



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ**  
**INSTITUTO DE TECNOLOGIA**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

ALAN MOTA CASTELO BRANCO JÚNIOR / 201101870002

**INTERAÇÃO CFD-DEM EM FLUIDIZAÇÃO:**  
Aplicação para o setor mineral

BELÉM

2013

ALAN MOTA CASTELO BRANCO JÚNIOR / 201101870002

**INTERAÇÃO CFD-DEM EM FLUIDIZAÇÃO:**  
Aplicação para o setor mineral

Dissertação apresentada no Instituto de Tecnologia da Universidade Federal do Pará para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica. Área de concentração: Ciências térmicas e de fluidos.

Orientador: Prof. Dr. André Luiz Amarante Mesquita.  
Co-orientador: Prof. Dr. Jerson Rogério Pinheiro Vaz.

BELÉM

2013

ALAN MOTA CASTELO BRANCO JÚNIOR / 201101870002

**INTERAÇÃO CFD-DEM EM FLUIDIZAÇÃO:**  
Aplicação para o setor mineral

Dissertação apresentada no Instituto de Tecnologia da Universidade Federal do Pará para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica. Área de concentração: Ciências térmicas e de fluidos.

Avaliado por banca examinadora constituída por:

---

**Prof. Dr. André Luiz Amarante Mesquita**  
FEM/UFPA – Orientador, Presidente

---

**Prof. Dr. Jerson Rogério Pinheiro Vaz**  
FEM/UFPA – Co-orientador

---

**Prof. Dr. Alexandre Luiz Amarante Mesquita**  
FEM/UFPA – Membro interno

---

**Prof. Dr. Emanuel Negrão Macedo**  
FEQ/UFPA – Membro externo

---

**Prof. Dr. José Gustavo Coelho**  
UFTM – Membro externo

Aprovado em \_\_\_\_ de \_\_\_\_\_ de 2013

Aos meus pais e aos meus irmãos, por tudo que as palavras jamais serão capazes de expressar.

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço primeiramente à Deus por todas as oportunidades e por continuar dando-me saúde e a força de vontade que me permite cair e levantar, começar e terminar o que comecei. Agradeço também pelo sentimento nato de que o sacrifício dos meus estudos terá uma serventia maior do que eu posso prever neste momento, pois esse é um combustível inexplicável para mim.

Agradeço aos meus pais e irmãos por serem os maiores patrocinadores de toda a minha vida, em tudo o que eu faço e em todos os sentidos.

Agradeço ao meu co-orientador, Prof. Dr. Jerson Rogério Pinheiro Vaz, por demonstrar-se sempre disponível para conversas produtivas, parabenizando-o pela forma respeitosa com que sempre dialoga com seus alunos. Agradeço também pela responsabilidade e perspicácia em direcionar-me com base no meu perfil acadêmico à orientação de uma pessoa crucial para o aproveitamento do tempo de que eu dispunha para realizar o presente trabalho, nomeadamente, Prof. Dr. André Luiz Amarante Mesquita. A este último, agradeço por aceitar orientar-me, mesmo com as “condições adversas” existentes, bem como pelas diversas horas de trabalho de orientação e correção de textos, sendo a pessoa que “correu lado a lado”.

Por fim, agradeço a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela concessão de bolsa de estudos no mestrado.

A maneira correta de enfrentar a vida é de pé e em guarda diante dos homens, mas de joelhos diante de Deus.

**Autor:** desconhecido

A gente apaga (desmaia ou morre), mas não bate (não desiste), aqui é só raçudo ...

**VÁ ATÉ O FIM.** Apagar mas não bater significa perseverança, não desistir do objetivo, ganhar da forma honesta, vencer as fraquezas, superar seus limites, não buscar atalhos, mas percorrer inteiro o árduo caminho ... **NÃO DESISTA, NUNCA !**

**Música:** Apaga, mas não bate (Jiu Jitsu lifestyle)

**Autor:** Pregador Luo

## RESUMO

A fluidização de partículas é amplamente utilizada na indústria, principalmente devido às altas taxas de transferência de calor e massa entre as fases. O acoplamento entre a Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD – *Computational Fluid Dynamics*) e o Método dos Elementos Discretos (DEM – *Discrete Element Method*) tem se tornado atrativo para a simulação de fluidização, já que nesse caso o movimento das partículas é analisado de forma mais direta do que em outros tipos de abordagens. O grande problema do acoplamento CFD-DEM é a alta exigência computacional para rastrear todas as partículas do sistema, o que leva ao uso de estratégias de redução do tempo de simulação que em caso de utilização incorreta podem comprometer os resultados. O presente trabalho trata da aplicação do acoplamento CFD-DEM na análise de fluidização de alumina, que é um problema importante para o setor mineral. Foram analisados diversos parâmetros capazes de influenciar os resultados e o tempo de simulação como os passos de tempo, os modelos de arrasto, a distribuição granulométrica das partículas, a constante de rigidez, a utilização de partículas representativas com tamanho maior que o das partículas reais, etc. O modelo de força de interação DEM utilizado foi o modelo de mola e amortecedor lineares (LSD – *Linear Spring Dashpot*). Todas as simulações foram realizadas com o *software* ANSYS FLUENT 14.5 e os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais e da literatura. Tais resultados permitiram comprovar a capacidade do modelo linear LSD em prever o comportamento global de leitos de alumina e reduzir o tempo de simulação, desde que os parâmetros do modelo sejam definidos de forma adequada.

Palavras-chave: Acoplamento CFD-DEM. Leito fluidizado. Alumina. Setor Mineral

## ABSTRACT

The particle fluidization process is widely used in the industry, mainly due to the high heat and mass transfer rates between the phases. The coupling between the Computational Fluid Dynamics (CFD) and the Discrete Element Method (DEM) has become attractive for the simulation of fluidization, because in this case the particles movement is analyzed in a more direct way than in other types of approaches. The main problem with the CFD-DEM coupling is the high demand for computational capacity in order to track the movement of all the particles in the system, what it leads to the use of some strategies to reduce the simulation time which in case of incorrect usage can prejudice the results. The present work deals with the application of the CFD-DEM coupling in the analysis of alumina fluidization, which is an important problem for the mineral sector. It were analyzed several parameters capable of influencing the results and the simulation time like the time steps, the drag models, the particle size distribution, the spring constant, the usage of representative particles bigger than the actual particles, etc. The DEM model used was the Linear Spring Dashpot model (LSD). All the simulations were carried out with the *software* ANSYS FLUENT 14.5 and the results obtained were compared with experimental data and the data available in the literature. These results allowed to verify the capability of the Linear Spring Dashpot Model for predicting the global behavior of alumina beds and reducing the simulation time, since the model parameters are defined adequately.

Keywords: CFD-DEM coupling. Fluidized bed. Alumina. Mineral sector.



## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 2.1 - Conjunto de peneiras para análise granulométrica de partículas. . . . .	27
Figura 2.2 - Balanço de forças em uma partícula do leito fluidizado . . . . .	28
Figura 2.3 - Regimes de escoamento do tipo gás-sólido . . . . .	29
Figura 2.4 - Curva de fluidização para leito de partículas . . . . .	34
Figura 2.5 - Curva de fluidização para misturas de partículas . . . . .	35
Figura 2.6 - Leito de partículas borbulhante . . . . .	38
Figura 2.7 - Expansão uniforme em um leito não borbulhante . . . . .	38
Figura 2.8 - Classificação de Geldart para as partículas . . . . .	39
Figura 2.9 - Fluidização do tipo jorro de grãos de arroz . . . . .	40
Figura 2.10 - Passagem de fluido sobre cilindros em ambiente aberto . . . . .	45
Figura 2.11 - Malha 2D não estruturada aplicável ao problema da figura 2.10 . . . . .	45
Figura 2.12 - Escoamento de fluido entre duas placas estacionárias . . . . .	46
Figura 2.13 - Malha 2D estruturada aplicável ao problema da figura 2.12 . . . . .	46
Figura 2.14 - Resultados CFD para expansão de um leito de alumina . . . . .	47
Figura 2.15 - Forças sobre uma partícula $i$ devido ao contato direto com a partícula $j$ e à força exercida sem contato pela partícula $k$ . . . . .	56
Figura 2.16 - Partícula de escala grosseira representando um grupo de partículas de escala refinada . . . . .	58
Figura 2.17 - Formas de partículas comumente usadas no DEM . . . . .	65
Figura 2.18 - Deformação de partículas representada pela sobreposição de esferas . . . . .	66
Figura 2.19 - Modelo de força envolvendo uma mola e um amortecedor em paralelo na direção normal e uma mola e um amortecedor em paralelo limitados pelo atrito na direção tangencial . . . . .	67
Figura 2.20 - Malha cartesiana utilizada para a detecção de colisão . . . . .	79
Figura 3.1 - Leito de partículas virtuais do estudo de caso A . . . . .	84

Figura 3.2 - Partículas de alumina ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) do caso B . . . . .	.86
Figura 3.3 - Distribuição granulométrica da alumina usada no caso B . . . . .	.86
Figura 3.4 - Classificação do tipo de fluidização da alumina do caso B . . . . .	.87
Figura 3.5 - Imagem 3D do equipamento de fluidização . . . . .	.88
Figura 3.6 - Detalhe da geometria da seção inferior do equipamento de fluidização . . . . .	.88
Figura 3.7 - Detalhe da geometria da seção superior do equipamento de fluidização . . . . .	.89
Figura 3.8 - Detalhe do domínio computacional do estudo de caso B . . . . .	.91
Figura 3.9 - (a) Malha 1, com 16640 volumes finitos. (b) Malha 2, com 50600 volumes finitos . . . . .	.92
Figura 4.1 - Resultados das simulações com partículas de tamanho real . . . . .	.96
Figura 4.2 - Demais comparações das simulações com partículas de tamanho real . . . . .	.97
Figura 4.3 - Comparações das simulações com partículas representativas . . . . .	.98
Figura 4.4 - Comparação de dados para simulações do FLUENT com partículas real e representativa . . . . .	.98
Figura 4.5 - Comportamento dos pacotes de partículas do leito simulado com o ANSYS FLUENT . . . . .	.99
Figura 4.6 - Curva de fluidização do leito com razão de aspecto $H/D = 0,71$ . . . . .	.101
Figura 4.7 - Queda de pressão por simulação CFD-DEM com o modelo A1 . . . . .	.102
Figura 4.8 - Imagens instantâneas do leito simulado com o modelo A1. . . . .	.102
Figura 4.9 - Dados obtidos experimentalmente e por simulação CFD-DEM com o modelo A1. . . . .	.103
Figura 4.10 - Curva de fluidização construída com os dados da tabela 4.1 . . . . .	.104
Figura 4.11 - Representação de partículas com distribuição granulométrica . . . . .	.107
Figura 4.12 - Inclusão do resultado obtido com o modelo A2 no conjunto de dados para as curvas de fluidização. . . . .	.108
Figura 4.13 - Comparação dos resultados obtidos com os modelos A1, A2 e A3 para $V_{\text{gás}} = 0,005$ m/s . . . . .	.110

## LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 - Especificações gerais de um dos computadores utilizados nas simulações . . . . .	.82
Tabela 3.2 - Valores dos parâmetros utilizados nas simulações de Hilton e Cleary (2012) . . . . .	.83
Tabela 3.3 - Demais parâmetros usados nas simulações do caso A . . . . .	.84
Tabela 3.4 - Propriedades de interesse da alumina usada no caso B . . . . .	.86
Tabela 3.5 - Especificações gerais das condições operacionais do estudo de caso B . . . . .	.90
Tabela 3.6 - Especificação das malhas CFD utilizadas nas simulações do caso B . . . . .	.92
Tabela 3.7 - Principais características do modelo A1. . . . .	.94
Tabela 3.8 - Principais características dos modelos A2 e A3 . . . . .	.95
Tabela 4.1 - Queda de pressão obtida experimentalmente e por simulação com o modelo A1. . . . .	.103
Tabela 4.2 - Dados para a mínima fluidização: experimentais e preditos com o modelo A1 . . . . .	.105
Tabela 4.3 - Comparação dos resultados dos modelos A1, A2 e A3 . . . . .	.109
Tabela 4.4 – Resultado do modelo A3 para $V_{gás} = 0,015$ m/s . . . . .	.111
Tabela 4.5 - Resultado do modelo A3 para $V_{gás} = 0,03$ m/s . . . . .	.111

## LISTA DE SÍMBOLOS

$d_p$	Diâmetro médio das partículas de uma amostra
$x_i$	Fração mássica retida na malha da peneira $i$
$d_{i-1}$	Diâmetro de abertura da peneira “ $i-1$ ”
$d_i$	Diâmetro de abertura da peneira “ $i$ ”, consecutiva à peneira “ $i-1$ ”
$\bar{d}_{pi}$	Diâmetro médio entre as aberturas de duas peneiras consecutivas
$V$	Velocidade superficial do gás
$Q_g$	Vazão volumétrica do gás
$A$	Área da seção transversal
$\varepsilon$	Porosidade do leito de partículas
$V_{total}$	Volume total do leito de partículas
$V_g$	Volume ocupado pelo gás intersticial no leito
$V_p$	Volume ocupado pelas partículas no leito
$t$	Tempo de relaxação da partícula
$\rho_p$	Massa específica da partícula
$\mu_f$	Viscosidade do fluido
$St$	Número de Stokes
$t_f$	Escala de tempo característica do escoamento do fluido
$\Delta P$	Queda de pressão do fluido
$H$	Altura do leito fixo de partículas
$\rho_f$	Massa específica do fluido

$\varepsilon_{mf}$	Porosidade do leito na condição de mínima fluidização
$V_{mf}$	Velocidade superficial do gás na condição de mínima fluidização
$\phi$	Esfericidade da partícula
$\alpha_q$	Fração volumétrica da fase “q”
$n$	Número de fases presentes no sistema
$\rho_q$	Massa específica da fase “q”
$\hat{\rho}_q$	Massa específica efetiva da fase “q”
$\vec{v}_q$	Velocidade da fase “q”
$\dot{m}_{pq}$	Taxa de transferência de massa da p-ésima fase para a q-ésima fase
$\dot{m}_{qp}$	Taxa de transferência de massa da q-ésima fase para a p-ésima fase
$S_q$	Termo fonte/sumidouro de massa da fase “q”
$\nabla P$	Gradiente de pressão do fluido
$\bar{\tau}_q$	Tensor tensão-deformação da fase “q”
$\vec{v}_{pq}$	Velocidade de transferência de massa da p-ésima fase para a q-ésima fase
$\vec{v}_{qp}$	Velocidade de transferência de massa da q-ésima fase para a p-ésima fase
$\vec{R}_{pq}$	Termo de força de interação entre a p-ésima fase e a q-ésima fase
$\vec{F}_q$	Força de campo resultante, com excessão da força da gravidade
$\vec{F}_{lift}$	Força de sustentação
$\vec{F}_{wl}$	Força de lubrificação de parede
$\vec{F}_{vm}$	Força de massa virtual
$\vec{F}_{td}$	Força de dispersão turbulenta

$K_{pq}$	Coeficiente de transferência de momento entre as fases “p” e “q”
$\vec{v}_p$	Velocidade da fase “p”
$K_{ls}$	Coeficiente de troca fluido-sólido
$\alpha_s$	Fração volumétrica do sólido
$\rho_s$	Massa específica do sólido
$C_D$	Coeficiente de arrasto
$Re_s$	Número de Reynolds relativo
$v_{r,s}$	Velocidade terminal das partículas
$\alpha_l$	Fração volumétrica do fluido
$\rho_l$	Massa específica do fluido
$\vec{v}_s$	Velocidade da fase sólida
$\vec{v}_l$	Velocidade da fase fluida
$\mu_s$	Viscosidade de cisalhamento do sólido
$\bar{I}$	Tensor identidade
$\bar{S}$	Tensor taxa de deformação
$P_s$	Pressão de sólidos
$\eta$	Coeficiente de restituição
$g_{os}$	Função de distribuição radial
$\theta_s$	Temperatura granular do sólido
$u_{s,i}$	i-ésimo componente de flutuação de velocidade do sólido
$k_{\theta s}$	Coeficiente de difusão do sólido
$\gamma_{\theta s}$	Dissipação colisional de energia

$m_i$	Massa da partícula “i”
$v_i$	Velocidade da partícula “i”
$F_{ij}^c$	Força de contato exercida sobre a partícula “i” por partículas e paredes “j”
$F_{ik}^{nC}$	Força exercida sem contato sobre a partícula “i”
$F_i^f$	Força de interação entre a partícula “i” e um fluido
$F_i^g$	Força gravitacional
$\omega_i$	Velocidade angular da partícula “i”
$I_i$	Momento de inércia da partícula “i”
$M_{ij}$	Torque de contato exercido sobre a partícula “i” por partículas e paredes “j”
$h$	Distância de separação entre as partículas
$f_{ij}^n$	Componente normal da força de contato entre partículas “i” e “j”
$f_{ij}^t$	Componente tangencial da força de contato entre partículas “i” e “j”
$N^f$	Número de partículas de escala refinada no sistema
$N^c$	Número de partículas de escala grosseira no sistema
$\kappa$	Número de partículas refinadas em uma partícula grosseira
$V^c$	Volume de uma partícula de escala grosseira
$V^f$	Volume de uma partícula de escala refinada
$d^c$	Diâmetro de uma partícula de escala grosseira
$d^f$	Diâmetro de uma partícula de escala refinada
$s$	Fator de escala
$C_n$	Coeficiente de amortecimento na direção normal
$v_n$	Velocidade relativa na direção normal

$k_n$	Constante de rigidez na direção normal
$\delta$	Deformação (sobreposição) na direção normal
$\mu$	Coefficiente de atrito de Coulomb
$C_t$	Coefficiente de amortecimento na direção tangencial
$v_t$	Velocidade relativa na direção tangencial
$k_t$	Constante de rigidez na direção tangencial
$\Delta t$	Passo de tempo
$m^f$	Massa de uma partícula de escala refinada
$v^f$	Velocidade da partícula de escala refinada
$F_n^f$	Força de colisão normal sobre uma partícula refinada
$F_t^f$	Força de colisão tangencial sobre uma partícula refinada
$F_d^f\{d^f\}$	Força de arrasto sobre uma partícula refinada de diâmetro $d^f$
$F_p^f$	Força de gradiente de pressão do fluido sobre uma partícula refinada
$v^c$	Velocidade de uma partícula de escala grosseira
$m^c$	Massa de uma partícula de escala grosseira
$\vec{x}$	Vetor posição de uma partícula ou de um pacote de partículas
$r$	Raio de uma partícula ou de um pacote de partículas
$\vec{e}_{12}$	Vetor unitário entre o centro da partícula 1 e o centro da partícula 2
$m_{12}$	Massa reduzida ou massa efetiva entre as partículas 1 e 2
$t_{coll}$	Tempo de colisão entre as partículas
$C$	Coefficiente de amortecimento
$\epsilon_D$	Deformação normal permissível para o pacote de partículas



## SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO</b> .....	18
1.1 CONSIDERAÇÕES GERAIS .....	18
1.2 JUSTIFICATIVA .....	20
1.3 OBJETIVOS .....	23
1.3.1 <b>Objetivo geral</b> .....	23
1.3.2 <b>Objetivos específicos</b> .....	23
1.4 ESTRUTURA E ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO .....	24
<b>2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</b> .....	25
2.1 ALUMINA .....	25
2.2 GRANULOMETRIA .....	26
2.3 FLUIDIZAÇÃO .....	27
2.3.1 <b>Fundamentos</b> .....	27
2.3.2 <b>Número de Stokes (St)</b> .....	31
2.3.3 <b>Queda de pressão através de um leito fixo de partículas</b> .....	32
2.3.4 <b>Curva de fluidização e queda de pressão em leitos fluidizados</b> .....	33
2.3.5 <b>Correlações para a velocidade mínima de fluidização</b> .....	36
2.3.6 <b>Fluidizações borbulhante e não borbulhante</b> .....	38
2.3.7 <b>Classificação de Geldart para as partículas</b> .....	39
2.4 ANÁLISE COMPUTACIONAL DE LEITOS FLUIDIZADOS .....	41
2.4.1 <b>Modelo computacional</b> .....	41
2.4.2 <b>Abordagens Euler-Euler, Euler-Lagrange e Híbrida</b> .....	41
2.4.2.1 <i>Conceituação básica</i> .....	41
2.4.3 <b>Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD)</b> .....	43
2.4.3.1 <i>Conceituação básica</i> .....	43
2.4.3.2 <i>Formulação matemática do Modelo Multifluidos (Euler-Euler)</i> .....	48
2.4.4 <b>Método dos Elementos Discretos (DEM)</b> .....	54
2.4.4.1 <i>Considerações gerais</i> .....	54
2.4.4.2 <i>Equações governantes</i> .....	55
2.4.4.3 <i>Conceito de partículas representativas no acoplamento CFD- DEM</i> .....	57
2.4.4.4 <i>Implementação do DEM no software ANSYS FLUENT</i> .....	65
2.4.4.5 <i>Aplicabilidade do modelo LSD</i> .....	70

2.4.4.6	<i>Determinação dos parâmetros de contato para o modelo LSD</i>	72
2.5	ACOPLAMENTO CFD-DEM NO SOFTWARE ANSYS FLUENT	76
2.5.1	<b>Formulação matemática para a fase contínua</b>	76
2.5.2	<b>Formulação matemática para a fase discreta</b>	78
2.5.3	<b>Malha cartesiana de colisão DEM</b>	79
2.5.4	<b>Relação entre resolução de malha CFD e tamanho das partículas</b>	80
<b>3</b>	<b>MATERIAIS E MÉTODOS</b>	<b>82</b>
3.1	DESCRIÇÃO DO SOFTWARE E HARDWARE UTILIZADOS	82
3.2	DESCRIÇÃO DOS ESTUDOS DE CASO	82
3.2.1	<b>Estudo de caso A</b>	82
3.2.2	<b>Estudo de caso B</b>	85
3.2.2.1	<i>Caracterização do material particulado do leito</i>	85
3.2.2.2	<i>Descrição do equipamento de fluidização</i>	87
3.2.2.3	<i>Condições operacionais analisadas</i>	90
3.2.2.4	<i>Domínio computacional</i>	91
3.2.2.5	<i>Geração das malhas CFD</i>	91
3.2.2.6	<i>Estratégia de simulação</i>	93
<b>4</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÕES</b>	<b>96</b>
4.1	ESTUDO DE CASO A	96
4.2	ESTUDO DE CASO B	101
4.2.1	<b>Caso com o modelo A1</b>	101
4.2.2	<b>Caso com o modelo A2</b>	106
4.2.3	<b>Caso com o modelo A3</b>	109
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES</b>	<b>112</b>
<b>6</b>	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>114</b>

# 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 CONSIDERAÇÕES GERAIS

O processo de fluidização de partículas é utilizado em diversos tipos de indústrias, principalmente devido a algumas de suas características como a alta taxa de mistura entre as fases, o que resulta em um aumento da transferência de calor e massa entre as mesmas (Crowe, 2006). A simulação computacional de um leito fluidizado é capaz de permitir a previsão de seu comportamento sob diferentes conjuntos de condições operacionais, permitindo o projeto do dispositivo de fluidização e a otimização do processo de forma relativamente rápida e econômica. Entretanto, para que essas previsões sejam confiáveis é preciso que o modelo computacional utilizado seja capaz de reproduzir com razoável concordância o comportamento real do leito em um ambiente virtual. Segundo Niemi (2012) existem duas abordagens básicas para a simulação de escoamentos gás-sólido densos encontrados em processos de fluidização: a abordagem Euleriana-Euleriana e a abordagem Eulerian-Lagrangiana.

Devido ao fato de que sob um ponto de vista macroscópico a fase sólida em um leito fluidizado possui um comportamento semelhante ao de um fluido, muitas simulações computacionais de leitos fluidizados tem sido baseadas no uso da abordagem Euleriana-Euleriana, que considera a fase sólida como um “pseudo-fluido”. Nesse caso, ao invés de se “rastrear” o escoamento individual de cada partícula do sistema de forma lagrangeana, resolve-se para a fase sólida equações governantes semelhantes às usadas para a fase fluida (ex. Navier-Stokes), que são baseadas na abordagem Euleriana (Tsuji, *et al.*, 1993). Quando a abordagem Euleriana-Euleriana é aplicada a escoamentos gás-sólido ela também é chamada de “abordagem de dois fluidos” ou de “modelo de dois fluidos (TFM – *Two-Fluid Model*)”.

Segundo Asegehegn *et al.* (2011) o trabalho de Anderson e Jackson (1967) foi um trabalho pioneiro de aplicação do modelo de dois fluidos na análise de escoamentos bifásicos gás-sólido. Desde então, muitos trabalhos tem sido realizados com esse modelo como, por exemplo, Enwald *et al.* (1996), Gidaspow e Ettehadieh (1983), Tsuo e Gidaspow (1990), Kuipers *et al.* (1992), Lourenço (2012), etc.

Apesar de sua utilidade, na abordagem Euleriana–Euleriana a modelagem de relações constitutivas para as equações governantes da fase sólida é uma tarefa desafiadora e, devido à natureza diversa dos diferentes tipos de escoamentos multifásicos essas relações podem variar de caso para caso. Se uma boa concordância entre simulações numéricas e experimentos é requerida, alguns parâmetros nas equações constitutivas devem ser determinadas empiricamente e algumas vezes de experimentos similares às simulações que serão realizadas. Além disso, na abordagem Euleriana-Euleriana a representação das partículas por meio de sua distribuição granulométrica (tamanho) real, que é importante na análise de muitos sistemas como aqueles que envolvem segregação de partículas não é tão simples. Em geral, somente valores médios são utilizados, já que a inclusão da distribuição granulométrica de partículas requer o uso de equações adicionais ou sub-modelos que podem aumentar substancialmente a demanda computacional (Niemi, 2012).

Diferentemente da abordagem Euleriana-Euleriana, o acoplamento entre a Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) e o Método dos Elementos Discretos (DEM) é baseado na abordagem Euleriana-Lagrangeana (Zhu, *et al.*, 2007). Nesse caso, o fluido é analisado de forma Euleriana com a CFD, enquanto cada partícula individual é analisada de forma lagrangeana com o DEM (Cundall e Strack, 1979). No DEM, para cada partícula aplica-se as equações newtonianas do movimento, sendo que as forças atuantes na partícula devido às interações com outras partículas, paredes e com o fluido são calculadas por meio de modelos de forças de interação.

O grande problema do acoplamento CFD-DEM é a alta exigência em termos de capacidade de processamento computacional para rastrear todas as partículas do sistema, já que sistemas industriais de grande escala geralmente envolvem um grande número de partículas, o que torna necessário o uso de algumas estratégias para a redução do tempo de simulação como, por exemplo, o uso de partículas virtuais com diâmetros maiores do que os das partículas reais (Hilton e Cleary, 2012). Segundo Malone e Xu (2008) dentre as outras estratégias que têm sido utilizadas para reduzir a exigência computacional do DEM e permitir que as simulações sejam realizadas em tempos razoáveis estão o uso de algoritmos de detecção de contatos de partículas mais avançados (Iwai, *et al.*, 1999), técnicas de processamento paralelo (Fleissner e Eberhard, 2008), novos esquemas de integração numérica (Fraige e Langston, 2004), bem como o uso de valores artificialmente baixos

para a constante de rigidez do modelo DEM, o que permite que sejam usados maiores passos de tempo de integração das equações governantes (Tsuji, *et al.*, 1993; Limtrakul, *et al.*, 2003; Mikami, *et al.*, 1998; Rhodes, *et al.*, 2001).

Ao longo dos últimos anos o número de estudos de aplicação do acoplamento CFD-DEM na investigação da fluidização de partículas tem se tornado crescente, o que inclui sistemas com partículas tanto coesivas quanto não coesivas como, por exemplo, Kawaguchi *et al.* (1998), Gera *et al.* (1998), Ouyang e Li (1999) Lu *et al.* (1999), Kuwagi e Horio (2002), Rong e Rorio (2001), Xu e Yu (2002), Li e Kuipers (2007), Bokkers *et al.* (2004), Pandit *et al.* (2005), Beetstra *et al.* (2007), Müller *et al.* (2008), Hilton e Cleary (2012), Li e mason (2000), Moreno-Atanasio *et al.* (2007), Swasdisevi *et al.* (2005), Alobaide *et al.* (2013) e Kriebitzsch *et al.* (2013).

No presente trabalho pretende-se verificar a aplicabilidade da metodologia CFD-DEM na solução de problemas práticos de fluidização, incluindo a análise da influência do uso de estratégias de redução do tempo de simulação sobre os resultados obtidos. Pretende-se assim reunir informações sobre a metodologia de calibração do modelo CFD-DEM para que ele seja capaz de representar de forma adequada o comportamento do leito real. Devido a importância do setor mineral para o desenvolvimento econômico e social do estado do Pará, a metodologia de acoplamento CFD-DEM foi aplicada ao processo de fluidização de partículas de alumina, cuja contextualização será exposta na próxima seção.

## 1.2 JUSTIFICATIVA

De acordo com o Ministério de Minas e Energia do Brasil, através do documento “**Plano Nacional de Mineração 2030**” (MME, 2011), o alumínio é o segundo metal mais produzido em todo o mundo, principalmente devido às suas características e à existência de grandes minas de bauxita no planeta. Quando se trata da produção de bauxita, o Brasil possui uma posição de destaque no mercado internacional, sendo o segundo colocado no ranking mundial. As reservas mundiais de bauxita estão estimadas em cerca de 34 bilhões de toneladas e, no Brasil, elas estão estimadas em cerca de 3,4 bilhões de toneladas, principalmente nos estados de Minas Gerais e Pará. Ainda segundo o documento citado (MME, 2011), cerca de

96% da bauxita metalurgica produzida no Brasil destina-se à produção de Alumina (Óxido de alumínio), que é uma substância integrante do processo de produção do metal alumínio. O exposto acima demonstra a importância da alumina para a economia do nosso estado e do papel do engenheiro para o projeto e otimização de máquinas e equipamentos relacionados a todo o processo de produção mineral, não só do alumínio, mas de todos os minérios encontrados em abundância no estado do Pará.

Conforme destacado por Amarante Mesquita *et al.* (2012), diversos trabalhos de aplicação da tríade experimentação-teoria-computação no projeto e otimização de máquinas e equipamentos do setor mineral vem sendo desenvolvidos ao longo dos últimos anos por pesquisadores do Laboratório de Transporte Pneumático da Universidade Federal do Pará (UFPA). Dentre estes pode-se destacar os trabalhos de doutoramento de Vasconcelos (2011), Gomes (2011) e de Lourenço (2012), por estarem todos relacionados ao material alumina.

Em Vasconcelos (2011) realizou-se uma análise de caráter experimental-teórico das interações entre fluidos e materiais particulados em aplicações da indústria do alumínio primário do estado do Pará. No referido trabalho considerou-se materiais provenientes dos processos produtivos da empresa Albrás Alumínio Brasileiro S.A. como a alumina fluoretada e o pó de crosta e o manuseio destes materiais em processos de fluidização e transporte em calhas e tubos fluidizados.

Já em Gomes (2011) realizou-se um estudo sobre o transporte pneumático de partículas em fase diluída. Neste trabalho utilizou-se partículas de areia e de alumina e analisou-se alguns parâmetros chave para o transporte das partículas por uma corrente gasosa como, por exemplo, a velocidade crítica de transporte e a queda de pressão na tubulação. Um dos principais resultados obtidos foi o desenvolvimento de uma equação para a velocidade de captura de partículas no fundo de uma tubulação horizontal.

Em Lourenço (2012), realizou-se uma análise de caráter experimental-teórico-computacional das interações entre fluidos e materiais particulados, considerando-se nesse caso o comportamento de esferas de vidro e de partículas de alumina em leitos fluidizados, novamente relacionados aos processos desenvolvidos

na empresa Albrás Alumínio Brasileiro S.A. e ao fortalecimento da interação indústria-academia.

Deve-se destacar que apesar de relativamente distintos, os trabalhos de Vasconcelos (2011), Gomes (2011) e Lourenço (2012) estão todos relacionados ao material alumina e seguem uma sequência cronológica, mas somente em Lourenço (2012) foi acrescentado o uso da CFD como instrumento de análise. Nesse caso as simulações foram realizadas somente com a abordagem Euleriana-Euleriana. Dando continuidade a essa sequência, descreve-se no presente trabalho os detalhes de um novo estudo de caráter computacional-teórico do comportamento da alumina durante o processo de fluidização. Diferentemente de Lourenço (2012) que utilizou somente a abordagem Euleriana-Euleriana, o principal propósito do presente trabalho é investigar a aplicação do acoplamento entre a Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) e o Método dos Elementos Discretos (DEM) para a simulação de leitos de partículas. Nesse caso pretende-se analisar o comportamento de um leito de alumina não reativo, confrontando os resultados computacionais com os resultados experimentais descritos em Lourenço (2012).

O estudo descrito aqui foi realizado com o *software* ANSYS FLUENT 14.5, que disponibiliza o uso do DEM por meio do modelo de esferas macias inicialmente proposto por Cundall and Strack (1979). Ao longo do texto são destacados os pontos fortes e possíveis deficiências do modelo utilizado que possam dar surgimento a oportunidades de investigação do uso de modelos potencialmente mais sofisticados.

Para finalizar, pretende-se que este documento possa servir como ponto de partida para todos os alunos das Faculdades e Programas de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e áreas afins da UFPA que queiram iniciar no campo da análise acoplada CFD-DEM de fluidização. Pelo menos no que cabe ao conhecimento do autor, apesar de trabalhos relacionados às análises CFD e DEM desacopladas já estarem sendo desenvolvidos nesta instituição (AMARANTE MESQUITA *et al.*, 2012), este seria o primeiro trabalho relacionado ao acoplamento CFD-DEM para o estudo de escoamentos granulares fluidizados realizado na UFPA.

## 1.3 OBJETIVOS

### 1.3.1 Objetivo geral

Este trabalho tem como objetivo analisar a aplicabilidade da interação CFD-DEM na solução de problemas de fluidização de importância para o setor mineral, verificando os procedimentos necessários para a obtenção de resultados aceitáveis.

