

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
PAULO CESAR CORREA GALEANO

ESTUDO DA MODELAGEM MATEMÁTICA DA DINÂMICA DAS  
PARTÍCULAS DE BIOMASSA EM UM COMBUSTOR DE LEITO  
FLUIDIZADO

ARARANGUÁ  
2017

**PAULO CESAR CORREA GALEANO**

**ESTUDO DA MODELAGEM MATEMÁTICA DA DINÂMICA DAS  
PARTÍCULAS DE BIOMASSA EM UM COMBUSTOR DE LEITO  
FLUIDIZADO**

Trabalho de conclusão de curso na modalidade de artigo científico para a aprovação da disciplina de Trabalho de Conclusão de Curso do curso de Engenharia de Energia da Universidade Federal de Santa Catarina - Campus Araranguá

Orientadora: Profa. Dra. Priscila Cardoso Calegari

Coorientadora: Profa. Dra. Elaine Virmond

**ARARANGUÁ**

**2017**

PAULO CESAR CORREA GALEANO

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO DE GRADUAÇÃO EM  
ENGENHARIA DE ENERGIA

Trabalho de conclusão de curso na modalidade de artigo científico para a aprovação na disciplina de Trabalho de Conclusão de Curso do curso de Engenharia de Energia da Universidade Federal de Santa Catarina – Campus Araranguá

Aprovado em: 07/12/2017

*Priscila C. Calegari*

\_\_\_\_\_  
Profª. Dra. Priscila Cardoso Calegari (Orientadora)

*Elaine Virmond*

\_\_\_\_\_  
Profª. Dra. Elaine Virmond (Coorientadora)

*Catalina M. Rúa A.*

\_\_\_\_\_  
Profª. Dra. Catalina Maria Rúa Alvarez (Examinadora)

*Marcelo Zannin da Rosa*

\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Marcelo Zannin da Rosa (Examinador)

*Tatiana Pineda V.*

\_\_\_\_\_  
Profª. Dra. Tatiana Gisset Pineda Vásquez (Examinadora)

## AGRADECIMENTOS

A professora Priscila, quem me introduziu no mundo da pesquisa científica, pela grande paciência, apoio e predisposição para me orientar ao longo desses últimos três anos e meio. Por sempre ter acreditado no meu potencial e por ter me passado grandes aprendizados, acrescentando tanto na minha carreira acadêmica como na minha formação como pessoa. Também, por ter me apresentado à apaixonante e complexa área dos métodos numéricos, modelagem matemática e simulação numérica de escoamentos bifásicos.

A professora Elaine, pelo apoio, confiança e predisposição para me orientar. Eterna gratidão por ter me ajudado em um dos semestres mais difíceis da minha graduação. E por ter me mostrado o fantástico que é a linha de pesquisa de conversão termoquímica de biomassa.

Aos meus pais e irmãos pelo carinho, apoio e incentivo desde que tenho memória, por sempre ter mais fé em mim do que eu mesmo costumo ter e pela certeza de que sempre serão meu porto seguro.

A Janyara pela amizade e grande apoio, principalmente neste último semestre. A Adrieny pela parceria de anos e pela ajuda de sempre. A Daiane pela amizade e por ser uma referência de dedicação aos estudos para mim. A minha turma 2013.1, pelo apoio e por ter me auxiliado de várias formas. A minha amiga Jessica pela amizade ao longo desses anos e por ter me acompanhado durante essa jornada.

Ao pessoal do Laboratório de Energia e Meio Ambiente (LEMA), em especial a Rosângela, pela paciência, apoio e aprendizados ao longo desses meses de estágio. Também, por ter me incentivado à pesquisa e a pensar fora da caixa.

À Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC) pelo acesso à informação, pela formação que recebi, pelos professores que sempre zelam pela excelência no ensino e pelas pessoas que conheci ao longo dos anos da minha graduação.

Aos professores Catalina, Marcelo e Tatiana por terem aceito participar da banca examinadora.

A Deus por me ter dado a fortaleza para superar todos os obstáculos até aqui e por colocar a cada uma das pessoas acima no meu caminho.

Ao Programa de Estudantes Convênio de Graduação (PEC-G) por premiar o bom desempenho acadêmico com a concessão da Bolsa Mérito.

## RESUMO

A combustão é considerada uma das principais fontes de energia, sendo predominante a queima de combustíveis fósseis. Nesse contexto, a biomassa tem ganhado relevância como fonte alternativa de energia, em função da sua abundância, alto valor energético e versatilidade. Conseqüentemente, as tecnologias que comportam processos de conversão termoquímica tem atraído interesse, como os reatores de leito fluidizado. Esses reatores são conhecidos por atingir eficiência superior nos processos de combustão, pela sua flexibilidade para operar com diferentes tipos de combustíveis sólidos e por auxiliar no controle das emissões de poluentes. O presente trabalho tem como interesse o estudo da modelagem matemática da dinâmica das partículas de biomassa no processo de combustão em reatores de leito fluidizado. Para tal estudou-se os conceitos fundamentais relacionados à dinâmica das partículas de biomassa no processo de combustão, e as características dos combustores de leito fluidizado. Analisou-se os modelos que retratam a dinâmica das partículas de biomassa em um combustor de leito fluidizado borbulhante, e um modelo matemático bidimensional foi utilizado para a implementação de métodos numéricos para estudar a dinâmica das partículas de biomassa. O método de Runge-Kutta de segunda ordem foi utilizado para a verificação numérica e o acoplamento entre as fases (em um único sentido) foi feito por meio da interpolação usando uma aproximação do delta de Dirac. A verificação numérica da metodologia aplicada ao modelo matemático utilizado foi bem sucedida, apresentando a ordem de convergência esperada.

**Palavras-chave:** Modelagem matemática. Conversão de biomassa. Dinâmica de partículas. Combustão em leito fluidizado.

## ABSTRACT

Combustion is considered one of the main energy sources, still being a major application the burning of fossil fuels. In this context, biomass has gained relevance as an alternative energy source due to its abundance, high energy value and versatility. Consequently, thermochemical conversion technologies have attracted attention, such as fluidized bed reactors. These reactors are known for achieving higher efficiency and because of their flexibility to operate with different types of solid fuels. In this work the mathematical modeling to describe biomass particles dynamics in fluidized bed reactors during combustion process is studied. Fundamentals about particles dynamics during combustion process and fluidized bed reactors characteristics were explained. Also, models that portray biomass particles dynamics in bubbling fluidized bed combustors were investigated and presented. A two-dimensional mathematical model was used to implement numerical methods to study biomass particles dynamics using a second-order Runge-Kutta method for the numerical verification. The coupling between the phases (one-way coupling) was performed by an interpolation method that uses a Dirac delta approximation. The numerical verification of the methodology applied for the mathematical model succeeded, presenting the order of convergence expected.

**Keywords:** Mathematical modeling. Biomass conversion. Particle dynamics. Fluidized bed combustion.

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>7</b>
<b>1.1</b>	<b>Justificativa</b>	<b>8</b>
<b>1.2</b>	<b>Objetivos</b>	<b>9</b>
1.2.1	Objetivo geral	9
1.2.2	Objetivos específicos	9
<b>2</b>	<b>FORMULAÇÃO DO PROBLEMA</b>	<b>10</b>
<b>2.1</b>	<b>Características e propriedades da biomassa</b>	<b>10</b>
<b>2.2</b>	<b>Reatores de leito fluidizado</b>	<b>12</b>
<b>2.3</b>	<b>Combustão de biomassa em reatores LFB</b>	<b>17</b>
<b>2.4</b>	<b>Modelagem da combustão de biomassa em reatores LFB</b>	<b>20</b>
2.4.1	Equações governantes da fase contínua	23
2.4.2	Equações governantes da fase discreta	24
<b>3</b>	<b>METODOLOGIA</b>	<b>28</b>
<b>3.1</b>	<b>Discretização espacial da fase contínua</b>	<b>29</b>
<b>3.2</b>	<b>Discretização temporal da fase discreta</b>	<b>31</b>
<b>3.3</b>	<b>Verificação numérica dos métodos implementados</b>	<b>32</b>
<b>4</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÃO</b>	<b>34</b>
<b>5</b>	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS</b>	<b>37</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>38</b>
	<b>ANEXO A - TRABALHOS PREDECESSORES</b>	<b>41</b>

## 1 INTRODUÇÃO

Nos primórdios da humanidade, a queima de biomassa foi uma das primeiras fontes de calor empregada para enfrentar as baixas temperaturas, para cozimento de alimentos e até para espantar predadores. Com o desenvolvimento das civilizações, as necessidades do homem tornaram-se mais complexas e dispendiosas energeticamente. Nesse contexto, os combustíveis fósseis assumiram, no último século, o papel de principal energético mundial (ROSAL, 2008).

Um estudo publicado pela International Energy Agency (2017), mostra que ainda no cenário atual as fontes de energia não renováveis continuam participando de forma majoritária na matriz energética mundial (de 87% aproximadamente), possuindo uma configuração similar à da matriz energética de 1971, como pode ser observado em detalhe na Figura 1.

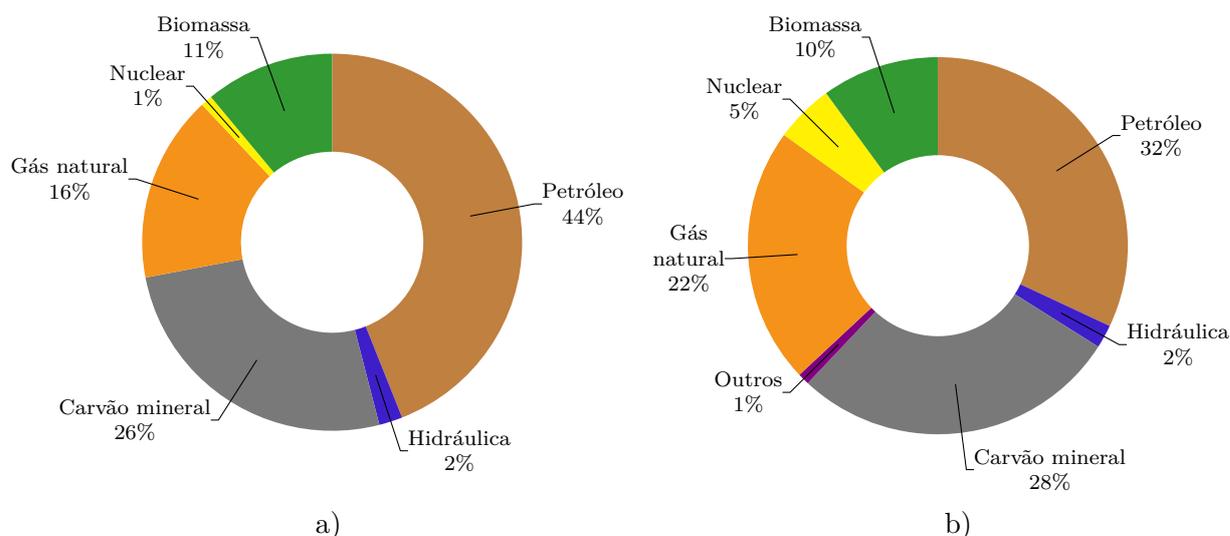


Figura 1 – Oferta de energia total por fonte no mundo para o ano de a) 1971 b) 2015. Fonte: adaptado de International Energy Agency (2017).

