamento para a fase particulada.

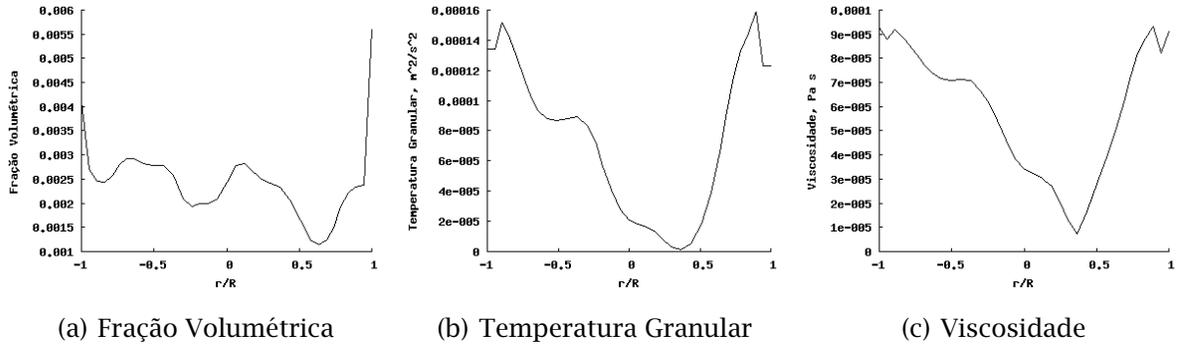


Figura 4.16: Perfis de (a) fração volumétrica, (b) temperatura granular e (c) viscosidade dinâmica para fase particulada a 0,16 m, a 0,36 m/s

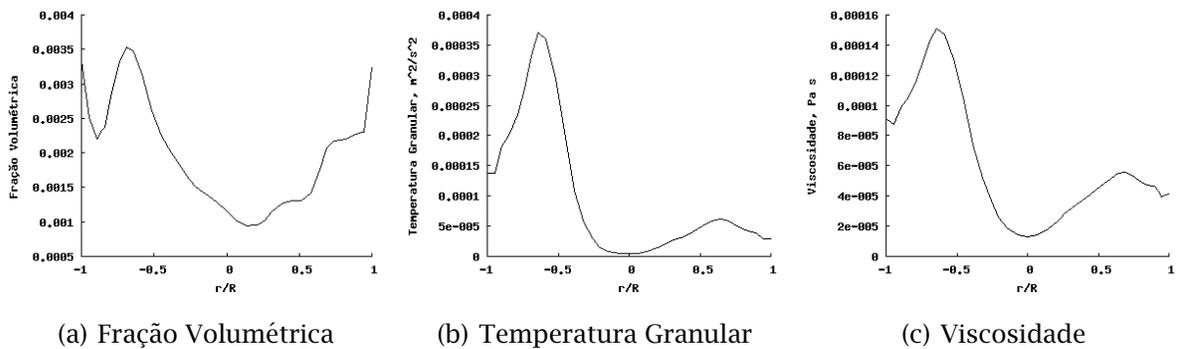


Figura 4.17: Perfis de (a) fração volumétrica, (b) temperatura granular e (c) viscosidade dinâmica para fase particulada a 0,32 m, a 0,36 m/s