### 1.3.2 Objetivos específicos

Os objetivos específicos deste trabalho incluem:

1. Realizar simulações CFD-DEM de um leito fluidizado isotérmico e não-reativo de alumina, com condições operacionais semelhantes às analisadas na tese de doutorado de Lourenço (2012). Calibrar o modelo computacional para que ele permita construir a curva de fluidização e prever a velocidade de mínima fluidização do leito.
2. Realizar simulações CFD-DEM para verificar a possibilidade de redução do tempo de simulação computacional por meio do uso do método de partículas representativas (chamadas de pacotes de partículas no ANSYS FLUENT).
3. Análise da influência dos parâmetros do modelo CFD-DEM sobre a previsibilidade do comportamento do leito de alumina e sobre o tempo de simulação. Essa análise inclui o uso de diferentes modelos de arrasto, variação do número e tamanho dos pacotes de partículas, diferentes resoluções de malha CFD, ou seja, diferentes tamanhos e números de volumes finitos da malha, bem como a representação de partículas tanto com distribuição de dimensão (diâmetro) uniforme quanto com distribuição granulométrica real. Além disso, considera-se também a variação do valor da constante de rigidez da mola do modelo de força de interação DEM, bem como os valores do passo de tempo DEM e do passo de tempo CFD.



## 1.4 ESTRUTURA E ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

O presente trabalho está dividido em seis capítulos.

No capítulo 1 é feita uma introdução ao problema, considerando-se sua relevância e destacando-se os objetivos a serem alcançados com a sua conclusão.

No capítulo 2 aborda-se a fundamentação teórica dos diversos temas relacionados ao trabalho realizado. Tal revisão mescla tanto a teoria pertinente encontrada em livros-texto quanto a indicação, sempre que possível, de trabalhos publicados em anais de congressos, periódicos etc. Com a apresentação de tal revisão espera-se expor de maneira sucinta todos os conceitos necessários ao entendimento e elaboração deste trabalho, bem como formar uma base conceitual e referencial para aqueles que queiram procurar outras fontes de aprofundamento no assunto.

No capítulo 3 é descrita a metodologia de desenvolvimento das atividades realizadas, incluindo dados relacionados à etapa de pré-processamento como a definição do domínio computacional, a geração das malhas CFD, a caracterização do material alumina e aos valores dos parâmetros DEM utilizados. Além disso, descreve-se também nesse capítulo o aparato experimental utilizado no trabalho cujos resultados serviram de referência para o processo de calibração do modelo CFD-DEM utilizado aqui.

No capítulo 4 apresentam-se e discutem-se os resultados das simulações computacionais. No capítulo 5 apresentam-se as conclusões sobre a aplicabilidade do acoplamento CFD-DEM ao problema de fluidização de alumina, bem como as sugestões para trabalhos futuros.

## 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

### 2.1 ALUMINA

O óxido de alumínio, ou alumina, é a matéria-prima essencial para a produção de alumínio primário (HYDRO, 2013). A alumina é um pó branco produzido pelo refino do minério bauxita, sendo necessárias cerca de 2 toneladas de alumina para produzir uma tonelada de alumínio pelo processo de eletrólise.

Além de ser a matéria prima para a produção do alumínio, a alumina também pode ser utilizada na indústria de alumínio primário para fins de controle de emissão de poluentes por meio de sistemas de lavagem a seco de gases (ABAL, 2010). Nesse caso, os gases resultantes do processo produtivo do alumínio podem ser forçados a passar por um leito de partículas de alumina, onde após o tempo necessário o fluoreto gasoso e outros gases são adsorvidos por essas partículas. A alumina pode adsorver de 4 a 6% do seu peso em fluoreto gasoso. Uma característica importante do sistema de lavagem a seco que utiliza a alumina como meio de adsorção é que o processo não gera resíduo e toda a alumina pode ser reutilizada no processo de produção, sendo a eficiência de remoção de fluoretos gasosos maior do que 99%.

De acordo com Vasconcelos (2011) a alumina existe em várias formas metaestáveis (em transição) e, também, em uma forma termodinamicamente estável denominada  $\alpha Al_2O_3$ , sendo esse o tipo de alumina produzida na empresa Alunorte - Alumina do Norte do Brasil S.A e usada na empresa Albras - Alumínio Brasileiro S.A.

Assim como nos trabalhos de Vasconcelos (2011) e Lourenço (2012), o tipo de alumina analisada no presente trabalho é o mesmo tipo utilizado no processo produtivo da empresa Albras - Alumínio Brasileiro S.A. Além disso, somente os aspectos fluidodinâmicos dos leitos de alumina foram analisados, sem nenhuma consideração sobre qualquer tipo de reação química.

## 2.2 GRANULOMETRIA

Em uma determinada amostra de material normalmente as partículas não possuem o mesmo tamanho, o que leva à necessidade de utilização de uma distribuição de dimensão de partículas, que nada mais é do que a representação aproximada da variabilidade de tamanhos das partículas do sistema (Rhodes, 2008).

Atualmente diversas técnicas podem ser utilizadas para a determinação da distribuição de dimensão de partículas de uma determinada amostra, sendo a escolha de uma delas normalmente baseada em questões econômicas e de precisão nos resultados obtidos. Alguns exemplos dessas técnicas são, por exemplo, a determinação por métodos de fotoanálise, por sedimentação e por difração laser. Entretanto, o método mais utilizado até hoje, principalmente pela simplicidade e pelo baixo custo envolvido na operação, é o peneiramento.

No peneiramento, diversas peneiras são arranjadas em série e com aberturas de tamanhos decrescentes, ou seja, a primeira peneira possui a malha de maior abertura e a última peneira possui a malha de menor abertura. Quando uma amostra de partículas é passada através de uma dessas peneiras (de cima para baixo), as partículas com tamanho maior do que o tamanho da abertura dessa peneira ficam retidas, enquanto as partículas com tamanho menor passam por ela e, posteriormente, são retidas por alguma das peneiras subsequentes com abertura menor.

Com base no tamanho de abertura de cada uma das peneiras e na fração mássica da amostra que ficou retida em cada uma delas pode-se então determinar o diâmetro médio das partículas da amostra, conforme mostrado a seguir:

$$d_p = \frac{1}{\sum(x_i/\bar{d}_{pi})} = \frac{1}{\sum\left(\frac{x_i}{\frac{d_i + d_{i-1}}{2}}\right)}, \quad (2.1)$$

sendo que  $d_p$  é o diâmetro médio,  $x_i$  é a fração mássica retida na malha da peneira  $i$  e  $\bar{d}_{pi}$  é o diâmetro médio entre as aberturas de duas peneiras consecutivas.

A figura 2.1 mostra um exemplo de um conjunto de peneiras utilizadas em análises de distribuição de tamanho das partículas (distribuição granulométrica):

Figura 2.1 - Conjunto de peneiras para análise granulométrica de partículas.



Fonte: Vasconcelos, 2011.

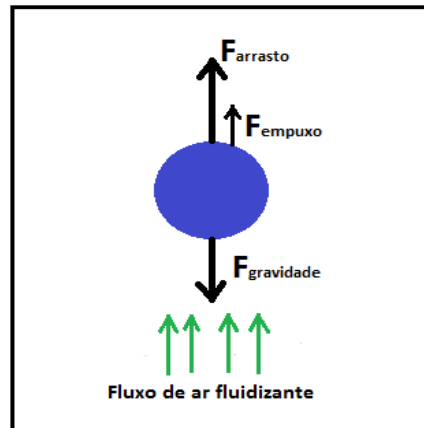
## 2.3 FLUIDIZAÇÃO

### 2.3.1 Fundamentos

Segundo Crowe (2006), o processo de fluidização ocorre quando um gás ou líquido é forçado a escoar verticalmente através de um leito de partículas com uma velocidade suficiente para que o peso aparente do leito seja completamente equilibrado pela força de arrasto imposta pelo fluido. Nesse momento, o leito de partículas ganha a aparência e propriedades de um fluido e, por isso, o processo é chamado de “fluidização”.

Na figura 2.2 pode-se observar as forças atuantes em uma partícula durante a fluidização do leito, nomeadamente, a força de arrasto devido ao escoamento do fluido (nesse caso o fluido é o ar), a força de empuxo devido ao deslocamento do fluido pela partícula sólida imersa e a força atuante na partícula devido à ação da gravidade (força peso):

Figura 2.2 - Balanço de forças em uma partícula do leito fluidizado



A maioria das aplicações de leitos fluidizados é para casos em que o fluido é um gás e, como as aplicações do processo de fluidização abordadas nesta dissertação estão relacionadas a leitos de alumina fluidizados por ar, o enfoque desse capítulo será a fluidização do tipo gás-sólido.

A atratividade da utilização de leitos fluidizados se deve ao fato de algumas de suas características serem interessantes para diversos tipos de processos, podendo-se citar entre essas características uma excelente taxa de mistura entre gás e partículas (importante para aplicações que envolvem processos de transferência de massa), excelente transferência de calor entre o leito e a superfície do equipamento, uniformidade de temperatura, etc. Tal processo também é utilizado em uma larga gama de indústrias diferentes como, por exemplo, a química, a petroquímica e a de alumínio primário.

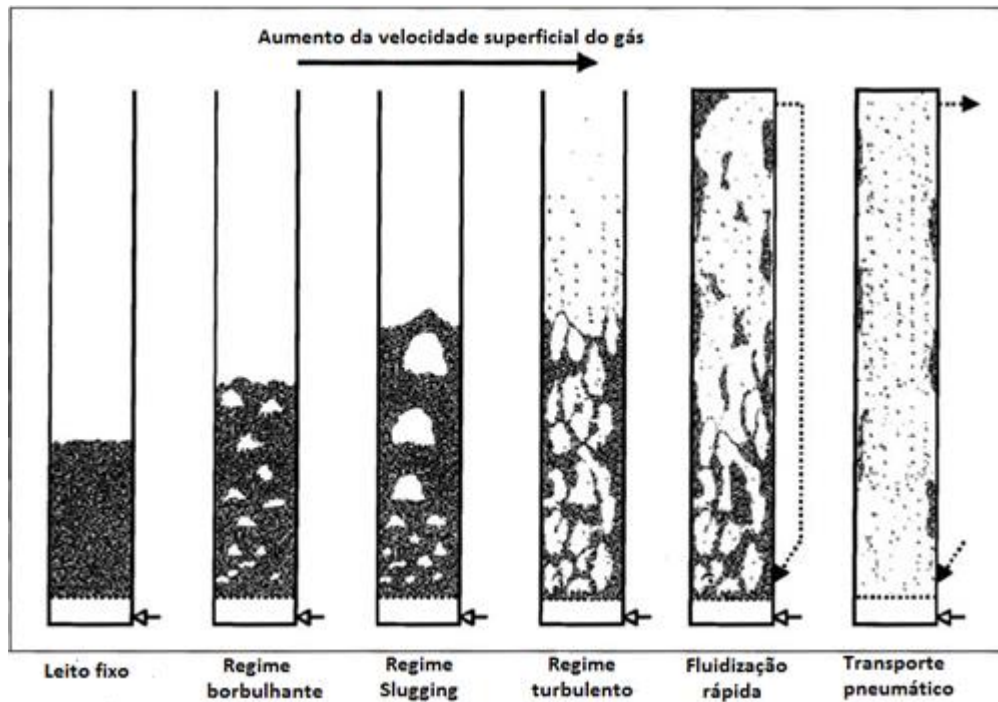
Os leitos fluidizados a gás normalmente exibem um número distinto de regimes de escoamento que variam em função do valor da velocidade superficial do gás, definida como a velocidade de aproximação do gás imediatamente antes de atravessar o leito, conforme definido na Eq. (2.2):

$$V = \frac{Q_g}{A}, \quad (2.2)$$

sendo que  $V$  e  $Q_g$  são, respectivamente, a velocidade superficial e a vazão volumétrica do gás, enquanto  $A$  é a área da seção transversal do dispositivo que contém o leito de partículas.

A figura 2.3 exibe os principais regimes de fluidização do tipo gás-sólido em função da velocidade superficial do gás:

Figura 2.3 – Regimes de escoamento do tipo gás-sólido



Fonte: Adaptado de Crowe (2006).

O primeiro regime de escoamento mostrado na figura 2.3 (da esquerda para a direita) é o regime de leito fixo, no qual as posições relativas das partículas permanecem constantes ao longo do tempo, enquanto o fluido escoar pelos espaços existentes entre essas partículas. Aumentando-se gradativamente a velocidade superficial do fluido, atinge-se em determinado momento uma condição em que a soma das forças de arrasto e empuxo aplicadas pelo gás sobre o leito de partículas é igual ao peso desse leito (equilíbrio de forças). Nesse momento diz-se que o leito saiu da condição de leito fixo e está na condição de mínima fluidização, sendo a velocidade do fluido correspondente a este estado conhecida como velocidade de mínima fluidização.

O aumento da velocidade do fluido a partir da velocidade de mínima fluidização leva o leito ao segundo regime de escoamento mostrado na figura 2.3, chamado de regime de fluidização borbulhante devido ao surgimento de algumas bolhas no sistema. Com o aumento da velocidade do fluido, as bolhas do sistema irão

coalescer (unir) e, conseqüentemente, aumentar de tamanho. Neste caso, o regime de escoamento passa a ser chamado de regime de fase densa lenta ou regime de *slugging* e as bolhas podem chegar a ter tamanhos comparáveis ao diâmetro do equipamento de fluidização.

Segundo Vasconcelos (2011), se as partículas são fluidizadas a uma vazão bastante alta, a superfície superior plana do leito desaparece e, em vez de bolhas com formato regular, observa-se o movimento turbulento de camadas sólidas e bolhas de gás de formas e tamanhos variados, sendo neste caso o regime de escoamento chamado de regime turbulento. Com o aumento adicional da velocidade do fluido a partir da condição de regime turbulento o leito fluidizado torna-se disperso (baixa concentração local de partículas), uma parte das partículas começa a ser arrastada e o regime de escoamento passa a ser chamado de regime de fluidização rápida. Por fim, aumentando-se ainda mais a velocidade do fluido, todo o material particulado passa a ser arrastado pela corrente de gás e o regime de escoamento passa a ser chamado de regime de transporte pneumático, apresentando aparência conforme mostrado na Figura 2.3.

A porosidade do leito de partículas também é um parâmetro importante para a análise de leitos fluidizados, sendo a mesma definida como a razão entre o volume ocupado pelo gás entre as partículas do leito e o volume total do leito, ou seja:

$$\varepsilon = \frac{V_g}{V_g + V_p} = \frac{V_g}{V_{total}} \quad (2.3)$$

sendo que  $\varepsilon$  e  $V_{total}$  são, respectivamente, a porosidade e o volume total do leito, enquanto  $V_g$  e  $V_p$  são, respectivamente, o volume ocupado pelo gás intersticial e o volume ocupado pelas partículas do leito.

A compreensão das características dos vários regimes de escoamento dos leitos fluidizados a gás é de grande importância para o projeto do sistema de fluidização e, assim, os principais conceitos necessários à análise de tais regimes serão abordados nas próximas seções.

### 2.3.2 Número de Stokes (St)

Segundo Crowe (2006), o tempo que uma partícula leva para responder a mudanças na temperatura e na velocidade de um fluido com o qual ela interage é importante para o estabelecimento de parâmetros adimensionais capazes de caracterizar o escoamento. Como as aplicações abordadas neste trabalho envolvem apenas escoamentos isotérmicos, não se considerará aqui as mudanças de temperatura do fluido. Quanto às mudanças de velocidade do fluido, Crowe (2006) define o tempo de relaxação da partícula ou tempo de resposta da partícula como:

$$t = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_f}, \quad (2.4)$$

sendo que  $\rho_p$  e  $d_p$  são, respectivamente, a massa específica e o diâmetro da partícula e  $\mu_f$  é a viscosidade do fluido.

Utilizando-se o conceito de tempo de relaxação citado acima, ou seja, o tempo necessário para mudanças significativas na velocidade da partícula devido a mudanças na velocidade do fluido adjacente, pode-se então definir o número de Stokes, que é um parâmetro muito importante para escoamento bifásicos do tipo gás-sólido e que pode ser representado por:

$$St = \frac{t}{t_f} = \frac{tv_g}{d_p}, \quad (2.5)$$

sendo que  $t_f$  é uma escala de tempo característica do escoamento do fluido como, por exemplo, o tempo relacionado ao escoamento ao longo de uma distância equivalente a 1 (um) diâmetro da partícula, definido na equação 2.5 como  $t_f = d_p/v_g$ , sendo  $v_g$  a velocidade do gás.

Se  $St \gg 1$ , o tempo de resposta da partícula é muito maior do que o tempo característico associado com o campo de escoamento, o que indica que a partícula não terá tempo suficiente para responder (mudar sua velocidade) devido a uma mudança de velocidade do fluido até que outra mudança significativa ocorra no sistema. Resumindo, neste caso a velocidade das partículas será pouco afetada pelas mudanças de velocidade do fluido.



Por outro lado, se  $St \ll 1$ , o tempo de resposta da partícula é muito menor do que o tempo característico associado com o campo de escoamento, o que indica que a partícula responderá prontamente às mudanças de velocidade do fluido e as velocidades de ambos, fluido e partícula, serão sempre aproximadamente iguais (equilíbrio de velocidade).

### 2.3.3 Queda de pressão através de um leito fixo de partículas

Como pode ser observado na figura 2.3, antes de chegar à condição de fluidização o leito de partículas passa pelo regime de leito fixo e, assim, a análise de queda de pressão do fluido nesse regime de escoamento também é importante. Conforme discutido mais adiante neste capítulo, os valores da queda de pressão do fluido no leito fixo são partes integrantes da curva de fluidização de um leito de partículas.

Um leito fixo de partículas pode ser definido como uma determinada quantidade de partículas na qual as mesmas ocupam posições fixas e o fluido escoar pelos espaços existentes entre elas. Assim como no escoamento de um fluido em uma tubulação, o escoamento através de um leito de partículas causa uma queda de pressão nesse fluido. De acordo com Rhodes (2008), para um leito fixo formado por partículas esféricas que estão aleatoriamente distribuídas e possuem todas o mesmo tamanho, a queda de pressão do fluido em escoamento laminar pode ser determinada pela seguinte equação:

$$\frac{(-\Delta P)}{H} = 180 \frac{\mu_f V (1 - \varepsilon)^2}{d_p^2 \varepsilon^3} \quad (2.6)$$

Esta equação é conhecida como **equação de Carman-Kozeny**, já que resulta dos trabalhos de Kozeny (1927, 1933) e Carman (1937). Na equação 2.6,  $H$  é a altura do leito fixo de partículas,  $(-\Delta P)$  é a queda de pressão através desse leito,  $\mu_f$  e  $V$  são, respectivamente, a viscosidade e a velocidade superficial do fluido,  $d_p$  é o diâmetro da partícula e  $\varepsilon$  é a porosidade do leito fixo. Para escoamentos turbulentos, considerando-se a massa específica do fluido ( $\rho_f$ ), a equação equivalente possui a seguinte forma:

$$\frac{(-\Delta P)}{H} = 1,75 \frac{\rho_f V^2 (1 - \varepsilon)}{d_p \varepsilon^3} \quad (2.7)$$

Baseado em dados experimentais, Ergun (1952) sugeriu a seguinte equação geral para a queda de pressão através de um leito fixo:

$$\frac{(-\Delta P)}{H} = 150 \frac{\mu_f V (1 - \varepsilon)^2}{d_p^2 \varepsilon^3} + 1,75 \frac{\rho_f V^2 (1 - \varepsilon)}{d_p \varepsilon^3} \quad (2.8)$$

Esta equação é conhecida como **equação de Ergun** e é válida para escoamento através de leitos fixos de partículas esféricas de mesmo tamanho e empacotadas (dispostas espacialmente) de maneira aleatória, apesar de que ela pode ser estendida para o uso com partículas de forma não esférica, conforme descrito mais adiante neste capítulo.

Deve-se observar que a equação de Ergun (1952) combina aditivamente os componentes laminar e turbulento da queda de pressão. Sob condições de escoamento laminar o primeiro termo do lado direito dessa equação passa a ser dominante e ela se reduz à equação de Carman-Kozeny, mas com a constante 150 ao invés de 180. De acordo com Rhodes (2008), esta diferença nos valores das constantes é provavelmente devido à diferenças na forma e no empacotamento das partículas. Ainda desse primeiro termo pode-se observar que sob condições laminares a queda de pressão do fluido aumenta linearmente com a sua velocidade superficial e de forma independente da sua massa específica.

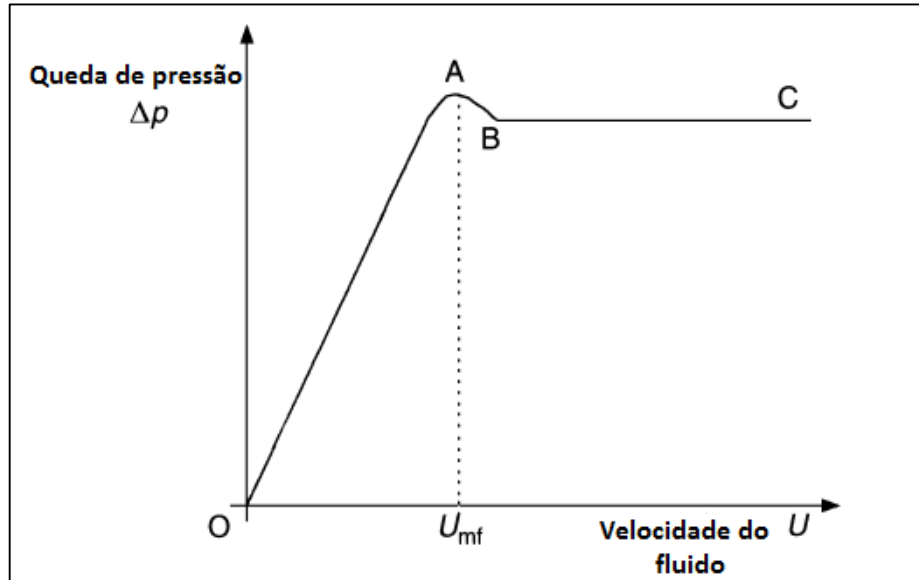
Sob condições de escoamento turbulento o segundo termo do lado direito da equação de Ergun (1952) passa a ser dominante e o gradiente de pressão passa a ser diretamente proporcional à segunda potência da velocidade superficial do fluido e independente de sua viscosidade.

#### 2.3.4 Curva de fluidização e queda de pressão em leitos fluidizados

A queda de pressão do fluido através de um leito de partículas é uma função da sua velocidade superficial e, para representar tal comportamento, utiliza-se normalmente um gráfico conhecido como “curva de fluidização”, no qual a queda de

pressão é plotada em função da velocidade superficial do fluido, conforme mostrado na figura 2.4:

Figura 2.4 – Curva de fluidização para leito de partículas.



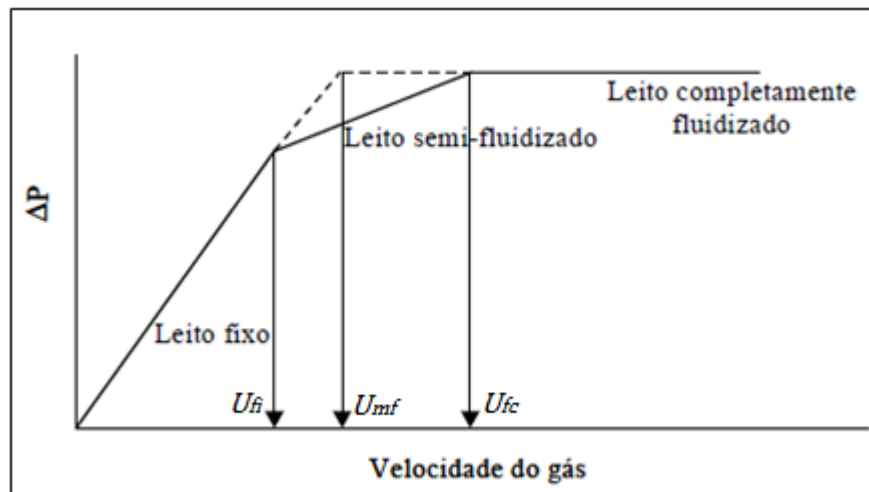
Fonte: Adaptado de Rhodes (2008).

Na curva mostrada na figura 2.4, a região da linha reta OA é a região de leito fixo, onde as partículas sólidas não se movem umas em relação as outras e a sua separação é constante ao longo do tempo. Nesta região o relacionamento entre a queda de pressão e a velocidade do fluido é descrito por meio da equação de Karman-Kozeny no regime de escoamento laminar e pela equação de Ergun (1952) no caso mais geral, conforme discutido na seção anterior.

A região da linha BC na figura 2.4 corresponde à região de velocidades para as quais o leito já está fluidizado. De acordo com Rhodes (2008), a velocidade superficial do fluido para a qual o leito fixo passa a se comportar como leito fluidizado (transição) é comumente chamada de velocidade mínima de fluidização ( $U_{mf}$ ).

Conforme explicado em Lourenço (2012), para algumas misturas de partículas com diferentes características como, por exemplo, o tamanho das partículas, a curva de fluidização apresenta uma forma um pouco diferente da apresentada na figura 2.4. Nesse caso ela passa a ter a seguinte forma:

Figura 2.5 – Curva de fluidização para misturas de partículas



Fonte: Lourenço, 2012.

Na figura 2.5 observa-se que com o aumento da velocidade do gás agora existe uma região de transição logo após a região de leito fixo chamada de região de leito semi-fluidizado. Nesta figura, a abcissa do ponto de intersecção entre as curvas de leito fixo e de leito semi-fluidizado corresponde à velocidade de fluidização incipiente ou iniciante ( $U_{fi}$ ), enquanto a abcissa do ponto de intersecção das curvas de leito semi-fluidizado e de leito completamente fluidizado equivale à velocidade de fluidização completa ou plena ( $U_{fc}$ ). Por último, a velocidade mínima de fluidização ( $U_{mf}$ ) é representada pela abcissa correspondente ao ponto de intersecção entre as curvas de leito fixo e de leito completamente fluidizado.

Quando o leito já está fluidizado, a força de arrasto do fluido equilibra o peso aparente do leito de partículas (peso menos a força de empuxo) e, assim, um balanço de forças indica que a queda de pressão do fluido é igual ao peso aparente por unidade de área da seção transversal do leito (Rhodes, 2008):

$$\text{Queda de pressão} = \frac{\text{Peso do leito} - \text{Força de empuxo}}{\text{Área da seção transversal do leito}}, \quad (2.9)$$

ou ainda

$$(-\Delta P) = \frac{HA(1 - \varepsilon)(\rho_p - \rho_f)g}{A} = H(1 - \varepsilon)(\rho_p - \rho_f)g, \quad (2.10)$$

Sendo que na equação 2.10,  $\varepsilon$ ,  $H$  e  $A$  são, respectivamente, a porosidade, a altura e a área da seção transversal do leito,  $\rho_p$  e  $\rho_f$  são a massa específica das partículas e do fluido e  $g$  é a aceleração da gravidade.

Como a equação 2.10 representa a queda de pressão do fluido para o leito em condição de fluidização ela corresponde à região BC da figura 2.4 e, portanto, possui um valor constante independentemente da velocidade do fluido, desde que essa velocidade seja igual ou maior do que a velocidade de mínima fluidização e menor do que as velocidades correspondentes ao regime de transporte pneumático.

### 2.3.5 Correlações para a velocidade mínima de fluidização

A determinação da velocidade mínima de fluidização para um determinado leito de partículas é importante para a adequada utilização de tal processo, já que para velocidades menores do que essa o leito não está fluidizado e não consegue-se obter as taxas de mistura desejadas entre o fluido e as partículas, enquanto para velocidades muito maiores do que essa as partículas são transportadas pelo fluido.

Como a condição de mínima fluidização representa a transição entre os regimes de leito fixo e de leito fluidizado é possível escrever uma expressão semi-empírica para a determinação dessa velocidade igualando-se as equações de queda de pressão para leito fixo e para leito fluidizado. Introduzindo-se o conceito de esfericidade da partícula na equação de Ergun (1952) da queda de pressão em leitos fixos (Eq. 2.8) a fim de contabilizar o efeito da forma de partículas não esféricas e igualando-se esta equação à equação da queda de pressão em leitos fluidizados (Eq. 2.10) obtêm-se uma equação da seguinte forma:

$$(1 - \varepsilon_{mf})(\rho_p - \rho_f)g = 150 \frac{(1 - \varepsilon_{mf})^2}{\varepsilon_{mf}^3} \frac{\mu V_{mf}}{(\phi d_p)^2} + 1,75 \frac{(1 - \varepsilon_{mf})}{\varepsilon_{mf}^3} \frac{\rho_f V_{mf}^2}{\phi d_p} \quad (2.11)$$

sendo que  $\varepsilon_{mf}$  e  $V_{mf}$  são, respectivamente, a porosidade e a velocidade de mínima fluidização e  $\phi$  é a esfericidade da partícula. A esfericidade é uma medida de quanto a forma de uma partícula se aproxima da forma de uma esfera, podendo ser definida como a área da superfície de uma esfera que possua o mesmo volume da partícula

dividida pela área da superfície dessa partícula. Assim, a esfericidade de uma partícula esférica é igual a 1 e a esfericidade de partículas que não sejam esféricas é menor do que 1. Para mais detalhes sobre a determinação experimental da esfericidade das partículas de alumina utilizadas neste trabalho deve-se consultar Lourenço (2012).

A Equação 2.11 pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$C = AV_{mf} + BV_{mf}^2 \quad (2.12)$$

Como pode-se observar, a equação acima é uma equação do segundo grau, cuja solução é dada por:

$$V_{mf} = \frac{-A \pm \sqrt{A^2 - 4BC}}{2B} \quad (2.13)$$

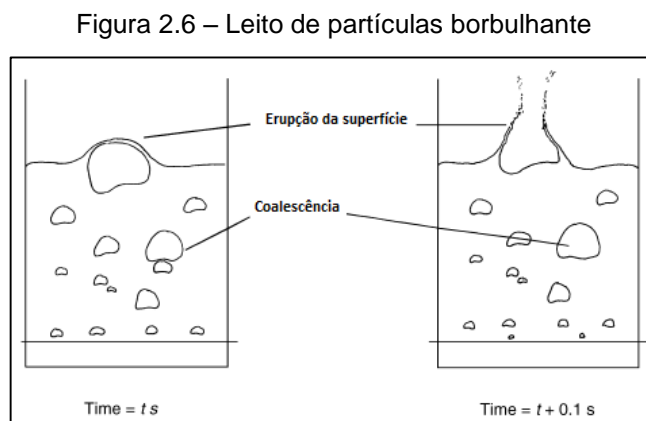
sendo que A e B são, respectivamente os fatores viscoso e inercial da equação de Ergun (1952). De acordo com Vasconcelos e Mesquita (2011), como a fluidização está normalmente relacionada à velocidades relativamente baixas o fator B (e, portanto,  $BV_{mf}^2$ ) pode ser negligenciado e a Equação 2.13 pode ser simplificada com um erro menor do que 5% para a seguinte forma:

$$V_{mf} = \frac{C}{A} = \frac{(\rho_p - \rho_f)g\varepsilon_{mf}^3(\phi d_p)^2}{150(1 - \varepsilon_{mf})\mu} \quad (2.14)$$

Também de acordo com Vasconcelos e Mesquita (2011), muitos pesquisadores tem tentado evitar a dificuldade de obtenção experimental da porosidade na mínima fluidização e da esfericidade da partícula requeridas para a resolução da equação 2.14. Para isso eles vem desenvolvendo equações que permitem determinar a velocidade mínima de fluidização somente com parâmetros que tenham valores de mais fácil acesso como  $\rho_p$ ,  $\rho_f$ ,  $d_p$ ,  $\mu$ , e  $g$ . Para maiores detalhes sobre equações desse tipo deve-se consultar, por exemplo, o trabalho de Vasconcelos (2011), bem como os trabalhos desenvolvidos por Coltters e Rivas (2004), Leva (1959), Abrahamsen e Geldart (1980), Wen e Yu (1966), Miller e Logwinuk (1951).

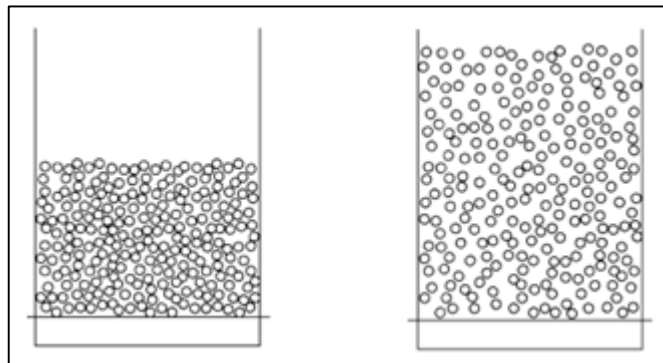
### 2.3.6 Fluidização borbulhante e não borbulhante

Para velocidades iguais ou maiores do que a de mínima fluidização algumas bolhas ou “espaços vazios de partículas” podem aparecer no leito fluidizado. Na Figura 2.6 pode-se observar tais bolhas e os fenômenos de coalescência (união) e erupção pelos quais elas podem passar. Já na Figura 2.7 pode-se observar o aumento uniforme da porosidade em um leito não borbulhante:



Fonte: Rhodes, 2008.

Figura 2.7 – Expansão uniforme em um leito não borbulhante



Fonte: Rhodes, 2008

A fluidização não borbulhante é também conhecida como fluidização homogênea ou particulada, enquanto a fluidização borbulhante é também conhecida como fluidização heterogênea ou agregativa.

A formação de leitos borbulhantes ou não borbulhantes normalmente é uma função da combinação de determinados tipos de fluidos e partículas. Na próxima

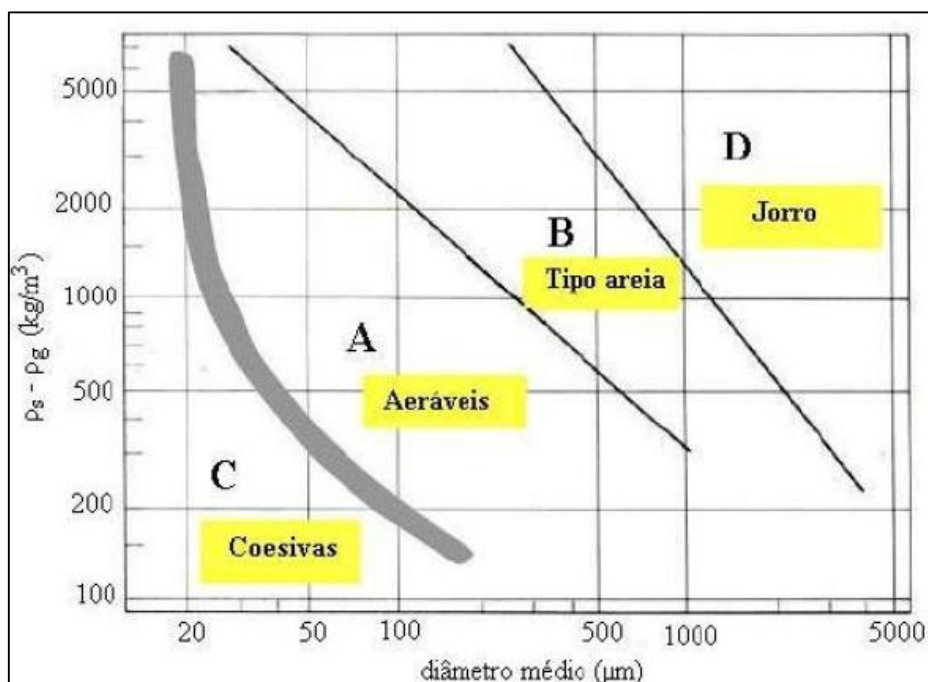
seção é apresentada uma classificação de partículas que permite prever quais tipos de partículas passam por um, por outro, ou por ambos os tipos de fluidização.