Comparativamente à composição da matriz energética mundial, mostrada na Figura 1, as fontes renováveis possuem uma participação de aproximadamente 43,5% na matriz energética nacional, sendo quase quatro vezes maior que sua participação em 1970, conforme mostrado na Figura 2, na qual apresenta-se a composição da matriz energética nacional

de 1970 e de 2016.

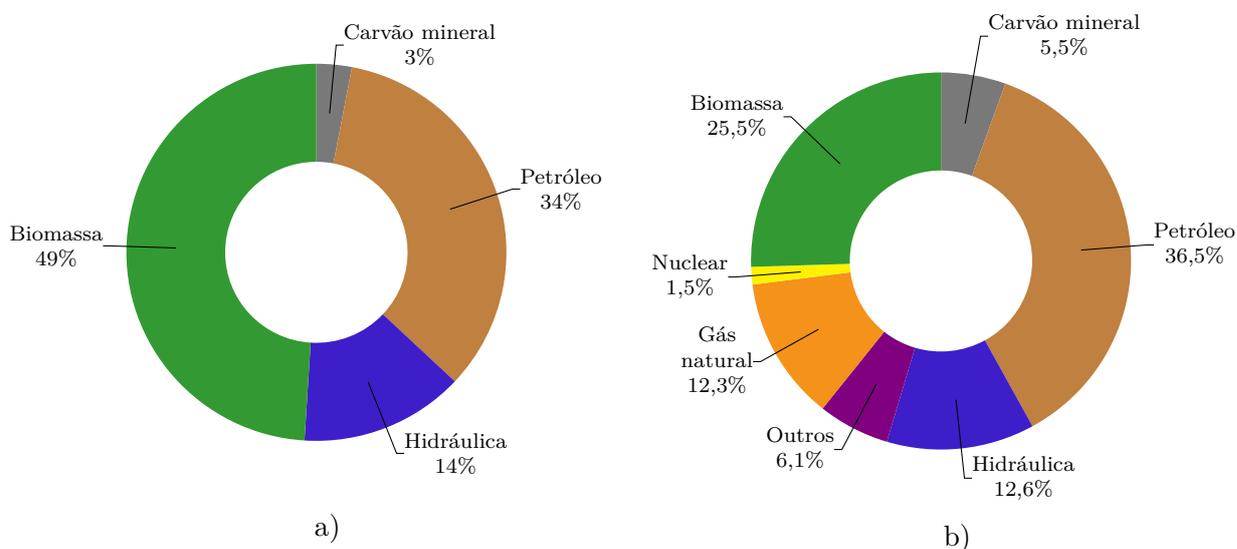


Figura 2 – Oferta de energia total por fonte no Brasil para o ano de a) 1970 b) 2016. Fonte: adaptado de Empresa de Pesquisa Energética (2017).

Estima-se que o consumo total mundial de energia aumentará em aproximadamente 28%, em uma projeção para o período de 2015 até 2040, realizada pela U.S Energy Information Administration (2017). Nessa projeção ressalta-se que a participação das fontes renováveis terá caráter crescente de 2,3%, ao ano, na matriz energética mundial.

### 1.1 Justificativa

A combustão é considerada uma das principais fontes de energia, sendo predominante a queima de combustíveis fósseis. Nas últimas décadas têm sido feitos consideráveis esforços para diminuir a dependência desses combustíveis, pelo fato de serem recursos limitados, como também pela carga ambiental que supõe o seu aproveitamento em geral. Em função disso, a biomassa tem recebido bastante atenção como fonte alternativa de energia, em função da sua abundância, alto valor energético e versatilidade. Assim também, as tecnologias que comportam processos de conversão termoquímica têm atraído interesse, dentre essas, os reatores de leito fluidizado, conhecidos por atingir eficiência superior nos processos, pela sua flexibilidade para operar com diferentes tipos de combustíveis sólidos e por auxiliar no controle das emissões de gases de efeito estufa. Esses reatores já vem sendo empregados há tempo, porém, há interesse contínuo no seu estudo com o intuito de compreender melhor os fenômenos dos processos que ocorrem no seu interior e aprimorar

a sua eficiência (SINGH; BRINK; HUPA, 2013; VIRMOND, 2011).

Os modelos matemáticos e as técnicas computacionais permitem estudar em detalhe os fenômenos que são difíceis de serem analisados por meio de práticas experimentais. Os dados obtidos a partir de simulações computacionais auxiliam na otimização de projetos, reduzindo custos operacionais, facilitando a alteração dos parâmetros de projeto e melhorando o desempenho do elemento ou processo de interesse. O estudo da combustão em reatores de leito fluidizado com ajuda de modelos matemáticos e simulações computacionais, tornou-se mais usual nos últimos anos, mas sempre procura-se investigar e desenvolver modelos que representem com maior fidelidade o fenômeno (JIANG et al., 2017; LOHA et al., 2014).

## 1.2 Objetivos

A seguir descrevem-se o objetivo geral e os objetivos específicos do presente trabalho.

### 1.2.1 Objetivo geral

Estudar a modelagem matemática da dinâmica das partículas de biomassa em um combustor de leito fluidizado borbulhante (LFB).

### 1.2.2 Objetivos específicos

- Estudar os conceitos fundamentais relacionados à dinâmica das partículas no processo de combustão, e as características dos reatores de leito fluidizado.
- Investigar e analisar os modelos que retratam a dinâmica das partículas de biomassa em um combustor LFB.
- Investigar e implementar métodos numéricos para o estudo da dinâmica das partículas de biomassa em um combustor LFB.

## 2 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

A seguir serão descritos os pressupostos teóricos básicos relacionados ao problema de aplicação estudado no presente trabalho.

### 2.1 Características e propriedades da biomassa

Atribui-se o termo de biomassa para a matéria orgânica recente, de origem natural ou antropogênica, e biodegradável. A biomassa abrange todos os elementos derivados dos organismos que utilizam energia solar para o seu desenvolvimento. Isso implica que além de plantas, animais e microrganismos, a definição também aplica-se a produtos e subprodutos da fotossíntese, resíduos agrícolas e florestais, e rejeitos industriais e urbanos (PACIONI, 2013).

A biomassa é constituída principalmente por três polímeros naturais, celulose, hemicelulose e lignina, e com uma pequena percentagem de minerais e extrativos. Os polímeros citados podem representar 40 a 60%, 20 a 40%, e 10 a 25% da massa da biomassa (em base seca), respectivamente. As proporções e as estruturas químicas podem variar bastante dependendo da origem e natureza da biomassa (YANG et al., 2006).

O aproveitamento da biomassa usualmente se dá para a geração de energia, produção de combustíveis e outros produtos. Segundo Guerrero (2015), o processamento pelas tecnologias de conversão bioquímica, termoquímica e processos de extração são as que possibilitam essas aplicações. A pirólise, a gaseificação, e a combustão são os principais processos de conversão termoquímica. Em geral, todos ocorrem a altas temperaturas e convertem um combustível (sólido ou líquido) em produtos em estado gasoso, líquido ou sólido, e em energia. Esses processos têm sido amplamente estudados. A pirólise e a gaseificação têm ganhado certa relevância dado que fornecem maior eficiência em relação à combustão. No entanto, esse último ainda é o processo de conversão termoquímica mais aplicado para a conversão de biomassa em energia (TEIXEIRA, 2010; VIRMOND, 2011).

Para os processos de conversão termoquímica, as propriedades da biomassa são determinantes, pois podem inferir, de forma favorável ou desfavorável, nas etapas da conversão. Com base nisso, normalmente realizam-se os seguintes procedimentos para a determinação dessas propriedades: análise elementar, análise imediata, análise granulométrica e determinação do poder calorífico (PACIONI, 2013; TEIXEIRA, 2010).

Na análise imediata caracteriza-se o teor de umidade, o teor de carbono fixo (CF) e voláteis (MV), e o conteúdo de cinzas (CZ). Na análise elementar determina-se a composição química da biomassa, ou seja, os percentuais mássicos dos elementos, carbono (C), hidrogênio (H), oxigênio (O), nitrogênio (N), enxofre (S) e outros. A partir da análise elementar também pode-se determinar o poder calorífico superior (PCS). A análise granulométrica fornece as frações em massa de cada dimensão característica da biomassa. A Tabela 1 apresenta vários tipos de biomassa com sua respectiva caracterização físico-química (GUERRERO, 2015).

Tabela 1 – Caracterização físico-química de vários tipos de biomassa.

Biomassa	Análise elementar <sup>1</sup>						Análise imediata <sup>1</sup>			PCS <sup>2</sup>	Referência
	C	H	O	N	S	Cl	CF	MV	CZ		
Madeira de salgueiro	49,90	5,90	41,80	0,61	0,07	<0,01	16,07	82,22	1,71	19,59	Jenkins et al. (1998)
Gramma	46,68	5,82	37,38	0,77	0,19	0,19	14,34	76,69	8,97	18,06	Jenkins et al. (1998)
Casca de arroz	38,83	4,75	35,47	0,52	0,05	0,12	16,22	63,52	20,26	15,84	Jenkins et al. (1998)
Bagaço de cana	48,64	5,87	42,82	0,16	0,04	0,03	11,95	85,61	2,44	18,99	Jenkins et al. (1998)
Serragem de madeira	55,30*	7,14*	37,30*	0,21*	<0,01*	0,04*	20,22*	79,78*	0,43	18,10	Virmond (2011)
LPC <sup>3</sup>	58,04*	9,01*	22,17*	9,24*	0,34*	0,18*	14,71*	85,29*	12,30	24,33	Virmond (2011)
LSAE <sup>4</sup>	33,87	6,32	24,64	5,88	0,67	0,21	8,08	63,50	28,41	16,19	Batistella (2015)
RSU <sup>5</sup>	43,10	6,10	31,40	1,00	0,30	-	13,40	68,50	18,10	18,30	Ouadi et al. (2017)

Notas: <sup>1</sup> Dados expressos em (%) de base seca da biomassa. <sup>2</sup> Poder calorífico superior (MJ/kg). <sup>3</sup> Lodo da indústria do processamento de carnes. <sup>4</sup> Lodo de esgoto sanitário aeróbio. <sup>5</sup> Resíduo sólido urbano. \* Base livre de umidade e cinzas.