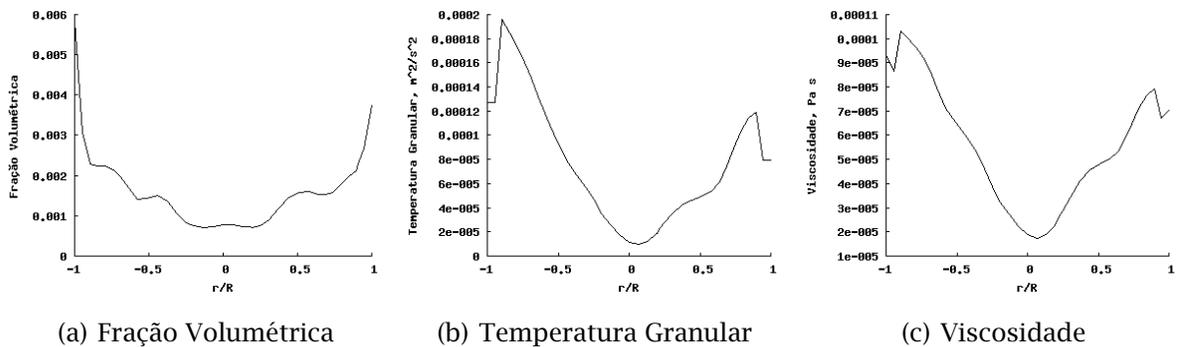


Figura 4.18: Perfis de (a) fração volumétrica, (b) temperatura granular e (c) viscosidade dinâmica para fase particulada a 0,48 m, a 0,36 m/s

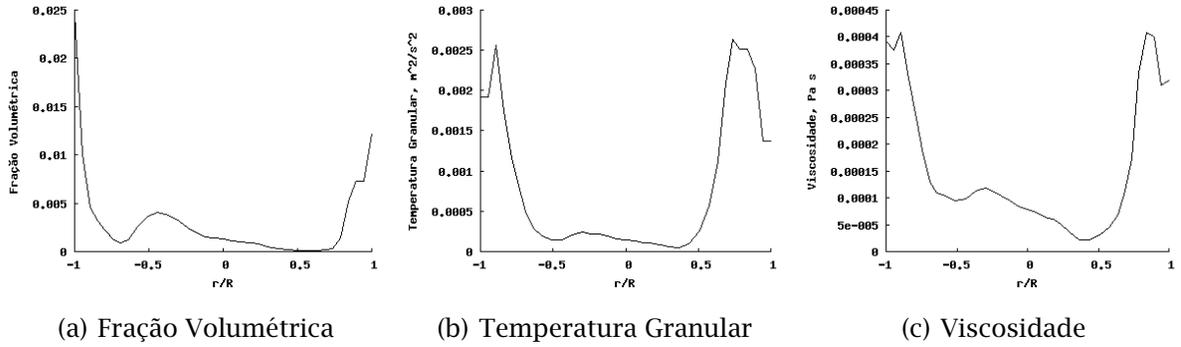


Figura 4.19: Perfis de (a) fração volumétrica, (b) temperatura granular e (c) viscosidade dinâmica para fase particulada a 0,16 m, a 0,71 m/s

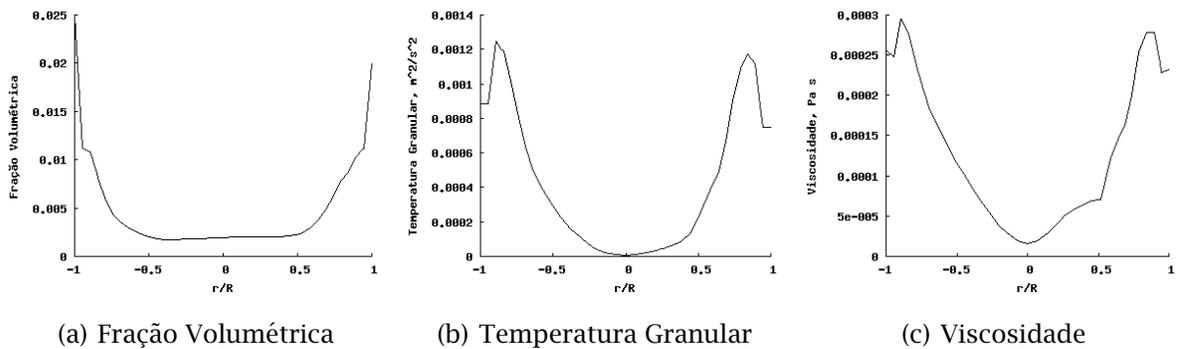


Figura 4.20: Perfis de (a) fração volumétrica, (b) temperatura granular e (c) viscosidade dinâmica para fase particulada a 0,32 m, a 0,71 m/s