### 2.3.7 Classificação de Geldart para as partículas

De acordo com as suas características durante a fluidização em condições ambiente, as partículas foram classificadas por Geldart (1973) em quatro grupos distintos, nomeadamente, os grupos A, B, C e D. Essa classificação é amplamente utilizada nos dias atuais em todos os campos de aplicação da tecnologia de partículas.

A figura 2.8 mostrada a seguir ilustra como esses quatro grupos estão relacionados com as propriedades do gás e das partículas:

Figura 2.8 – Classificação de Geldart para as partículas



Fonte: Macias, 2013

No grupo A estão inclusas as partículas que quando fluidizadas por ar em condições ambiente exibem primeiramente um comportamento de fluidização não borbulhante quando a velocidade do ar é igual à velocidade de mínima fluidização, passando para um comportamento de fluidização borbulhante a medida que a velocidade do fluido é aumentada acima dessa velocidade.

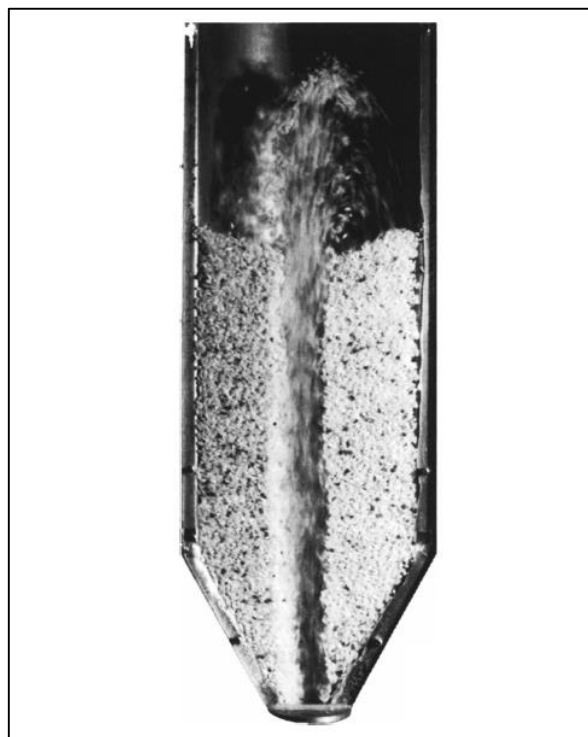


No grupo B estão inclusas as partículas que quando fluidizadas por ar em condições ambiente exibem somente o comportamento de fluidização borbulhante, desde a velocidade de mínima fluidização.

No grupo C as partículas são finas e as forças inter-partículas são relativamente grandes quando comparadas com as forças inercias que agem sobre as partículas do leito. Devido à essa característica de coesão, não formam-se bolhas através do leito e, ao invés disso, o fluxo de gás forma canais de escoamento através do leito, que não fluidiza no sentido estrito da palavra.

O grupo D é formado por partículas relativamente grandes em relação às dos outros grupos e pouco coesivas. A fluidização deste tipo de material, geralmente chamada de fluidização do tipo jorro, é exemplificada na figura 2.9:

Figura 2.9 – Fluidização do tipo jorro de grãos de arroz.



Fonte: Rhodes, 2008

O conhecimento prévio do tipo de partículas com que se vai trabalhar pode facilitar o trabalho do engenheiro em vários aspectos como, por exemplo, na escolha inicial do tipo de modelo de força de interação DEM que será utilizado na simulação computacional de um determinado leito.

## 2.4 ANÁLISE COMPUTACIONAL DE LEITOS FLUIDIZADOS

### 2.4.1 Modelo computacional

Define-se aqui o modelo computacional como sendo o conjunto formado por todas as hipóteses simplificadoras, características da malha CFD, resolução de partículas (tamanho e número), modelos matemáticos de processos físicos e valores de parâmetros adotados para a configuração desses modelos matemáticos.

Sempre que forem citados modelos relacionados a processos físicos específicos eles serão chamados simplesmente pelo nome “modelo”, acompanhado de especificações que facilitem a identificação do processo físico ao qual eles se referem como, por exemplo, “modelo de força de colisão LSD” ou “modelo LSD”.

### 2.4.2 Abordagens Euler-Euler, Euler-Lagrange e Híbrida

#### 2.4.2.1 *Conceituação básica*

Atualmente existem duas grandes vertentes para a análise numérica de escoamentos bifásicos gás-sólido, nomeadamente, as abordagens Euler-Euler e Euler-Lagrange, sendo que um tipo de abordagem conhecida como “híbrida” é, na verdade, um caso particular da abordagem Euler-Lagrange, conforme explicado posteriormente.

Na abordagem Euler-Euler, tanto a fase gasosa quanto a fase particulada são analisadas de um ponto de vista euleriano, ou seja, apesar de as partículas sólidas serem entidades individuais, o seu conjunto é tratado como se fosse um meio contínuo, da mesma forma que se faz na abordagem Euleriana de um fluido, onde os espaços intermoleculares são desprezados e o fluido é tratado como um meio contínuo.

Por ser tratada como um meio contínuo na abordagem Euler-Euler, a fase particulada pode ser considerada como um “pseudo-fluido” e a análise do seu movimento pode então ser realizada por meio de equações governantes semelhantes às equações governantes do comportamento dos fluidos propriamente ditos.

Normalmente o modelo que utiliza a abordagem Euleriana-Euleriana é chamado de **Modelo Multifluidos**, quando mais de duas fases estão presentes, **Modelo de Dois Fluidos**, quando somente duas fases estão presentes no sistema como no caso de escoamentos bifásicos gás-sólido e, muitas vezes, de **Modelo Euleriano-Euleriano** ou **Modelo Euler-Euler**.

Segundo ANSYS inc. (2011), durante vários anos essa foi a única alternativa de análise de escoamentos gás-sólido densos no *software* ANSYS FLUENT, principalmente devido ao fato de que as equações governantes do modelo multifluidos consideram a presença de altas concentrações da fase particulada no sistema por meio da inserção do conceito de fração volumétrica das fases nas equações governantes, conforme mostrado em seções posteriores deste trabalho.

Nos casos de escoamento denso (alta concentração de partículas presentes), as interações partícula-partícula não podem ser negligenciadas e, normalmente, são modeladas no modelo multifluidos por meio de uma aproximação ditada pela teoria cinética dos escoamentos granulares, que nada mais é do que uma analogia com a teoria cinética dos gases (Gidaspow, 1994).

Já no caso da abordagem Euler-Lagrange, a fase fluida é tratada com a abordagem Euleriana e a fase particulada é analisada com uma abordagem Lagrangiana, onde o movimento das partículas individuais é “rastreado” por meio das equações do movimento de Newton.

Dependendo da quantidade relativa de material particulado presente no sistema, o uso da abordagem Euler-Lagrange na modelagem computacional de escoamentos gás-sólido pode seguir duas vertentes distintas, uma para escoamentos com baixas concentrações de partículas (diluto ou diluído) e outra para escoamentos com altas concentrações de partículas (densos).

Nos casos de escoamentos gás-sólido dilutos, onde a fração volumétrica ocupada pela fase particulada no sistema é relativamente baixa, as interações partícula-partícula podem ser negligenciadas e, além disso, as equações governantes da fase fluida normalmente não precisam incluir o conceito de fração volumétrica para contabilizar a presença da fase particulada no sistema, já que o volume ocupado pelas partículas é relativamente pequeno.

Já nos casos de escoamentos gás-sólido densos, onde a fração volumétrica ocupada pela fase particulada no sistema é relativamente alta, as interações partícula-partícula não podem ser negligenciadas, já que elas ocorrem com grande frequência e, além disso, as equações governantes da fase fluida devem incluir o conceito de fração volumétrica para contabilizar a presença da fase particulada no sistema. Nesse caso, normalmente usa-se para a fase gasosa as mesmas equações do modelo multifluidos (que utiliza a abordagem Euler-Euler), já que elas incluem o conceito de fração volumétrica, enquanto que a fase particulada continua sendo tratada de forma lagrangeana por meio das equações do movimento de Newton. Apesar de ainda possuir natureza Euleriana-Lagrangeana, devido ao fato de esse tipo de abordagem utilizar as mesmas equações da abordagem Euler-Euler para a fase gasosa e as equações da abordagem Lagrangeana para a fase discreta (partículas), a mesma é normalmente chamada de **abordagem híbrida**.

No *software* ANSYS FLUENT e, portanto, nas simulações realizadas neste trabalho de dissertação de mestrado, a análise de leitos fluidizados (escoamentos densos) por meio do acoplamento CFD-DEM utiliza justamente este tipo de abordagem híbrida, onde a análise lagrangeana das partículas inclui as forças de interação partícula-partícula calculadas pelo DEM e a análise euleriana da fase fluida utiliza as mesmas equações governantes do modelo Euleriano-Euleriano.

### 2.4.3 Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD)

#### 2.4.3.1 *Conceituação básica*

Segundo Zikanov (2010), a Dinâmica dos Fluidos Computacional, comumente chamada de CFD (*Computational Fluid Dynamics*), é um conjunto de métodos numéricos aplicados na obtenção de soluções aproximadas de problemas das áreas de Dinâmica dos Fluidos e fenômenos associados (combustão, transferência de calor e massa, etc.)

Pode-se dizer também que a CFD não é uma ciência por si só, mas sim uma maneira de aplicar os métodos de uma disciplina (análise numérica) à uma outra disciplina (Dinâmica dos Fluidos e fenômenos associados).

A atratividade da CFD deve-se ao fato de que a maioria dos problemas práticos que envolvem escoamento de fluido são normalmente descritos em termos de modelos matemáticos compostos por conjuntos de equações diferenciais parciais difíceis ou mesmo impossíveis de serem resolvidas analiticamente, principalmente devido à sua não-linearidade. Desse modo, com o uso da CFD o conjunto de equações diferenciais parciais é convertido em um conjunto de equações algébricas, cuja solução é capaz de fornecer soluções aproximadas, mas com um nível de aproximação aceitável para a prática da engenharia.

Para atingir seu objetivo, a aplicação da CFD requer a discretização da região de análise, alcançada por meio da “divisão” ou “particionamento” de um modelo geométrico computacional criado para representar a região de análise e chamado de **domínio computacional**.

Apesar de existirem diversos métodos utilizados para a discretização do domínio computacional, um dos métodos mais utilizados para essa tarefa é conhecido como Método dos Volumes Finitos (FVM), sendo este o método implementado em alguns dos *softwares* de análise CFD mais utilizados como, por exemplo, os *softwares* ANSYS FLUENT, ANSYS CFX, STAR-CD e OpenFOAM.

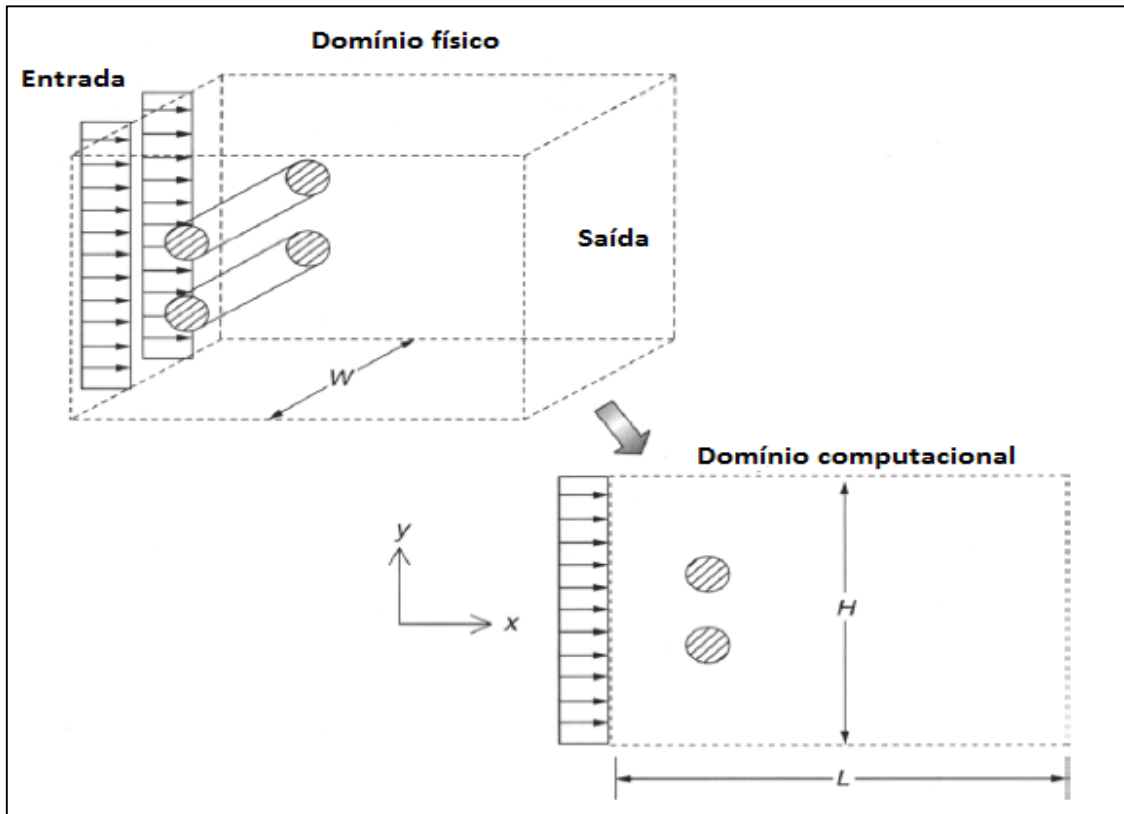
Ao domínio computacional discretizado, ou seja, sub-dividido em volumes finitos menores do que o domínio computacional, dá-se o nome de **malha computacional** e, frequentemente, **malha CFD**.

As características da malha CFD como, por exemplo, o número, tamanho e padrão de distribuição dos volumes finitos é fortemente dependente de fatores como o tipo de problema que se está analisando e a disponibilidade de recursos computacionais, já que quanto maior for o número de sub-divisões da malha (volumes finitos), maior será o tempo de cálculo exigido para completar uma simulação.

A escolha de representação da região de interesse por meio de domínios computacionais e malhas CFD tridimensionais ou bidimensionais normalmente depende da experiência e conhecimento dos fenômenos físicos e/ou químicos por parte de quem realiza as simulações. Quando as propriedades do fluido variam significativamente nas três dimensões deve usar domínio e malha 3D e, quando elas variam principalmente em duas dimensões, o domínio e a malha devem ser 2D.

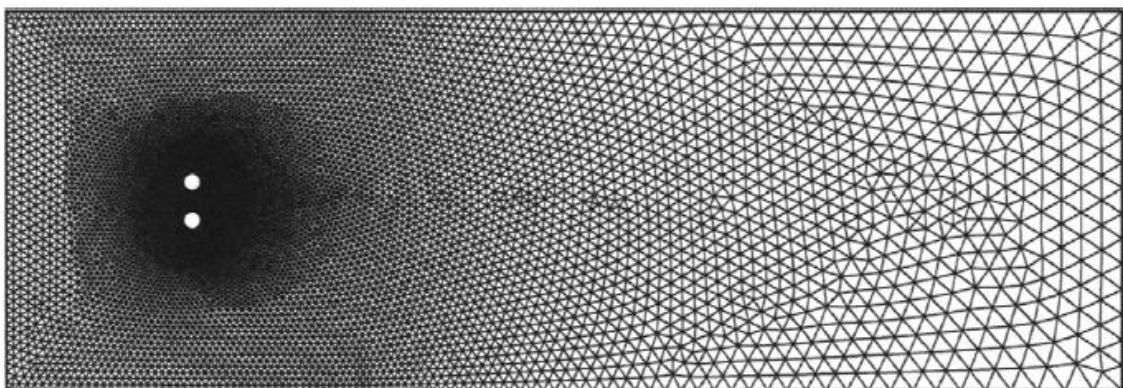
Nas figuras 2.10 à 2.13 mostradas a seguir pode-se observar alguns exemplos de domínios computacionais e suas correspondentes malhas CFD:

Figura 2.10 – Passagem de fluido sobre cilindros em ambiente aberto.



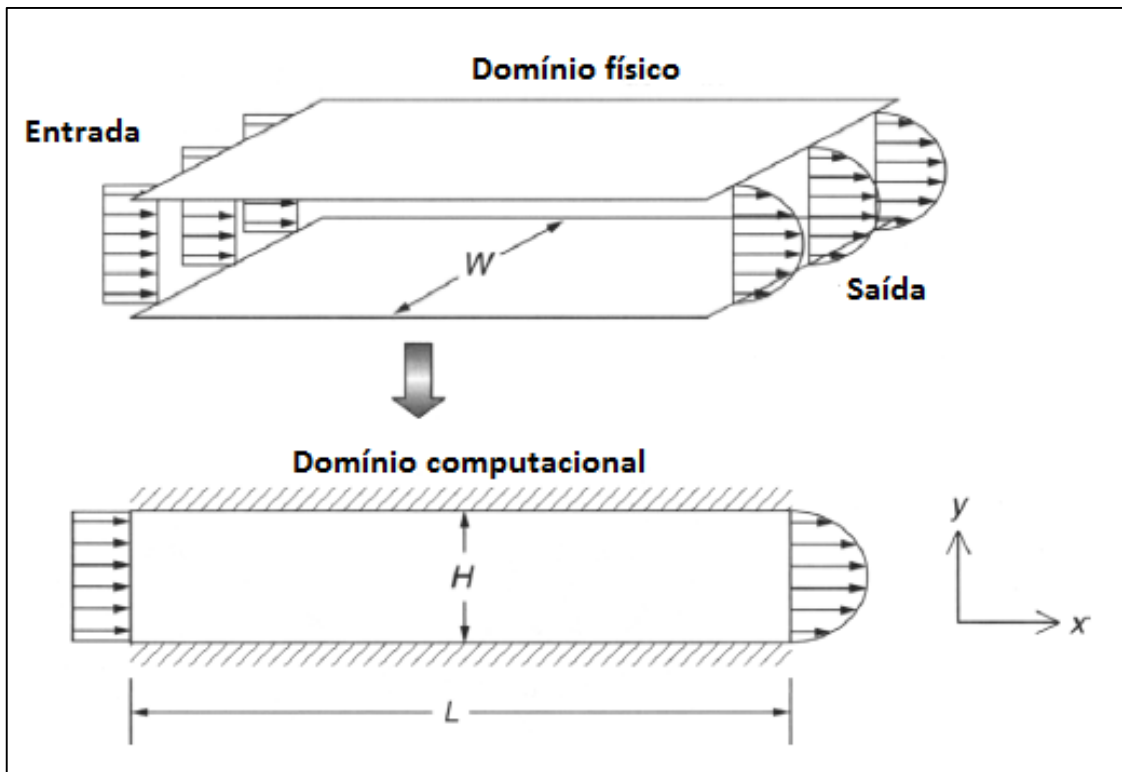
Fonte: Traduzido de Tu *et al.* (2008).

Figura 2.11 – Malha 2D do tipo não estruturada aplicável ao problema da Figura 2.10



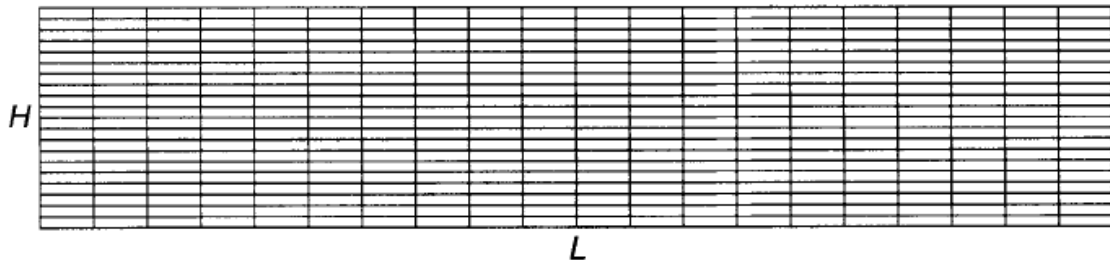
Fonte: Tu *et al.*, 2008.

Figura 2.12 – Escoamento de fluido entre duas placas estacionárias



Fonte: Traduzido de Tu *et al.* (2008).

Figura 2.13 – Malha 2D do tipo estruturada aplicável ao problema da Figura 2.12



Fonte: Tu *et al.*, 2008.

As figuras 2.10 à 2.13 exemplificam as considerações sobre o domínio físico do problema (região real de interesse), o domínio computacional (representação simplificada) e a correspondente malha computacional. A malha CFD mostrada na figura 2.11 é um tipo de malha comumente chamada de malha não estruturada, enquanto a malha CFD mostrada na figura 2.13 é um tipo de malha comumente chamada de malha estruturada.

Segundo Çengel e Cimbala (2007), uma **malha estruturada** é aquela em que a disposição das células (volumes finitos) obedece a um padrão organizacional

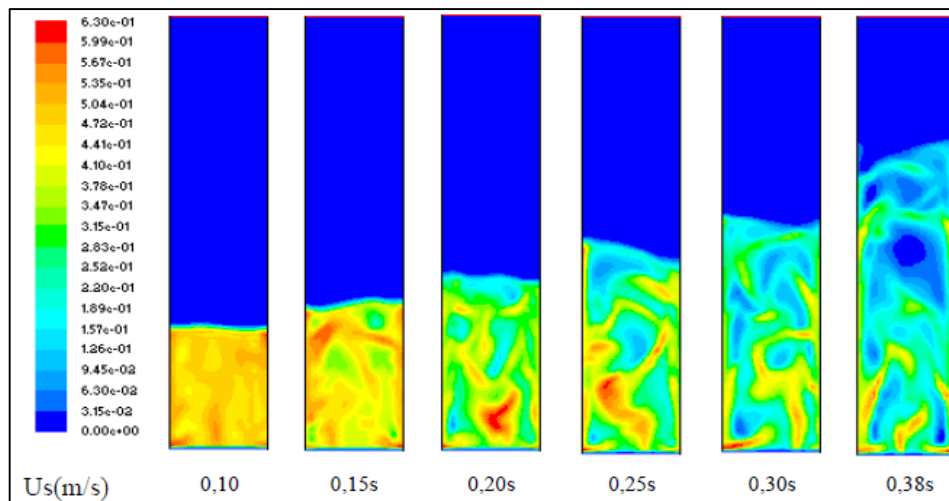
reconhecível que facilita a localização de cada uma dessas células. Uma malha **não estruturada** é aquela em que esse padrão de distribuição espacial das células não está presente e uma **malha híbrida** é aquela que possui tanto características de malha estruturada quanto de malha não estruturada.

Os leitores interessados nos demais conceitos relacionados não só a malhas CFD, mas também na aplicabilidade da CFD em problemas de caráter geral podem consultar a literatura especializada sobre o tema como, por exemplo, Zikanov (2010) e Tu *et al.* (2008).

Quanto à aplicabilidade da CFD na simulação computacional de leitos fluidizados, diversos trabalhos tem sido publicados ao longo dos últimos anos, principalmente com o uso da abordagem Euler-Euler descrita na seção anterior como, por exemplo, o trabalho de Lourenço (2012), que também realizou experimentos físicos no leito.

Na figura 2.14 mostrada a seguir pode-se observar alguns resultados obtidos por Lourenço (2012) com o uso da CFD e da abordagem Euler-Euler:

Figura 2.14 – Resultados CFD para expansão de um leito de partículas de alumina.



Fonte: Lourenço, 2012.

Por ser o método de análise computacional mais utilizado até hoje para leitos fluidizados e por fazer parte das análises comparativas desta dissertação, a próxima seção dedica-se exclusivamente à formulação matemática do modelo multifluidos (Euler-Euler). Novamente, conforme mencionado na seção anterior, tais



equações também fazem parte da formulação híbrida adotada no acoplamento CFD-DEM, com a diferença de que com este método de acoplamento as interações entre as partículas não são modeladas pela teoria cinética dos escoamentos granulares.

#### 2.4.3.2 Formulação matemática do modelo multifluidos (Euler-Euler)

Durante a modelagem de escoamentos multifásicos com a abordagem multifluidos (Euleriana-Euleriana), o tratamento das fases sólidas como sendo “pseudo fluidos” faz com que as equações governantes para essas fases possuam a mesma forma das equações resolvidas para as fases fluidas reais. Entretanto, tanto as equações da fase fluida quanto as da fase sólida (pseudo fluido) possuem algumas diferenças fundamentais em relação às equações governantes para escoamentos monofásicos, sendo as principais diferenças a consideração dos conceitos de fração volumétrica e massa específica efetiva.

A fração volumétrica, denotada aqui por  $\alpha_q$  representa a fração de um determinado volume que é ocupada por uma determinada fase. Assim, para satisfazer os princípios básicos de conservação, a soma das frações volumétricas de todas as fases do sistema deve ser igual a 1, conforme equação a seguir:

$$\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1, \quad (2.15)$$

sendo que  $q$  representa qualquer uma das fases do sistema,  $\alpha_q$  é a fração volumétrica dessa fase e  $n$  o número de fases (fluidos e pseudo fluidos) no sistema. Quando o valor de  $n$  é igual ou maior do que 3 o modelo é chamado de modelo multifluidos e quando  $n$  é igual a 2 o modelo é chamado de modelo de dois fluidos.

Utilizando-se o conceito de fração volumétrica, a massa específica efetiva pode ser definida como (ANSYS inc., 2011):

$$\hat{\rho}_q = \alpha_q \rho_q, \quad (2.16)$$

sendo que  $\hat{\rho}_q$  e  $\rho_q$  são, respectivamente a massa específica efetiva e a massa específica física real da fase “ $q$ ”.

Utilizando-se o conceito de massa específica efetiva, as equações governantes do movimento de um fluido ou pseudo fluido "q" no contexto do modelo multifluidos podem ser escritas de forma generalizada, conforme mostrado a seguir:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) = \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} + \dot{m}_{qp}) + S_q \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) = -\alpha_q \nabla P + \nabla \cdot \bar{\tau}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \\ & + \sum_{p=1}^n (\vec{R}_{pq} + \dot{m}_{pq} \vec{v}_{pq} - \dot{m}_{qp} \vec{v}_{qp}) + (\vec{F}_q + \vec{F}_{lift,q} + \vec{F}_{wl,q} + \vec{F}_{vm,q} + \vec{F}_{td,q}) \end{aligned} \quad (2.18)$$

As equações 2.17 e 2.18 são, respectivamente, as equações da continuidade e da conservação da quantidade de movimento para uma fase  $q$ . Nestas equações,  $\vec{g}$  é a aceleração da gravidade,  $n$  é o número total de fases no sistema,  $P$  é a pressão e,  $\alpha_q$ ,  $\rho_q$  e  $\vec{v}_q$  são, respectivamente, a fração volumétrica, a massa específica real e o vetor velocidade da fase  $q$ . O termo  $S_q$  é um termo fonte/sumidouro de massa da fase  $q$  que pode ser definido como um valor constante ou variável.

O termo  $\vec{F}_q$  representa uma força de campo externa diferente da força da gravidade como, por exemplo, uma força eletromagnética e  $\vec{F}_{lift,q}$  é uma força de sustentação. O termo  $\vec{F}_{wl,q}$  é chamado de "força de lubrificação de parede" e é importante em problemas de escoamentos bifásicos líquido-gás onde é responsável por "empurrar" a fase secundária (bolhas) para longe das paredes. Já o termo  $\vec{F}_{vm,q}$  é uma força de massa virtual e  $\vec{F}_{td,q}$  é uma força de dispersão turbulenta.

Já  $\bar{\tau}_q$  é o tensor tensão-deformação da fase  $q$  e os termos  $\dot{m}_{pq}$  e  $\dot{m}_{qp}$  caracterizam, respectivamente, as taxas de transferência de massa da p-ésima para a q-ésima fase e da q-ésima para a p-ésima fase. Assim,  $\vec{v}_{pq}$  e  $\vec{v}_{qp}$  representam as velocidades das fases durante esses processos de transferências de massa (não confundir vazão mássica com velocidade da fase, apesar de estarem correlacionadas).

Segundo ANSYS inc. (2011), o “fechamento” da Equação 2.18 para a conservação do momento da fase  $q$  deve ser realizado por meio da escolha de expressões adequadas para o termo  $\vec{R}_{pq}$ , chamado de “termo de força de interação entre as fases” e que está sujeito as seguintes condições:

$$\vec{R}_{pq} = -\vec{R}_{qp}, \quad (2.19)$$

$$\vec{R}_{qq} = 0. \quad (2.20)$$

No *software* ANSYS FLUENT o termo mostrado na Eq.(2.18) para o somatório das forças de interação entre a fase  $q$  e as demais fases do sistema é representado na seguinte forma:

$$\sum_{p=1}^n \vec{R}_{pq} = \sum_{p=1}^n K_{pq} (\vec{v}_p - \vec{v}_q), \quad (2.21)$$

sendo que  $\vec{v}_p$  e  $\vec{v}_q$  são, respectivamente, as velocidades das fases  $p$  e  $q$ , e o termo  $K_{pq}$  ( $= K_{qp}$ ) é o **coeficiente de transferência de momento entre as fases**, também chamado de **coeficiente de troca na interface**.

Para escoamentos bifásicos do tipo gás-sólido esse coeficiente de troca pode ser chamado de **coeficiente de troca fluido-sólido** e pode ser representado por  $K_{ls}$ , onde o subscrito “s” significa “sólido” e o subscrito “l” significa “fluido”, podendo o mesmo ser escrito na seguinte forma geral:

$$K_{ls} = \frac{\alpha_s \rho_s f}{t}, \quad (2.22)$$

sendo que  $f$  é definido de maneira diferente para os diferentes **modelos de coeficiente de troca** (conforme descrito mais adiante) e “ $t$ ” é o “tempo de relaxação da partícula”, definido como:

$$t = \frac{\rho_s d_s^2}{18\mu_l} \quad (2.23)$$

sendo que  $d_s$  na equação 2.23 é o diâmetro médio das partículas da fase sólida e  $\mu_l$  é a viscosidade do fluido.

Todas as definições do parâmetro  $f$  incluem um coeficiente de arrasto ( $C_D$ ) baseado no número de Reynolds relativo ( $Re_s$ ), sendo justamente esse coeficiente que diferencia os vários modelos de coeficiente de troca.

Para o modelo de Syamlal-O'Brien (1989)  $f$  é definido como:

$$f = \frac{C_D Re_s \alpha_l}{24 v_{r,s}^2}, \quad (2.24)$$

enquanto o coeficiente de arrasto tem a forma dada por Dalla Valle (1948):

$$C_D = \left( 0,63 + \frac{4,8}{\sqrt{Re_s/v_{r,s}}} \right)^2, \quad (2.25)$$

e o coeficiente de troca na interface fluido-sólido assume a seguinte forma:

$$K_{ls} = \frac{3\alpha_s \alpha_l \rho_l}{4v_{r,s}^2 d_s} C_D \left( \frac{Re_s}{v_{r,s}} \right) |\vec{v}_s - \vec{v}_l| \quad (2.26)$$

Nas equações acima  $Re_s$  é o número de Reynolds relativo, definido por Richardson e Zaki (1954) como a seguir:

$$Re_s = \frac{\rho_l d_s |\vec{v}_s - \vec{v}_l|}{\mu_l} \quad (2.27)$$

Já  $v_{r,s}$  é a velocidade terminal das partículas, definida por Garside e Al-Dibouni (1977) como:

$$v_{r,s} = 0,5 \left( E - 0,06 Re_s + \sqrt{(0,06 Re_s)^2 + 0,12 Re_s (2B - E) + E^2} \right) \quad (2.28)$$

sendo que

$$E = \alpha_l^{4,14}, \quad (2.29)$$

quando  $\alpha_l \leq 0,85$ , têm-se que

$$B = 0,8\alpha_l^{1,28}, \quad (2.30)$$

enquanto para  $\alpha_l > 0,85$ ,

$$B = \alpha_l^{2,65}. \quad (2.31)$$

Para o modelo de Wen e Yu (1966) o coeficiente de troca de momento na interface fluido-sólido é escrito na seguinte forma:

$$K_{ls} = \frac{3}{4}C_D \frac{\alpha_s\alpha_l\rho_l|\vec{v}_s - \vec{v}_l|}{d_s} \alpha_l^{-2,65}, \quad (2.31)$$

sendo

$$C_D = \frac{24}{\alpha_l Re_s} [1 + 0,15(\alpha_l Re_s)^{0,687}]. \quad (2.32)$$

O modelo de Wen e Yu (1966) é mais apropriado para sistemas dilutos. Já o modelo de Gidaspow *et al.* (1992) é uma combinação do modelo de Wen e Yu (1966) e da equação de Ergun (1952). Nesse caso, quando  $\alpha_l > 0,8$  o coeficiente de troca de momento na interface fluido-sólido é modelado de acordo com o modelo de Wen e Yu (1966) e quando  $\alpha_l \leq 0,8$  ele toma a seguinte forma:

$$K_{ls} = 150 \frac{\alpha_s(1 - \alpha_l)\mu_l}{\alpha_l d_s^2} + 1,75 \frac{\rho_l \alpha_s |\vec{v}_s - \vec{v}_l|}{d_s} \quad (2.33)$$

Esse modelo de Gidaspow *et al.* (1992) é adequado para leitos densos.