Em função da diversidade que apresenta a biomassa, nota-se consideráveis variações nos valores das suas propriedades físico-químicas, conforme mostrado na Tabela 1. Nessa tabela percebe-se que a biomassa possui um alto teor de material volátil, entre 63 a 85%, sendo superior ao conteúdo nos combustíveis fósseis, porém, o teor de carbono fixo presente é inferior, variando de 8 a 17%. O conteúdo de cinzas costuma ser menor a 5%, mas este pode ser alto (até 20% aproximadamente), como na casca de arroz. Enquanto aos teores de C, H e O, os dois primeiros contribuem positivamente no poder calorífico, enquanto que o último tem o efeito contrário, sendo uns dos motivos pelo qual a biomassa é inferior em relação aos combustíveis fósseis nesse aspecto. O teor de umidade também possui um efeito similar, pois, embora possa representar um baixo percentual na composição de

biomassas pré-secas, em biomassas *in natura* pode representar até 50% da sua composição (ROSAL, 2008).

No trabalho de Yang et al. (2005) menciona-se que o efeito das propriedades da biomassa também depende do reator no qual ocorre o seu aproveitamento. Os principais tipos de reatores que são utilizados para a conversão termoquímica de biomassa são: reatores de leito fixo, reatores de leito fluidizado e os reatores de leito de arraste. A diferença entre esses tipos de reatores é a dinâmica das partículas.

## 2.2 Reatores de leito fluidizado

Desde sua concepção, os reatores de leito fluidizado têm sido utilizados em diversos processos físicos e químicos. O processo de fluidização e as reações químicas e físicas em leitos fluidizados têm sido investigados extensivamente e aplicados após da Segunda Guerra Mundial. Mas, o auge da pesquisa e do desenvolvimento da tecnologia dos reatores de leito fluidizado foi atingido na década de 1970, no período em que ocorreu uma crise energética. Desde essa época, os pesquisadores de vários países aderiram à tendência de desenvolver novas tecnologias para fins energéticos (BASU, 2006; OKA, 2004).

Na literatura se faz distinção, frequentemente, de dois tipos de reatores de leito fluidizado: o reator de leito fluidizado borbulhante (LFB) e o reator de leito fluidizado circulante (LFC), mostrados na Figura 3. Em ambas as tipologias, um gás fluidizante é introduzido pela região inferior do reator (por meio de uma placa distribuidora). A alimentação do combustível sólido é feita a partir de uma entrada lateral, os gases deixam o reator pela região superior, e as cinzas são retiradas geralmente pela parte inferior. Embora esses reatores possuam muita similaridade, têm diferenças notórias, como a recirculação das partículas, que acontece apenas no reator LFC. Para fins deste trabalho, a seguir apresenta-se maior detalhe sobre o reator LFB.

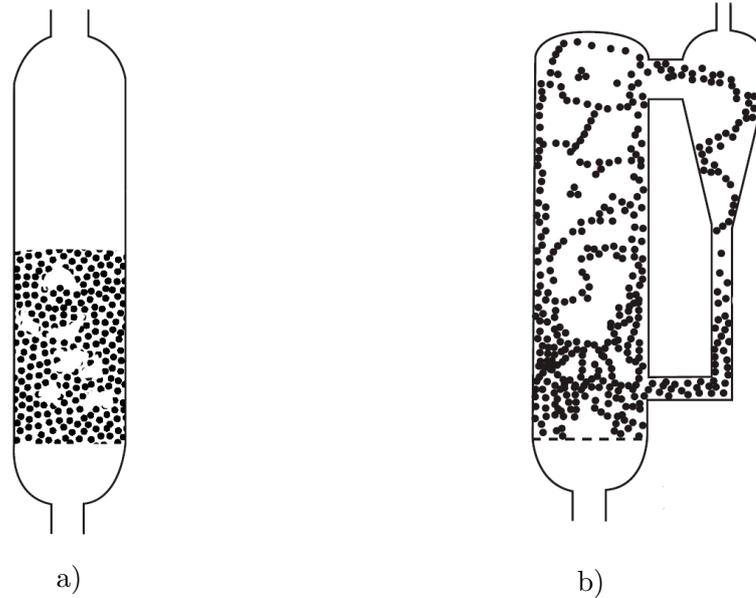


Figura 3 – Os reatores de leito fluidizado a) borbulhante, e b) circulante. Fonte: adaptado de Ranade (2002).

Para compreender as particularidades do reator LFB, deve-se descrever o processo de fluidização. Esse processo ocorre quando as partículas do leito encontram-se suspensas por um fluxo ascendente e contínuo de gases. Nesse caso, as forças de atrito entre as partículas e o gás contrabalançam o peso dessas. A componente vertical da força de compressão entre as partículas adjacentes desaparece e a queda de pressão através de qualquer região do leito é equivalente aos pesos das partículas e do gás pertencentes a essa região. No instante no qual as partículas adquirem essas características, o leito expande-se e começa a se comportar como um líquido. Desse modo, considera-se que o leito se encontra na mínima condição de fluidização ou regime de fluidização incipiente (MORAES, 2011; VERISSIMO, 2014).

Quando aumenta a velocidade do gás fluidizante originam-se novos regimes de fluidização, conforme ilustrado na Figura 4. Após o regime incipiente, o regime observado é o borbulhante. Nesse regime, há surgimento de bolhas pelo excesso de gás, além do necessário para a mínima fluidização. Essas bolhas aumentam de tamanho, por coalescência, à medida que avançam na altura do leito, e estouram na superfície do próprio leito (MORAES, 2011).

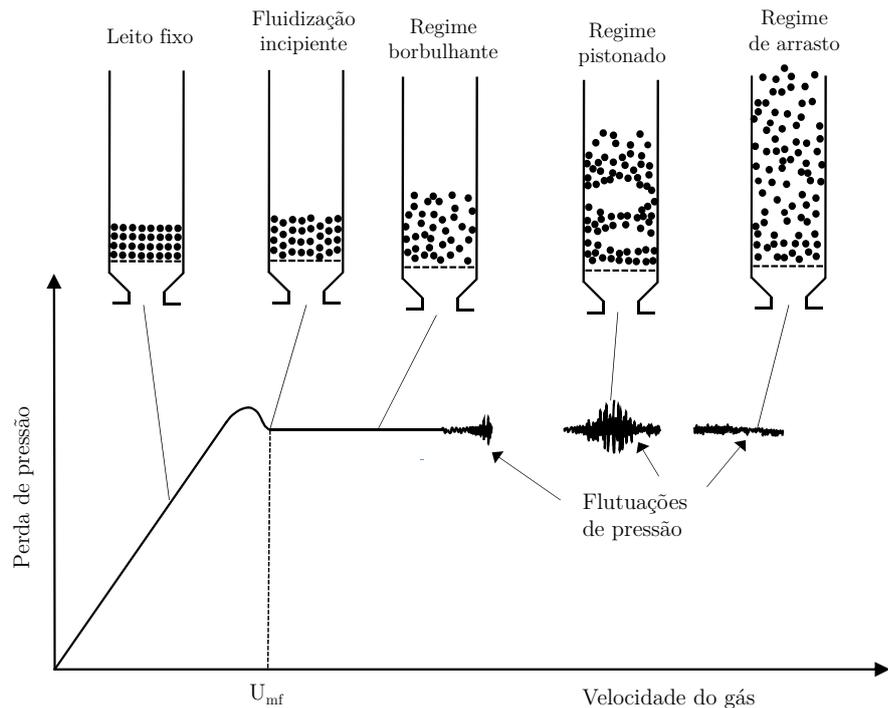


Figura 4 – Comportamento do leito com o aumento da velocidade do gás de fluidização ( $U_{mf}$ : velocidade de mínima fluidização). Fonte: adaptado de Moraes (2011).

Para velocidades de fluidização superiores à do regime borbulhante, observa-se na Figura 4 que a agitação do leito se torna mais intensa, devido a essas flutuações de pressão. Para determinadas condições do reator, pode-se observar o regime pistonado, no qual as bolhas crescem até quase o tamanho do diâmetro do reator. Uma quantidade apreciável de partículas é carregada pelas bolhas quando essas atravessam a superfície do leito (MORAES, 2011).

Existem outros regimes usuais que não são descritos na Figura 4, como o regime turbulento, que surge quando a velocidade de fluidização aumenta além daquela do regime borbulhante. Esse regime é caracterizado por maiores oscilações de pressão no leito e há uma mudança do padrão de bolhas, sendo substituído por vazios irregulares. Logo, podem-se apresentar outros regimes, como o regime de fluidização rápida e o regime de arrasto. Nesse último, o gás movimentar-se através do leito de forma que as partículas podem chegar no *freeboard* (a parte superior do reator) e as mais finas podem até ser transportadas com os produtos gasosos e deixar o reator. Porém, a maioria que escapa do volume do leito volta de novo a ele, para logo ser removida junto com as cinzas na parte inferior do reator (MORAES, 2011; OKA, 2004).

Vários autores, tais como Basu (2006), Oka (2004) e Yang (2003), mencionam que

o comportamento de fluidização de um leito não depende apenas da velocidade do gás fluidizante, mas também das características das partículas que integram o leito. Por tal motivo, utiliza-se a classificação de Geldart, que agrupa as partículas em quatro grupos (A, B, C e D), em função do seu diâmetro médio  $d_p$  e de sua massa específica  $\rho_p$ , bem como da massa específica do gás fluidizante  $\rho_g$ . Isso é facilitado por meio do diagrama criado pelo próprio autor da classificação, mostrado na Figura 5.