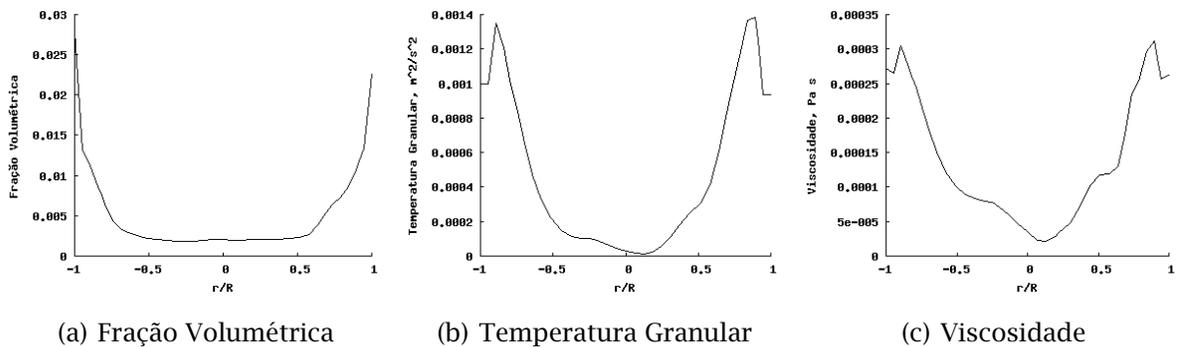


Figura 4.21: Perfis de (a) fração volumétrica, (b) temperatura granular e (c) viscosidade dinâmica para fase particulada a 0,48 m, a 0,71 m/s

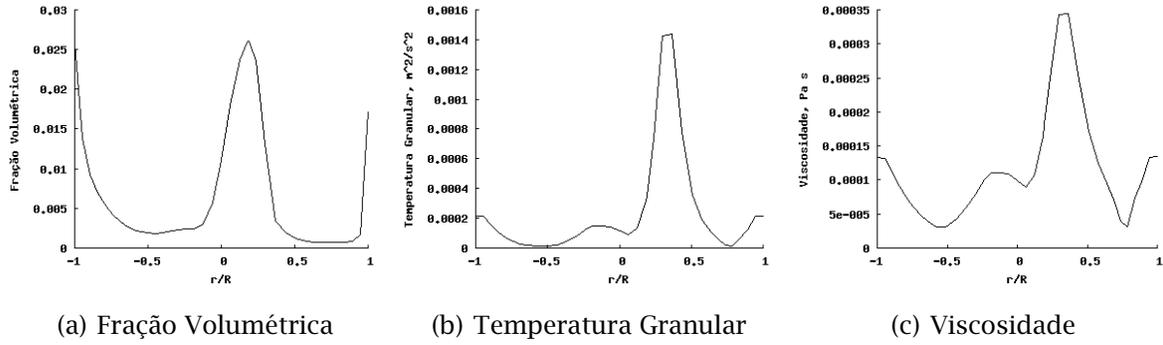


Figura 4.22: Perfis de (a) fração volumétrica, (b) temperatura granular e (c) viscosidade dinâmica para fase particulada a 0,16 m, a 1,42 m/s