Quando a equação do momento do modelo multifluidos é resolvida para a fase sólida (pseudo fluido) o termo do tensor de tensão é utilizado para contabilizar a interação entre as partículas sólidas que ocorrem no sistema particulado real. Isto é normalmente feito por meio da derivação deste termo a partir da teoria cinética dos escoamento granulares. Assim, utilizando-se o subscrito “s” (substituindo o subscrito “q” da Eq. 2.18) para indicar a fase sólida (pseudo fluido), têm-se:

$$\bar{\tau}_s = -P_s \bar{I} + 2\alpha_s \mu_s \bar{S} + \alpha_s \left( \lambda_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) \nabla \cdot \vec{v}_s \bar{I} \quad (2.34)$$

$$\bar{S} = \frac{1}{2}(\nabla \vec{v}_s + (\nabla \vec{v}_s)^T) \quad (2.35)$$

sendo que  $\mu_s$  e  $\lambda_s$  são, respectivamente, a viscosidade de cisalhamento e a viscosidade *bulk* do sólido,  $\bar{I}$  é o tensor identidade,  $\bar{S}$  é o tensor taxa de deformação e  $P_s$  é a pressão de sólidos.

A pressão de sólidos representa a pressão exercida sobre as paredes devido à presença das partículas e, no *software* FLUENT, este termo pode ser modelado por:

$$P_s = \alpha_s \rho_s \theta_s (1 + 2(1 + \eta) \alpha_s g_{os}) \quad (2.36)$$

sendo que  $\eta$  é chamado de coeficiente de restituição e utilizado para contabilizar a dissipação de energia devido às colisões das partículas, enquanto  $g_{os}$  é chamado de função de distribuição radial e funciona como um fator de correção que modifica a probabilidade de colisão das partículas quando elas estão presentes em altas concentrações. Por fim,  $\theta_s$  é conhecido como temperatura granular.

A temperatura granular é na verdade uma pseudo-temperatura, cujo nome surgiu por analogia entre a teoria cinética dos escoamentos granulares e a teoria cinética dos gases. Na verdade a temperatura granular é uma medida da energia cinética das flutuações de velocidade das partículas, podendo ser expressa formalmente por:

$$\theta_s = \frac{1}{3} u_{s,i} u_{s,i} \quad (2.37)$$

sendo que  $u_{s,i}$  representa o *i*-ésimo componente da flutuação de velocidade do sólido no sistema de coordenadas cartesianas. No *software* ANSYS FLUENT a distribuição de temperatura granular no sistema é determinada por meio da resolução de sua equação de transporte, conforme mostrado a seguir:

$$\frac{3}{2} \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\rho_s \alpha_s \theta_s) + \nabla \cdot (\rho_s \alpha_s \vec{v}_s \theta_s) \right] = (-P_s \bar{I} + \bar{\tau}_s) : \nabla \vec{v}_s + \nabla \cdot (k_{\theta_s} \nabla \theta_s) - \gamma_{\theta_s} + \phi_{ls} \quad (2.38)$$

O primeiro termo do lado direito da equação 2.38 representa a geração de energia, o segundo termo representa a difusão de energia ( $k_{\theta_s}$  é o coeficiente de

difusão), o termo  $\gamma_{\theta s}$  representa a dissipação colisional de energia e o termo  $\phi_{ls}$  representa a troca de energia entre a fase sólida  $s$  e uma outra fase  $l$  do sistema como, por exemplo, a fase fluida em escoamentos bifásicos do tipo gás-sólido.

Na apresentação dada nesta seção alguns termos das equações podem ser modelados por meio de outros modelos matemáticos e, assim, para mais informações sobre as demais alternativas de modelagem desses termos pode-se consultar ANSYS inc. (2011).

Também é importante notar que quando o modelo multifluidos é utilizado para analisar escoamentos bifásicos do tipo gás-sólido, como a fase sólida é tratada como um pseudo fluido, essa análise está restrita e necessita somente da Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) para ser realizada.

#### 2.4.4 Método dos Elementos Discretos (DEM)

##### 2.4.4.1 Considerações gerais

O Método dos Elementos Discretos (DEM – *Discrete Element Method*) foi inicialmente desenvolvido por Cundall e Strack (1979) e ao longo dos últimos anos tem sido utilizado para a análise de sistemas granulares em uma larga gama de aplicações e nos mais variados tipos de indústrias.

Segundo Cleary (2010), nos 15 anos subsequentes ao seu desenvolvimento a utilização do Método dos Elementos Discretos ficou restrita a problemas com geometrias simples, em escala reduzida (100 à 1000 partículas) e em duas dimensões (2D). Como exemplo dessas aplicações iniciais e limitadas pode-se citar a análise do escoamento de partículas em chutes, pequenos silos e células de cisalhamento, apenas com o intuito de compreender os fundamentos do escoamento de materiais granulares.

A utilização isolada do Método dos Elementos Discretos (DEM) é suficiente para a previsão do comportamento de escoamentos de materiais granulares em que a interação com um fluido não é a força motriz do movimento das partículas. Entretanto, em problemas onde as forças de interação entre um fluido e o material

granular são importantes, como em processos de fluidização e de transporte pneumático, o acoplamento com a Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) torna-se fundamental, já que a mesma é utilizada para prever o comportamento do fluido durante o escoamento ao redor das partículas.

#### 2.4.4.2 Equações governantes

O Método dos Elementos Discretos (DEM) baseia-se no uso da 2ª Lei do Movimento de Newton para descrever o movimento de partículas individuais em um meio granular, bem como em leis de forças de interação para quantificar as forças que causam esses movimentos.

Dependendo do tipo de partículas e de suas interações com o meio circundante, podem-se considerar nos cálculos do DEM tanto as forças resultantes de contato direto entre partículas quanto as forças exercidas sem o contato direto com as partículas como, por exemplo, forças eletromagnéticas e de coesão.

Com base no descrito acima, as equações governantes para os movimentos translacional e rotacional de uma partícula  $i$  com massa  $m_i$  e momento de inércia  $I_i$  podem ser escritas como (Zhu *et al.*, 2007):

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_j \mathbf{F}_{ij}^C + \sum_k \mathbf{F}_{ik}^{nC} + \mathbf{F}_i^f + \mathbf{F}_i^g, \quad (2.39)$$

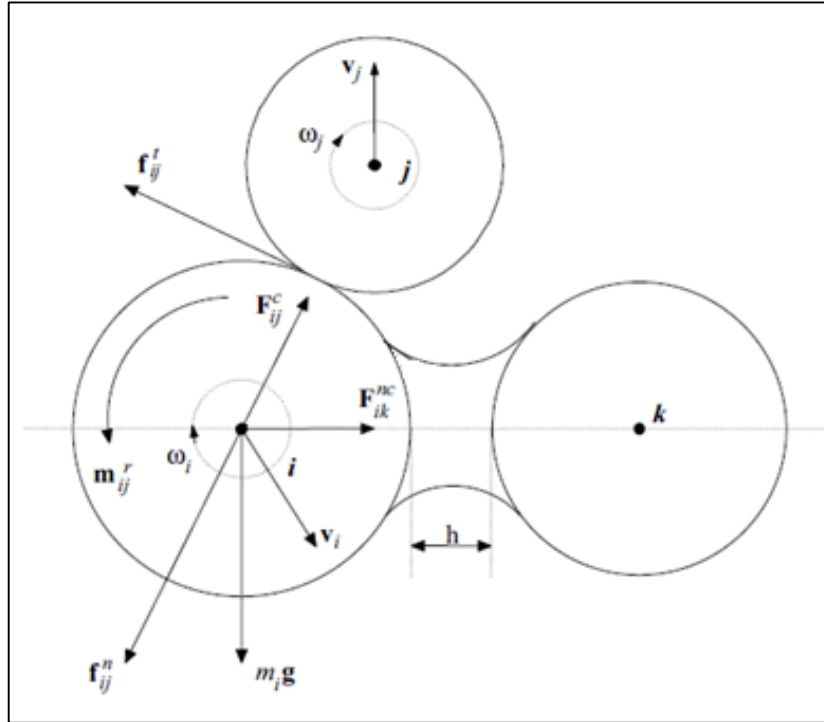
$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_j \mathbf{M}_{ij}, \quad (2.40)$$

sendo que  $\mathbf{v}_i$  e  $\omega_i$  são, respectivamente, as velocidades translacional e angular da partícula  $i$ ,  $\mathbf{F}_{ij}^C$  e  $\mathbf{M}_{ij}$  são a força e o torque de contato exercidos sobre a partícula  $i$  pelas partículas  $j$  ou por paredes do dispositivo que contém as partículas,  $\mathbf{F}_{ik}^{nC}$  é a força exercida sem contato direto (*non-contact*) sobre a partícula  $i$  pela partícula  $k$  ou outras fontes,  $\mathbf{F}_i^f$  é a força de interação entre a partícula  $i$  e um fluido e,  $\mathbf{F}_i^g$  é a força gravitacional.



Na figura 2.15 mostra-se um esquema de algumas das possíveis formas de interação das partículas comumente consideradas em uma simulação DEM:

Figura 2.15 – Ilustração esquemática de forças atuantes sobre uma partícula  $i$ , tanto devido ao contato direto com a partícula  $j$  quanto à força exercida sem contato pela partícula  $k$ .



Fonte: Zhu *et al*, 2007.

Na figura 2.15,  $h$  é a distância de separação entre as partículas,  $f_{ij}^n$  e  $f_{ij}^t$  são, respectivamente, as componentes normal e tangencial da força de contato e  $m_{ij}^r$  é o torque devido ao atrito de rolamento entre as partículas  $i$  e  $j$ .

Uma vez que essas forças e torques sejam conhecidos, as Equações 2.39 e 2.40 podem ser resolvidas numericamente para que as trajetórias e velocidades das partículas sejam determinadas.

Ao longo dos últimos anos, diversos modelos matemáticos têm sido desenvolvidos para calcular essas e outras forças e torques, conforme descrito em detalhes por Zhu *et al.* (2007). Assim, são abordados nas próximas seções somente os aspectos relacionados aos modelos necessários ao entendimento das atividades realizadas no presente trabalho como, por exemplo, os relacionados ao modelo *Linear-Spring/Dashpot* (LSD), implementado no *software* ANSYS FLUENT.

#### 2.4.4.3 Conceito de partículas representativas no acoplamento CFD-DEM

Segundo Hilton e Cleary (2012), a formulação do Método dos Elementos Discretos (DEM) permite que o número de partículas consideradas na simulação ( $N$ ) e o número de partículas no sistema real que está sendo simulado ( $n$ ) sejam iguais. Nesse caso o tamanho das partículas virtuais é igual ao tamanho das partículas reais.

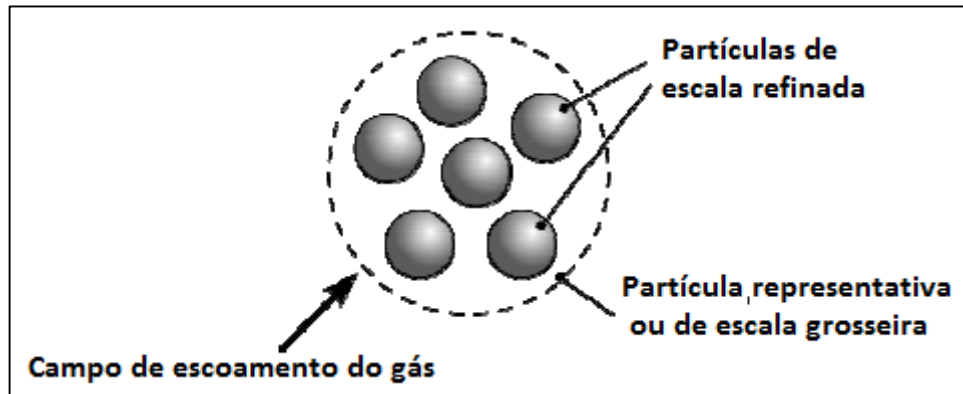
Em sistemas industriais de grande escala, o custo computacional do rastreamento de cada partícula individual por meio da resolução das equações do movimento de Newton para cada uma delas torna-se proibitivo, já que nesses casos o número de partículas presentes ( $n$ ) é geralmente da ordem de bilhões. Nesses casos, esses sistemas são normalmente modelados com partículas virtuais maiores do que as partículas reais, o que resulta em um sistema virtual com a mesma massa total do sistema real, mas com  $N \ll n$ . Essa abordagem pode ser vantajosa na análise do escoamento isolado de sólidos particulados, mas torna-se especialmente problemática para sistemas nos quais o material granular interage com um fluxo de gás, já que nesse caso a dinâmica do sistema depende fortemente do valor de  $n$ .

Assim, quando acopla-se o Método dos Elementos Discretos (DEM) à Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) para a análise de escoamentos bifásicos do tipo gás-sólido, uma abordagem bastante utilizada nos dias de hoje é a consideração de duas escalas de tamanho para as partículas virtuais na mesma simulação.

Os métodos baseados na abordagem de duas escalas de tamanho de partículas são geralmente chamados de métodos de partículas representativas, nos quais a consideração dessas duas escalas de tamanho dá origem às chamadas partículas de escala refinada e partículas de escala grosseira. A partícula de escala grosseira pode ser considerada como uma partícula virtual grande que contém em seu interior várias partículas virtuais menores, ou seja, as partículas de escala refinada. Desse modo, a massa da partícula grosseira é igual à soma das massas de todas as partículas refinadas contidos em seu interior.

A figura 2.16 ilustra os conceitos de partículas de escala grosseira e de escala refinada:

Figura 2.16 – Partícula de escala grosseira representando um grupo de partículas de escala refinada.



Fonte: Adaptado de Hilton e Cleary (2012).

No *software* ANSYS FLUENT, as partículas de escala grosseira são normalmente chamadas de pacotes de partículas e, por conveniência, esse será o termo utilizado ao longo deste trabalho sempre que mencionar-se as simulações realizadas com esse *software*.

Ao longo dos últimos anos diversos trabalhos sobre modelos de partículas representativas vem sendo desenvolvidos, sendo que tais tipos de modelos foram primeiramente propostos por Kazari *et al.* (1995). Após isso, outros trabalhos foram publicados como, por exemplo, os de Sakano *et al.* (2000), Mokhtar *et al.* (2012), Kuwagi *et al.* (2004) e Sakai *et al.* (2010).

O princípio deste tipo de metodologia consiste em imaginar que em determinados momentos da simulação é mais vantajoso representar o sistema de uma maneira, mas em outros momentos é mais vantajoso que esse mesmo sistema seja representado de outra maneira. Como a massa total do sistema deve ser a mesma, quer ele seja representado por partículas grosseiras ou por partículas refinadas, e como a massa de uma partícula grosseira é maior do que a de uma partícula refinada, o número de partículas na simulação será menor se esse sistema for representado por partículas grosseiras do que se ele for representado por partículas refinadas. Imaginando, por exemplo, um sistema com massa total de 10 kg, o DEM exigiria menos capacidade de processamento para os cálculos se ele fosse representado por 2 partículas grosseiras de 5 kg do que se esse sistema fosse representado por 10

partículas refinadas de 1 kg, pois isso aumentaria o número de equações do movimento a serem resolvidas de 2 para 10 e, conseqüentemente, o tempo total de simulação.

Assim, nos modelos de partículas representativas, normalmente configura-se o tamanho (diâmetro) das partículas de escala refinada como sendo igual (ou aproximadamente igual) ao tamanho das partículas reais, sendo essa a escala de tamanho usada nos cálculos de arrasto (e transferência de calor e massa se houver), já que estes cálculos são dependentes do tamanho real das partículas para fornecerem bons resultados. Enquanto isso, nos cálculos de colisão do DEM utiliza-se a escala de tamanho das partículas grosseiras para representar o sistema, pois isso reduz o número de partículas rastreadas pelo DEM e, conseqüentemente, o tempo de simulação.

Infelizmente, não são fornecidos nos manuais do *software* ANSYS FLUENT 14.5 maiores detalhes sobre a formulação matemática do modelo de pacotes de partículas utilizado em sua funcionalidade de acoplamento CFD-DEM. Assim, alguns resultados do presente trabalho obtidos com esse *software* são comparados com resultados obtidos com o modelo descrito por Hilton e Cleary (2012). Apesar da falta de informações detalhadas sobre a formulação matemática, segundo ANSYS inc. (2013b) o modelo de pacotes de partículas do FLUENT não seria tão sofisticado quanto o apresentado por Hilton e Cleary (2012), o que permite que esse último possa ser utilizado como referência, já que seus resultados também apresentam boa concordância com a teoria da fluidização.

Em Hilton e Cleary (2012), define-se a seguinte relação:

$$N^f = \kappa N^c \quad (2.41)$$

sendo que  $\kappa$  é o número de partículas de escala refinada dentro de uma única partícula de escala grosseira e  $N^f$  é o número total de partículas de escala refinada no sistema como um todo, ou seja, a soma das partículas refinadas dentro de todas as partículas grosseiras do sistema. Já  $N^c$  é o número de partículas de escala grosseira no sistema.

O parâmetro  $\kappa$  também pode ser definido como a razão entre o volume de uma partícula de escala grosseira e o de uma partícula de escala refinada:

$$\kappa = \frac{V^c}{V^f} = \left(\frac{d^c}{d^f}\right)^3 \quad (2.42)$$

sendo que  $V^c$  e  $V^f$  são respectivamente, o volume da partícula de escala grosseira e da partícula de escala refinada, enquanto  $d^c$  e  $d^f$  são, respectivamente, o diâmetro da partícula de escala grosseira e da partícula de escala refinada. Outro parâmetro considerado no modelo é o fator de escala, que dá uma idéia da diferença entre os tamanhos das partículas de escalas grosseira e refinada, sendo definido como:

$$s = \frac{d^c}{d^f} = \kappa^{\frac{1}{3}} \text{ ou } \kappa = s^3 \quad (2.43)$$

Utilizando-se o fator de escala  $s$ , a equação 2.41 pode ser reescrita como:

$$N^c = \frac{N^f}{s^3} \text{ ou } N^f = s^3 N^c \quad (2.44)$$

A equação 2.44 permite deduzir que quanto maior for a diferença entre os tamanhos das partículas de escala grosseira e de escala refinada ( $s$ ), menor será o número de partículas de escala grosseira consideradas nos cálculos do DEM, o que permitirá uma redução no tempo de simulação.

Para o modelo de Hilton e Cleary (2012) a equação do movimento translacional de uma partícula (Eq. 2.39) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$m \frac{\partial v}{\partial t} = \mathbf{F}_c + \mathbf{F}_d + \mathbf{F}_p + m\mathbf{g} \quad (2.45)$$

sendo que  $m$  e  $v$  são, respectivamente, a massa e a velocidade da partícula,  $\mathbf{F}_c$ ,  $\mathbf{F}_d$  e  $\mathbf{F}_p$  são, respectivamente, a força de colisão, a força de arrasto e a força devido ao gradiente de pressão do gás sobre a partícula, enquanto o termo  $m\mathbf{g}$  é a força devido a ação da gravidade (força peso). O DEM calcula a força de colisão resultante  $\mathbf{F}_c$  e realiza uma integração temporal da equação 2.45 para fornecer a velocidade e a posição da partícula no próximo passo de tempo.

A força de colisão é composta pela força de colisão normal  $\mathbf{F}_n$  e pela força de colisão tangencial  $\mathbf{F}_t$  que agem sobre a partícula  $\mathbf{F}_c = \mathbf{F}_n + \mathbf{F}_t$ . Essas duas forças agem, respectivamente, ao longo dos planos normal e tangente ao ponto de contato entre as partículas. A magnitude da força normal é calculada por um modelo de amortecedor e mola linear (*Linear-Spring Dashpot Model* - LSD):

$$\mathbf{F}_n = C_n v_n - k_n \delta \quad (2.46)$$

sendo que  $k_n$ ,  $C_n$  e  $v_n$  são, respectivamente, a constante de rigidez, o coeficiente de amortecimento e a velocidade relativa na direção normal. A magnitude da força tangencial é calculada incrementalmente por:

$$\mathbf{F}_t = \min \left\{ \begin{array}{l} \mu \mathbf{F}_n \\ C_t v_t + k_t \sum v_t \Delta t \end{array} \right\} \quad (2.47)$$

sendo que  $k_t$ ,  $C_t$  e  $v_t$  são, respectivamente, a constante de rigidez, o coeficiente de amortecimento e a velocidade relativa na direção tangencial,  $\mu$  é o coeficiente de atrito de Coulomb e  $\Delta t$  é o passo de tempo. A força de arrasto gás-partícula é:

$$\mathbf{F}_d\{d\} = \frac{1}{2} C_d\{d\} A \rho_g |\mathbf{u}_r|^2 \hat{\mathbf{u}}_r \quad (2.48)$$

sendo que  $C_d\{d\}$  é o coeficiente de arrasto para uma partícula de diâmetro  $d$ ,  $A$  é a área da seção transversal projetada na direção do campo de escoamento do gás,  $\rho_g$  é a massa específica do gás e  $\mathbf{u}_r$  é a velocidade relativa gás-partícula.

A força devido ao gradiente de pressão do gás é dada por:

$$\mathbf{F}_p = V_p \nabla P \quad (2.49)$$

sendo que  $V_p$  é o volume de uma partícula e  $P$  é a pressão do gás.

Segundo Hilton e Cleary (2012), para obter-se a equação do movimento de uma partícula de escala refinada a equação 2.45 é reescrita como:

$$m^f \frac{\partial \mathbf{v}^f}{\partial t} = m^f \mathbf{g} + \mathbf{F}_n^f + \mathbf{F}_t^f + \mathbf{F}_d^f\{d^f\} + \mathbf{F}_p^f \quad (2.50)$$

Tomando a soma de ambos os lados da equação 2.50 para o número de partículas de escala refinada “contidas” em uma partícula de escala grosseira  $\kappa$ :

$$m^f \sum_{\kappa} \frac{\partial \mathbf{v}^f}{\partial t} = \kappa m^f \mathbf{g} + \sum_{\kappa} (\mathbf{F}_n^f + \mathbf{F}_t^f + \mathbf{F}_d^f \{d^f\} + \mathbf{F}_p^f) \quad (2.51)$$

Na equação 2.51 é assumido que a massa de todas as partículas de escala refinada  $m^f$  dentro de uma partícula de escala grosseira são iguais. Além disso, também assume-se que as velocidades de todas as partículas de escala refinada são idênticas e iguais à velocidade da partícula de escala grosseira. Essa última pode então ser formalmente considerada como a velocidade média das partículas de escala refinada:

$$\mathbf{v}^c = \frac{1}{\kappa} \sum_{\kappa} \mathbf{v}^f \quad (2.52)$$

Considerando-se que  $\kappa m^f = m^c$  juntamente com o conceito exposto na equação 2.52, pode-se reescrever a equação 2.51 para obter-se a equação do movimento da partícula de escala grosseira:

$$m^c \frac{\partial \mathbf{v}^c}{\partial t} = m^c \mathbf{g} + \sum_{\kappa} (\mathbf{F}_n^f + \mathbf{F}_t^f + \mathbf{F}_d^f \{d^f\} + \mathbf{F}_p^f) \quad (2.53)$$

A partir de agora serão considerados separadamente cada um dos somatórios do lado direito da equação 2.53. Começando pela força de colisão normal agindo sobre a partícula de escala grosseira, assume-se que ela seja a superposição linear das forças de colisão agindo sobre as partículas de escala refinada. Assim, a partir da equação 2.46 têm-se:

$$\sum_{\kappa} \mathbf{F}_n^f = C_n^f \sum_{\kappa} v_n^f - k_n^f \sum_{\kappa} \delta^f \quad (2.54)$$

Lembrando da suposição de que as velocidades normais de todas as partículas de escala refinada são idênticas e assumindo-se também que a sobreposição no ponto de contato (deformação) da partícula de escala grosseira é uma média das sobreposições das partículas de escala refinada, têm-se:

$$\sum_{\kappa} \mathbf{F}_n^f = \kappa (C_n^f v_n^c - k_n^f \delta^c) \quad (2.55)$$

Os coeficientes de rigidez e de amortecimento normais da partícula de escala grosseira podem ser definidos como:

$$C_n^c = \kappa C_n^f \quad (2.56)$$

$$k_n^c = \kappa k_n^f \quad (2.57)$$

Finalmente, a força de colisão normal agindo sobre a partícula de escala grosseira pode ser escrita como:

$$\sum_{\kappa} \mathbf{F}_n^f = C_n^c v_n - k_n^c \delta = F_n^c \quad (2.58)$$

Quanto ao segundo termo de somatório da equação 2.53, ou seja, a força de colisão tangencial agindo sobre a partícula de escala grosseira, pode-se usar as mesmas suposições que foram usadas na dedução da força normal. Assim, considerando-se também a equação 2.47, têm-se:

$$\sum_{\kappa} \mathbf{F}_t^f = \min \left\{ \begin{array}{l} \mu \sum_{\kappa} F_n^f \\ \kappa (C_t^f v_t + k_t^f \sum v_t \Delta t) \end{array} \right\} \quad (2.59)$$

Considerando-se a equação 2.58 pode-se reescrever a equação 2.59:

$$\sum_{\kappa} \mathbf{F}_t^f = \min \left\{ \begin{array}{l} \mu F_n^c \\ \kappa (C_t^f v_t + k_t^f \sum v_t \Delta t) \end{array} \right\} \quad (2.60)$$

Os coeficientes de rigidez e de amortecimento tangenciais da partícula de escala grosseira podem ser definidos como:

$$C_t^c = \kappa C_t^f \quad (2.61)$$

$$k_t^c = \kappa k_t^f \quad (2.62)$$



Finalmente, a força de colisão tangencial agindo sobre a partícula de escala grosseira pode ser escrita como:

$$\sum_{\kappa} \mathbf{F}_t^f = \min \left\{ \mu F_n^c, \kappa (C_t^c v_t + k_t^c \sum v_t \Delta t) \right\} = F_t^c \quad (2.63)$$

Quanto ao terceiro termo de somatório da equação 2.53, ou seja, a força de arrasto agindo sobre a partícula de escala grosseira, deve-se lembrar que a força de arrasto é dada pela equação 2.48 e, assim, têm-se:

$$\sum_{\kappa} \mathbf{F}_d^f \{d^f\} = \frac{1}{2} \rho_g |\mathbf{u}_r|^2 \hat{\mathbf{u}}_r C_d \{d^f\} \sum_{\kappa} A^f, \quad (2.64)$$

sendo que  $C_d \{d^f\}$  indica que o coeficiente de arrasto é calculado usando-se o diâmetro da partícula de escala refinada. Considerando-se partículas esféricas e usando-se as Equações 2.42 e 2.43 têm-se:

$$\sum_{\kappa} A^f = \kappa^{\frac{1}{3}} A^c \quad (2.65)$$

Como a força de arrasto da partícula de escala grosseira é dada por:

$$\mathbf{F}_d^c \{d\} = \frac{1}{2} \rho_g |\mathbf{u}_r|^2 \hat{\mathbf{u}}_r C_d \{d\} A^c, \quad (2.66)$$

então a expressão para a força de arrasto, equação 2.64, torna-se:

$$\sum_{\kappa} \mathbf{F}_d^f \{d^f\} = \kappa^{\frac{1}{3}} \mathbf{F}_d^c \{d^f\} \quad (2.67)$$

Quanto ao último termo de somatório da equação 2.53, ou seja, a força devido ao gradiente de pressão agindo sobre a partícula de escala grosseira, considerando-se a equação 2.49 têm-se:

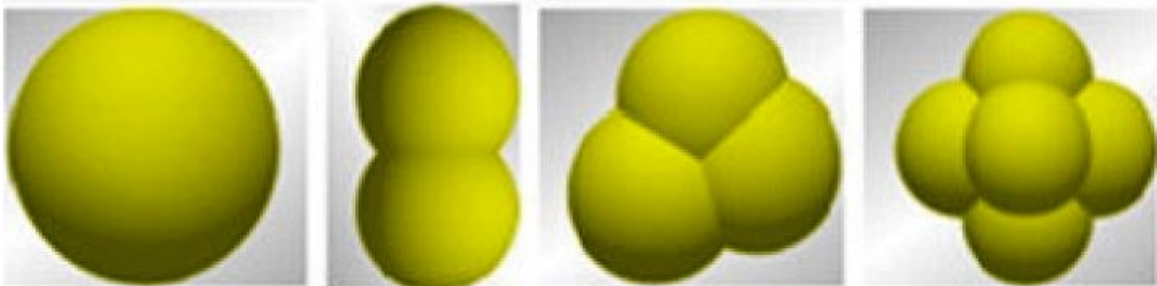
$$\sum_{\kappa} \mathbf{F}_p^f = \nabla P \sum_{\kappa} V_p^f \quad (2.68)$$

Por fim a equação 2.68 pode ser reescrita considerando-se a equação 2.42:

$$\sum_{\kappa} \mathbf{F}_p^f = \kappa \nabla P V_p^f = \nabla P V_p^c \quad (2.69)$$

Deve-se notar que nas formulações de Hilton e Cleary (2012) apresentadas nesta seção e, também nas simulações a serem realizadas com o *software* ANSYS FLUENT, considera-se que todas as partículas possuem a forma esférica. Segundo Amarante Mesquita *et al.* (2012) a modelagem de partículas reais de forma variável por meio de partículas esféricas é uma simplificação comum em aplicações do DEM, apesar de outras formas poderem ser usadas de maneira mais apropriada em determinados casos. Uma discussão sobre a representação de partículas reais por partículas virtuais não esféricas no DEM pode ser encontrada em Santos *et al.* (2012) e a figura 2.17 ilustra algumas das formas de partículas comumente usadas no DEM:

Figura 2.17 – Formas de partículas comumente usadas no DEM



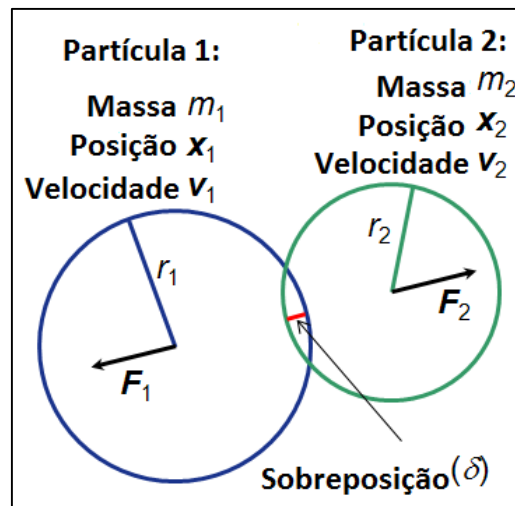
Fonte: Santos *et al.*, 2012.

#### 2.4.4.4 Implementação do DEM no software ANSYS FLUENT

Até a versão 13.0 do *software* ANSYS FLUENT, o mesmo só poderia ser utilizado para o acoplamento CFD-DEM se fosse acoplado a algum *software* de análise por meio do Método dos Elementos Discretos como, por exemplo, o *software* EDEM (DEMSolutions Ltd., 2013). A versão 14.0 foi a primeira versão do *software* ANSYS FLUENT a apresentar ao público uma implementação do Método dos Elementos Discretos. Atualmente, apesar de algumas mudanças relacionadas à aspectos numéricos, o modelo DEM da versão 14.5 é essencialmente o mesmo da versão 14.0. Essa implementação do DEM é baseada no trabalho pioneiro de Cundall and Strack (1979), onde por meio da chamada abordagem das esferas macias, as

forças resultantes das colisões entre partículas são determinadas por meio da deformação das partículas. Essas deformações são na verdade medidas por meio da sobreposição entre pares de esferas ou entre uma esfera e uma parede do sistema, conforme ilustrado na figura 2.18:

Figura 2.18 – Deformação de partículas representada pela sobreposição de esferas.



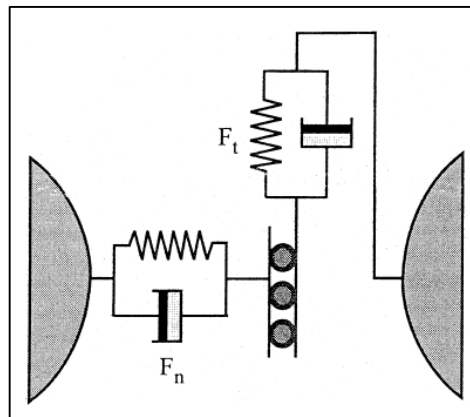
Fonte: ANSYS, 2011.

sendo que  $m_1$ ,  $\vec{x}_1$  e  $v_1$  são a massa, a posição e a velocidade da partícula 1, enquanto  $m_2$ ,  $\vec{x}_2$  e  $v_2$  são a massa, a posição e a velocidade da partícula 2. Já  $r_1$  e  $r_2$  são os raios das partículas 1 e 2, enquanto  $F_1$  e  $F_2$  são, respectivamente, as forças aplicadas sobre as partículas 1 e 2 devido ao contato com uma outra partícula (ou parede). O parâmetro  $\delta$  é a sobreposição entre as partículas, o que no DEM representa a deformação das mesmas no ponto de contato.

Segundo Di Renzo e Di Maio (2004), a idéia utilizada por Cundall and Strack (1979) foi a de modelar as relações mecânicas de contato entre as partículas por meio da combinação de elementos mecânicos lineares dispostos em série ou em paralelo. Assim, Cundall and Strack (1979) propuseram um modelo de colisão em que uma mola linear disposta em paralelo com um amortecedor foram utilizados para contabilizar as interações mecânicas da colisão entre partículas na direção normal à superfície de contato entre as mesmas. Para a direção tangencial o modelo utiliza uma mola linear e um amortecedor dispostos em paralelo entre si e em série com um deslizador (*slider*) utilizado para representar o atrito.

A mola é utilizada para contabilizar a força elástica repulsiva que “empurra” as partículas em direções opostas durante o contato, enquanto o amortecedor e o deslizador (*slider*) contabilizam, respectivamente, a dissipação de energia devido à deformação plástica e ao atrito entre as superfícies das partículas durante a colisão. A figura 2.19 permite visualizar tal conceito de forma aproximada:

Figura 2.19 - Modelo de força de contato que envolve uma mola e um amortecedor em paralelo na direção normal e uma mola e um amortecedor em paralelo limitados pelo atrito na direção tangencial.



Fonte: Cleary *et al.*, 1998.

No *software* ANSYS FLUENT o usuário pode escolher quais dos três efeitos citados acima (elasticidade, plasticidade e atrito) ele deseja inserir no modelo DEM por meio da escolha de combinações entre três “leis de força de colisão”. Essas três leis podem ser consideradas como sendo sub-modelos capazes de serem acoplados para formar um modelo mais completo. Tais leis de força de colisão são:

- a. Lei de colisão com mola linear (Linear spring collision law).
- b. Lei de colisão com mola linear e amortecedor (Linear Spring/Dashpot collision law - LSD).
- c. Lei de atrito de colisão (Friction collision law).