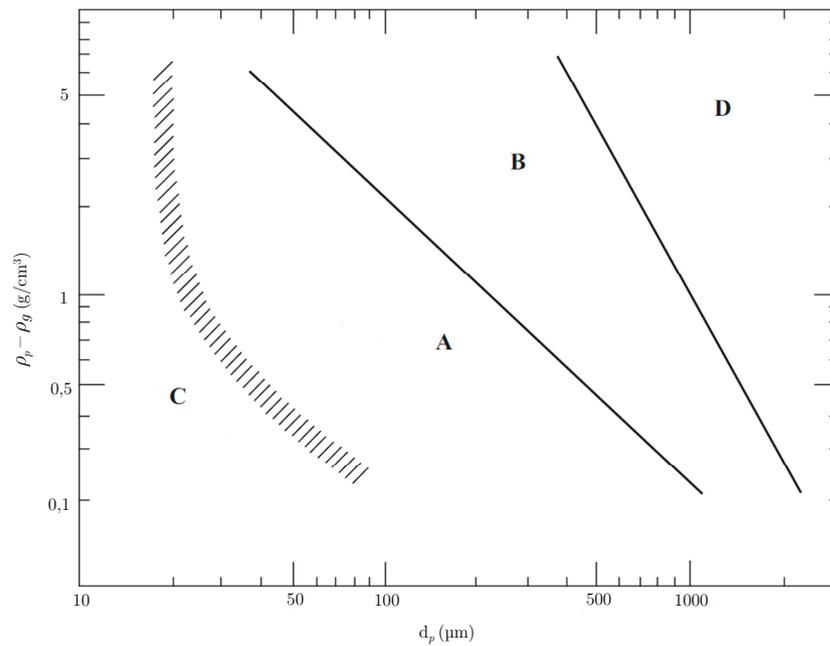


Figura 5 – Diagrama de Geldart. Fonte: adaptado de Ranade (2002).

Na Tabela 2 mostram-se as características de cada grupo de partículas do leito da classificação de Geldart.

Tabela 2 – Características dos grupos de partículas do leito da classificação de Geldart.

Grupo	Diâmetro médio ( $\mu\text{m}$ )	Particularidades
A	30-100	Grande facilidade para ser fluidizada. $\rho_p < 1400$ ( $\text{kg/m}^3$ )
B	40-500	Fluidiza intensamente com a formação de bolhas. $1400 < \rho_p < 4000$ ( $\text{kg/m}^3$ ). Ex: areia
C	<20	Altamente coesivo, difícil fluidização. Ex: cimento e farinha
D	>500	Produz grandes bolhas e taxas de mistura inferiores. Ex: cascalho e grão de cereais

Fonte: Ranade (2002) e Moraes (2011).

O leito dos reatores LFB opera no regime de fluidização borbulhante, e usualmente utilizam-se partículas pertencentes ao grupo B, mas na região limite com o grupo D, embora, algumas partículas compatíveis pertençam ao grupo D (OKA, 2004).

A superfície do leito assemelha-se à de um líquido em estado de ebulição, e a presença de bolhas e o movimento caótico das partículas contribuem positivamente para a mistura no leito. Esse comportamento similar a dos líquidos permite que os sólidos possam ser tratados como um fluido, como também a operação contínua do reator (OKA, 2004; YANG, 2003).

A mistura intensa característica do leito fluidizado resulta na uniformidade da temperatura no seu interior, inclusive para reações altamente exotérmicas ou endotérmicas. Também, o contato gás-sólido e a transferência de calor e de massa são superiores a outros tipos de reator, por exemplo, o de leito fixo (OKA, 2004; YANG, 2003).

A operação do reator LFB encontra-se condicionada principalmente à velocidade do gás fluidizante, ao tamanho das partículas do leito e dos sólidos combustíveis. A Tabela 3 mostra os valores usuais desses parâmetros de operação do reator LFB.

Tabela 3 – Valores usuais dos principais parâmetros de operação do reator LFB.

Parâmetros	Valores
Velocidade do gás fluidizante (m/s)	1,0 - 3,0
Diâmetro de partículas do leito (mm)	<0,5 - 1,0
Diâmetro de partículas combustíveis (mm)	<80,0

Fonte: Grammelis, Karampinis e Nikolopoulos (2011).

O reator LFB possui uma série de vantagens como a flexibilidade de trabalhar com vários tipos de combustíveis, alta eficiência e baixo custo de operação e manutenção, comparados com outros reatores, para resultados obtidos sob as mesmas condições de operação. Ainda assim, o reator LFB possui algumas desvantagens, como a erosão das suas partes internas, e a grande carga de material particulado nos gases produto, ambas produzidas pela intensa mistura no leito. Quando o sólido combustível for biomassa, o reator pode requerer um sistema eficiente para separar o particulado dos gases produto (KHAN et al., 2009; YANG, 2003).

Os processos de conversão termoquímica de sólidos, como a combustão e a gaseificação, são as aplicações mais conhecidas do reator LFB. Mas, esse reator possui outras aplicações, como na indústria química na produção de anilina, polietileno e óxido de alumínio, e em vários processos físicos, como secagem, adsorção e tratamento térmico (OKA, 2004).

### 2.3 Combustão de biomassa em reatores LFB

A quantidade de sólidos combustíveis introduzido em um reator de leito de fluidizado costuma ser entre 0,5-5,0% da massa do material do leito. Esse material tem caráter inerte, e habitualmente utiliza-se areia e/ou cinzas. Às vezes, adiciona-se outros materiais como calcário, para que certos componentes nocivos do combustível não sejam emitidos com os gases produto do processo. Previamente à introdução do combustível, o material do leito é alimentado na parte inferior do reator e é fluidizado conforme descrito na subseção anterior (BASU, 2006; SINGH; BRINK; HUPA, 2013).

Moraes (2011) menciona que num combustor LFB, cada partícula combustível pode ser visualizada envolvida pelas partículas do leito, pois essas somente fornecem a energia necessária para o início da combustão, em função da sua elevada capacidade térmica. As partículas do leito não sofrem transformação alguma, ou a princípio não deveriam.

De forma geral, a combustão de sólidos em um reator (ou combustor) de leito fluidizado pode ser esquematizada pelos seguintes subprocessos: secagem, devolatilização, e combustão do carbono fixo, conforme mostrado na Figura 6 (BASU, 2006; JIANG et al., 2017).

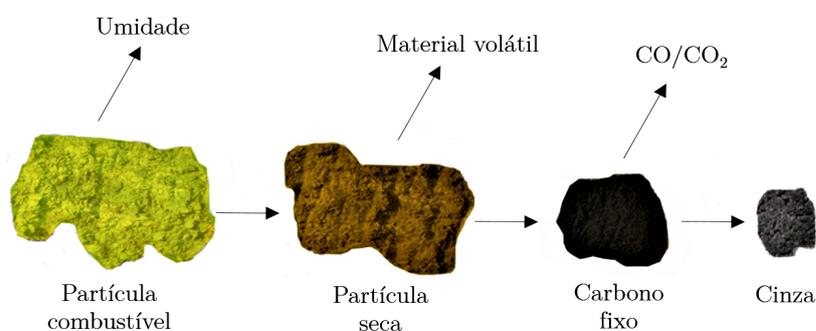


Figura 6 – Estágios do processo da combustão de sólidos. Fonte: adaptado de Singh, Brink e Hupa (2013).

A secagem é a primeira transformação que um sólido exibe em toda conversão termoquímica. Esse estágio começa logo após as partículas entrarem no combustor, em uma faixa de temperatura de 100 a 200 °C, e tem duração de alguns segundos. O processo finaliza quando a umidade do sólido tenha-se evaporado completamente e inicia a devolatilização. Não existe um limite claro entre esses dois subprocessos, em todo caso existe um período no qual ocorrem simultaneamente (LOHA et al., 2014; SOUZA-SANTOS, 2004).

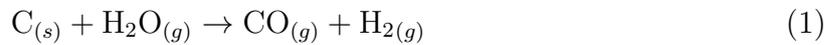
O sólido não sofre decomposição na secagem, pois a temperatura do processo não

é elevada o suficiente para que alguma reação química aconteça, mas ele pode sofrer compressão, redução no tamanho dos seus poros, e fraturas (JIANG et al., 2017; RAVELLI; PERDICHIZZI; BARIGOZZI, 2008).

A devolatilização ocorre quando o sólido é degradado termicamente e libera compostos voláteis de baixo peso molecular como hidrogênio gasoso ( $H_2$ ), metano ( $CH_4$ ), monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono ( $CO_2$ ), óxidos de nitrogênio ( $NO_x$ ) e vapor de água, e de alto peso molecular, que são condensáveis e acabam se tornando alcatrão. Também, carbono fixo é encontrado no interior do combustor como resultado desse subprocesso, que se desenvolve na ausência de oxigênio (LOHA et al., 2014; SOUZA-SANTOS, 2004).

Os produtos da devolatilização são parcialmente oxidados pelo oxigênio contido no gás de fluidização (para a combustão, geralmente ar) e em seguida reagem com  $CO_2$ ,  $H_2$  e vapor de água, nas chamadas de reações de gaseificação (LOHA et al., 2014). De acordo com Loo e Koppejan (2008), essas reações ainda formam parte da etapa da devolatilização.

As reações de gaseificação são inúmeras, mas na literatura comenta-se que as mais relevantes são: a reação entre o carbono fixo e água,



A reação entre o carbono fixo e dióxido de carbono,



E por fim, a reação entre o carbono fixo e hidrogênio,



Ressalta-se que as reações em (1), (2) e (3) são endotérmicas, e o calor necessário é fornecido, geralmente, pelas reações de combustão ou oxidação (SOUZA-SANTOS, 2004).

A fragmentação da partícula restante pode ocorrer devido ao aumento de pressões internas, dividindo-a em partículas menores. Esse material combustível restante é constituído de cinzas e carbono fixo, reagem mais lentamente e a temperaturas superiores à do leito. As reações que se desenvolvem durante a combustão do carbono fixo são de caráter exotérmico, e podem ser representadas pelas reações em (4) (RAVELLI; PERDICHIZZI;

BARIGOZZI, 2008; SOUZA-SANTOS, 2004).



Durante a queima do carbono fixo, efeitos abrasivos entre as partículas ou entre essas e as superfícies internas do reator tendem a produzir partículas mais finas, que são elutriadas do reator pelo fluxo do gás de fluidização. Dessa forma, a partícula original tem seu tamanho reduzido progressivamente (MORAES, 2011).

Diferentemente da combustão de combustíveis sólidos tradicionais, como o carvão, a combustão de biomassa é descrita por vários pesquisadores como um processo mais complexo. Em parte, porque a biomassa possui alto conteúdo de material volátil, e frequentemente, alto conteúdo de umidade. Também, pela sua dificuldade intrínseca de fragmentação uniforme em partículas menores, o que contribui na diversidade de formas característica das partículas de biomassa (MASON et al., 2015; NUSSBAUMER, 2003).