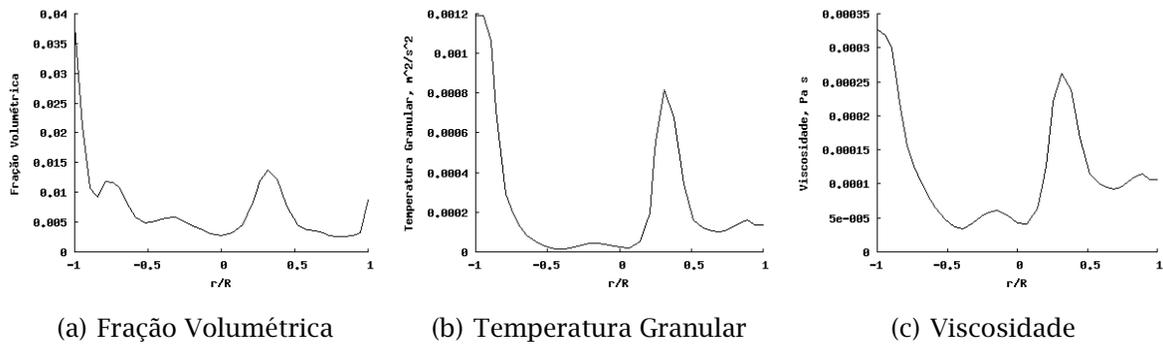


Figura 4.23: Perfis de (a) fração volumétrica, (b) temperatura granular e (c) viscosidade dinâmica para fase particulada a 0,32 m, a 1,42 m/s

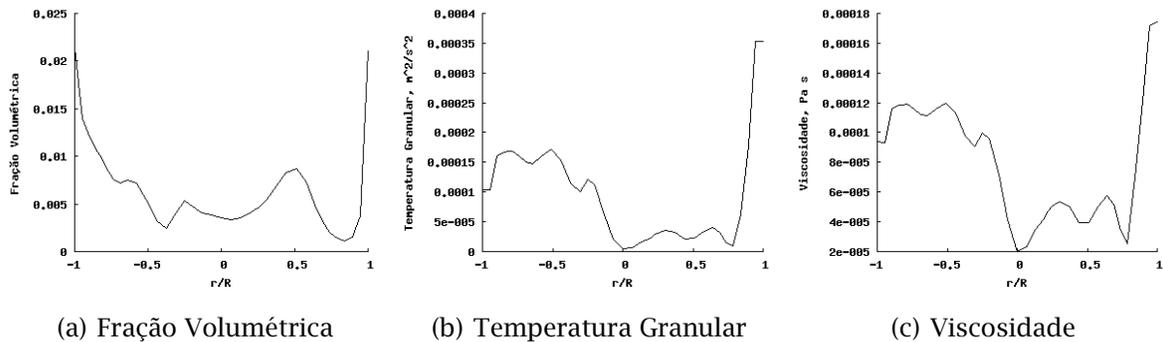


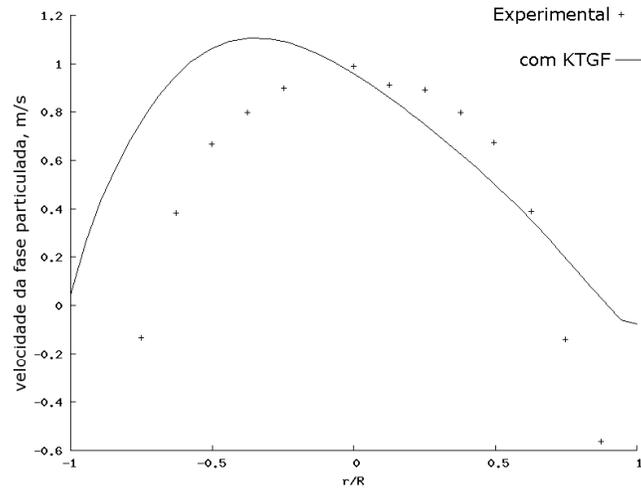
Figura 4.24: Perfis de (a) fração volumétrica, (b) temperatura granular e (c) viscosidade dinâmica para fase particulada a 0,48 m, a 1,42 m/s

Nas Figuras 4.25 e 4.26 estão os gráficos para as simulações utilizando a função de parede de não-deslizamento, para a velocidade de 0,71 m/s e 1,42 m/s, respectivamente.