A **lei de colisão com mola linear** considera somente a elasticidade (mola) e, nesse caso, um vetor unitário é definido a partir do centro da partícula 1 em direção ao centro partícula 2 (Fig. 2.18), conforme a equação mostrada a seguir:

$$\vec{e}_{12} = \frac{x_2 - x_1}{\|x_2 - x_1\|}, \quad (2.70)$$

sendo que  $x_1$  e  $x_2$  representam as posições das partículas 1 e 2. Já a sobreposição das partículas no ponto de contato é definida como:

$$\delta = \|x_2 - x_1\| - (r_1 + r_2), \quad (2.71)$$

sendo que  $r_1$  e  $r_2$  representam, respectivamente, os raios das partículas 1 e 2. De posse dos valores calculados pelas Equações 2.41 e 2.42, a força normal atuante sobre a partícula 1 é então calculada usando-se a constante de rigidez da mola (K) definida pelo usuário:

$$\vec{F}_1 = K\delta\vec{e}_{12} \quad (2.72)$$

Com base na 3ª Lei do movimento de Newton a força atuante sobre a partícula 2 é então definida como:

$$\vec{F}_2 = -\vec{F}_1 \quad (2.73)$$

No caso de o usuário desejar incluir a dissipação de energia devido a deformação plástica das partículas durante a colisão pode-se utilizar a **lei de colisão com mola linear e amortecedor (LSD)**, que nada mais é do que a lei de colisão com mola linear (descrita nos parágrafos anteriores) “melhorada” pela inclusão de um termo de amortecimento. Neste caso, durante a preparação para o cálculo de forças são também avaliadas pelo FLUENT as seguintes expressões:

$$m_{12} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (2.74)$$

$$t_{coll} = \sqrt{\pi^2 + (\ln \eta)^2} \cdot \sqrt{\frac{m_{12}}{K}} \quad (2.75)$$

$$C = -2 \frac{m_{12} \ln \eta}{t_{coll}} \quad (2.76)$$

$$\vec{v}_{12} = \vec{v}_2 - \vec{v}_1 \quad (2.77)$$

sendo que  $m_1$  e  $m_2$  são, respectivamente, as massas das partículas 1 e 2,  $m_{12}$  é a chamada “massa reduzida”,  $t_{coll}$  é o tempo de colisão entre as partículas,  $\vec{v}_1$  e  $\vec{v}_2$  são,

respectivamente, as velocidades das partículas 1 e 2,  $\vec{v}_{12}$  é a velocidade relativa entre as partículas e  $C$  é o coeficiente de amortecimento calculado a partir do valor do coeficiente de restituição  $\eta$ . O coeficiente de restituição  $\eta$  é um valor fracionário compreendido na gama  $0 \leq \eta \leq 1$  que representa a razão entre as velocidades do objeto antes e após o impacto, sendo capaz de fornecer uma medida da quantidade de energia perdida no impacto. Este é um parâmetro de entrada no FLUENT, assim como o valor da constante de rigidez  $K$ .

Deve-se enfatizar que se estivermos usando o conceito de partículas de escala grosseira na simulação ao invés de resolver a simulação considerando somente partículas virtuais com tamanhos iguais aos das partículas reais, as massas  $m_1$  e  $m_2$  serão, na verdade, as massas de dois pacotes de partículas, já que essa seria a escala de tamanho utilizada nos cálculos DEM (ver seção 2.4.4.3).

Uma vez que as expressões acima tenham sido calculadas, a força atuante sobre a partícula 1 pode ser calculada por meio da seguinte expressão:

$$\vec{F}_1 = (K\delta + C(\vec{v}_{12} \cdot \vec{e}_{12}))\vec{e}_{12} \quad (2.78)$$

A força  $\vec{F}_2$  pode então ser calculada por meio da 3ª lei do movimento de Newton (Eq. 2.73).

O *software* ANSYS FLUENT também permite “refinar” ainda mais o modelo DEM utilizado por meio da inclusão das perdas de energia devido ao atrito entre as partículas. Isto é feito pela inclusão da lei de atrito de colisão disponível no *software* e que é baseada na equação de atrito de Coulomb:

$$\vec{F}_{atrito} = \mu\vec{F}_{normal}, \quad (2.79)$$

sendo que  $\mu$  é o coeficiente de atrito,  $\vec{F}_{atrito}$  é a força de atrito entre as partículas ou entre as partículas e as paredes do dispositivo e  $\vec{F}_{normal}$  é a força normal à superfície de contato das partículas. O coeficiente de atrito é uma função da magnitude da velocidade tangencial relativa entre as partículas ( $v_r$ ), variando de acordo com a consideração do efeito grudar-deslizar (*stick-slip*), conforme informado em ANSYS inc. (2011). Apesar de considerar os coeficientes de atrito estático e cinético que são, respectivamente, o coeficiente de atrito antes e depois do início do movimento relativo

entre as partículas, não considera-se nas versões 14.0 e 14.5 (atual) do FLUENT o coeficiente de atrito de rolamento (e também a rotação das partículas).

A consideração de linearidade nos cálculos das forças de colisão adotada pelo modelo DEM implementado no FLUENT pode não ser a mais adequada para todos os tipos de problemas, mas conforme discutido nas próximas seções, em alguns casos os resultados obtidos com o modelo LSD podem ser comparáveis ou até melhores do que os obtidos com modelos inicialmente considerados como mais completos (DI Renzo e Di Maio, 2004).

Para finalizar, deve-se destacar aqui que apesar do termo “*Linear Spring-Dashpot Model - LSD*” fazer menção somente à mola e ao amortecedor, o mesmo também é largamente utilizado na literatura especializada para indicar o modelo desenvolvido por Cundal e Strack (1979) de forma completa, ou seja, incluindo o deslizador (Slider). Assim, ao longo de todo este texto o termo “modelo LSD” será utilizado para indicar de forma genérica o modelo desenvolvido por Cundal e Strack (1979), considerando-se o atrito ou não, apesar de que neste trabalho o atrito foi incluído nas análises.

#### 2.4.4.5 Aplicabilidade do modelo LSD

Da mesma forma que em muitas áreas da engenharia, atualmente não há um modelo de força de interação DEM que seja universal e capaz de ser aplicado em todos os tipos de problemas. De uma forma geral, a escolha entre um modelo e outro depende das características do material particulado e do equipamento utilizado para o seu manuseio, do grau de previsibilidade que se pretende obter com as simulações e da disponibilidade de recursos computacionais.

Na classe de simulações de escoamentos multifásicos em que normalmente faz-se necessário o uso de sistemas computacionais com alta capacidade de processamento, a escolha de modelos físicos complexos pode tornar a análise muito demorada ou mesmo proibitiva.

Ao contrário do que muitos podem imaginar, algumas vezes a relativa simplicidade do modelo de força de interação LSD frente a outros modelos

considerados como mais sofisticados pode representar uma vantagem em termos de custo/benefício. Como será visto na próxima seção, este modelo permite a utilização de algumas idealizações sobre o valor da constante de rigidez que resultam na redução do tempo de processamento da simulação. Tal redução é bastante interessante quando se utiliza o acoplamento CFD-DEM para a análise de leitos fluidizados, já que as exigências computacionais da CFD para a simulação do comportamento do fluido acopladas às exigências do DEM para a simulação do comportamento das partículas geralmente resultam em longos tempos de simulação.

Quanto à capacidade de previsão do modelo LSD, alguns estudos indicam que sua aplicabilidade depende muito do grau de precisão que se deseja obter com as simulações. Um exemplo de tal estudo é o desenvolvido por Di Renzo e Di Maio (2004), que realizaram um estudo comparativo da aplicação de três modelos de força de interação DEM na análise da colisão de partículas de alumina contra paredes planas. Os três modelos analisados foram uma versão simplificada sem o amortecedor do modelo *Linear Spring-Dashpot* (LSD) de Cundall and Strack (1979), e duas versões do modelo de Hertz-Mindlin and Deresiewicz, sendo uma simplificada sem deslizamento (H-MDns) e uma completa (H-MD). Os modelos de força de contato H-MDns e H-MD são baseados na teoria clássica de Hertz (1882) para a direção normal e no modelo desenvolvido por Mindlin e Deresiewicz (1953) para a direção tangencial, sendo a sua principal diferença em relação ao modelo LSD o fato de considerarem relações não lineares entre forças de contato e deformação das partículas. Por simplicidade, a versão do modelo LSD utilizada por Di Renzo e Di Maio (2004) será chamada aqui de modelo LSD-nD para indicar que o amortecedor não foi utilizado.

Os resultados obtidos por Di Renzo e Di Maio (2004) com os três modelos citados acima foram comparados na escala microscópica (evolução temporal das forças normais e tangenciais, velocidades e deslocamentos no ponto de contato entre as partículas) com soluções analíticas aproximadamente exatas e, na escala macroscópica, com resultados experimentais.

Segundo os referidos autores, em uma escala microscópica, o modelo completo H-MD apresentou melhores resultados, o que já era esperado, já que os efeitos de micro-deslizamento são corretamente contabilizados por este modelo.



Também de acordo com os autores, este modelo deveria ser a escolha entre os três modelos estudados para a análise de problemas com alto grau de sensibilidade em relação às forças e deformações de contato das partículas calculadas pelo DEM. Ainda na escala microscópica, o modelo H-MDns, que em princípio seria mais detalhado do que o modelo linear LSD-nD, revelou pior capacidade de simulação do que o mesmo quando valores adequados para os parâmetros do modelo LSD-nD foram definidos.

Na escala macroscópica, apesar de ser o modelo mais simples entre os três analisados, os autores afirmaram que a concordância entre os resultados obtidos com o modelo LSD-nD e os resultados experimentais foi bastante satisfatória, e que nenhuma melhoria significativa foi observada com o uso dos modelos H-MDns e H-MD. Além disso, também foi afirmado que, de forma decepcionante, os resultados obtidos com o modelo H-MDns foram piores, especialmente para baixos valores do ângulo de impacto entre as partículas de alumina e a parede. Com relação ao valor da velocidade das partículas no final da colisão, o modelo linear LSD-nD chegou a fornecer resultados muitas vezes equivalentes ao modelo completo H-MD.

Estudos como o descrito acima podem representar uma indicação do motivo pelo qual o modelo LSD ainda vem sendo aplicado nos dias de hoje em aplicações práticas, sendo este o único modelo de força de interação DEM atualmente implementado no ANSYS FLUENT, que é o *software* utilizado nas simulações do presente trabalho de dissertação de mestrado. Cabe então ao usuário julgar sua aplicabilidade ao problema a ser analisado com base no grau de precisão esperado para os resultados e no ganho real ou imaginário resultante do uso de outros modelos normalmente considerados mais completos e, conseqüentemente, mais exigentes em termos de capacidade de processamento computacional.

#### 2.4.4.6 Determinação dos parâmetros de contato para o modelo LSD

Os parâmetros de entrada para o modelo LSD (com atrito) são basicamente o coeficiente de amortecimento  $C$  (do amortecedor), o coeficiente de atrito  $\mu$  (do deslizador - *slider*) e a constante de rigidez  $K$  (da mola). Deve-se notar que o coeficiente de amortecimento e a constante de rigidez não são propriedades do

material propriamente ditas, mas sim dos elementos mecânicos (amortecedor e mola) utilizados no método DEM para modelar o comportamento mecânico das partículas.

O melhor critério para a determinação dos valores dos três parâmetros citados acima é calculá-los a partir de propriedades mecânicas reais do material da partícula ou obtê-los por meio de experimentos. Por exemplo, o coeficiente de restituição e o coeficiente de atrito podem ser obtidos experimentalmente. Assim, o valor do coeficiente de atrito pode ser prontamente inserido no modelo DEM, enquanto o valor do coeficiente de restituição ao ser inserido no *software* FLUENT será utilizado na equação 2.76 para determinar o valor do coeficiente de amortecimento. Infelizmente, apesar da relativa simplicidade dessa abordagem, o acesso a dados experimentais para esses dois parâmetros pode ser difícil devido às dificuldades encontradas para as medições com partículas muito pequenas ou quando se estiver lidando com materiais pouco estudados, o que leva à necessidade de utilizar-se na prática de um processo de ajuste por tentativa e erro ou outro método de análise para se determinar os valores desses dois parâmetros.

Discutidos os processos de determinação dos coeficientes de amortecimento e de atrito do modelo DEM, uma atenção especial deve ser dada ao processo de determinação do valor da constante de rigidez da mola. Nos últimos anos diversas abordagens têm sido utilizadas para reduzir o tempo computacional exigido para os cálculos do método DEM e permitir que um número maior de partículas seja utilizado nas simulações, o que inclui o uso de algoritmos avançados de detecção de contato como em Iwai *et al.* (1999), o uso de técnicas de processamento paralelo como em Fleissner e Eberhard (2008) e, mais comumente no caso do modelo *Linear-Spring/Dashpot* (LSD), o uso de valores mais baixos que os reais para a constante de rigidez, muitas vezes chamados de valores “artificialmente baixos”.

Como exemplo de aplicação dessa última abordagem podemos citar o trabalho de Tsuji *et al.* (1993), que utilizaram o modelo LSD na análise de um leito fluidizado bidimensional. Segundo os referidos autores, em aplicações que envolvem leitos fluidizados ou transporte pneumático, a força motriz dominante para o movimento das partículas é a força de arrasto aerodinâmico do fluido e, assim, o efeito da rigidez sobre o movimento das partículas é secundário. Deve-se notar que aqui a

palavra “secundário” não quer dizer “insignificante”, já que é de conhecimento da comunidade científica que em escoamentos densos como os encontrados em leitos fluidizados as interações partícula-partícula são importantes e devem ser contabilizadas. Na verdade os autores referem-se à influência sobre o comportamento global do leito e, em problemas onde a análise detalhada dos contatos entre as partículas é exigida, essa abordagem certamente não seria adequada e a utilização de valores realísticos para a constante de rigidez seria exigida.

A grande atratividade para essa abordagem é que, conforme já discutido neste capítulo, no contexto do modelo de força de interação LSD o tempo de colisão ou tempo de contato entre duas partículas é inversamente proporcional à constante de rigidez do modelo (Equação 2.75). Quanto menor for o valor de  $K$ , maior será o tempo de contato entre as partículas e, como o passo de tempo DEM é uma fração do tempo de contato, poderemos usar valores relativamente grandes para esse passo de tempo DEM, o que diminui o tempo de processamento da simulação.

Para tentar ajudar nessa explicação deve-se enfatizar que é importante notar a diferença entre tempo de colisão das partículas e passo de tempo DEM. O tempo de colisão ou tempo de contato é o intervalo de tempo que começa no momento em que as partículas se tocam, se estende durante todos os instantes em que as partículas se deformam no ponto de contato e termina no momento em que as forças repulsivas resultantes fazem com que essas partículas deixem de tocar uma na outra. Para modelar esse fenômeno de três estágios, ou seja, contato, deformação, separação, o Método dos Elementos Discretos utiliza um intervalo de tempo menor do que o tempo de contato entre as partículas para calcular o valor da força repulsiva em função do nível de deformação atual. Esse passo de tempo é chamado de passo de tempo DEM e, quanto menor for seu valor, maior será o número de vezes em que o nível de deformação e a correspondente força repulsiva serão calculados durante o tempo de duração do contato, o que como em qualquer cálculo de integração temporal leva à uma melhor previsão da evolução dos valores desses parâmetros. Entretanto, quanto maior for o número de vezes em que esses cálculos forem executados durante o tempo de contato, maior será o tempo de processamento. Por outro lado, quanto menor for o valor da constante de rigidez, maior será o tempo de contato e maior poderá ser o valor do passo de tempo DEM, o que reduzirá o tempo total de processamento da simulação.

A utilização de valores artificialmente baixos para a constante de rigidez em simulações DEM tem sido bastante utilizada ao longo dos últimos anos como, por exemplo, nos trabalhos de Kawaguchi *et al.* (1998), Rhodes *et al.* (2001) e Kuwagi *et al.* (2000). Essa abordagem também é recomendada por ANSYS inc. (2013) para o uso do modelo LSD implementado no *software* ANSYS FLUENT e utilizado neste trabalho de dissertação.

De acordo ANSYS inc. (2013) apesar do uso de valores baixos para a constante de rigidez ser uma boa alternativa para a redução do tempo computacional, deve-se evitar escolher valores excessivamente baixos para essa constante, já que quanto menor for a constante de rigidez menos repulsivas ou mais “macias” serão as partículas, o que pode causar uma sobreposição (deformação) excessiva das mesmas no ponto de contato e prejudicar as previsões. Dito de outra forma, deve-se escolher um valor para a constante de rigidez que seja pequeno o suficiente para gerar uma redução do tempo total de processamento da simulação e grande o suficiente para evitar a sobreposição excessiva entre as partículas. Segundo ANSYS inc.(2013) a recomendação para uso no *software* ANSYS FLUENT é a de que o valor escolhido para a constante de rigidez atenda ao seguinte critério:

$$K \geq \frac{\pi v^2}{3 \epsilon_D^2} \rho D , \quad (2.80)$$

sendo que  $D$  é o diâmetro do pacote de partículas,  $\epsilon_D$  é o valor máximo de deformação normal permissível para o pacote de partículas, representado por uma fração do diâmetro desse pacote,  $\rho$  é a massa específica da partícula real (e, portanto, do pacote também) e  $v$  é a velocidade relativa entre dois pacotes de partículas em colisão. O valor de  $\epsilon_D$  encontrado na literatura normalmente é de aproximadamente de 1% ou menos e o valor de  $v$  deve ser calculado com base nas escalas de velocidade do problema que está sendo analisado.

Uma vez calculado o valor de  $K$  deve-se inserir esse valor na equação 2.75 para obter o tempo de colisão correspondente e, após isso, deve-se escolher um valor para o passo de tempo DEM que seja uma fração desse tempo de colisão. Também segundo ANSYS inc. (2013), idealmente o tempo de colisão entre as partículas deveria ser discretizado em 20 ou mais passos de tempo, o que indica que o valor

escolhido para o passo de tempo DEM deve ser de pelo menos 1/20 do valor do tempo de colisão para se garantir resultados satisfatórios.

Para finalizar, o uso de valores artificialmente baixos para a constante de rigidez da mola parece ser mais aplicável no contexto do modelo LSD, já que para outros modelos de força de interação DEM como os modelos não lineares normalmente se deriva o valor real da constante de rigidez a partir de propriedades mecânicas reais da partícula como o módulo de elasticidade, o que leva a altos valores para essa constante e, conseqüentemente, valores muito baixos para o tempo de colisão e para o passo de tempo DEM, aumentando o tempo de processamento. Atualmente o modelo LSD é o único modelo de força de interação DEM disponível no *software* ANSYS FLUENT.

## 2.5 ACOPLAMENTO CFD-DEM NO SOFTWARE ANSYS FLUENT

Na análise CFD-DEM de escoamentos bifásicos densos do tipo gás-sólido realizada com o *software* ANSYS FLUENT utiliza-se uma abordagem híbrida na qual a fase discreta é representada de forma lagrangeana e a fase fluida é representada no estilo de abordagem multifluidos, para que dessa forma a presença de partículas em altas concentrações no sistema seja levada em consideração nas equações governantes da fase fluida por meio do conceito de fração volumétrica da fase.

Nesta seção aborda-se a formulação matemática relacionada a essa abordagem híbrida de análise de escoamentos densos gas-sólido. Além disso, optou-se aqui em enfatizar, o tanto quanto possível, as formas simplificadas das equações governantes envolvidas que melhor reflitam os problemas abordados no presente trabalho, ou seja, problemas de escoamento gás-sólido densos sem transferência de calor e massa entre as fases e sem a ocorrência de reações químicas.

### 2.5.1 Formulação matemática para a fase contínua

Quando utiliza-se o acoplamento CFD-DEM somente as equações governantes da fase fluida possuem a forma das equações do modelo multifluidos

discutidas anteriormente neste capítulo, enquanto a fase discreta passa a ser “rastreada” de forma lagrangeana por meio das equações do movimento de Newton. Isso significa que nesse caso não se resolve a equação do momento do modelo multifluidos para a fase sólida como se faz durante a aplicação do modelo multifluidos para escoamentos bifásicos gás-sólido e não se modela as interações partícula-partícula com base na teoria cinética dos escoamentos granulares.

Assim, considerando-se que nos casos analisados no presente trabalho não ocorrem reações químicas ou transferência de calor e massa entre as fases do sistema gás-sólido, a equação da energia não será resolvida e as equações da **fase gasosa** utilizadas para a modelagem CFD-DEM neste trabalho podem ser escritas de forma simplificada como mostrado a seguir (fase gasosa  $q$  e fase sólida  $p$ ):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) = 0 , \quad (2.81)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) = & -\alpha_q \nabla P + \nabla \cdot \bar{\tau}_q + \\ & + \alpha_q \rho_q \vec{g} + K_{pq}(\vec{v}_p - \vec{v}_q) + S_{other} , \end{aligned} \quad (2.82)$$

Sendo que  $S_{other}$  é um termo fonte utilizado para representar outras formas de transferência de quantidade de movimento entre as fases não mostradas explicitamente na Equação 2.82.

No caso de simulações CFD-DEM no *software* ANSYS FLUENT, os modelos de arrasto aplicáveis para o acoplamento entre as fases sólida e fluida por meio do coeficiente de troca de momento na interface são somente os modelos de Syamlal-O’Brien (1989), Wen e Yu (1966) e Gidaspow *et al.* (1992), já discutidos anteriormente neste capítulo. Também conforme mencionado anteriormente, utilizando-se o conceito de pacote de partículas os cálculos do coeficiente de arrasto são baseados no diâmetro das partículas de escala refinada e não no diâmetro do pacote de partículas.

Para o acoplamento pressão-velocidade das equações governantes da fase fluida em escoamentos multifásicos o *software* ANSYS FLUENT disponibiliza o esquema **Coupled** e o esquema **Phase Coupled SIMPLE (PC-SIMPLE)**, indicado por

ANSYS inc. (2011) como sendo uma extensão para escoamentos multifásicos do algoritmo **SIMPLE** descrito em Patankar (1980).

### 2.5.2 Formulação matemática para a fase discreta

Conforme já mencionado, para a análise CFD-DEM de escoamentos gás-sólido no *software* ANSYS FLUENT o rastreamento das partículas é realizado de forma lagrangeana. Para isso, as equações governantes dos movimentos das partículas são equações diferenciais ordinárias relacionadas à 2ª Lei do movimento de Newton, conforme mostrado a seguir:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}_{arrasto} + \vec{F}_{press\tilde{a}o} + \vec{F}_{gravidade} + \vec{F}_{outras} \quad (2.83)$$

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{v} \quad (2.84)$$

sendo que  $m$  e  $\vec{v}$  são, respectivamente, a massa e a velocidade da partícula,  $\vec{F}_{arrasto}$  é a força de arrasto causado pelo fluido,  $\vec{F}_{press\tilde{a}o}$  é a força devido à gradientes de pressão no fluido,  $\vec{F}_{gravidade}$  é a força gravitacional e  $\vec{F}_{outras}$  representa as demais forças adicionais que podem atuar sobre as partículas como, por exemplo, a eletromagnética, a de massa virtual, etc.

Além das forças descritas acima para o termo  $\vec{F}_{outras}$ , também é nesse termo que são incluídas as forças devido às colisões com outras partículas e/ou paredes do sistema, ou seja, é nesse termo que são contabilizadas as forças calculadas pelo Método dos Elementos Discretos (DEM). Assim, pode-se dizer que a equação 2.83 representa um balanço de forças atuantes sobre a partícula que inclui tanto as forças exercidas pelo fluido quanto as forças exercidas por outras partículas e por paredes do sistema devido à colisões, conforme calculado pelo DEM (além da força gravitacional e outras forças de campo).

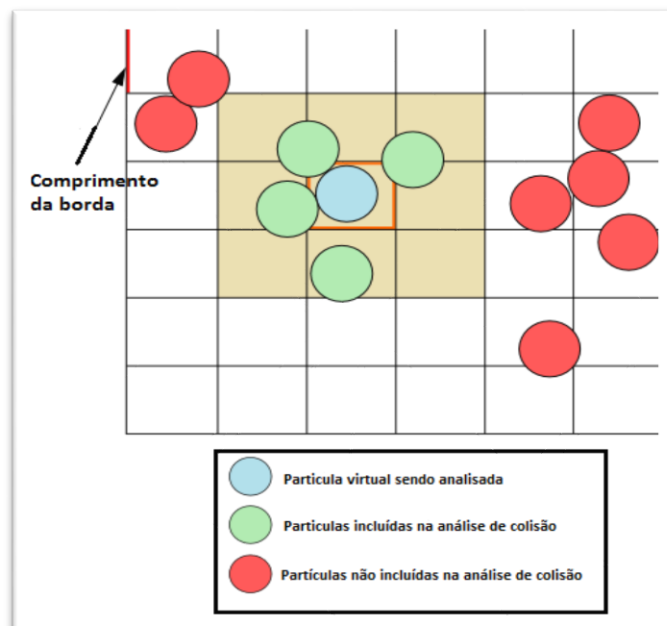
Deve-se destacar que durante os cálculos CFD-DEM, sempre que as novas posições e velocidades das partículas são determinadas com as equações 2.83 e 2.84, o *software* determina também o valor do coeficiente de troca de momento na

interface gás-sólido  $K_{pq}$  e a fração volumétrica de partículas  $\alpha_p$  em cada volume finito da malha CFD. Uma vez que estes valores estão definidos o *software* utiliza-os então para a resolução das equações 2.81 e 2.82 da fase fluida (lembrar que  $\alpha_q = 1 - \alpha_p$ ).

### 2.5.3 Malha cartesiana de colisão DEM

Durante os cálculos de força de interação DEM, o *software* ANSYS FLUENT utiliza uma malha diferente da malha CFD para detectar as partículas que se encontram mais próximas de uma partícula em análise, chamada de malha cartesiana de colisão DEM. Esta abordagem consiste em dividir o domínio computacional na forma de uma malha cartesiana onde o comprimento das bordas das células é um múltiplo do diâmetro da maior partícula no sistema. Após isso, as avaliações de forças de colisão de uma partícula são realizadas somente com relação às partículas que estão nas células vizinhas da malha de colisão, evitando-se considerar a detecção de partículas que estão em células distantes, reduzindo os custos computacionais. A figura 2.20 ilustra o conceito de malha cartesiana de colisão DEM:

Figura 2.20 – Malha cartesiana utilizada para a detecção de colisão.



Fonte: ANSYS, 2011.



#### 2.5.4 Relação entre resolução de malha CFD e tamanho das partículas

Na abordagem de acoplamento CFD-DEM normalmente descrita na literatura, os cálculos relacionados às interações entre a fase fluida e a fase sólida são sempre realizados em uma malha em comum, a malha CFD (não confundir com a malha cartesiana de colisão DEM). Assim, se o volume de uma partícula virtual (pacote de partículas) é maior do que o volume de uma célula da malha CFD a porosidade calculada nesta célula é igual à zero, o que leva à instabilidades numéricas durante a simulação. Para evitar esses problemas de instabilidade numérica deve-se assegurar que a dimensão da maior partícula virtual do sistema granular seja menor do que a menor célula da malha CFD.

Devido ao fato de que a aplicação do DEM a sistemas com um número relativamente grande de partículas reais normalmente requer a utilização de partículas virtuais de dimensão artificialmente maior, a relação entre as dimensões das partículas e as dos volumes finitos da malha CFD descrita acima tende a limitar o processo de refinamento da malha CFD, dificultando a redução dos erros de discretização normalmente realizada através da análise de convergência de malha. Em outras palavras, a medida que se aumenta gradativamente o tamanho das partículas virtuais para diminuir os custos de processamento computacional perde-se, também gradativamente, a capacidade de diminuição do erros de discretização da malha CFD por meio do refinamento (diminuição do tamanho) de seus volumes finitos.

Para tentar contornar esse problema diversas pesquisas vem sendo feitas nos últimos anos. Recentemente Alobaide *et al.* (2013) publicaram um estudo de aplicação de um modelo CFD-DEM estendido na simulação de um leito fluidizado em que os cálculos relacionados à interação entre o fluido e a fase particulada foram realizados em grades (malhas) separadas. Esse procedimento permitiu a variação da resolução da malha CFD (tamanho e número de células) de forma independente do tamanho das partículas, melhorando a precisão dos resultados obtidos. Entretanto, de acordo com os autores, o uso desta abordagem ainda precisa de mais investigação.

Também recentemente, Kriebitzsch *et al.* (2013) realizaram a simulação numérica direta (DNS) de um leito fluidizado gas-sólido por meio do acoplamento da CFD com o Método da Fronteira Imersa (IBM), afim de investigar as consequências

do fato de nos modelos que utilizam o acoplamento CFD-DEM a fase gasosa ser normalmente descrita em uma escala maior do que a da dimensão das partículas, conforme mencionado nos parágrafos anteriores. Segundo os autores essa e outras características do acoplamento CFD-DEM podem fazer com que sob determinadas circunstâncias as forças de interação preditas entre o fluido e uma partícula sejam cerca de 33% menores do que as forças reais.

Apesar disso, deve-se enfatizar que devido ao custo computacional da abordagem DNS a simulação realizada por Kriebitzsch *et al.* (2013) limitou-se à uma única condição de operação, e que apesar do erro na previsão das forças de interação mencionado acima, o uso do acoplamento CFD-DEM continua sendo muito menos custoso em termos computacionais do que o uso da DNS.

Cabe então ao usuário do *software* CFD-DEM avaliar o compromisso entre exatidão nas previsões, estabilidade numérica e custo computacional durante a definição do número e tamanho das partículas com que trabalhará e do tamanho das células da malha CFD.

### 3 MATERIAIS E MÉTODOS

Neste trabalho analisa-se a aplicação do acoplamento CFD-DEM em dois problemas de fluidização, doravante chamados de “Caso A” e “Caso B”. São apresentadas neste capítulo as descrições destes estudos de caso e todos os materiais e métodos utilizados na obtenção dos resultados discutidos no capítulo 4, de tal forma a facilitar a sua apresentação e análise.

#### 3.1 DESCRIÇÃO DO SOFTWARE E HARDWARE UTILIZADOS

Os estudos descritos no presente trabalho foram realizados no sub-laboratório de simulação computacional do Laboratório de Transporte Pneumático da Universidade Federal do Pará (UFPA). Em todas essas simulações utilizou-se o *software* comercial ANSYS FLUENT 14.5, bem como computadores do tipo *Workstation*, em modo de processamento paralelo de memória dividida em uma máquina local, sempre com a utilização de 8 (oito) núcleos físicos de processamento. A tabela 3.1 mostra as especificações gerais de um dos computadores utilizados:

Tabela 3.1: Especificações gerais de um dos computadores utilizados nas simulações.

PARÂMETROS	ESPECIFICAÇÕES
<b>Tipo de computador</b>	<i>Workstation</i>
<b>Processador</b>	<i>Intel(R) Xeon(R) CPU X5650 @ 2.67GHz</i> 2.66 GHz (2 processadores: 12 núcleos físicos + 12 núcleos virtuais)
<b>Memória (RAM)</b>	28 GB
<b>Tipo de sistema</b>	Sistema Operacional <i>Windows Server</i> de 64 Bits

#### 3.2 DESCRIÇÃO DOS ESTUDOS DE CASO

##### 3.2.1 Estudo de caso A

Como não são fornecidas informações detalhadas nos manuais do *software* ANSYS FLUENT 14.5 sobre a formulação matemática do modelo de pacotes de partículas utilizado em seu acoplamento CFD-DEM, optou-se por verificar as

potencialidades desse modelo por meio de comparação com resultados disponíveis na literatura. Tal estudo comparativo permitirá verificar de forma prática a possibilidade de redução do tempo de simulação CFD-DEM por meio do uso de duas escalas de tamanho de partículas, uma para os cálculos de arrasto e outra para os cálculos do DEM. Após comprovada de forma prática, essa abordagem é utilizada em todas as simulações do leito de alumina analisado no estudo de caso B.

No estudo de caso A os resultados obtidos com o FLUENT são comparados com os resultados obtidos com o modelo de partículas representativas utilizado nas simulações CFD-DEM realizadas por Hilton e Cleary (2012). Apesar da falta de informações detalhadas sobre a formulação matemática do modelo de pacotes de partículas do FLUENT, segundo ANSYS inc. (2013b) esse modelo não seria tão sofisticado quanto o descrito por Hilton e Cleary (2012). Assim, considera-se que este último seja adequado para os estudos comparativos necessários, já que seus resultados também apresentam boa concordância com a teoria da fluidização.

Hilton e Cleary (2012) compararam os resultados de simulações em que utilizaram-se-se partículas de tamanho real com os resultados de simulações em que utilizaram-se partículas representativas com duas escalas de tamanho diferentes. A verificação no estudo de caso A da possibilidade de redução do tempo de simulação por meio do uso de partículas representativas sem perdas significativas nos resultados também permite diminuir o número de alternativas de modelagem analisadas no estudo de caso B.

Em Hilton e Cleary (2012) utilizaram-se partículas de tamanho real nas simulações de cinco leitos diferentes e o método de partículas representativas nas simulações de três leitos diferentes, de acordo com os dados da tabela. 3.2.