As partículas de biomassa empregadas no processo de combustão são maiores que as de carvão, (na faixa de 2-10 mm aproximadamente) podendo ser até 200 vezes maiores, conforme Lu e Baxter (2011). Devido ao tamanho e forma variada das partículas de biomassa, os eventos intraparticulares, como transferências de calor e massa, podem inferir de forma apreciável na taxa em que ocorre o processo global de combustão. Apesar desses fatos, na literatura menciona-se que não se faz necessário nem viável economicamente o pré-processamento da biomassa, no intuito de adquirir o padrão do carvão (RAVELLI; PERDICHIZZI; BARIGOZZI, 2008).

Todos os aspectos da biomassa citados nos parágrafos anteriores traduzem-se em escalas de tempo diferentes dos processos da secagem, devolatilização e oxidação das partículas de biomassa, que excedem as escalas das partículas de carvão, para as mesmas condições (LU; BAXTER, 2011).

As partículas de biomassa iniciam a etapa de devolatilização a temperaturas inferiores às partículas de carvão em função dos seus constituintes orgânicos. Nesse estágio ocorre a maior perda de massa e a maior contribuição de calor. Isso ocorre por causa do rápido desprendimento de material volátil, que resulta na alta reatividade do sólido. Por outro lado, a oxidação do carbono fixo ainda governa o tempo de residência desse sólido combustível, como visto na Figura 7 (GRAMMELIS; KARAMPINIS; NIKOLOPOULOS, 2011; LU; BAXTER, 2011).

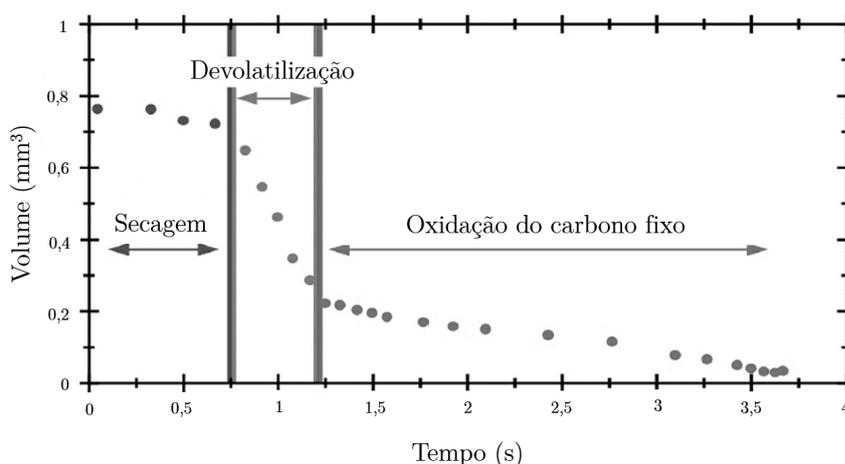
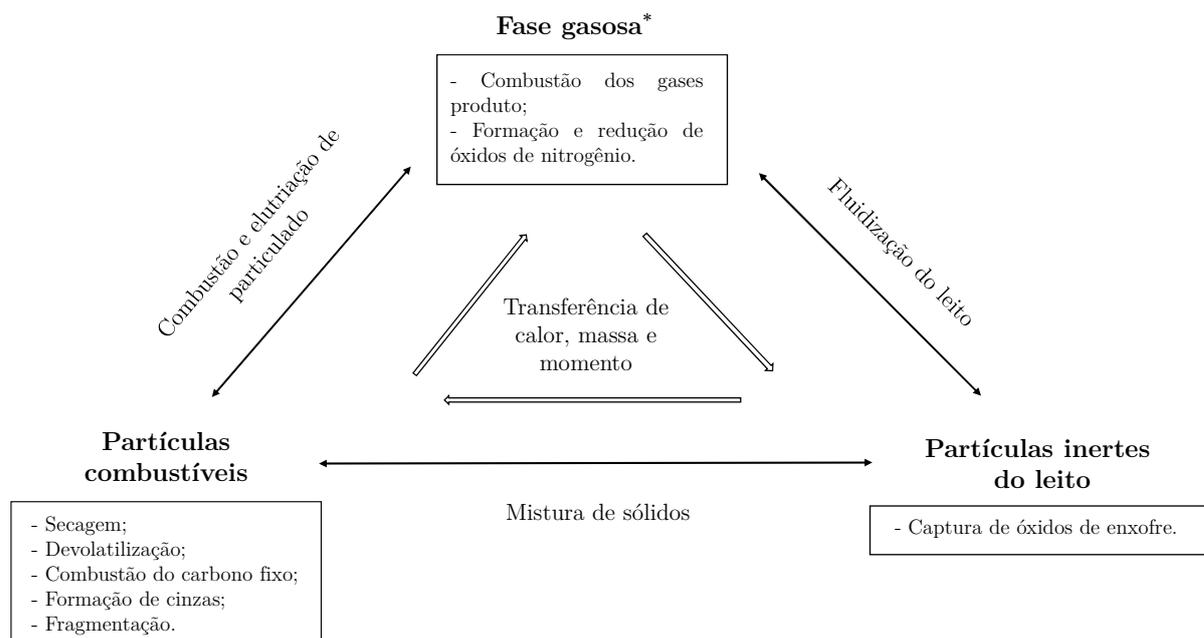


Figura 7 – Gráfico típico da perda de volume de uma partícula de biomassa ao longo do processo da combustão. Fonte: adaptado de Loo e Koppejan (2008).

Os compostos voláteis podem-se queimar na região do *freeboard* do combustor. Para garantir a alta eficiência da combustão e a redução das emissões de poluentes, como  $\text{NO}_x$ , além de maiores tempos de residência pratica-se a chamada combustão estagiada. Nessa metodologia, o calor do processo da combustão é liberado em parte na região do leito e outra parte na região do *freeboard*. Para tal, injeta-se ar (secundário) nessa região superior do combustor, sendo uma vantagem dos combustores LFB (BASU, 2006; GRAMMELIS; KARAMPINIS; NIKOLOPOULOS, 2011).

## 2.4 Modelagem da combustão de biomassa em reatores LFB

Nas subseções anteriores percebe-se que a combustão de biomassa em leito fluidizado é um evento complexo, já que é composta por diversos mecanismos físicos e químicos, sendo alguns desses: a fluidização do leito, a interação do fluxo de gases e a mistura de sólidos no leito, a secagem, devolatilização e cinética do sólido combustível, as transferências de calor entre as fases, a elutriação do material particulado, a combustão no *freeboard*, a captura de óxidos de enxofre, a formação e redução de óxidos de nitrogênio. Na Figura 8 são apresentadas as três componentes do processo e como se relacionam com os mecanismos físicos e químicos envolvidos. Dependendo do objetivo do estudo, esses subprocessos podem ou não ser considerados na sua totalidade para compor um modelo matemático (MORAES, 2011; SOUZA-SANTOS, 2004).



\*A fase gasosa inclui o gás de fluidização e os gases produto.

Figura 8 – Principais mecanismos físicos e químicos que formam parte da combustão de sólidos em leito fluidizado. Fonte: do autor.

Existem diversas formas de descrever a combustão de sólidos em reatores LFB. Os modelos podem ser classificados com respeito às dimensões espaciais utilizadas, em relação à consideração do tempo como variável (regime estacionário ou transiente) ou em função da abordagem considerada para tratar as fases que compõem o evento, como a abordagem Euleriana-Euleriana e Euleriana-Lagrangiana (MASON et al., 2015; OKA, 2004; SOUZA-SANTOS, 2004).

Para o estudo da combustão de sólidos em reatores de leito fluidizado, na maioria dos modelos, o interior do reator costuma ser dividido em três regiões: o leito, a zona de *splash* e o *freeboard*, apresentadas na Figura 9. A região do leito, como o seu próprio nome o indica, refere-se ao local onde encontram-se os sólidos inertes e ocorre a fluidização do leito, conseqüentemente a formação de bolhas. A zona de *splash* compreende o espaço acima da superfície do leito onde as bolhas estouram, o que promove a presença de algumas partículas que escapam momentaneamente do leito. Por fim, a região superior do reator é a do *freeboard*, composta pelos gases produto do processo e material particulado (SINGH; BRINK; HUPA, 2013).

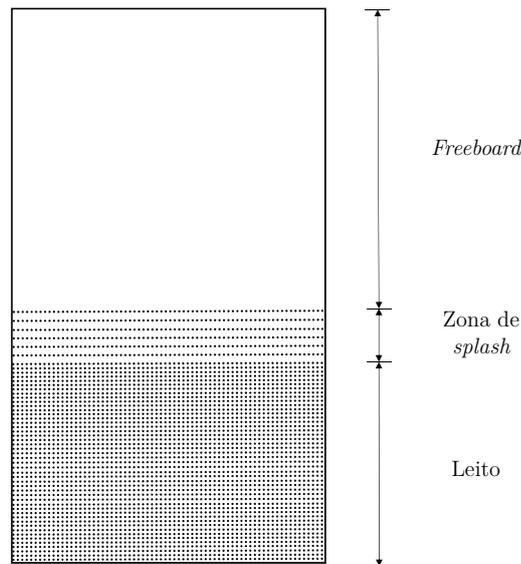


Figura 9 – Representação das regiões do reator LFB. Fonte: adaptado de Scala e Salatino (2002).

Em geral, os modelos que utilizam a abordagem Euleriana-Euleriana aparecem com maior frequência em estudos da combustão de sólidos em reatores de leito fluidizado. Nesses modelos, a fase das partículas recebe o mesmo tratamento que a fase dos gases, ou seja, tanto a fase gasosa quanto a fase sólida são consideradas fluidos. Conseqüentemente, esse tipo de modelo não consegue fornecer informação suficiente sobre a dinâmica das partículas, pois não considera as suas propriedades físicas como a sua forma, seu tamanho, como é feito na abordagem Euleriana-Lagrangiana (CALEGARI, 2012; HOOMANS et al., 1996; KLOSS et al., 2009).

No presente trabalho, apresenta-se um modelo matemático da abordagem Euleriana-Lagrangiana. Essa abordagem é ideal para avaliar fenômenos físicos que estejam relacionados com o escoamento de partículas, como as interações entre partículas. O considerável custo computacional em função do número de partículas simuladas é a desvantagem. Porém, vários autores como Curtis e Wachem (2004) e Kloss et al. (2009) apontam que nas últimas décadas vem-se trabalhando no aprimoramento das ferramentas computacionais e dos métodos de resolução das equações.