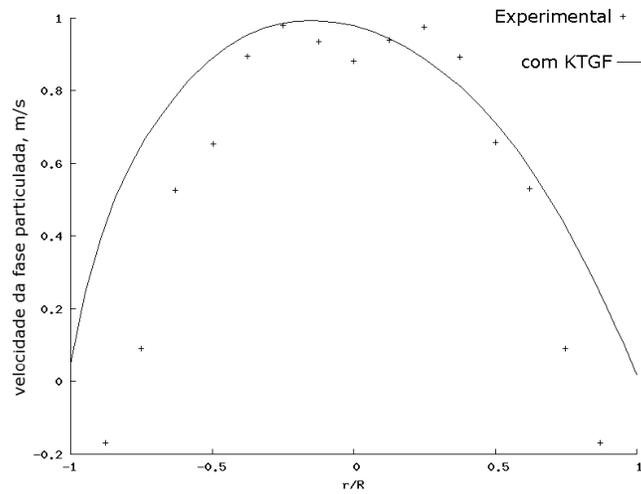
Como já explanado anteriormente a condição de deslizamento livre não é completamente correta, bem como não o é a de não-deslizamento. O correto é uma função de parede intermediária, que pode ser obtida de um balanço para a taxa de transferência de tensão viscosa para a parede pelas partículas que colidem com esta.

Observa-se ali que, em especial na região mais próxima à parede, a curva simulada obtida com a condição de não-deslizamento apresenta um desvio bem menor dos dados experimentais do que observado na condição de deslizamento livre, das Figuras 4.8 e 4.9. Conclui-se com isso que a velocidade na parede é um ponto importante na modelagem da KTGF.

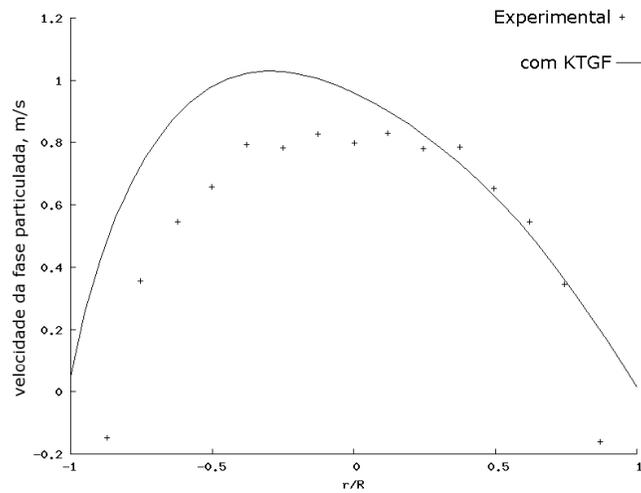
Isso é um forte indício de que a utilização de uma função de parede mais adequada se faz necessário, e a solução apontada por ALVES (1998), como já discutido anteriormente, pode ser implementada. Espera-se que a implementação de uma função de parede mais adequada produza melhores resultados que a utilização da condição de deslizamento livre, ou mesmo de não-deslizamento. Algo que esperava-se, em todos os casos seria um movimento descendente de partículas, presente do regime de escoamento *core-annular*.