Tabela 3.2: Valores dos parâmetros utilizados nas simulações de Hilton e Cleary (2012)

LEITO COM PARTÍCULAS DE TAMANHO REAL			LEITO COM PARTÍCULAS REPRESENTATIVAS			
$d$	$\varepsilon$	$N$	$d^f$	$d^c$	$s$	$N^f$
2 mm	0,626	291914	2 mm	6 mm	3.0	280098
3 mm	0,624	85585	3 mm	6 mm	2.0	82992
4 mm	0,623	35640	4 mm	6 mm	1.5	35012
5 mm	0,620	18079	-----	-----	-----	-----
6 mm	0,619	10374	-----	-----	-----	-----

Fonte: Adaptado de Hilton e Cleary (2012)

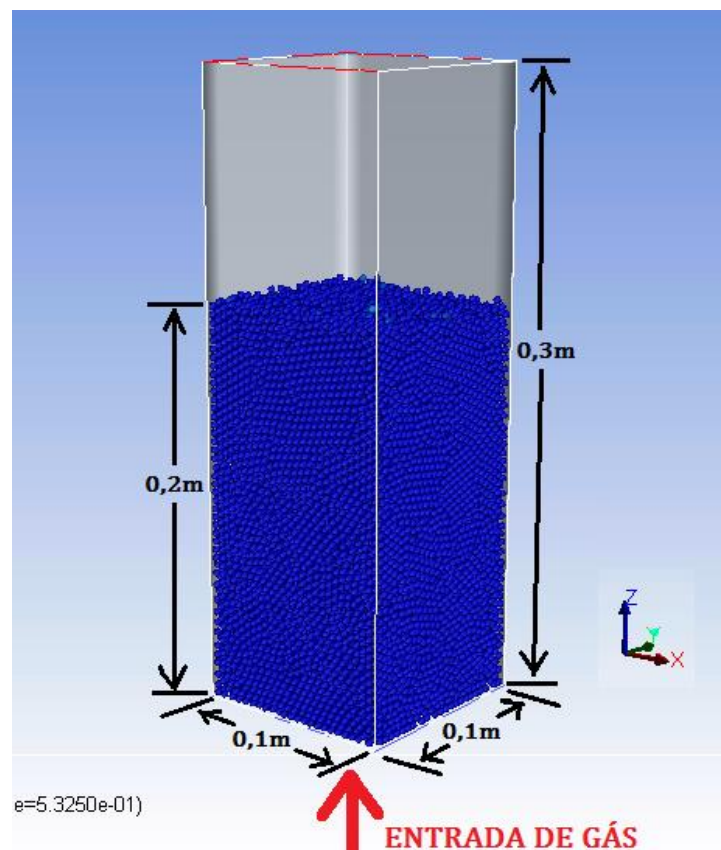
Diferentemente do que foi feito em Hilton e Cleary (2012), realizou-se no presente trabalho somente simulações do leito com partículas de diâmetro médio de 4mm. No caso das simulações desse leito com o método das partículas representativas o diâmetro de 4mm caracteriza o diâmetro das partículas de escala refinada, enquanto utilizou-se o diâmetro de 6mm para a correspondente partícula de escala grosseira (linha sombreada na tabela 3.2). Na tabela 3.3 estão resumidos outros parâmetros usados nas simulações e a figura 3.1 ilustra o leito de partículas:

Tabela 3.3 – Demais parâmetros usados nas simulações do caso A

PARÂMETRO	VALOR
Massa específica da partícula ( $\rho_p$ )	1000 kg/m <sup>3</sup>
Massa específica do gás ( $\rho_f$ )	1,2 kg/m <sup>3</sup>
Viscosidade do gás ( $\mu_f$ )	1,8 x 10 <sup>-5</sup> Pa.s
Coefficiente de atrito da partícula ( $\mu$ )	0,1
Coefficiente de rigidez da mola ( $k$ )	1,0 x 10 <sup>4</sup> N/m
Coefficiente de restituição ( $\eta$ )	0,5

Fonte: Adaptado de Hilton e Cleary (2012)

Figura 3.1 – Leito de partículas virtuais do estudo de caso A



Todas as simulações foram rodadas para um total de 2 segundos de tempo de escoamento do fluido através do leito. A resolução da malha CFD, ou seja, o número de volumes finitos nas direções x, y e z foi de 10, 10 e 30, respectivamente.

A velocidade de entrada do gás foi variada de 0,2 m/s à 2 m/s em incrementos de 0,2 m/s. Além de realizar-se a comparação entre os resultados das simulações com o ANSYS FLUENT e os resultados de Hilton e Cleary (2012), realizaram-se também comparações dos valores preditos para o gradiente de pressão com os valores obtidos por uma expressão empírica dada por Ergun (1952).

### 3.2.2 Estudo de caso B

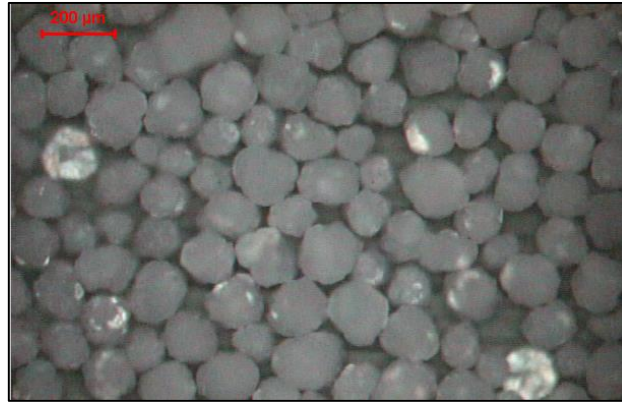
O estudo de caso B refere-se a uma operação de fluidização de alumina analisada experimentalmente e computacionalmente com o uso do modelo Euleriano-Euleriano por Lourenço (2012.)

Nas próximas seções são apresentadas as características do material particulado, do equipamento utilizado para a sua fluidização, as especificações gerais do caso B e as condições de fluidização analisadas.

#### *3.2.2.1 Caracterização do material particulado do leito*

O material particulado deste caso foi um tipo de alumina ( $Al_2O_3$ ) produzida na empresa Alunorte - Alumina do Norte do Brasil S.A e usada no processo produtivo da empresa Albras - Alumínio Brasileiro S.A, cujas características foram descritas por Lourenço (2012).

Na figura 3.2 pode-se observar uma imagem das partículas de alumina do caso B e na tabela 3.4 pode-se observar algumas propriedades de interesse desse material, bem como os métodos utilizados para a sua obtenção:

Figura 3.2 - Partículas de alumina ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) do caso B.

Fonte: Lourenço, 2012.

Tabela 3.4: Propriedades de interesse da alumina usada no caso B.

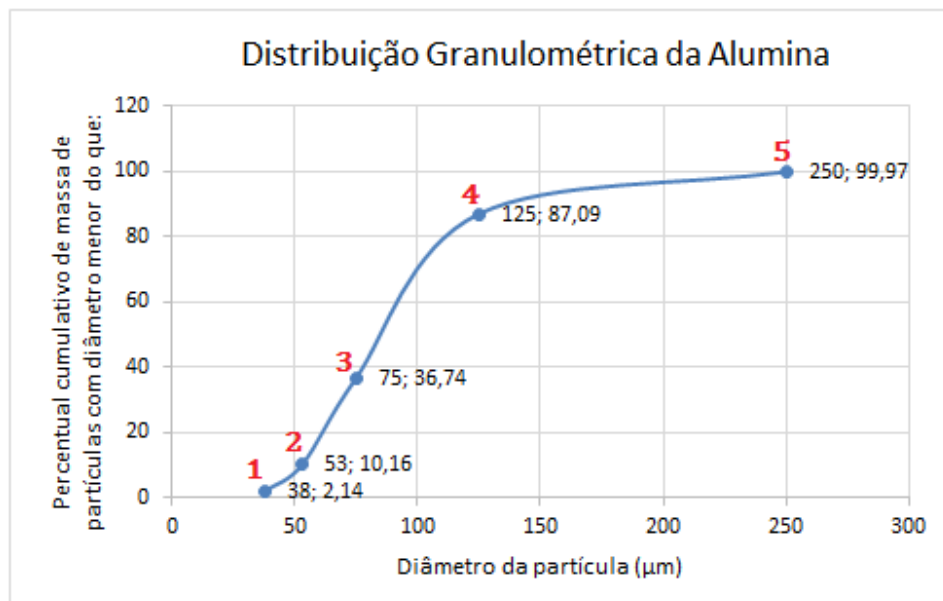
PROPRIEDADES	VALOR OBSERVADO	MÉTODO DE DETERMINAÇÃO
Massa específica $\rho_s$ ( $\text{kg/m}^3$ )	3387*	Picnometria
Diâmetro médio $d_p$ ( $\mu\text{m}$ )	84,06	Peneiramento
Esfericidade $\phi$ (-)	0,679	Análise de imagem

Fonte: Adaptado de Lourenço (2012)

\* Vasconcelos (2011).

O diâmetro médio mostrado na tabela 3.4 foi estimado através da análise de distribuição granulométrica da alumina, conforme descrito no capítulo 2. A representação gráfica dessa distribuição granulométrica é mostrada na figura 3.3:

Figura 3.3 - Distribuição granulométrica da alumina usada no caso B.

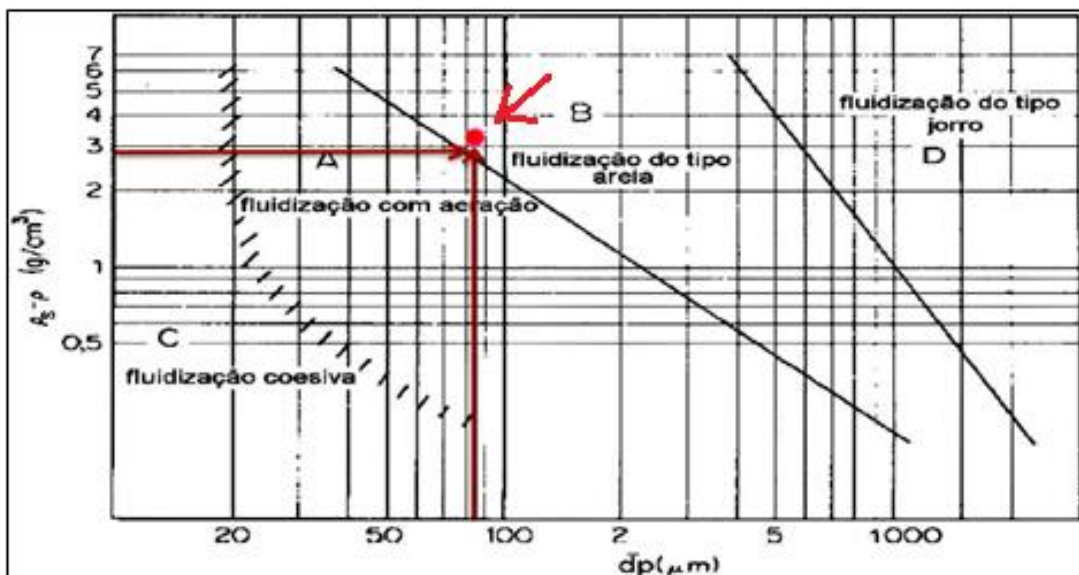


Fonte: Adaptado de Lourenço (2012)

Para facilitar o entendimento da figura 3.3 pode-se tomar como exemplo o ponto 4 destacado em vermelho e que informa que 87,09% da massa da amostra de alumina analisada era formada por partículas com diâmetro menor do que 125  $\mu\text{m}$ . De modo análogo, o ponto 2 informa que 10,16% da massa da amostra de alumina analisada era formada por partículas com diâmetro menor do que 53  $\mu\text{m}$ .

Segundo Lourenço (2012), com base na análise de suas propriedades essa alumina pode ser classificada como integrante do grupo B da classificação de Geldart (1973), conforme indicado na figura 3.4 mostrada a seguir:

Figura 3.4 - Classificação do tipo de fluidização da alumina usada no caso B



Fonte: Lourenço, 2012

### 3.2.2.2 Descrição do equipamento de fluidização

O equipamento utilizado para a fluidização do leito de partículas de alumina do caso B foi descrito em detalhes em Lourenço (2012). Com base nestas descrições criou-se aqui um protótipo virtual 3D aproximado para tentar melhorar a compreensão da geometria do equipamento, conforme mostrado nas figuras a seguir:



Figura 3.5 - Imagem 3D do equipamento de fluidização (dimensões em metros).

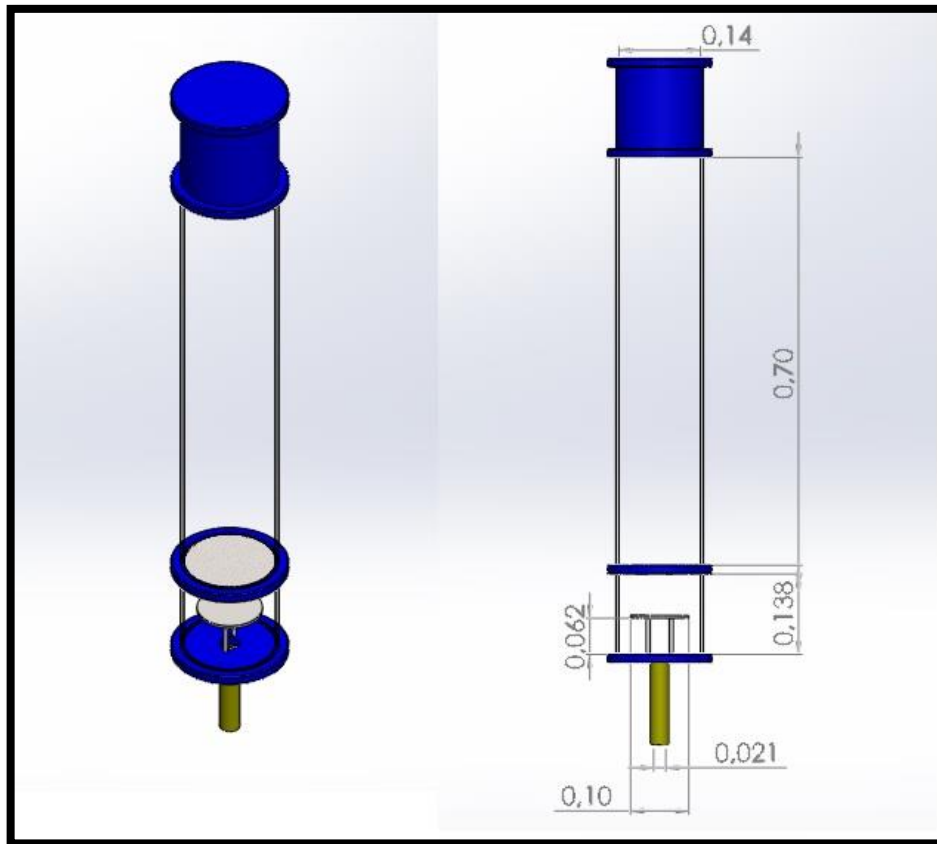


Figura 3.6 - Detalhe da geometria da seção inferior do equipamento de fluidização

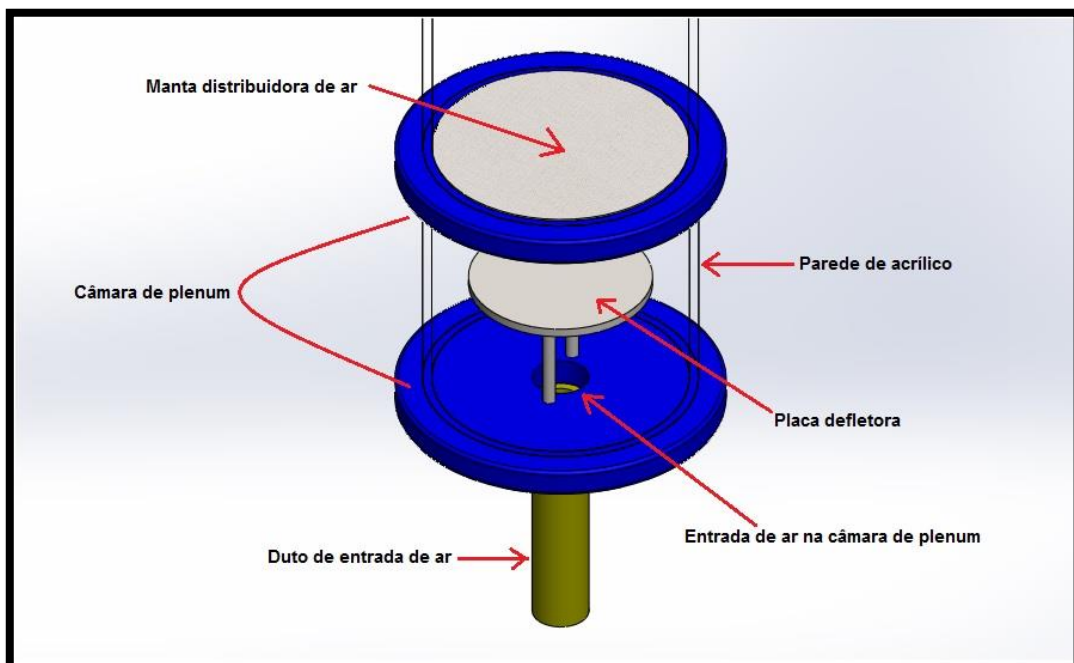
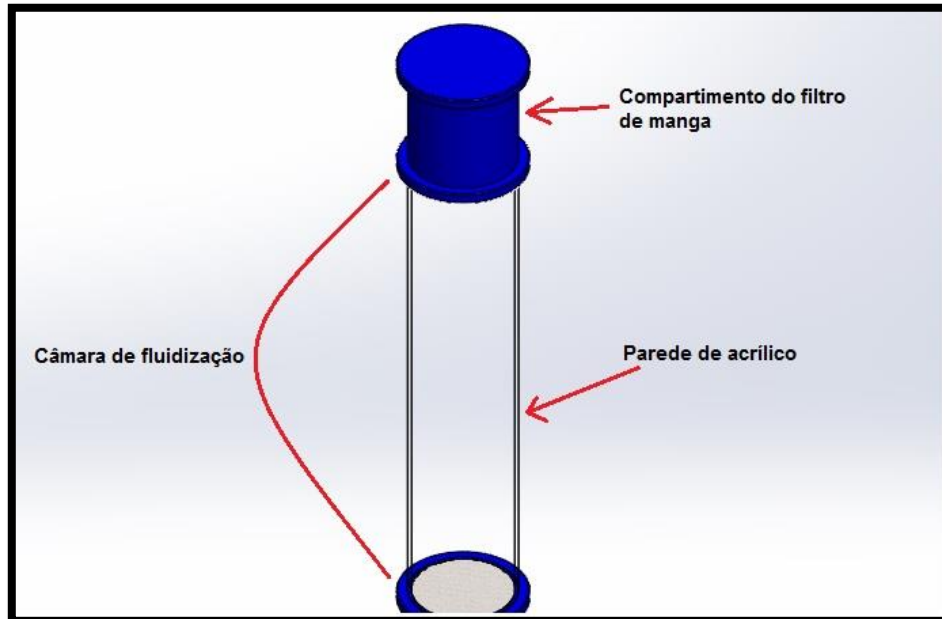


Figura 3.7 - Detalhe da geometria da seção superior do equipamento de fluidização.



Conforme pode-se observar nas figuras 3.5 à 3.7 e de acordo com as descrições de Lourenço (2012) o equipamento de fluidização é formado por uma câmara de plenum, uma placa defletora, uma manta distribuidora de ar, uma câmara de fluidização e um compartimento do filtro de manga.

A finalidade da câmara de plenum é promover uma melhor distribuição do fluxo de gás fluidizante e, devido ao fato de que a razão entre o diâmetro do corpo cilíndrico do equipamento e o diâmetro do duto de entrada de ar ( $D_c/D_i \cong 6,67$ ) estava fora do valor considerado desejável para uma boa fluidização ( $D_c/D_i = 6$ ), instalou-se no seu interior uma placa defletora para aumentar a eficiência da distribuição de ar.

A manta distribuidora de ar também possui a finalidade de ajudar a tornar a distribuição do fluxo de ar fluidizante o mais uniforme possível ao longo da seção transversal do leito de partículas, mas além disso ela também possui a finalidade de sustentar esse leito de partículas e impedir a perda desse material para a câmara de plenum. Segundo Lourenço (2012) essa manta foi confeccionada com fios de poliéster de alta firmeza, tecida em tafetá com revestimento de poliuretano.

Conforme o nome indica, a câmara de fluidização é a parte do equipamento na qual o processo de fluidização do leito de partículas ocorre, sendo que para permitir uma boa visualização desse fenômeno as suas paredes foram fabricadas com material acrílico que, além da transparência, é bastante resistente às vibrações

mecânicas resultantes de altas vazões de ar no equipamento durante o seu funcionamento. A câmara de fluidização e a câmara de plenum possuem o mesmo diâmetro de seção transversal (0,14m). Acima da câmara de fluidização existe um filtro de manga confeccionado em poliuretano para reter as partículas de alumina arrastadas da base dessa câmara pelo elevado fluxo de ar.

A obtenção dos valores de queda de pressão foi realizada por meio de um manômetro diferencial digital, com pontos de tomada de pressão localizados na câmara de plenum e na parte superior da câmara de fluidização. Para maiores detalhes sobre a instrumentação e os procedimentos de aquisição e tratamento de dados experimentais utilizados o leitor deverá consultar Lourenço (2012).

### 3.2.2.3 Condições operacionais analisadas

Em sua tese de doutorado, Lourenço (2012) analisou não somente a fluidização de alumina, mas também a fluidização de esferas de vidro e de misturas binárias com diferentes proporções entre alumina e partículas de crosta, que é um resíduo gerado na demolição de cubas eletrolíticas de produção de alumínio.

Dentre as análises realizadas apenas com a alumina, estudou-se em Lourenço (2012) o comportamento do leito para três razões de aspecto (altura do leito/diâmetro do leito) diferentes, sendo que no presente trabalho, apenas uma destas situações foi examinada por meio do acoplamento CFD-DEM e não realizaram-se análises com misturas binárias ou esferas de vidro. O problema abordado aqui e que caracteriza o estudo de caso B é resumido de modo geral na tabela 3.5:

Tabela 3.5 - Especificações gerais das condições operacionais do estudo de caso B

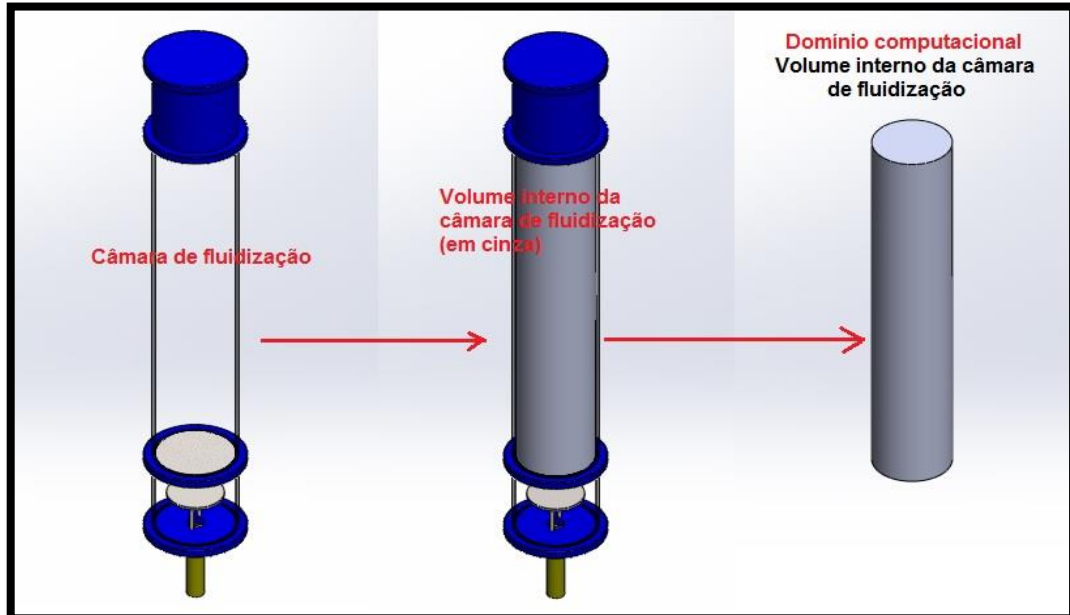
<b>ESTUDO DE CASO B</b>	
<b>Material</b>	Alumina (seção 3.2.2.1)
<b>Altura inicial do leito de partículas (H)</b>	0,1 m
<b>Diâmetro do leito de partículas (D)</b>	0,14 m
<b>Razão de aspecto do leito (H/D)</b>	0,71
<b>Porosidade inicial do leito (Experimental)</b>	0,63
<b>Gás fluidizante</b>	Ar (Simplificado como O <sub>2</sub> +N <sub>2</sub> )
<b>Velocidades do gás fluidizante</b>	[0 - 0,125 m/s]

### 3.2.2.4 Domínio computacional

No trabalho realizado por Lourenço (2012) as simulações por meio do modelo Euleriano-Euleriano foram realizadas de forma bidimensional (2D). Aqui, além de utilizar-se o acoplamento CFD-DEM a abordagem de simulação é estendida para um domínio tridimensional (3D), a fim de melhorar a visualização do comportamento do leito como um todo e, possivelmente, a obtenção de resultados.

Para o estudo de caso B, o domínio computacional para os cálculos de interação entre fluido e partículas compreende a representação geométrica do volume interno da câmara de fluidização, já que este é o local onde as duas fases coexistem durante o processo de fluidização. Na figura 3.8 pode-se observar a representação 3D do volume interno da câmara de fluidização do equipamento de fluidização e os detalhes relacionados à discretização espacial desse domínio computacional são informados na próxima seção.

Figura 3.8 - Detalhe do domínio computacional do estudo de caso B.



### 3.2.2.5 Geração das malhas CFD

A discretização do domínio computacional foi realizada no *software* Ansys Meshing 14.5 e, por questões de limitação computacional (capacidade de

processamento), somente duas malhas CFD foram utilizadas até o momento de forma combinada com diferentes resoluções de partículas (número e tamanho) para o acoplamento CFD-DEM. Na figura 3.9 são apresentadas as duas malhas CFD utilizadas nas simulações e na tabela 3.6 algumas de suas especificações:

Figura 3.9 - (a) Malha 1, com 16640 volumes finitos. (b) Malha 2, com 50600 volumes finitos.

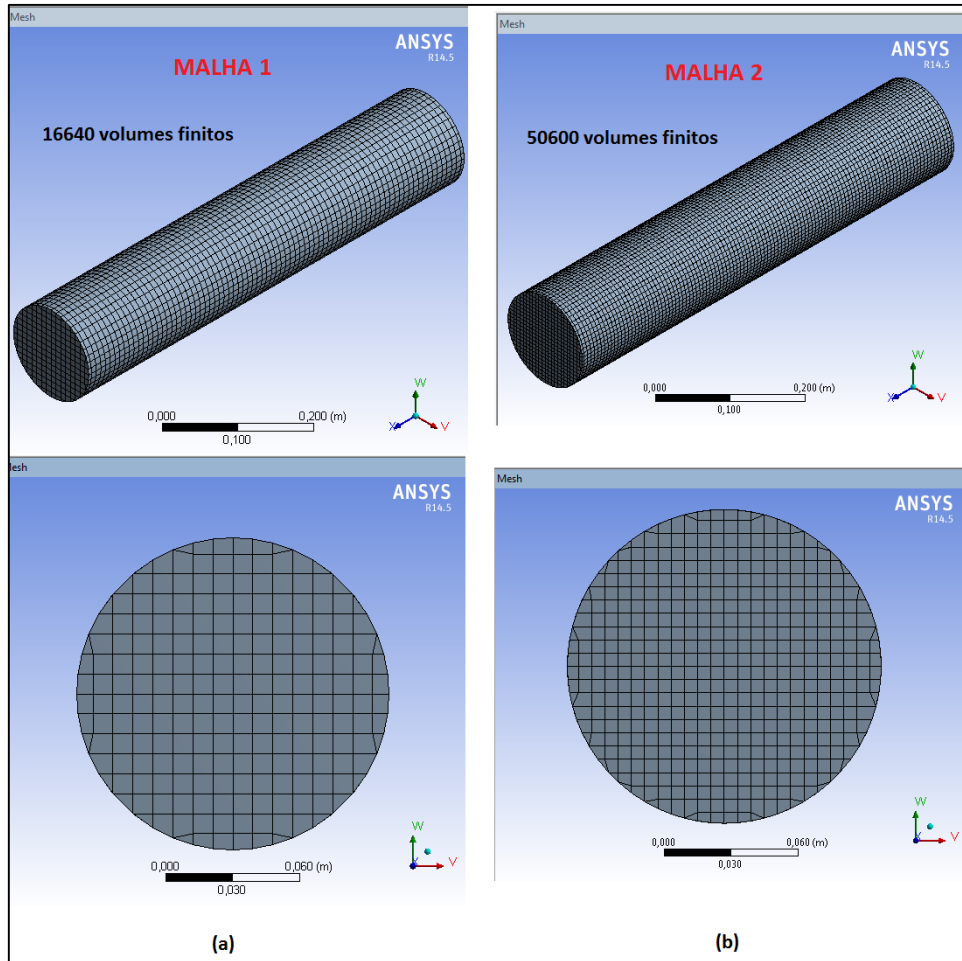


Tabela 3.6: Especificação das malhas CFD utilizadas nas simulações do caso B

PARÂMETRO	MALHA 1	MALHA 2
Tipo de malha	Estruturada	Estruturada
Tipos de células	Hexaédricas e prismáticas	Hexaédricas e prismáticas
Nº de células	16640	50600
Nº de nós	17901	53391
Alinhamento das células	Com o sentido de escoamento do fluido	Com o sentido de escoamento do fluido
Qualidade ortogonal	Min = 0,8 e Max = 1	Min = 0,7 e Max = 1
Razão de aspecto	Min = 1,01 e Max = 3,57	Min = 1,08 e Max = 4,13

Por questão de concisão, somente os valores dos dois principais indicadores de qualidade deste tipo de malha são citados na tabela 3.6. Ambos informam desvios das formas das células em relação à forma ideal esperada, sendo que a qualidade ortogonal varia de 0 à 1, deve ser mantida com valor maior do que 0,1 e quanto mais próximo de 1 melhor é a qualidade da malha. Já para a razão de aspecto uma boa prática para o tipo de malha utilizada aqui é manter seu valor menor do que 10 (ANSYS inc., 2011). Ambas as malhas podem ser classificadas como adequadas para a análise CFD-DEM em questão, mas devido à necessidade de entendimento do conjunto dos vários indicadores como um todo (mostrados e não mostrados na tabela), o leitor interessado deve consultar maiores detalhes em ANSYS inc. (2011).

### 3.2.2.6 Estratégia de simulação

Como o efeito do uso de duas escalas de dimensão de partículas (diâmetros) sobre o tempo e resultados das simulações CFD-DEM foi averiguado no caso A, passou-se então no caso B para a análise das influências exercidas por outros parâmetros considerados importantes. Essa análise inclui o uso de diferentes modelos de arrasto, variação do número e tamanho dos pacotes de partículas, diferentes resoluções de malha CFD, ou seja, diferentes tamanhos e números de volumes finitos da malha, bem como a representação de partículas tanto com distribuição de dimensão (diâmetro) uniforme quanto com distribuição granulométrica real. Além disso, realizou-se a variação do valor da constante de rigidez da mola do modelo de força de interação DEM, bem como os valores do passo de tempo DEM e do passo de tempo CFD. Tais variações foram realizadas para que se pudesse chegar o mais próximo possível dos resultados experimentais relativos ao comportamento real do leito de alumina que estava sendo analisado.

Dentre todas as variações de configuração do modelo CFD-DEM testadas serão descritas no presente trabalho somente aquelas formadas por combinações de parâmetros que forneceram os resultados considerados mais expressivos até o presente momento. Assim, serão analisados no capítulo 4 os resultados das simulações realizadas com três configurações do modelo CFD-DEM, chamadas a

partir de agora de modelos A1, A2 e A3, estando suas principais características descritas nas tabelas 3.7 e 3.8, mostradas a seguir:

Tabela 3.7: Principais características do modelo A1

<b>MODELO A1</b>		
Modelo de força de interação DEM		Modelo de mola e amortecedor lineares (LSD)
Diâmetro do pacote de partículas		2,1568 mm
Diâmetro médio das partículas reais		84,06 $\mu\text{m}$
Forma das partículas virtuais		Esférica
Número de pacotes de partículas		100000
Distribuição granulométrica das partículas		Não (tamanhos uniformes)
Coeficiente de restituição (partícula-partícula e partícula-parede)		0,9
Coeficiente de atrito estático (partícula-partícula e partícula-parede)		0,3
Coeficiente de atrito cinético (partícula-partícula e partícula parede)		0,12
Constante de rigidez		100 N/m
Passo de tempo DEM		2e-04 s
Passo de tempo CFD		1e-03 s
Modelo de arrasto		Wen e Yu (1966)
Malha CFD		Malha 1
Regime de escoamento do fluido		Laminar
Condições numéricas	Acoplamento Pressão-Velocidade	Phase Coupled SIMPLE
	Discretização dos termos convectivos: momento	Esquema Quick
	Discretização dos termos convectivos: Fração volumétrica	Esquema Quick
Condições de contorno	Na entrada do domínio computacional	Velocidade especificada
	Na saída do domínio computacional	Pressão especificada
	Na parede do dispositivo	Adiabática; Não deslizamento
	De colisão partícula-parede, partícula-manta e partícula-filtro	Reflexão

Tabela 3.8: Principais características dos modelos A2 e A3

<b>MODELO A2</b>	
Modelo de arrasto	Gidaspow <i>et al.</i> (1992)
Distribuição granulométrica real	Sim, incluída.
Demais características	Iguais às do modelo A1
<b>MODELO A3</b>	
Modelo de arrasto	Gidaspow <i>et al.</i> (1992)
Distribuição granulométrica real	Sim, incluída.
Diâmetro do pacote de partículas	1,48 mm
Número de pacotes de partículas	300000
Constante de rigidez	300 N/m
Passo de tempo DEM	1,45e-05s
Passo de tempo CFD	5e-04s
Malha CFD	Malha 2
Demais características	Iguais às do modelo A1

É importante notar que os valores da constante de rigidez utilizados nos modelos A1, A2 e A3 são valores artificialmente baixos e não realísticos para as partículas de alumina. Estes valores foram escolhidos para reduzir-se o tempo total de simulação, conforme estratégia descrita no capítulo 2. Desse modo, os resultados obtidos permitirão averiguar se realmente é possível obter-se resultados satisfatórios com tal abordagem quando ela é aplicada a leitos de alumina.

Conforme pode-se observar nas tabelas 3.7 e 3.8, devido ao grande número de parâmetros a serem testados e ao grande tempo de simulação requerido para cada teste diante da atual disponibilidade de recursos computacionais, optou-se por realizar a variação de tais parâmetros de forma conjunta em cada teste diferente, priorizando o ajuste do modelo ao invés da análise do efeito isolado de um determinado parâmetro. Desse modo, ao invés de realizar-se variações, por exemplo, do coeficiente de rigidez, mantendo-se as demais variáveis constantes, poderia-se variar o valor desse coeficiente juntamente com o número de volumes finitos da malha CFD, etc. e avaliar os efeitos dessa variação conjunta de parâmetros, até obter-se boa concordância entre os resultados simulados e os experimentos de Lourenço (2012).

A análise da variação de parâmetros de modelagem de forma isolada foi incluída como sugestão para trabalhos futuros no capítulo 6.