A abordagem Euleriana-Lagrangiana considera a fase gasosa como contínua e a fase das partículas como discreta. O movimento, a variação de temperatura e massa das partículas conseguem ser acompanhadas individualmente. As equações correspondentes às fases contínua e discreta são apresentadas a seguir.

### 2.4.1 Equações governantes da fase contínua

O comportamento da fase contínua é descrito pelas equações de Navier-Stokes, dadas pelos princípios de conservação de massa, quantidade de movimento linear, energia e das espécies químicas.

O princípio da conservação da massa para a fase gasosa é representado pela seguinte equação,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = S_m, \quad (5)$$

onde  $\rho$  e  $\mathbf{u}$  são a massa específica e o campo de velocidade do escoamento gasoso, respectivamente.  $\nabla$  é o operador divergente e o termo  $S_m$  representa o acoplamento entre as fases contínua e discreta, ou seja, a transferência de massa das partículas para a fase gasosa.

O princípio da conservação da quantidade de movimento linear é uma aplicação da segunda lei de Newton, dada por,

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{F} + \mathbf{S}_u, \quad (6)$$

onde  $P$  é a pressão externa exercida sobre o fluido,  $\mathbf{F}$  representa as forças que agem sobre o escoamento,  $\boldsymbol{\tau}$  é o tensor das tensões viscosas e o termo  $\mathbf{S}_u$  representa o acoplamento entre as fases contínua e discreta, ou seja, a influência da velocidade das partículas na velocidade do escoamento.

Quanto ao princípio de conservação de energia, têm-se a equação da energia, dada por,

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} E) = -\nabla \cdot p \mathbf{u} + \nabla(k \nabla T) + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u}) + S_T, \quad (7)$$

onde  $E$  é a energia total,  $k$  refere-se à condutividade térmica,  $T$  é a temperatura da fase gasosa, o termo  $S_T$  representa o acoplamento entre as fases contínua e discreta, ou seja, a influência da temperatura das partículas na fase gasosa.

Por fim, o princípio da conservação das espécies químicas é dado por,

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) = \nabla \cdot (D \nabla(\rho Y_i)) + S_m + R_f, \quad (8)$$

onde  $Y_i$  e  $D$  são a fração mássica e a difusividade da espécie  $i$ , e  $R_f$  é o termo correspondente à taxa de reação da espécie  $i$ , a qual depende do modelo de reação química considerado. Dessa forma, a fase contínua é modelada pelas equações (5)-(8). Ressalta-se que para resolver este sistema de equações ele precisa ser fechado. Para isso utilizam-se as chamadas equações de estado que podem ser representadas de diversas formas, dependendo das considerações feitas no modelo. Além disso, são necessárias condições de contorno e condições iniciais que dependem do problema de aplicação em estudo. Mais detalhes podem ser encontrados em Calegari (2012), Ferziger e Perić (2002), Fortuna (2012) e Maliska (2004).

#### 2.4.2 Equações governantes da fase discreta

O comportamento das partículas é descrito por meio da fase discreta. Para cada partícula  $p$  tem-se um sistema de Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs) associado. A posição de cada partícula é dada por,

$$\frac{d\mathbf{x}_p}{dt} = \mathbf{u}_p, \quad (9)$$

onde  $\mathbf{x}_p$  é o vetor posição da partícula e  $\mathbf{u}_p$  é o vetor velocidade da partícula. Da segunda lei de Newton, tem-se,

$$m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \mathbf{F}_p, \quad (10)$$

onde  $m_p$  são a massa da partícula e  $\mathbf{F}_p$  é o termo das forças externas que agem sob a partícula. O termo da  $\mathbf{F}_p$  em (10) pode ter várias maneiras de ser representado conforme a abordagem escolhida. Na literatura distinguem-se duas principais: modelo das partículas discretas ou DPM (sigla em inglês para *Discrete Particle Model*),

$$\mathbf{F}_p = F_D(\mathbf{u} - \mathbf{u}_p) + \frac{\mathbf{g}(\rho_p - \rho)}{\rho_p}, \quad (11)$$

onde  $F_D$  é o coeficiente de arrasto,  $\mathbf{g}$  é a aceleração da gravidade,  $\rho_p$  é a massa específica da partícula e  $\mathbf{u}$  é a velocidade do escoamento na posição da partícula, termo que representa o acoplamento no sentido gás-sólido. A outra abordagem é a do modelo de elementos discretos ou DEM (sigla em inglês para *Discrete Element Model*),

$$\mathbf{F}_p = \sum_{j=1}^{n_c} (\mathbf{F}_{c,pj} + \mathbf{F}_{d,pj}) + \mathbf{F}_{d,g-p} + \mathbf{F}_{P,g-p} + m_p \mathbf{g}, \quad (12)$$

onde  $n_c$  é o número de partículas em contato com a partícula  $p$ ,  $\mathbf{F}_{c,pj}$  é força elástica de contato entre as partículas,  $\mathbf{F}_{d,pj}$  é força de amortecimento viscoso,  $\mathbf{F}_{d,g-p}$  é força de arrasto gás-partícula e  $\mathbf{F}_{P,pj}$  é força devido à pressão externa, mais detalhes em Geng e Che (2011).

Pode-se perceber pelas equações características das abordagens DPM e DEM, que a primeira não considera as interações entre as partículas. Conseqüentemente, o modelo DEM é mais complexo e possui um custo computacional maior. Porém, vários pesquisadores apontam que para estudar da melhor maneira a dinâmica das partículas em um reator de leito fluidizado o DEM deve ser considerado. Ainda assim, o DPM é utilizado em função da sua simplicidade. Mais detalhes sobre as abordagens podem ser encontrados nos trabalhos de Centeno-González *et al.* (2017), Geng e Che (2011), Kloss *et al.* (2009) e Lu, Third e Müller (2015).

Conforme Centeno-González *et al.* (2017), a taxa de variação de massa pode ser descrita para cada fase do processo da combustão.

Para a etapa da **secagem**, tem-se a seguinte expressão,

$$\frac{dm_p}{dt} = k_c A_{s,p} \rho \ln \left( 1 + \frac{Y_{H_2O,s,p} - Y_{H_2O}}{1 - Y_{H_2O,s,p}} \right), \quad (13)$$

onde  $k_c$  é o coeficiente de transferência de massa,  $m_p$  e  $A_{s,p}$  são a massa e a área de superfície da partícula  $p$ ,  $Y_{H_2O}$  e  $Y_{H_2O,s,p}$  correspondem à água contida na fase gasosa e nas partículas. A taxa de variação da temperatura da partícula durante a **secagem** é dada por,

$$m_p c_{P,p} \frac{dT_p}{dt} = h A_{s,p} (T - T_p) - \frac{dm_p}{dt} h_{fg} + A_{s,p} \epsilon_p \sigma (\phi_R^4 - T_p^4), \quad (14)$$

onde  $c_{P,p}$  e  $\epsilon_p$  são o calor específico e emissividade da partícula  $p$ ,  $h$  é o coeficiente convectivo de transferência de calor,  $h_{fg}$  é o calor latente da água,  $\sigma$  é o coeficiente de Stefan-Boltzmann,  $\phi_R$  representa a temperatura de radiação,  $T_p$  é temperatura da partícula e  $T$  temperatura do escoamento na posição da partícula, termo que representa o acoplamento no sentido gás-sólido.

Na etapa da **combustão do carbono fixo** tem-se que,

$$\frac{dm_p}{dt} = -A_{s,p} \frac{\rho R T Y_{O_2}}{M_{w,O_2}} \frac{D_o \mathfrak{R}}{D_o + \mathfrak{R}}, \quad (15)$$

onde  $Y_{O_2}$  e  $M_{w,O_2}$  são a fração mássica local e a massa molecular de  $O_2$ ,  $D_o$  a coeficiente da taxa de difusão,  $\mathfrak{R}$  a taxa cinética de oxigênio e  $R$  é a constante universal dos gases.

Os termos  $\mathfrak{R}$  e  $D_o$  são dados por,

$$\left\{ \begin{array}{l} D_o = C_1 \frac{[(T_p + T)/2]^{0,75}}{d_p}, \\ \mathfrak{R} = C_2 \exp(-E_a/RT_p), \end{array} \right. \quad (16)$$

onde  $C_1$  e  $C_2$  são constantes e  $E_a$  representa a energia de ativação. A taxa de variação da temperatura da partícula é dada por,

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_{s,p} (T - T_p) - 0,3 \frac{dm_p}{dt} h_{reac} + A_{s,p} \epsilon_p \sigma (\phi_R^4 - T_p^4). \quad (17)$$

onde  $h_{reac}$  é o calor liberado na combustão do carbono fixo.

Pode-se notar que ainda não foi comentado sobre as equações que descrevem a taxa de variação da massa e da temperatura durante a etapa da **devolatilização**. Essa é a etapa que mais difere entre os modelos da fase discreta propostos na literatura, o que se deve ao fato de que ela domina em complexidade no processo de combustão. Conseqüentemente, é difícil propor uma equação ou um conjunto de equações para descrever de forma generalizada.

A escolha do modelo depende de dados experimentais sobre a degradação térmica da biomassa de estudo, como no trabalho de Centeno-González *et al.* (2017), no qual, em função da biomassa que foi analisada, a taxa de variação da fração mássica das partículas é descrita em duas etapas, por meio das equações de Arrhenius, dadas por,

$$\begin{cases} \frac{d\alpha_p}{dt} = A_1 \exp(-E_a/RT_p)(1 - \alpha_p)^2, \\ \frac{d\alpha_p}{dt} = A_2 \exp(-E_a/RT_p)(1 - \alpha_p)^3, \end{cases} \quad (18)$$

onde  $\alpha_p$  é a fração mássica,  $E_a$  é a energia de ativação e  $A_1$  e  $A_2$  são os fatores pré-exponenciais para cada equação. A primeira equação em (18) descreve de forma mais adequada os primeiros instantes da devolatilização e a segunda equação o restante desse processo.

Dessa forma o sistema de EDOs associado a cada partícula é dado pelas (9), (10), (13), (14), (15), (17) e (18). Salienta-se que o cálculo das variáveis da partícula como posição, velocidade, temperatura e massa está acoplado ao campo de variáveis do escoamento da fase dos gases, pois as fases trocam massa, momento e energia. Além disso, são necessárias condições iniciais para cada uma das EDOs. Nos trabalhos de Geng e Che (2011) e Singh, Brink e Hupa (2013) pode-se encontrar mais detalhes sobre as equações da fase dispersa.