(a) 0,16 m

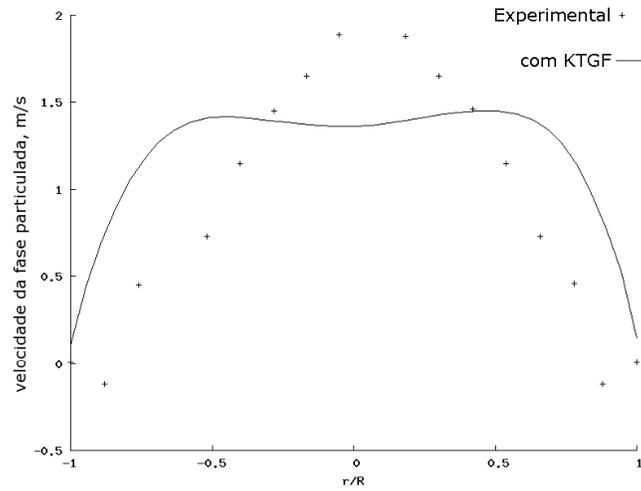


(b) 0,32 m

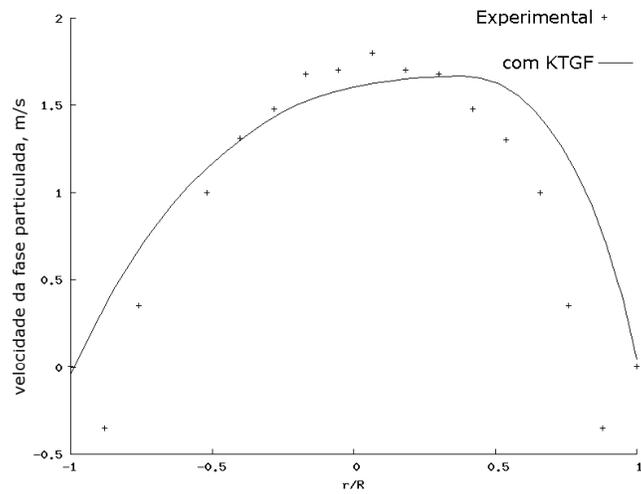


(c) 0,48 m

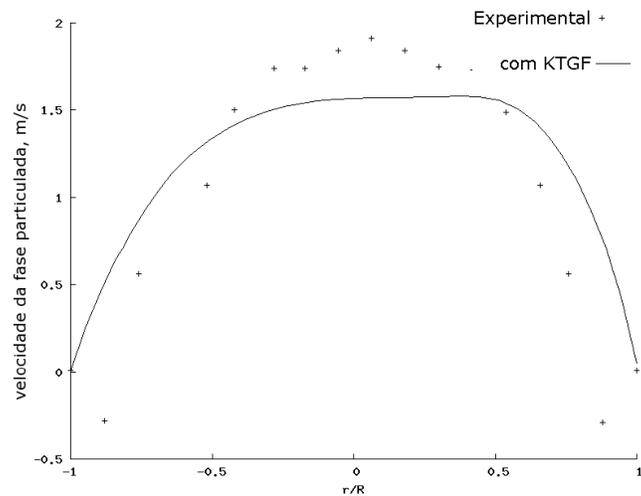
Figura 4.25: Perfis de velocidade da fase particulada, com velocidade superficial do gás de 0,71 m/s, tempo de simulação de 12 s, utilizando função de parede *no slip*



(a) 0,16 m



(b) 0,32 m



(c) 0,48 m

Figura 4.26: Perfis de velocidade da fase particulada, com velocidade superficial do gás de 1,42 m/s, tempo de simulação de 12 s, utilizando função de parede *no slip*

Capítulo 5

Conclusões e Sugestões

Neste capítulo são apresentadas as conclusões e apontadas as sugestões.

O objetivo deste trabalho foi avaliar a influência da teoria cinética do escoamento granular na predição do comportamento do escoamento de um leito fluidizado.

Os resultados obtidos com as simulações apontam que, utilizando-se a função de parede na condição de deslizamento livre, na região mais ao centro do duto obteve-se bons resultados, em detrimento da região vizinha à parede, onde os resultados não se mostraram tão razoáveis.

Testando-se uma função de parede diferente, no caso com a condição de não-deslizamento, notou-se que houve uma melhora nesta região mais próxima à parede. Assim pode-se argumentar que uma função de parede mais apropriada se faz necessário.

Assim sugere-se para um prosseguimento do trabalho a inserção de uma função de parede mais apropriada. No caso, uma possível solução seria utilizar a função de parede sugerida por ALVES (1998). Para a implementação de uma nova função de parede no software *ANSYS CFX 11*, uma rota sugerida é a utilização de subrotinas em Fortran.