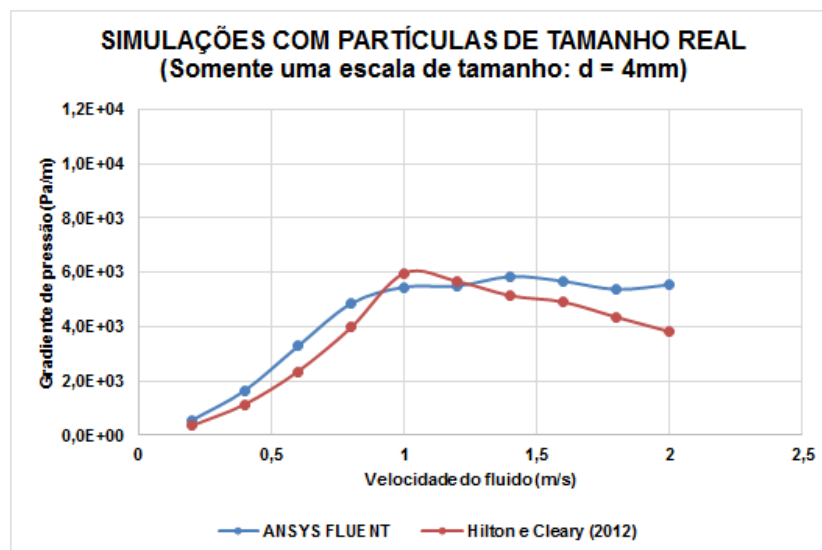
## 4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

### 4.1 ESTUDO DE CASO A

No estudo de caso A procurou-se avaliar a funcionalidade de simulação CFD-DEM recentemente implementada no ANSYS FLUENT por meio da reprodução de dados disponíveis na literatura, bem como avaliar o efeito do uso de partículas de tamanho real ou de partículas representativas sobre o tempo de simulação.

Na figura 4.1 é possível observar as curvas de fluidização do leito com partículas de tamanho real ( $d=4\text{mm}$ ) obtidas tanto por Hilton e Cleary (2012) quanto nas simulações do presente trabalho com o *software* ANSYS FLUENT.

Figura 4.1 – Resultados para as simulações com partículas de tamanho real

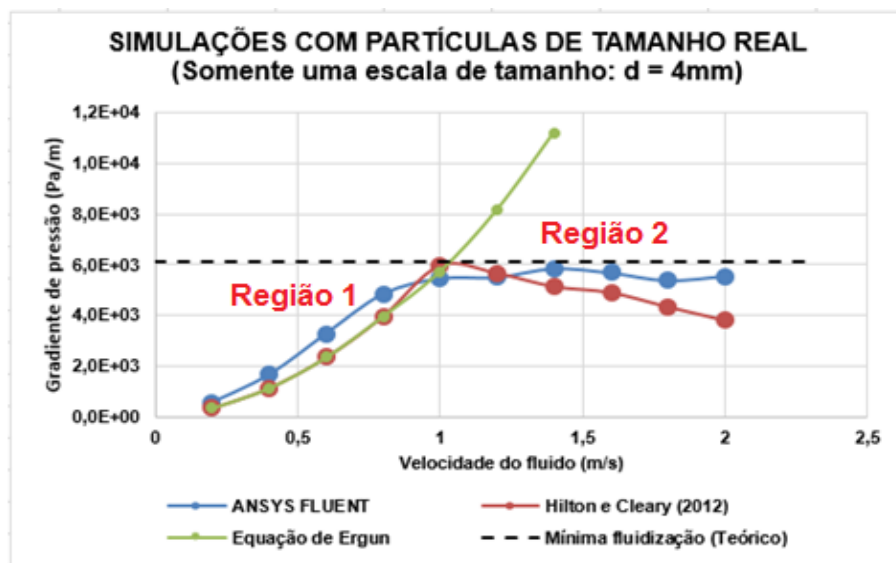


Conforme pode-se observar na figura 4.1 ambas as curvas apresentam um comportamento global semelhante, estando as diferenças mais notáveis presentes em uma parte da região correspondente ao comportamento de leito fixo e na região correspondente à velocidade do fluido igual à 2 m/s. Tais diferenças podem estar relacionadas ao fato de que, de acordo com Ansys inc. (2013b), o modelo de pacote de partículas atualmente implementado no *software* ANSYS FLUENT não é exatamente igual ao modelo de partículas representativas de Hilton e Cleary (2012).

Apesar da diferença do modelo de partículas representativas de Hilton e Cleary (2012) em relação ao modelo de pacote de partículas do *software* ANSYS FLUENT (ANSYS inc., 2013b), as diferenças apresentadas na figura 4.1 não podem ser atribuídas somente a este fator. Nas simulações realizadas com o *software* ANSYS FLUENT precisou-se adotar valores para alguns parâmetros de modelagem que não foram explicitados em Hilton e Cleary (2012) como, por exemplo, o valor do coeficiente de atrito partícula-parede, que precisou ser inicialmente adotado como sendo igual ao do coeficiente de atrito partícula-partícula, mas que depois necessitou de ajustes. Outro fator que merece destaque é o valor do passo de tempo DEM utilizado no *software* ANSYS FLUENT, já que este pode influenciar nos resultados obtidos e pode ser variado para melhorar as previsões.

Mesmo com as diferenças descritas no parágrafo anterior não pode-se afirmar que as previsões obtidas com o *software* FLUENT e mostradas na figura 4.1 estejam insatisfatórias, pois na figura 4.2 pode-se observar que os resultados de Hilton e Cleary (2012) ajustam-se melhor aos dados obtidos com a equação de Ergun (1952) na região de leito fixo (Região 1), mas os dados das simulações com o *software* ANSYS FLUENT aproximam-se melhor do valor teórico do gradiente de pressão correspondente à mínima fluidização e à fluidização plena (Região 2):

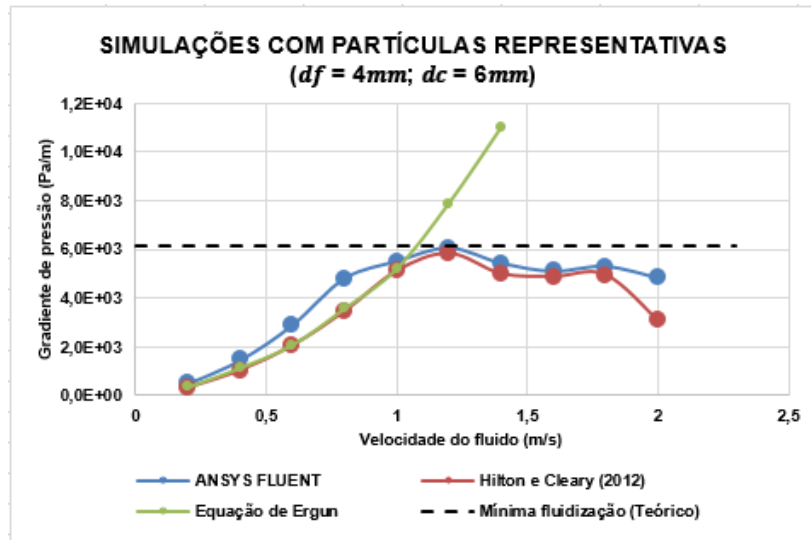
Figura 4.2 – Demais comparações das simulações com partículas de tamanho real



Considerações semelhantes às discutidas até agora para as simulações com partículas de tamanho real podem ser aplicadas para as simulações do leito em

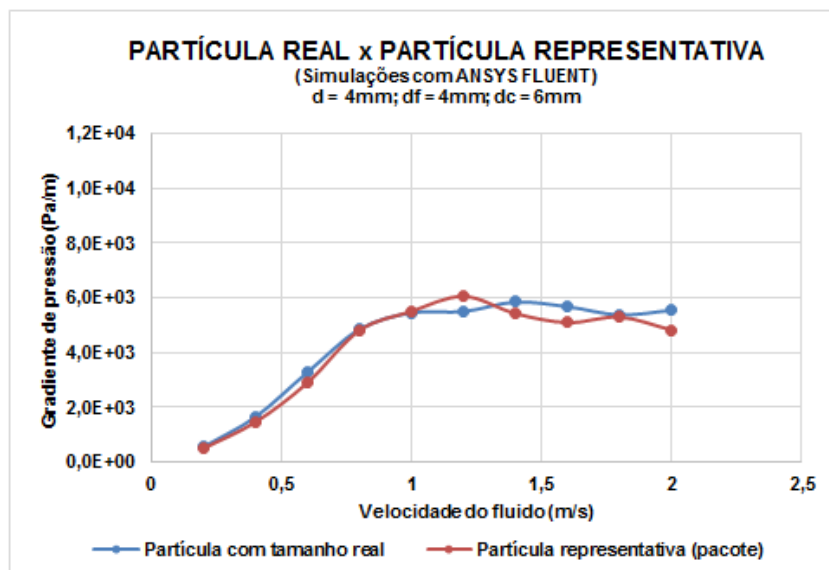
que utiliza-se partículas representativas. Neste caso, o diâmetro das partículas de escala refinada é de  $d^f = 4\text{mm}$  e o diâmetro das partículas de escala grosseira é de  $d^c = 6\text{mm}$ , sendo o gráfico de comparação dos resultados mostrado na figura 4.3:

Figura 4.3 – Comparações das simulações com partículas representativas



Confirmada a capacidade da funcionalidade CFD-DEM recentemente implementada no FLUENT em reproduzir dados já disponíveis para a comunidade científica, também é importante “confrontar” os resultados das simulações com partícula de tamanho real e com partículas representativas para avaliar as diferenças em termos de tempo de simulação e precisão da predição, conforme figura 4.4:

Figura 4.4 – Comparação de dados para simulações do FLUENT com partículas real e representativa



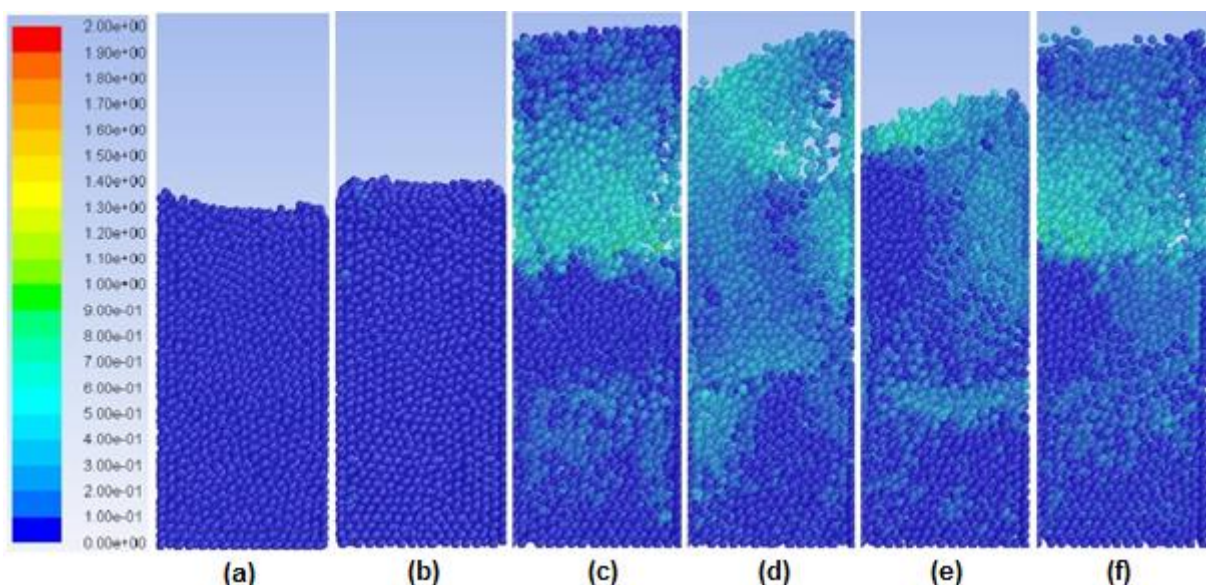
Para a análise da figura 4.4 vale lembrar que, assim como nas simulações com partícula de tamanho real, o diâmetro de partícula de escala refinada usado nas simulações com partículas representativas também é 4mm. A diferença é que nas simulações com partícula representativa esse diâmetro só é usado nos cálculos de arrasto, enquanto nos cálculos de colisão do DEM utiliza-se o diâmetro de partícula de escala grosseira, nesse caso 6mm.

A figura 4.4 mostra que os valores do gradiente de pressão do fluido obtidos nas simulações com partícula representativa possuem boa concordância com os das simulações com partículas de tamanho real. Entretanto, a razão  $T/T^{CGM}$  entre o tempo computacional para as simulações com partícula real  $T$  e o tempo computacional para as simulações com partícula representativa  $T^{CGM}$  foi de  $T/T^{CGM} \cong 3,7$ , o que significa que as simulações com partículas representativas foram 3,7 vezes mais rápidas.

O valor de  $T/T^{CGM}$  informado por Hilton e Cleary (2012) para este caso em que  $d^f = 4mm$  e  $d^c = 6mm$  foi de  $T/T^{CGM} = 4,22$ . Novamente, acredita-se que tal diferença em relação ao valor de 3,7 obtido com as simulações no ANSYS FLUENT está relacionada às diferenças de formulação e à adoção de valores para alguns parâmetros mencionadas durante a análise da figura 4.1.

A figuras 4.5 exibe algumas imagens do comportamento dos pacotes de partículas (partículas de escala grosseira) nas simulações descritas nesta seção:

Figura 4.5 – Comportamento dos pacotes de partículas do leito simulado com o ANSYS FLUENT.



Na figura 4.5, o leito encontra-se na condição de leito fixo no instante de tempo (a). No instante (b) observa-se uma certa expansão do leito em relação ao à altura do leito fixo, o que pode ser considerada uma condição de mínima fluidização, enquanto nos instantes seguintes (c), (d), (e) e (f) o leito está completamente fluidizado. A variação de comportamento mostrada na figura 4.5 é uma função da variação da velocidade do fluido.

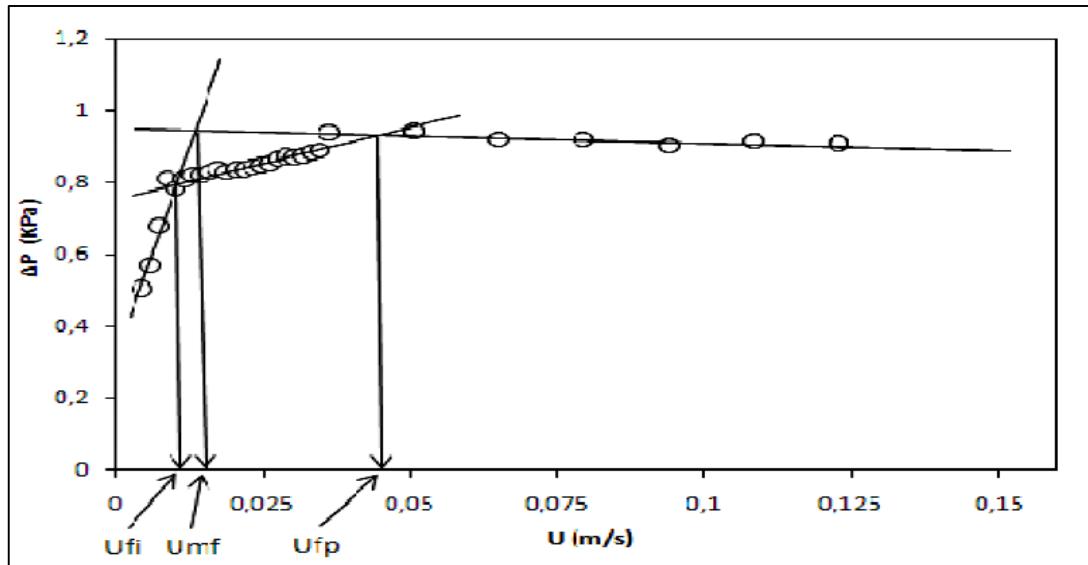
Segundo Hiton e Cleary (2012) simulações com a abordagem de partículas representativas para um outro caso em que  $d^f = 2mm$  e  $d^c = 6mm$  resultaram no valor de  $T/T^{CGM} = 68,64$ , indicando que quanto maior for a diferença entre os diâmetros da partícula de escala grosseira e de escala refinada, maior será a redução do tempo total de simulação.

Apesar do modelo de pacote de partículas do ANSYS FLUENT 14.5 não ser igual ao modelo de partículas representativas de Hilton e Cleary (2012), acredita-se que os resultados apresentados nesta seção serviram para confirmar ser possível utilizar o conceito de pacotes de partículas nas simulações CFD-DEM realizadas com o ANSYS FLUENT, garantindo redução do tempo total de simulação sem perdas significativas na precisão dos resultados obtidos. Assim, nas demais simulações realizadas no presente trabalho, ao invés de utilizar-se partículas com tamanho real será utilizada somente a abordagem de pacote de partículas.

## 4.2 ESTUDO DE CASO B

As análises do processo de ajuste do modelo CFD-DEM apresentadas aqui são baseadas na teoria da fluidização e na curva de fluidização experimental do leito de alumina obtida por Lourenço (2012) e mostrada na figura 4.6:

Figura 4.6 - Curva de fluidização do leito de alumina com razão de aspecto  $H/D = 0,71$



Fonte: Lourenço, 2012.

Na figura 4.6  $U_{fi}$ ,  $U_{mf}$  e  $U_{fp}$  são, respectivamente, as velocidades de fluidização incipiente, de mínima fluidização e de fluidização plena, enquanto  $\Delta P$  é a queda de pressão do ar através do leito.

### 4.2.1 Caso com o modelo A1

Com o uso do modelo computacional A1 para o caso em que a velocidade do gás é de 0,075 m/s, a estimativa do valor correspondente para a queda de pressão obtida com a simulação no FLUENT foi de cerca de 0,98 kPa. Esse valor de 0,98 kPa representa a média temporal do sinal de queda de pressão obtido para 6 (seis) segundos de escoamento do gás no leito. Nas figuras 4.7 e 4.8 pode-se observar, respectivamente, o sinal de pressão obtido nesta simulação e algumas imagens instantâneas do leito virtual ao longo desses 6 segundos de escoamento.



Figura 4.7 - Evolução da queda de pressão obtida por simulação CFD-DEM com o modelo A1.

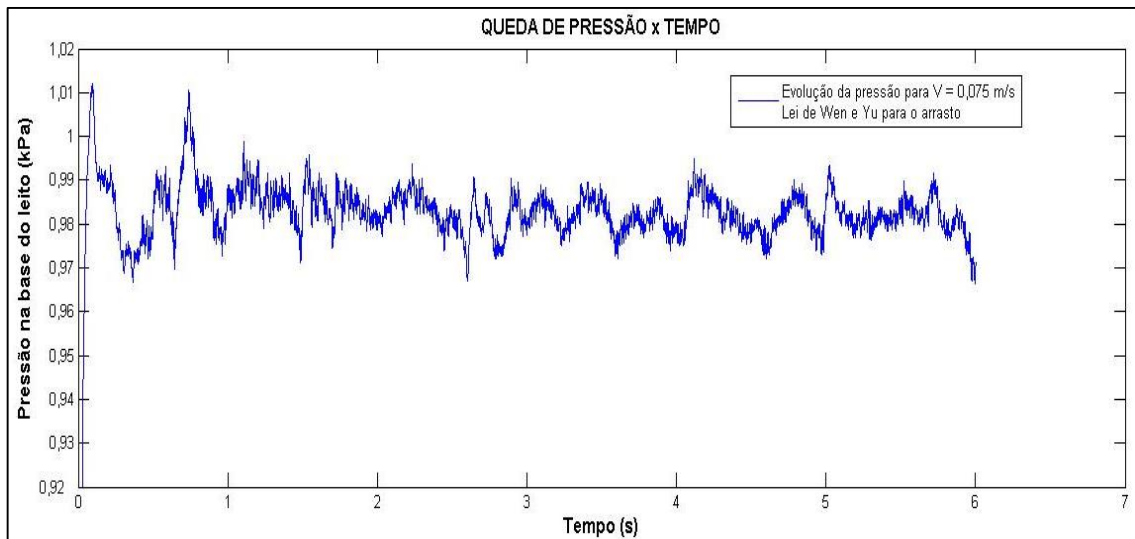
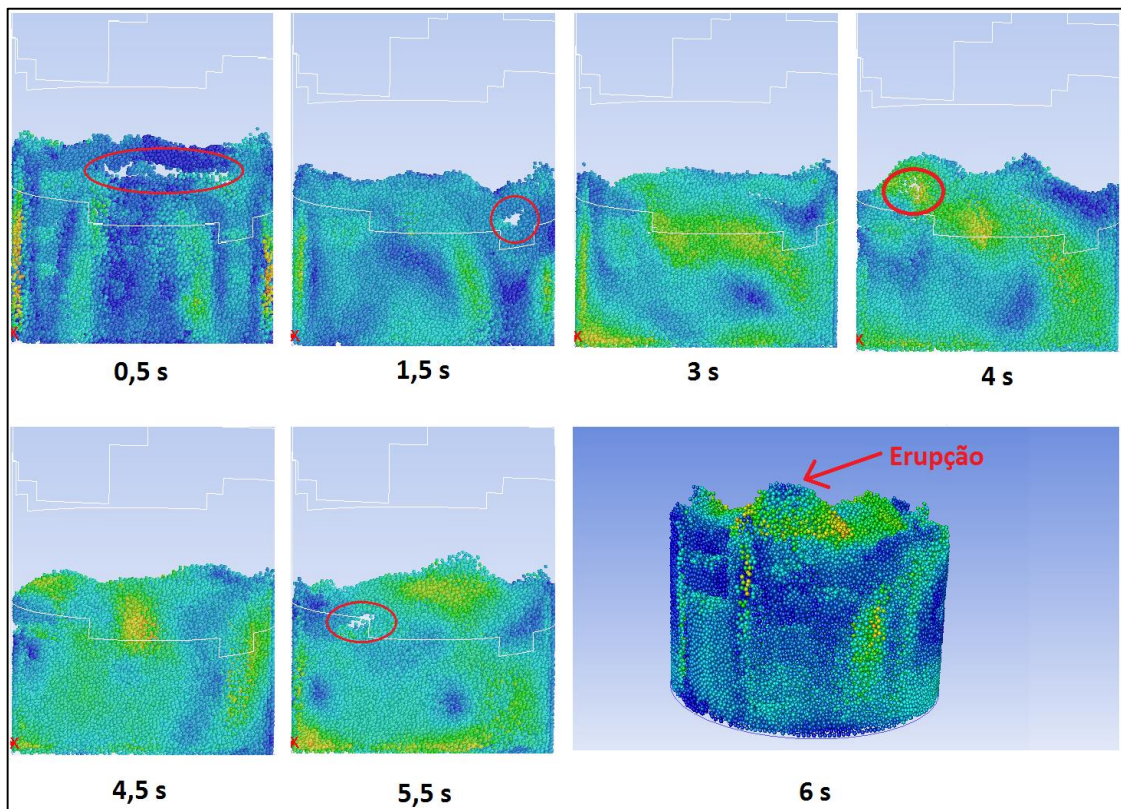


Figura 4.8 - Imagens instantâneas do leito simulado com o modelo A1



Nota: A velocidade do fluido é de 0,075 m/s e as partículas estão coloridas pela magnitude de suas velocidades, onde a cor azul indica as menores e as cores verde e vermelho as maiores velocidades.

Na figura 4.8 foram destacadas algumas bolhas e o fenômeno de erupção (ruptura) de bolhas na superfície do leito. Conforme pode ser inferido da figura 4.6, o valor estimado experimentalmente por Lourenço (2012) para a queda de pressão correspondente a essa velocidade de 0,075 m/s foi de cerca de 0,93 kPa. Segundo a

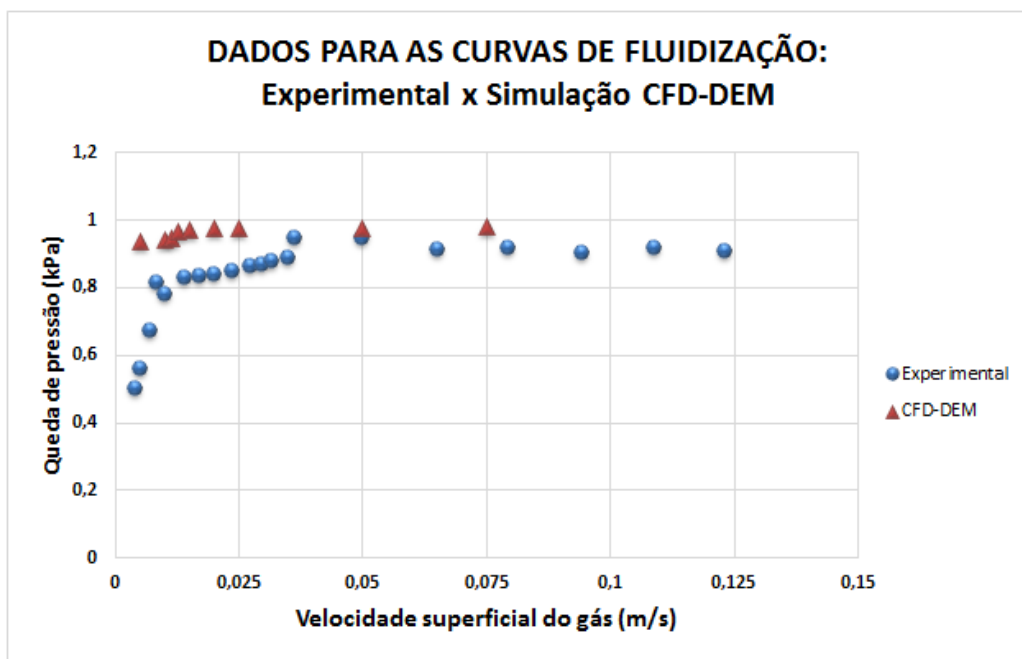
teoria da fluidização, um balanço de forças no leito fluidizado indica que a queda de pressão do fluido é igual ao peso aparente do leito dividido pela sua área da seção transversal, que para o leito em questão é de 0,97 kPa. Assim, observa-se que o valor da queda de pressão obtido com a simulação CFD-DEM (modelo A1) está bem próximo do valor teórico e do valor experimental obtido por Lourenço (2012).

Devido à boa concordância indicada acima para o caso em que  $V_{\text{gás}} = 0,075$  m/s, utilizou-se o modelo A1 para simulações com mais oito velocidades do gás. Os valores de queda de pressão obtidos com essas simulações são comparados com os dados experimentais de Lourenço (2012) na tabela 4.1 e na figura 4.9:

Tabela 4.1 - Queda de pressão obtida experimentalmente e por simulação com o modelo A1.

Velocity (m/s)	$\Delta P_{\text{exp}}$ (kPa)	$\Delta P_{\text{sim}}$ (kPa)	Desvio (%)
0,0050	0,5600	0,9354	40,13
0,0100	0,7800	0,9412	17,12
0,0115	0,8000	0,9481	15,62
0,0129	0,8220	0,9680	15,08
0,0150	0,8259	0,9720	15,03
0,0200	0,8384	0,9742	13,93
0,0250	0,8571	0,9763	12,21
0,0500	0,9440	0,9765	3,32
0,0750	0,9301	0,9805	5,14

Figura 4.9 - Dados obtidos experimentalmente e por simulação CFD-DEM com o modelo A1.

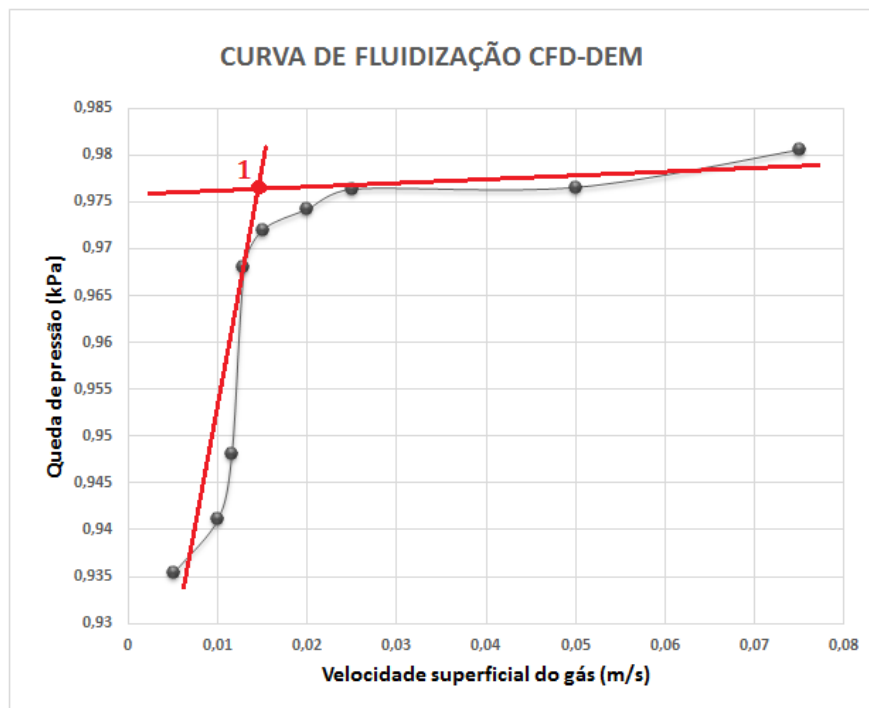




Nos dados expostos na tabela 4.1 e na figura 4.9 é possível observar que apesar dos resultados simulados para as regiões de leito semi-fluidizado e completamente fluidizado terem se ajustado satisfatoriamente aos resultados experimentais obtidos por Lourenço (2012), os valores experimentais de queda de pressão para a região de leito fixo são bem menores do que os previstos com a simulação CFD-DEM (modelo A1). A busca pelo entendimento deste fenômeno e do correspondente ajuste do modelo computacional refletiu grande parte do trabalho desenvolvido, o que é demonstrado ao longo do restante deste capítulo.

Apesar do problema exposto acima, pode-se obter uma estimativa para a velocidade de mínima fluidização do leito a partir dos dados simulados. Desse modo, diminuindo-se de forma apropriada as gamas de valores dos eixos do gráfico da figura 4.9 e plotando-se os dados obtidos com a simulação CFD-DEM (tabela 4.1) de forma isolada contra os valores da velocidade do gás, obtêm-se uma curva com formato típico de curvas de fluidização, conforme mostrado na figura 4.10:

Figura 4.10 - Curva de fluidização construída a partir dos dados expostos na tabela 4.1



Fica claro na figura 4.10 que os valores da queda de pressão no regime de leito fixo estão muito próximos uns dos outros e dos valores da queda de pressão para o leito semi-fluidizado e completamente fluidizado. Entretanto, traçando-se duas retas

(destacadas em vermelho) ao longo dos dados correspondentes aos regimes de leito fixo e de leito fluidizado na figura 4.10 pode-se obter uma estimativa para a condição de mínima fluidização por meio da análise do ponto de interseção entre essas retas (ponto1). Assim, a tabela 4.2 mostra os valores de velocidade e queda de pressão na condição de mínima fluidização obtidos experimentalmente por Lourenço (2012) e com as simulações CFD-DEM (modelo A1):

Tabela 4.2 – Dados para a mínima fluidização: experimentais e preditos com o modelo A1

<b>CONDIÇÃO DE MÍNIMA FLUIDIZAÇÃO</b>			
<b>Parâmetro</b>	<b>Experimental</b>	<b>Simulado</b>	<b>Desvio</b>
$V_{mf}$ (m/s)	0,0129	0,015	14,0%
$\Delta P_{mf}$ (kPa)	0,9500	0,977	2,76%

Deve-se observar que o valor de 0,977 kPa da tabela 4.2 é o valor de queda de pressão correspondente ao ponto de cruzamento das duas retas destacadas em vermelho na figura 4.10 (ponto 1), e não o valor da queda de pressão para  $V_{gás} = 0,015$  m/s obtido diretamente com a simulação e mostrado na tabela 4.1. Da mesma forma o valor de 0,95 kPa da tabela 4.2 é o valor de queda de pressão correspondente ao ponto de cruzamento das duas retas mostradas na figura 4.6 e não o valor da queda de pressão para a velocidade de 0,0129 m/s obtida diretamente nos experimentos por Lourenço (2012) e mostrado na tabela 4.1. Tal abordagem de considerar os valores de velocidade mínima e queda de pressão na mínima fluidização como sendo os valores correspondentes ao ponto de interseção entre duas retas traçadas ao longo dos dados para o leito fixo e para o leito fluidizado está de acordo com a prática de análise de dados de fluidização (ver capítulo 2).

Apesar de considerar-se que as previsões obtidas pelo modelo A1 (Tabela 4.1) mostraram uma boa concordância com os resultados experimentais para os regimes de leito semi-fluidizado e completamente fluidizado, mesmo com o grande número de simplificações matemáticas e numéricas envolvidas, considerou-se também que os resultados não foram satisfatórios para a previsão do regime de leito fixo. Assim, a abordagem utilizada acima para se determinar a condição de mínima fluidização poderia ser de certa forma ilusória, já que se as previsões do modelo para o regime de leito fixo estavam prejudicadas as previsões do modelo para a transição entre leito fixo e leito fluidizado poderiam não ser tão confiáveis. Desse modo, deu-se

início à busca pela calibração do modelo para que ele seja capaz de prever o comportamento do leito de partículas com confiabilidade em todos os regimes de escoamento do leito, conforme descrito nas próximas seções.

#### 4.2.2 Caso com o modelo A2

Uma vez diagnosticada a discordância entre os resultados experimentais e simulados para o regime de leito fixo, resolveu-se realizar uma nova simulação com a velocidade do gás de 0,005 m/s (regime de leito fixo), mas modificando alguns parâmetros que pudessem estar influenciando nos resultados preditos. Essa velocidade do gás foi escolhida por ser a velocidade para a qual obteve-se o maior desvio entre os resultados experimentais de Lourenço (2012) e os resultados das simulações com o modelo A1, conforme mostrado na tabela 4.1.