### 3 METODOLOGIA

Para a revisão teórica, inicialmente foram descritos os conceitos para o entendimento mínimo do problema abordado neste trabalho. Logo, integraram-se as diversas formas de descrever a combustão das partículas de biomassa em um reator LFB. Elaborou-se uma explicação do que ocorre com as partículas desde que ingressam no reator até serem convertidas nos respectivos produtos do processo. Também, considerou-se alguns aspectos sobre os reatores de leito fluidizado relevantes para o processo da combustão, como a fluidização do leito e as condições de operação.

Na última parte da formulação do problema, foram relacionados os modelos da combustão de biomassa em reatores LFB mais recorrentes na literatura. Conferiu-se maior detalhe aos modelos que oferecem melhor conhecimento sobre comportamento das partículas ao longo do processo, como os modelos que seguem a abordagem Euleriana-Lagrangiana.

Este capítulo descreve a metodologia numérica utilizada no presente trabalho. Para a implementação de métodos numéricos para o estudo da dinâmica das partículas de biomassa em um reator LFB foi utilizado um modelo matemático da dinâmica das partículas obtido a partir das equações (9) e (10). O modelo matemático utilizado descreve a posição e velocidade de cada partícula  $p$ , em um escoamento bidimensional, e é dado pelo sistema de EDOs a seguir,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dx_p}{dt} = u_p, \\ \frac{dy_p}{dt} = v_p, \\ \frac{du_p}{dt} = \frac{1}{\tau_u}(u - u_p), \\ \frac{dv_p}{dt} = \frac{1}{\tau_v}(v - v_p), \end{array} \right. \quad (19)$$

sendo  $(x_p, y_p)$  a posição da partícula  $p$ ,  $u_p$  e  $v_p$  as componentes da velocidade da partícula,  $u$  e  $v$  são as componentes da velocidade do escoamento contínuo na posição da partícula e  $\tau_u$  e  $\tau_v$  são o tempo característico das velocidades  $u$  e  $v$ , respectivamente. O modelo matemático simplificado (32) assume que: o escoamento possui um número de Reynolds relativo pequeno, de forma que não consideram-se os efeitos de turbulência.

No presente trabalho, considera-se que o campo de velocidade da fase contínua é imposto analiticamente e a interação entre as fases ocorre somente no sentido gás-sólido. Nas seguintes subseções mencionam-se mais detalhes sobre a discretização espacial da fase contínua e temporal da fase discreta.

### 3.1 Discretização espacial da fase contínua

Para aproximar numericamente os escoamentos é usual delimitar uma região do espaço onde ocorre o fenômeno. Essa região delimitada é normalmente chamada de domínio computacional. Para a discretização das variáveis no domínio, este é composto de uma malha e esta por sua vez de células, conforme apresentado na Figura 10. A malha pode apresentar diversas formas e padrões, mas neste trabalho considerou-se que ela é estruturada, uniforme e suas células quadradas (FORTUNA, 2012).

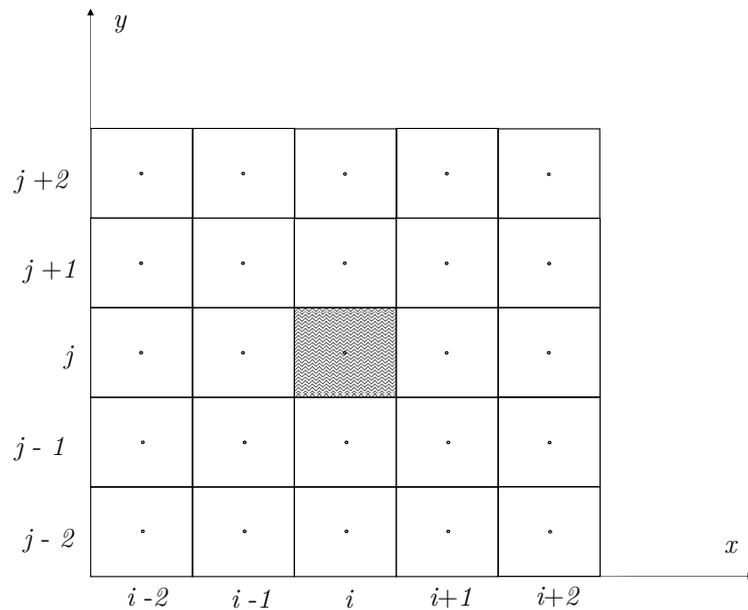


Figura 10 – Representação de uma malha computacional, onde o tamanho das células é dado por:  $\Delta x = x_i - x_{i-1}$  e  $\Delta y = y_j - y_{j-1}$ . Fonte: do autor.

No presente trabalho, a velocidade do escoamento é aproximada em cada uma das células da malha. Como a velocidade do escoamento influencia na velocidade das partículas é necessário avaliar a velocidade do escoamento na posição de cada partícula. Esta avaliação é feita por meio do acoplamento entre as fases contínua e discreta. O acoplamento entre as fases é feito por meio da interpolação usando uma aproximação do delta de Dirac. O

delta de Dirac ( $\delta$ ) pertence a uma classe mais geral de funções chamadas funcionais ou simplesmente distribuições. O delta de Dirac satisfaz as seguintes propriedades,

$$\begin{cases} \delta(x - x_p) = 0, \text{ se } x \neq x_p, \\ \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_p) dx = 1, \\ \delta(x - x_p) = \delta(x_p - x), \end{cases} \quad (20)$$

que não se enquadram na teoria de integração do cálculo convencional (BALAKRISNAN, 2003; KUSSE; WESTWIG, 2006).

No presente trabalho, a aproximação do delta de Dirac é bidimensional e é representada por,

$$\delta_h^2(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) = \delta_h(x - x_p)\delta_h(y - y_p), \quad (21)$$

sendo,

$$\delta_h(x - x_p) = \frac{1}{h}\phi\left(\frac{x - x_p}{h}\right), \quad (22)$$

onde,  $h$  é o comprimento da célula da malha euleriana ( $h = \Delta x = \Delta y$ ),  $\delta_h$  é a aproximação do delta de Dirac 1D e  $\phi$  é uma função aproximadora. A função aproximadora utilizada é apresentada no trabalho de Griffith e Peskin (2005) e é dada por,

$$\phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{8}(3 - 2|r| - \sqrt{1 + 4|r| - 4r^2}), & 0 \leq |r| \leq 1, \\ \frac{1}{8}(5 - 2|r| - \sqrt{-7 + 12|r| - 4r^2}), & 1 \leq |r| \leq 2, \\ 0, & |r| \geq 2, \end{cases} \quad (23)$$

sendo  $r = \frac{x - x_p}{h}$ . Logo, uma variável  $\psi$  definida na malha euleriana, interpolada para a posição da partícula  $p$  é,

$$\psi_p = \sum_{i,j} \psi_{ij} \delta_h^2(\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{x}_p) h^2, \quad (24)$$

nesse somatório, os índices  $i$  e  $j$  são das células pertencentes ao suporte de  $\phi(r)$ , que neste caso, é composto por 4 células em cada direção, conforme apresentado na Figura 11. O suporte é um conjunto de células da malha, delimitada pela própria aproximação do delta de Dirac para realizar a interpolação.

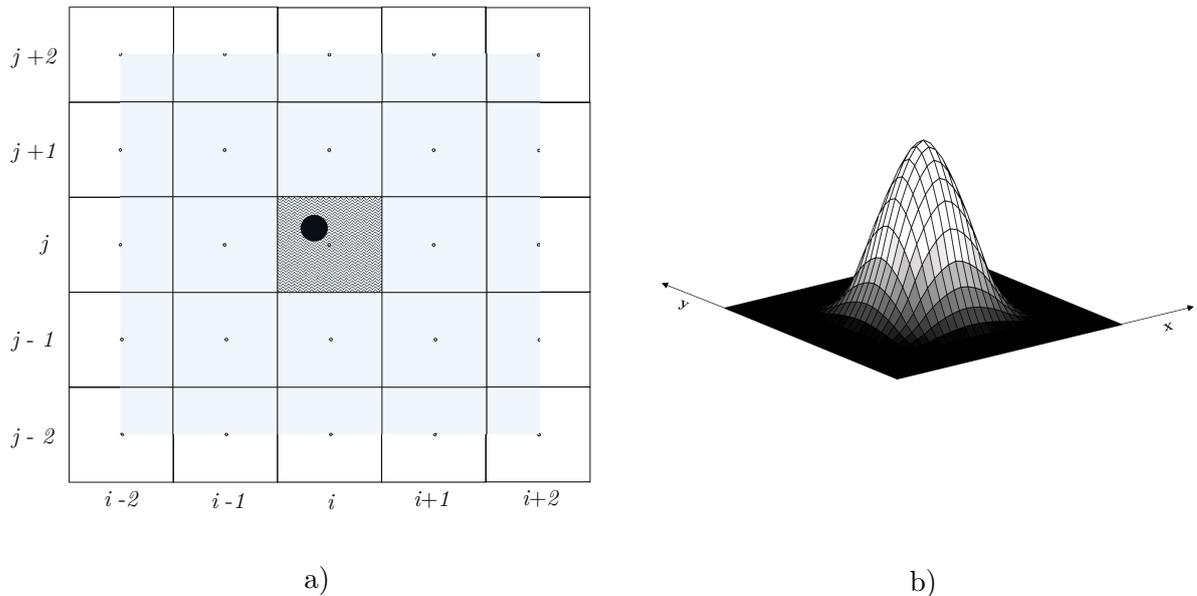


Figura 11 – Representação de a) uma malha computacional com o suporte de  $\phi(r)$  (zona sombreada em azul) e b) da aproximação do delta de Dirac. Fonte: do autor.