Referências Bibliográficas

ALVES, J. J. N. *Modelagem fenomenológica e simulação bidimensional da fluidodinâmica de reatores de leito fluidizado circulante*. Tese de Doutorado — UNICAMP, Campinas, 1998.

ALVES, J. J. N.; MORI, M. Fluid dynamic modelling and simulation of circulating fluidized bed reactors: analysis of particle phase stress model. *Computers Chemical Engineering*, v. 22, p. 763 - 766, 1998.

ANDERSON, T. B.; JACKSON, R. A fluid mechanical description of fluidized beds. *Industrial and Engineering Chemistry*, v. 6, n. 4, p. 527-539, 1967.

ANSYS. *Icem CFD Manual*. [S.l.], 2005.

ANSYS. *CFX 10: Reference Guide*. [S.l.], 2006.

ARASTOPOUR, H.; GIDASPOW, D. Vertical pneumatic conveying using four hydrodynamic models. *Industrial and Chemical Engineering Fundamentals*, v. 18, n. 2, p. 123-130, 1979.

BASTOS, J. C. S. C. *Simulação do escoamento gás-sólido em um duto cilíndrico vertical em leito fluidizado rápido aplicando a técnica CFD*. Dissertação de mestrado — UNICAMP, Campinas, 2005.

BASTOS, J. C. S. C.; ROSA, L. M.; MORI, 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.

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

CHAPMAN, S.; COWLING, T. G. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Londres: Cambridge University Press, 1970.

- DASGUPTA, S.; JACKSON, R.; SUNDARESAN, S. Turbulent gas-particle flow in vertical risers. *AIChE Journal*, v. 40, n. 2, p. 215 – 228, 1994.
- DAVIDSON, J. F.; HARRISSON, D.; CARVALHO, J. R. F. G. D. On the liquidlike behavior of fluidized beds. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 9, p. 55–86, 1977.
- DAVIDSON, J. R. Symposium on fluidization. *Transaction Institution of Chemical Engineering*, v. 39, p. 230–232, 1961.
- DECKER, R. K. *Modelagem e simulação tridimensional transiente do escoamento gás-sólido*. Dissertação de Mestrado — UNICAMP, Campinas, 2003.
- DING, J.; GIDASPOW, D. A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow. *AIChE J.*, v. 36, n. 4, p. 523–538, 1990.
- ENWALD, H.; PEIRANO, E.; ALMSTEDT, A. E. Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 22, p. 21 – 66, 1996.
- GELDART, D. Types of gas fluidization. *Powder Technology*, v. 7, p. 55–86, 1973.
- GELDART, D. *Gas Fluidization Technology*. Chichester: J. Wiley, 1986.
- GIBILARO, L. G. *Fluidization Dynamics*. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2001.
- GIDASPOW, D. Hydrodynamics of fluidization and heat transfer: supercomputer modeling. *Applied Mechanics Reviews*, v. 39, n. 1, p. 10 – 22, 1986.
- GIDASPOW, D. *Multiphase flow and fluidization*. London: Academic Press, 1994.
- GIDASPOW, D.; ETTEHADIEH, B.; BOUILLARD, J. Hydrodynamics of fluidization: bubbles and gas compositions in the u-gas process. *AIChE Symposium Series*, v. 80, n. 241, p. 57 –64, 1984.
- GIDASPOW, D.; JUNG, J.; SINGH, R. K. Hydrodynamics of fluidization using kinetic theory: an emergin paradigm 2002 flour-daniel lecture. *Powder Technology*, v. 148, p. 123–141, 2004.
- GIDASPOW, G.; ETTEHADIEH, B. Fluidization in two-dimensional beds with a jet. 2. hydrodynamic modeling. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, v. 22, p. 193 – 201, 1983.
- GOLDSCHMIDT, M. J. V.; BEETSTRA, R.; KUIPERS, J. A. M. Hydrodynamic modelling of dense gas-fluidised beds: comparison and validation of 3d discrete particle and continuum models. *Powder Technology*, v. 142, p. 23–47, 2004.