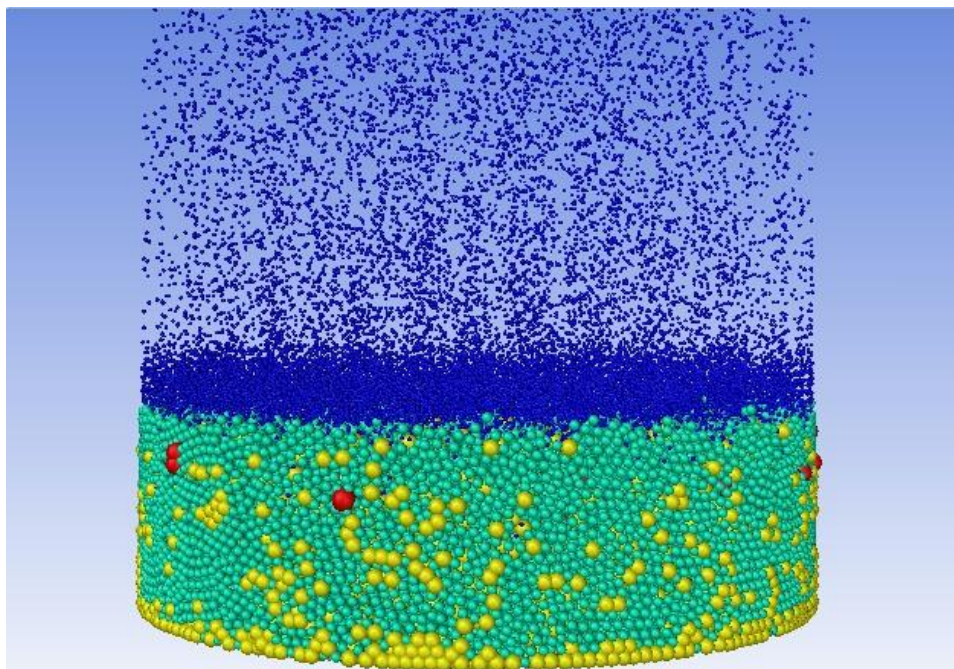
Uma das suspeitas para o problema dos resultados insatisfatórios para o regime de leito fixo era a de que no modelo A1 utilizou-se o sub-modelo de Wen e Yu (1966) para o arrasto, que não seria a melhor escolha para a modelagem do leito com alto grau de empacotamento (baixa porosidade) como no caso de leitos fixos, já que o mesmo é mais apropriado para escoamentos dilutos (baixa concentração de partículas). Assim, resolveu-se incluir na modelagem das forças de arrasto o modelo de Gidaspow *et al.* (1992).

Além disso, passou-se a representar o sistema de partículas com a distribuição de dimensões real obtida experimentalmente por Lourenço (2012) e mostrada no capítulo 3. O uso da distribuição granulométrica real das partículas não poderia deixar de ser testado, já que uma das grandes vantagens da metodologia de acoplamento CFD-DEM sobre o modelo de dois fluidos é a possibilidade de consideração da distribuição granulométrica das partículas de maneira fácil e direta.

Esse novo modelo CFD-DEM no qual passou-se a utilizar o modelo de arrasto de Gidaspow *et al.* (1992) e a considerar distribuição granulométrica real das partículas de alumina passou a ser chamado de modelo A2.

Na figura 4.11 pode-se observar a representação do sistema particulado por meio da distribuição granulométrica:

Figura 4.11 - Representação em escala aumentada das partículas com distribuição granulométrica.



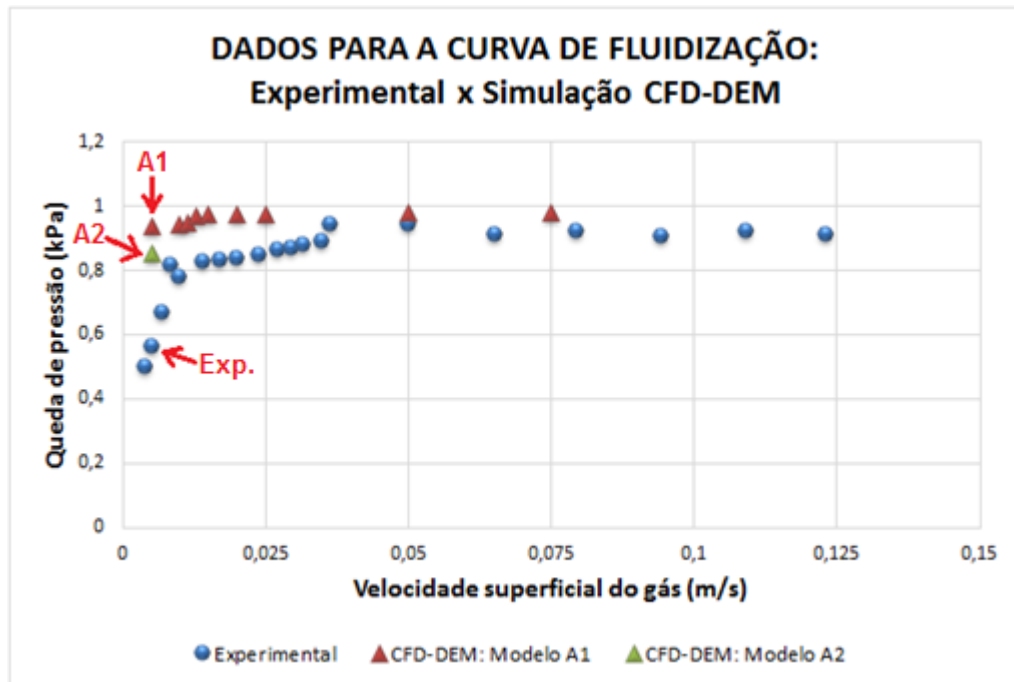
A figura 4.11 ilustra as partículas de alumina em escala aumentada e coloridas em função dos seus tamanhos relativos. As partículas são mostradas em um instante em que, após serem soltas a partir de um ponto elevado, as partículas maiores já haviam se depositado no fundo do recipiente, enquanto algumas partículas bem menores ainda estavam caindo. Tal efeito seria praticamente impossível de ser visualizado com o modelo Euleriano-Euleriano ou com a representação do sistema por partículas de dimensão uniforme, conforme foi considerado no modelo A1.

Para essa nova simulação, o valor previsto para a queda de pressão do leito fixo com o modelo A2 foi de 0,855 kPa, contra 0,9354 kPa do modelo A1 (tabela 4.1) e cerca de 0,56 kPa (tabela 4.1) dos experimentos de Lourenço (2012).

Assim, apesar de ainda haver uma diferença considerável entre o resultado obtido com o modelo A2 e o resultado experimental, a inclusão da distribuição granulométrica juntamente com o uso do modelo de arrasto de Gidaspow *et al.* (1992) fez com que o resultado ficasse mais próximo do valor experimental do que o resultado obtido com o modelo A1.

A figura 4.12 exibe uma forma modificada da figura 4.9 em que, agora, o resultado obtido com o modelo A2 é exibido para comparação (na cor verde):

Figura 4.12 - Inclusão do resultado obtido com o modelo A2 no conjunto de dados para as curvas de fluidização.



Na figura 4.12, as setas vermelhas são usadas para destacar os valores da queda de pressão predita quando a velocidade do gás é de 0,005 m/s por meio de experimentos (esfera azul), por meio de simulação com o modelo A1 (triângulo vermelho) e por meio de simulação com o modelo A2 (triângulo verde). Como pode-se observar, o valor representado pelo triângulo verde ajusta-se melhor ao valor experimental nesta região do regime de leito fixo e, por isso, a distribuição granulométrica de partículas e o modelo de arrasto de Gidaspow *et al.* (1992) serão partes integrantes dos próximos testes a serem realizados para o ajuste do modelo computacional final.

Apesar da melhoria no ajuste dos resultados com a simulação descrita acima, considera-se que a diferença entre o valor simulado e o valor experimental ainda é significativa para o leito fixo, o que indica que mais fatores podem ainda estar influenciando os resultados simulados.

#### 4.2.3 Caso com o modelo A3

Com o modelo A3 continuou-se a utilizar  $V_{gás} = 0,005$  m/s, para que se pudesse comparar os novos resultados com os resultados dos modelos A1 e A2. Também continuou-se a utilizar a distribuição granulométrica real das partículas e o modelo de arrasto de Gidaspow *et al.* (1992).

Para continuar tentando reduzir os desvios das previsões do leito fixo optou-se então por melhorar a resolução da malha CFD e das partículas do leito virtual, ou seja, diminuir o tamanho (e aumentar o número) dos volumes finitos da malha CFD e dos pacotes de partículas de alumina. Assim, esperava-se diminuir os erros de discretização das fases fluida e sólida e melhorar os resultados obtidos com a simulação CFD-DEM. Desse modo, o número de pacotes de partículas consideradas na simulação foi aumentado de 100000 para 300000 e a malha CFD passou de 16640 para 50600 volumes finitos (malha 1 para malha 2).

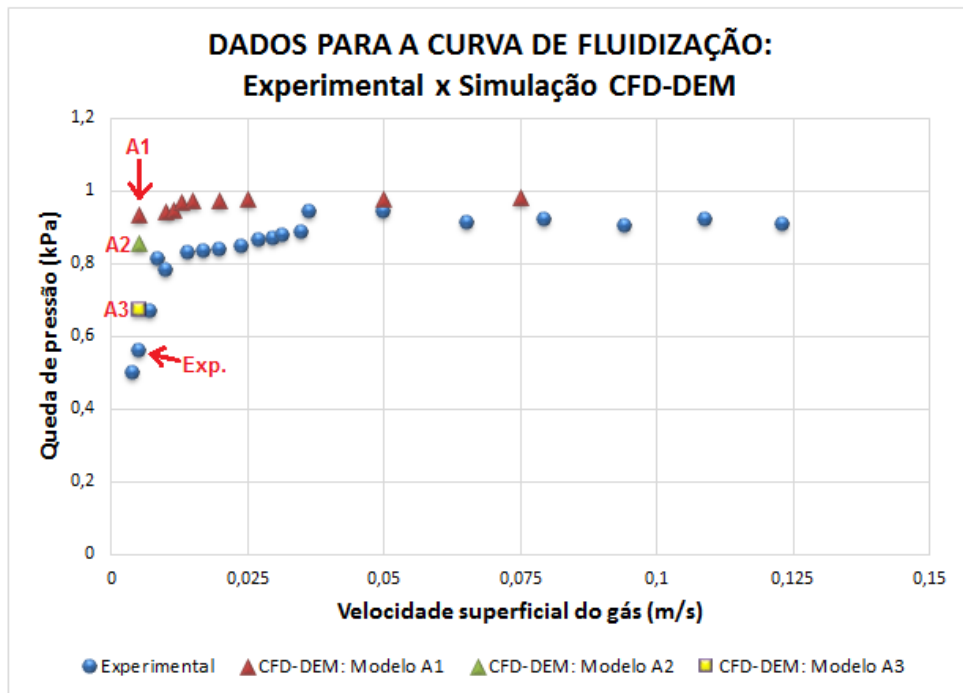
Além disso, julgou-se que os valores do passo de tempo DEM e do passo de tempo CFD poderiam ser alguns dos fatores primordiais para a melhoria das previsões. O valor do passo de tempo CFD foi diminuído de  $1 \times 10^{-3}$ s para  $5 \times 10^{-4}$ s, enquanto o valor do passo de tempo DEM foi diminuído de  $2 \times 10^{-4}$ s para  $1,45 \times 10^{-5}$ s. Conforme discussão apresentada no capítulo 2 sobre o relacionamento entre os valores da constante de rigidez e do passo de tempo DEM para o modelo de colisão LSD, a diminuição do valor do passo de tempo DEM descrita acima foi acompanhada de um aumento no valor da constante de rigidez de 100N/m para 300N/m.

A comparação entre os resultados obtidos com o modelo A3 e os resultados obtidos com os modelos A1 e A2 é mostrada na tabela 4.3 e na figura 4.13, onde também são mostrados o valor do resultado obtido experimentalmente por Lourenço (2012) e os desvios entre os resultados simulados e o experimental:

Tabela 4.3 – Comparação dos resultados dos modelos A1, A2 e A3

<b>Modelo</b>	<b>Velocidade (m/s)</b>	<b><math>\Delta P_{exp}</math> (kPa)</b>	<b><math>\Delta P_{sim}</math> (kPa)</b>	<b>Desvio (%)</b>
Modelo A1	0,005	0,56	0,9354	40,13
Modelo A2	0,005	0,56	0,8550	34,50
Modelo A3	0,005	0,56	0,6731	16,80

Figura 4.13 – Comparação dos resultados obtidos com os modelos A1, A2 e A3 para  $V_{gás} = 0,005$  m/s



Conforme pode ser observado na tabela 4.3 e na figura 4.13 as modificações realizadas no modelo CFD-DEM e que caracterizam a configuração do modelo A3 foram as que resultaram na maior diminuição no desvio entre o resultado experimental e o resultado simulado até o presente momento. Assim, fica claro que o valor da constante de rigidez, os valores do passo de tempo DEM e do passo de tempo CFD, juntamente com o número de volumes finitos da malha CFD e o número de pacotes de partículas exercem papel fundamental na capacidade de previsão do modelo CFD-DEM.

Inicialmente, os valores dos parâmetros citados acima foram configurados nos modelos A1 e A2 com base na preocupação principal de redução do tempo total de simulação, o que não foi obtido sem o prejuízo da capacidade de previsão do modelo CFD-DEM. Por exemplo, o valor de  $2e-04$ s para o passo de tempo DEM utilizado nos modelos A1 e A2 ficou mais próximo do limite inferior de garantia de estabilidade numérica que é de  $1/3$  do tempo de contato entre as partículas correspondente a um determinado valor de constante de rigidez, enquanto nesse caso o ideal seria que o valor do passo de tempo DEM fosse de pelo menos  $1/20$  do valor do tempo de contato entre as partículas correspondente à constante de rigidez com valor de  $100$  N/m (ver cap. 2).

Para estender a sua verificação de capacidade, o modelo A3 foi utilizado para a simulação do leito de alumina com mais duas velocidades do fluido, conforme mostrado a seguir:

Tabela 4.4 – Resultado do modelo A3 para  $V_{gás} = 0,015$  m/s

<b>Modelo</b>	<b>Velocidade (m/s)</b>	<b><math>\Delta P_{exp}</math> (kPa)</b>	<b><math>\Delta P_{sim}</math> (kPa)</b>	<b>Desvio (%)</b>
Modelo A1	0,015	0,8259	0,9720	15,03
Modelo A3	0,015	0,8259	0,9130	9,53

Tabela 4.5 – Resultado do modelos A3 para  $V_{gás} = 0,03$  m/s

<b>Modelo</b>	<b>Velocidade (m/s)</b>	<b><math>\Delta P_{exp}</math> (kPa)</b>	<b><math>\Delta P_{sim}</math> (kPa)</b>	<b>Desvio (%)</b>
Modelo A3	0,03	0,8762	0,937	6,48

Na tabela 4.4 pode-se observar que a utilização do modelo A3 para a simulação do leito com  $V_{gás} = 0,015$  m/s reduziu o desvio de 15,03% para 9,53% em relação ao resultado obtido com o modelo A1. Na tabela 4.5, comparando-se o resultado obtido com o modelo A3 para  $V_{gás} = 0,03$  m/s com o resultado experimental, observa-se que o valor do desvio de 6,48% também é adequadamente aceitável do ponto de vista da prática de engenharia para escoamento bifásicos.

Apesar das modificações realizadas no modelo A3 terem resultado na melhoria da previsão do comportamento do leito, elas também resultaram em um aumento substancial do tempo de simulação. Entretanto, acredita-se que os resultados discutidos nesse capítulo permitiram comprovar a possibilidade de uso de um modelo linear de colisão DEM (LSD) para a previsão do comportamento de leitos de alumina, mesmo utilizando-se valores baixos e não realísticos para a constante de rigidez, conforme estratégia descrita no capítulo 2. Para que isso seja verdade basta que a configuração correta dos valores dos parâmetros de modelagem seja assegurada. Cabe então ao usuário do *software* de simulação considerar o custo benefício das diversas estratégias de modelagem disponíveis, o que pode depender do seu nível de conhecimento e experiência em simulações computacionais de escoamentos bifásicos.



## 5 CONCLUSÕES

Os resultados apresentados no capítulo 4 permitiram verificar a possibilidade de utilização do acoplamento CFD-DEM para a simulação de leitos fluidizados de alumina, incluindo a execução de tarefas importantes como a construção da curva de fluidização e a determinação da velocidade de mínima fluidização.

Atenção especial deve ser dada ao processo de calibração do modelo CFD-DEM para que ele possa representar de forma adequada o comportamento do leito para diversas condições operacionais. Assim, deve-se evitar que o uso incorreto das técnicas disponíveis para a redução do tempo total de simulação prejudique os resultados obtidos.

Dentre as técnicas para redução do tempo de simulação, o uso da abordagem de pacotes de partículas disponível no software ANSYS FLUENT se mostrou bastante eficiente, tendo sido possível comprovar sua utilidade prática.

Outro fator importante é a relação discutida no capítulo 2 entre os tamanhos dos volumes finitos da malha CFD e dos pacotes de partículas, tendo sido esse o motivo para que apenas duas configurações de malhas tenham sido utilizadas. Tal relação limitou a redução do tamanho dos volumes finitos, já que para o problema em questão, essa redução precisava ser acompanhada da diminuição do tamanho dos pacotes de partículas e, conseqüentemente, do aumento do número de pacotes no sistema e do tempo total de simulação.

Ficou evidente que a utilização de valores exageradamente baixos para a constante de rigidez e valores exageradamente altos para os passos de tempo DEM e do fluido pode prejudicar os resultados obtidos. Esse tipo de abordagem foi utilizada com o modelo A1, no qual os valores desses parâmetros foram definidos de forma aleatória com o único propósito de redução do tempo de simulação. Assim, ao utilizar-se esse tipo de estratégia deve-se sempre buscar um compromisso entre redução do tempo de simulação e manutenção da capacidade de previsão do modelo computacional.

Por fim, observando-se a complexidade do escoamento bifásico analisado aqui e todas as simplificações envolvidas, acredita-se que os resultados também permitiram confirmar ser possível utilizar um modelo linear de força de interação do DEM, como o LSD, para prever de forma satisfatória o comportamento global de leitos de alumina, desde que os parâmetros do modelo sejam configurados corretamente.

Para complementar e estender as análises realizadas no presente trabalho, aponta-se como sugestões para trabalhos futuros:

- 1) Realizar a análise da variação de parâmetros de modelagem de forma isolada, mantendo-se os demais parâmetros constantes. Inclui-se nessa análise os efeitos da variação dos coeficientes de atrito e de restituição, que foram mantidos constantes no presente trabalho para diminuir-se o número de parâmetros que precisavam ser controlados.
- 2) Analisar a possibilidade de extensão do modelo CFD-DEM para a análise de problemas regionais de interesse prático que envolvam transferência de calor e massa e/ou reações químicas entre as partículas e o fluido. Verificar a possibilidade de essa extensão ser realizada por meio do acoplamento de módulos adicionais programados pelo usuário a um *software* comercial, livre ou próprio.
- 3) Realizar uma análise comparativa entre tempo de simulação e precisão dos resultados obtidos com diferentes modelos de força de interação DEM, lineares e não lineares.
- 4) Realização de estudos sobre a aplicabilidade do acoplamento CFD-DEM no escalonamento de leitos fluidizados de materiais de interesse para o desenvolvimento regional.
- 5) Realização de experimentos em leitos com diferentes configurações que permitam a disponibilização de dados suficientes para o desenvolvimento de processos de calibração para os modelos CFD-DEM. Inclui-se nesse caso experimentos e respectivas simulações em leitos quase 2D que permitam a visualização e monitoramento da formação e das características de bolhas no leito fluidizado.

## 6 REFERÊNCIAS

ABAL – Associação Brasileira do Alumínio. **Proposta de limites de emissões atmosféricas de fontes fixas, para fábricas existentes, da indústria brasileira de alumínio primário.** Documento de referência, 2010.

ABRAHAMSEN, A. R; GELDART, D. **Behavior of gas fluidized beds of fine powders.** Powder technology, Vol. 26, p. 35, 1980.

ALBAIDE, F; STRÖHLE, J; EPPLE, B. **Extended CFD/DEM model for the simulation of circulating fluidized bed.** Advanced Powder Technology, Vol. 24, p. 403-415, 2013.

AMARANTE MESQUITA, A. L. *et al.* **Uso do Método dos Elementos Discretos em manuseio de minérios e sua contribuição para a Pós-Graduação e Graduação no curso de Engenharia Mecânica da UFPA.** In: XL Congresso Brasileiro de Educação em Engenharia – COBENGE. Belém-Pa, 2012.

ANDERSON, T. B; JACKSON, R. **A Fluid Mechanical Description of Fluidized Beds Equations of Motion.** Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals, Vol. 6, No.4, p. 527-539, 1967.

ANSYS inc. **ANSYS FLUENT 14.0 Theory and User's Guide.** USA, 2011.

\_\_\_\_\_. **ANSYS FLUENT 14.5 Training materials.** USA, 2013.

\_\_\_\_\_. **ANSYS FLUENT 14.5 Reference paper for the particle parcel concept theory.** Suporte técnico, 2013b.

ASEGEHEGN, T. W; SCHREIBER, M; KRAUTZ, H. J. (2011). **Numerical Simulation of Dense Gas-Solid Multiphase Flows Using Eulerian-Eulerian Two-Fluid Model, Computational Simulations and Applications,** Dr. Jianping Zhu (Ed.), ISBN: 978-953-307-430-6, InTech, DOI: 10.5772/24244.l

BEETSTRA, R; VAN DER HOEF, M.A; KUIPERS, J.A.M. **Numerical study of segregation using a new drag force correlation for polydisperse systems derived from lattice-Boltzmann simulations.** Chemical Engineering Science, Vol. 62, p. 246–255, 2007.

BOKKERS, G.A; ANNALAND, M.V.S; KUIPERS, J.A.M. **Mixing and segregation in a bidisperse gas–solid fluidised bed, a numerical and experimental study.** Powder Technology, Vol. 140, p.176–186, 2004.

CARMAN, P. C. **Fluid flow through granular beds,** Trans. Inst. Chem. Eng., Vol.15, p.150–166, 1937.

ÇENGEL, Y. A; CIMBALA, J. M. **Mecânica dos fluidos: Fundamentos e Aplicações**. São Paulo: McGraw-Hill, 2007.

CLEARY, P; METCALFE, G; LIFFMAN, K. **How well do discrete element granular flow models capture the essentials of mixing processes?** Applied Mathematical Modelling, Vol. 22, p. 995-1008, 1998.

CLEARY, P. **DEM prediction of industrial and geophysical particle flows**. Particuology, Vol. 8, p 106–118, 2010.

COLTTERS, R; RIVAS, A. L. **Minimum fluidization velocity correlations in particulate systems**. Powder Technology, Vol. 147, p. 34 – 48, 2004.

CROWE, C.T. **Multiphase Flow Handbook**. Boca Raton: CRC press, 2006.

CUNDALL, P.A; STRACK, O.D.L. **A discrete numerical model for granular assemblies**. Geotechnique, Vol. 29, p. 47–65, 1979.

DALLA VALLE, J. M. **Micromeritics**. London: Pitman, 1948.

DEMSolutions Ltd. Disponível em:< <http://www.dem-solutions.com/>> Acesso em: Maio de 2013.

DI RENZO, A; DI MAIO, F. P. **Comparison of contact-force models for the simulation of collisions in DEM-based granular flow codes**. Chemical Engineering Science, Vol. 59, p. 525-541, 2004.

ENWALD, H; PEIRANO, E; ALMSTEDT, A.E. **Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization**. International Journal of Multiphase Flow, Vol.22, p. 21-66, 1996.

ERGUN, S. **Fluid flow through packed columns**, Chem. Eng. Prog., Vol. 48, p. 89–94, 1952.

FLEISSNER, F; EBERHARD, P. **Parallel load-balanced simulation for short-range interaction particle methods with hierarchical particle grouping based on orthogonal recursive bisection**. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 74, p. 531–553, 2008.

FRAIGE, F. Y; LANGSTON, P. A. **Integration schemes and damping algorithms in distinct element models**. Advanced Powder Technology, Vol. 15, p. 227 – 245, 2004.

GARSDALE, J; AL-DIBOUNI, M. R. **Velocity-Voidage Relationships for Fluidization and Sedimentation**. I & EC Process Des. Dev. Vol. 16, p. 206–214, 1977.

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

GERA, D. *et al.* **Computer simulation of bubbles in large-particle fluidized beds**. Powder Technology, Vol. 98, p. 38–47, 1998.

GIDASPOW, D; ETTEHADIEH, B. **Fluidization in two-dimensional beds with a jet hydrodynamic modeling**. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, Vol.22, No.2, p. 193-201, 1983.

GIDASPOW, D; BEZBURUAH, R; DING, J. **Hydrodynamics of Circulating Fluidized Beds: Kinetic Theory Approach**. In: *Proceedings of the 7th Engineering Foundation Conference on Fluidization*. p. 75–82, 1992.

GIDASPOW, D. **Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions**. Califórnia (USA): Academic Press, 1994.

GOMES, L. M. **Contribuição à análise do transporte pneumático em fase diluída**. 2011. 205 f. Tese (Doutorado em Engenharia de Recursos Naturais da Amazônia) – Programa: PRODERNA, Universidade Federal do Pará, Belém, 2011. Orientação de Prof. Dr. André Luiz Amarante Mesquita.

HERTZ, H. **UY ber die BeruYhrung fester elastischer KoYrper (On the contact of elastic solids)**. *Journal fur die Reine und Angewandte Mathematik* 92, p.156–171, 1882.

HILTON, J. E; CLEARY, P. W. **Comparison of resolved and coarse grain DEM models for gas flow through particle beds**. In: *Ninth International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries*. Australia: 2012.

HYDRO. **Bauxita e Alumina – Ponto de partida para a produção de alumínio**. Disponível em: <<http://www.hydro.com/pt/Aluminio/A-Hydro-no-Brasil/Produtos/Bauxita-e-alumina/>> Acesso em: Maio de 2013.

IWAI, T; HONG, C.W; GREIL, P. **Fast particle pair detection algorithms for particle simulations**. *International Journal of Modern Physics C*, 10(5), p. 823–838, 1999.

KAWAGUCHI, T; TANAKA, T; TSUJI, Y. **Numerical simulation of two-dimensional fluidized beds using the discrete element method (comparison between the two- and three-dimensional models)**. *Powder Technology*, Vol. 96, p. 129-138, 1998.

KUWAGI, K; HORIO, M. **A numerical study on agglomerate formation in a fluidized bed of fine cohesive particles**. *Chemical Engineering Science*, Vol. 57, p. 4737–4744, 2002.

KAZARI, M. *et al.* *Proc. Multiphase Flow*, Kyoto, Japan, FB2.9 – FB2.15, 1995.

KOZENY, J. **Capillary Motion of Water in Soils**. *Sitzungsberichte der Akactemie der Wissenschaften in Wien, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Klasse*, V136, N 5-6, p. 271–306. *Sitzb. Akad. Wiss*, 136, 271–306, 1927.

KOZENY, J. Z. *Pfl.-Ernahr. Dung. Boden*, 28A, p. 54–56, 1933.

KRIEBITZSCH, S. H. L; VAN DER HOEF, M. A; KUIPERS, J. A. M. **Fully resolved simulation of a gas-fluidized bed: A critical test of DEM models**. *Chemical Engineering Science*, Vol. 91, p. 1-4, 2013.

KUIPERS, J. A. M. *et al.* **A numerical model of gas-fluidized beds.** Chemical Engineering Science, Vol.47, No.8, p. 1913-1924, 1992.

KUWAGI, K; MIKAMI, T; HORIO, M. **Numerical simulation of metallic solid bridging particles in a fluidized bed at high temperature.** Powder Technology, Vol. 109, p. 27-40, 2000.

KUWAGI K; TAKEDA, H; HORIO M. Conf. on Fluidization Eng. XI, Naples, p. 243-250, 2004.

LEVA, M., **Fluidization**, New York: McGraw-Hill, 1959.

LI, J.T; MASON, D.J. **A computational investigation of transient heat transfer in pneumatic transport of granular particles.** Powder Technology, Vol. 112, p. 273–282, 2000.

LI, J; KUIPERS, J.A.M. **Effect of competition between particle–particle and gas-particle interactions on flow patterns in dense gas-fluidized beds.** Chemical Engineering Science Vol. 62, p. 3429–3442, 2007.

LIMTRAKUL, S. *et al.* **Discrete particle simulation of solids motion in a gas-solid fluidized bed.** *Chemical Engineering Science*, Vol. 58, p. 915 – 921, 2003.

LOURENÇO, R. O. **Análise experimental e numérica da fluidização para aplicações industriais.** 2012. 177 f. Tese (Doutorado em Engenharia de Recursos Naturais da Amazônia) – Programa: PRODENA, Universidade Federal do Pará, Belém, 2012. Orientação de Prof. Dr. Emanuel Negrão Macedo e Prof. Dr. André Luiz Amarante Mesquita.

LU, W.M. *et al.* **Stability analysis of perforated plate type single stage suspension fluidized bed without downcomer.** Korean Journal of Chemical Engineering, Vol. 16, p. 810–817, 1999.

MACIAS, P. H. S. **Fluidização de partículas de esfera de vidro.** 33 f. Relatório de atividade de pesquisa de iniciação tecnológica e industrial. Projeto: CNPq – processo No 56082/2008-7. Coordenador: Prof. Dr. André Luiz Amarante Mesquita.

MALONE, K. F; XU, B. H. **Determination of contact parameters for discrete element method simulations of granular systems.** Particuology, Vol. 6, p. 521 – 528, 2008.

MIKAMI,T; KAMIYA, H; HORIO, M. **Numerical simulation of cohesive powder behavior in a fluidized bed.** Chemical Engineering Science, Vol. 53, p.1927–1940, 1998.

MILLER, C. O; LOGWINUK, A. K. **Fluidization Studies of solid particles.** Ind. Eng. Chem., Vol. 43, p. 1220-1226, 1951.

MME (Ministério de Minas e Energia do Brasil). **Plano Nacional de Mineração 2030 (PNM - 2030)**. Brasília, 2011.

MINDLIN, R.D; DERESIEWICZ, H. **Elastic spheres in contact under varying oblique forces**. Transactions of ASME, Series E. Journal of Applied Mechanics 20, p. 327–344, 1953.

MOKHTAR, M. A. *et al.* **Validation of the similar particle assembly (SPA) model for the fluidization of Geldart's group A and D particles**. A. I. Ch. E., Vol. 58, p. 87-98, 2012.

MORENO-ATANASIO, R; XU, B.H; GHADIRI, M. **Computer simulation of the effect of contact stiffness and adhesion on the fluidization behaviour of powders**. Chemical Engineering Science, Vol. 62, p.184–194, 2007.

MÜLLER, C.R. *et al.* **Granular temperature: comparison of magnetic resonance measurements with Discrete Element Model simulations**. Powder Technology, Vol. 184, p. 241–253, 2008.

NIEMI, T. **Particle size distribution in CFD simulation of gas-particle flows**. M.Sc. thesis, Aalto University, Finland, 2012.

PATANKAR, S. V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Washington DC: Hemisphere, 1980.

PANDIT, J.K; WANG, X.S; RHODES, M.J. **Study of Geldart's Group A behavior using the discrete element method simulation**. Powder Technology, Vol.160, p. 7–14, 2005.

OUYANG, J; LI, J.H. **Particle-motion-resolved discrete model for simulating gas–solid fluidization**. Chemical Engineering Science, Vol. 54, p. 2077–2083, 1999.

RICHARDSON, J. R; ZAKI, W.N. **Sedimentation and Fluidization: Part I**. Trans. Inst. Chem. Eng., Vol. 32, p. 35–53, 1954.

RHODES, M. J. **Introduction to particle technology**. 2. ed. England: John Wiley & Sons Ltd, 2008.

RHODES, M. J; WANG, X. S; NGUYEN, M. **Use of discrete element method simulation in studying fluidization characteristics: Influence of interparticle force**. *Chemical Engineering Science*, Vol. 56, p. 69–76, 2001.

RONG, D. G; HORIO, M. **Behavior of particles and bubbles around immersed tubes fluidized bed at high temperature and pressure, a DEM simulation**. International Journal of Multiphase Flow, Vol. 27, p. 89–105, 2001.

SAKAI M; YAMADA, Y; SHIGETO, Y. **Large-scale discrete element modeling in a fluidized bed**. International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 64, p. 1319–1335, 2010.

SAKANO M; YASO T; NAKANISHI H. *Jpn. J. Multiphase Flow*, Vol. 14, p. 66-73.

SANTOS, E. G. *et al.* **Análise da forma geométrica da partícula na aplicação do Método dos Elementos Discretos – DEM.** In: VII Congresso Nacional de Engenharia Mecânica – CONEM 2012, São Luís-MA, 2012.

SWASDISEVI, T. *et al.* **Prediction of gas-particle dynamics and heat transfer in a two-dimensional spouted bed.** *Advanced Powder Technology*, Vol. 16, p. 275–293, 2005.

SYAMLAL, M; O'BRIEN, T. J. **Computer Simulation of Bubbles in a Fluidized Bed.** *AICHE Symp. Series*. Vol. 85, p. 22–31, 1989.

TSUJI, Y; KAWAGUCHI, T; TANAKA, T. **Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed.** *Powder Technology*, Vol. 77, p. 79-87, 1993.

TSUO, Y; GIDASPOW, D. **Computation of flow patterns in circulating fluidized beds.** *AICHE Journal*, Vol.36, No.6, p. 885-896, 1990.

TU, J; YEOH, G. H; LIU, C. **Computational Fluid Dynamics: A practical approach.** USA: Elsevier, 2008.

VASCONCELOS, P. D. S. **Transporte pneumático fluidizado: Estudos de casos aplicados à indústria do alumínio primário.** 2011. 183 f. Tese (Doutorado em Engenharia de Recursos Naturais da Amazônia) – Programa: PRODERNA, Universidade Federal do Pará, Belém, 2011. Orientação de Prof. Dr. André Luiz Amarante Mesquita.

VASCONCELOS, P. D. S.; MESQUITA, A. L. A. **Minimum and Full Fluidization Velocity for Alumina used in the Aluminum Smelter.** *Intech Open Access Publisher*, Vol. 3, No. 4, p. 7-13, 2011.

WEN, C. Y; YU, Y. H. **Mechanics of Fluidization**, *Chem. Eng. Progress Symp. Series*, Vol. 62, No. 62, p. 100 – 111, 1966.

XU, B.H; YU, A.B. **A new stability criterion for bed expansion of gas fluidization.** In: 4th World Congress on Particle Technology, Sydney, Australia, 189. 2002.

ZIKANOV, O. **Essential Computational Fluid Dynamics.** USA: John Wiley & Sons Ltd, 2010.

ZHU, H. P; ZHOU, Z. Y; YANG, R. Y; YU, A. B. **Discrete particle simulation of particulate systems: Theoretical developments.** *Chemical Engineering Science*, Vol. 62, p. 3378 – 3396, 2007.

ZHU, H. P; ZHOU, Z. Y; YANG, R. Y; YU, A. B. **Discrete particle simulation of particulate systems: A review of major applications and findings.** *Chemical Engineering Science*, Vol. 63, p. 5728–5770, 2008.