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

HRENYA, C. M.; SINCLAIR, J. L. Effects of particle-phase turbulence in gas-solids flows. *AIChE*, v. 43, p. 853 - 869, 1997.

HUILIN, L.; GIDASPOW, D. Hydrodynamics of binary fluidization in a riser: Cfd simulation using two granular temperatures. *Chemical Engineering Science*, v. 58, p. 3777-3792, 2003.

JENKINS, J. T.; MANCINI, F. Kinetic theory for binary mixtures of smooth, nearly elastic spheres. *Physics of Fluids*, v. 35, p. 2020-2057, 1989.

JENKINS, J. T.; RICHMAN, M. W. Grad's 13-moment for a dense gas of inelastic spheres. *Arch. Ratio. Mech. Anal*, v. 87, p. 355-377, 1985.

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

JIRADILOK, V.; GIDASPOW, D.; DAMRONGLERD, S.; KOVES, W. J.; MOSTOFI, R. Kinetic theory base 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 application to plane shearing. *J. Fluid Mech.*, v. 176, p. 67 - 93, 1987.

KUNII, D.; LEVENSPIEL, O. Bubbling bed model. *Industrial and Engineering Chemistry*, v. 7, n. 3, p. 446-452, 1968.

KUNII, D.; LEVENSPIEL, O. *Fluidization Engineering*. 2. ed. Boston: Butterworth-Heinemann, 1990.

LUN, C. K. K.; SAVAGE, S. B. The effects of an impact velocity dependent coefficient of restitution on stresses developed by sheared granular materials. *Acta Mechanica*, v. 63, p. 15-44, 1986.

LUN, C. K. K.; SAVAGE, S. B.; JEFFREY, D. J.; CHEPURNIY, N. Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 140, p. 223-256, 1984.

MALISKA, C. R. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004.

MATHIESEN, V.; SOLBERG, T.; HJERTAGER, B. H. An experimental and computational study of multiphase flow behavior in a circulating fluidized bed. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 26, p. 387-419, 2000.

MILLER, A.; GIDASPOW, D. Dense, vertical gas-solid flow in a pipe. *AIChE Journal*, v. 38, n. 11, p. 1801-1815, 1992.

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

NERI, A.; GIDASPOW, D. Riser hydrodynamics: simulation using kinetic theory. *Particle technology and fluidization*, v. 46, p. 52-67, 2000.

PATANKAR, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. New York: McGraw-Hill, 1980.

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

ROSA, L. M. *Simulação de reações químicas e consumo de calor em reatores riser*. Dissertação de mestrado — UNICAMP, Campinas, 2002.

SAMUELSBERG, A.; HJERTAGER, B. H. An experimental and numerical study of flow patterns in a circulating fluidized bed reactor. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 22, p. 575-591, 1996.

SINCLAIR, J. L.; JACKSON, R. Gas-particle flow in a vertical pipe with particle-particle interactions. *AIChE J.*, v. 35, n. 9, p. 1473-1486, 1989.

VANWACHEN, B. G. M. *Derivation, implementation, and validation of computer simulation models for gas-solid fluidized beds*. Tese de doutorado — Delft University, 1998.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An introduction to computational fluid dynamics - The finite volume method*. London: Prentice Hall, 1995.

YERUSHALMI, J.; CANKURT, N. T. High-velocity fluid beds. *CHEMTECH*, v. 8, n. 9, p. 564-572, 1978.

ZHANG, Y.; REESE, J. M. Particle-gas turbulence interactions in a kinetic theory approach to granular flows. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 27, p. 1945 - 1964, 2001.

ZHANG, Y.; REESE, J. M. Gas turbulence modulation in a two-fluid model for gas-solid flows. *Particle Technology and Fluidization*, v. 49, n. 12, p. 3048 - 3065, 2003.