### 3.2 Discretização temporal da fase discreta

Para resolver numericamente o sistema de equações (32) utilizou-se o método de Runge-Kutta de segunda ordem (RK2). Esse método pertence à família de métodos de passo único, pois calcula-se a aproximação de uma variável  $z$  no instante  $t_{k+1}$  conhecendo-se apenas o valor da aproximação no instante imediatamente anterior  $t_k$  (BURDEN; FAIRES, 2010). Dado um problema de valor inicial (PVI),

$$\begin{cases} \frac{dz}{dt} = f(t, z), & t \in [t_0, t_f], \\ z(t_0) = z_0. \end{cases} \quad (25)$$

A solução numérica de 25 por meio do método RK2 pode ser escrita de forma geral,

$$\begin{cases} z_0 = z(t_0), \\ z_{k+1} = z_k + \Delta t \phi(t_k, z_k, \Delta t), \end{cases} \quad (26)$$

sendo  $z_o$  o valor da variável  $z$  no tempo  $t_o$  e  $\Delta t$  é o tamanho de passo no tempo, dado por  $\Delta t = (t_f - t_0)/N$ , sendo  $N$  o número de subintervalos. Assim,  $t_{k+1}$  é dado por  $t_{k+1} = t_k + \Delta t$ , com  $0 \leq k \leq N$  e  $z_k$  é a aproximação de  $z(t_k)$ . Finalmente,  $\phi(t_k, z_k, \Delta t)$  é uma função que depende do método escolhido. Neste caso, o método RK2 utilizado é dado por,

$$\phi(t_k, z_k, \Delta t) = \frac{1}{2}[f(t_k, z_k) + f(t_k + \Delta t, z_k + \Delta t f(t_k, z_k))]. \quad (27)$$

Salienta-se que o método RK2 é um método explícito, o que significa que não precisa-se resolver nenhum tipo de equação algébrica. A solução aproximada pode ser calculada apenas somando as parcelas do lado direito da equação em (26) (BURDEN; FAIRES, 2010).

A ordem de convergência do erro deste método é 2. Embora existam métodos de ordens maiores, a preferência se deu pelo fato da aproximação do delta de Dirac escolhida em (23) possuir a mesma ordem.

### 3.3 Verificação numérica dos métodos implementados

A verificação de um método numérico tem como objetivo determinar se um modelo matemático é resolvido adequadamente por meio de um método numérico. A verificação numérica é feita por meio da análise da ordem de convergência. Dessa forma foram verificados, computacionalmente, o método RK2 e a aproximação do delta de Dirac, que são de segunda ordem (BURDEN; FAIRES, 2010; GRIFFITH; PESKIN, 2005). As implementações dos métodos numéricos foram feitas na linguagem C.

Geralmente, a solução numérica de um método numérico com uma ordem de convergência  $q$ , admite uma expansão do erro global em potências de  $h$ , onde  $h$  pode representar  $\Delta t$  ou o tamanho de uma célula computacional. Com isso, se  $f_{ex}$  é a solução exata (que é o que procura-se idealmente) e  $f_{num}(h)$  é a solução numérica do método (a qual deveria de se aproximar dessa solução exata). Pode-se estimar a ordem empregando

tamanhos de passo diferentes, neste caso, diminuindo o tamanho de  $h$  em uma razão de 2, isto é,  $h, \frac{h}{2}, \frac{h}{4}, \dots$ . Para tal, tem-se  $f_{nm}(h), f_{nm}(\frac{h}{2}), f_{nm}(\frac{h}{4}), \dots$ . Para um método com ordem de convergência  $q$ , tem-se,

$$|f_{ex} - f_{nm}(h)| \approx h^q. \quad (28)$$

Dessa forma, para um  $h > 0$  suficientemente pequeno, tem-se,

$$\frac{|f_{ex} - f_{nm}(h)|}{|f_{ex} - f_{nm}(\frac{h}{2})|} \approx \frac{h^q}{h^q/2^q} = 2^q. \quad (29)$$

Assim, a estimativa para a ordem do método é dada por,

$$\log_2 \left( \frac{|f_{ex} - f_{nm}(h)|}{|f_{ex} - f_{nm}(\frac{h}{2})|} \right) \approx \bar{q}. \quad (30)$$

Mais detalhes em (STOER; BULIRSCH, 2002).

## 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Este capítulo apresenta a verificação numérica descritos no capítulo anterior. Para o teste de verificação numérica do método de RK2 apresentado em (26) - (27) aplicados às equações da posição da partícula descritas em (32), foram utilizadas as seguintes soluções manufaturadas,

$$\left\{ \begin{array}{l} x_p(t) = -\frac{1}{4\pi} \cos(2\pi t), \\ y_p(t) = -\frac{1}{4\pi} \sin(2\pi t), \\ u_p(t) = \frac{1}{2\pi} \sin(2\pi t), \\ v_p(t) = -\frac{1}{2\pi} \cos(2\pi t), \end{array} \right. \quad (31)$$

para o cálculo das posições e velocidades da partícula no tempo. Com a escolha das soluções manufaturadas o problema a ser resolvido é dado por,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dx_p}{dt} = \frac{1}{2\pi} \sin(2\pi t), \\ \frac{dy_p}{dt} = -\frac{1}{2\pi} \cos(2\pi t), \\ \frac{du_p}{dt} = \cos(2\pi t), \\ \frac{dv_p}{dt} = \sin(2\pi t). \end{array} \right. \quad (32)$$

Para analisar a ordem de convergência do método numérico utilizado, analisou-se o erro cometido em um instante do tempo  $t_f$ , sendo  $t_f = 0, 4$ , para distintos números de

subintervalos de integração, apresentados nas Tabelas 4 e 5.

Tabela 4 – Verificação numérica do método de Runge-Kutta de segunda ordem para o cálculo de  $x_p$  e  $y_p$ .

N	Erro $x_p$	Ordem	Erro $y_p$	Ordem
64	5,888879e-06	—	1,913413e-06	—
128	1,472191e-06	2,000028	4,783439e-07	2,000028
256	3,668641e-07	2,004647	1,211956e-07	1,980710
512	9,186415e-08	1,997672	3,009794e-08	2,009600
1024	2,300284e-08	1,997689	7,474078e-09	2,009697
2048	5,750708e-09	2,000001	1,868519e-09	2,000000

Fonte: do autor.

Na Tabela 4 observa-se que os erros no cálculo  $x_p$  e  $y_p$  convergem para zero a medida que aumentam-se os subintervalos avaliados (N) no período de tempo considerado. A ordem de convergência dos erros nos cálculos de  $x_p$  e  $y_p$  oscila ao redor de 2, conforme esperado.

Tabela 5 – Verificação numérica do método RK2 para o cálculo de  $u_p$  e  $v_p$ .

N	Erro $u_p$	Ordem	Erro $v_p$	Ordem
64	1,202233e-05	—	3,700092e-05	—
128	3,005524e-06	2,000028	9,250051e-06	2,000028
256	7,614940e-07	1,980712	2,305075e-06	2,004647
512	1,891110e-07	2,009600	5,771995e-07	1,997671
1024	4,696101e-08	2,009697	1,445311e-07	1,997690
2048	1.174025e-08	2,000000	3,613276e-08	2,000001

Fonte: do autor.

Na Tabela 5 observam-se resultados similares aos da Tabela 4, os erros no cálculo  $u_p$  e  $v_p$  convergem para zero a medida que aumentam-se os subintervalos avaliados (N) no período de tempo considerado, e a ordem de convergência dos erros também oscila ao redor de 2, como descrito na literatura.

Para o teste de verificação numérica da aproximação da interpolação por aproximação do delta de Dirac apresentado em (20) - (24) foram utilizadas as seguintes funções,

$$\begin{cases} u(x, y) = \cos(2\pi x) \sin(2\pi y), \\ v(x, y) = e^x y, \end{cases} \quad (33)$$

para representar o campo de velocidades do escoamento contínuo no cálculo da velocidade da partícula. Foi escolhido uma posição no domínio, de forma que esse não pertença à malha e a aproximação do delta de Dirac foi usada para verificar a interpolação.

Para analisar a ordem de convergência do método numérico foi utilizado uma malha computacional de  $[0, 1] \times [0, 1]$  e posição escolhida para a partícula foi:  $x_p = 0,7$  e  $y_p = 0,4$ . A análise se realizou para distintos passos de integração conforme apresentado na Tabela 6.

Tabela 6 – Verificação numérica da aproximação do delta de Dirac para o cálculo de  $U(x_p, y_p)$  e  $V(x_p, y_p)$ .

N	Erro $U(x_p, y_p)$	Ordem	Erro $V(x_p, y_p)$	Ordem
64	9,102598e-04	—	5,227715e-05	—
128	2,273601e-04	2,001299	1,245900e-05	2,068992
256	5,676707e-05	2,001853	3,268156e-06	1,930640
512	1,420241e-05	1,998918	7,788220e-07	2,069111
1024	3,552208e-06	1,999348	2,042450e-07	1,930992
2048	8,879147e-07	2,000223	4,867420e-08	2,069072

Fonte: do autor.

Na Tabela 6 também observam-se resultados similares aos das tabelas anteriores, os erros no cálculo  $U(x_p, y_p)$  e  $V(x_p, y_p)$  convergem para zero a medida que aumentam-se os subintervalos avaliados (N) no período de tempo considerado. Enquanto que a ordem de convergência dos erros oscila ao redor de 2, conforme esperado.

Ressalta-se que o presente trabalho é parte de uma série de trabalhos que foram concebidos no programa de Iniciação Científica desenvolvido no Laboratório de Computação Científica (LCC/UFSC) e registrado pela Pró-reitoria de Pesquisa (PROPESQ/UFSC). Nos anexos encontram-se os resumos apresentados sobre os trabalhos predecessores a este. Inicialmente, no Seminário de Iniciação Científica da UFSC em 2015 foi apresentado um trabalho no qual se estudaram os métodos de passo único explícitos para a resolução de EDOs. Dando continuidade a esse trabalho, no Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional (CNMAC) de 2016 foi apresentado uma verificação numérica para um modelo matemático do transporte de gotículas com evaporação. Por fim, na VI Escola de Combustão do presente ano foi apresentada uma verificação numérica de um modelo matemático do transporte de partículas, nele se introduziu o acoplamento das fases do escoamento por meio da interpolação por aproximação do delta de Dirac.

## 5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O estudo de processos físicos e químicos sempre tem sido associado à proposta de modelos teóricos e matemáticos, bem como ao desenvolvimento de métodos numéricos. A modelagem matemática possui grande importância nos processos de engenharia, pois fornece alternativas para resolver problemas e permite o entendimento das interações de diferentes fenômenos e parâmetros que formam parte de um processo.

No desenvolvimento do presente trabalho foi identificado que os modelos da abordagem Euleriana-Lagrangiana para retratar processos de conversão termoquímica, especialmente combustão, de biomassa em reatores de leito fluidizado são escassos, embora nos últimos anos venha crescendo o número de trabalhos que utilizam esse tipo de modelo. Outro ponto que vale a pena ser mencionado é que percebeu-se que os trabalhos que tentam simular a fluidodinâmica do leito com as reações químicas em um modelo para o processo da combustão em leito fluidizado também são difíceis de serem encontrados, o que pode ser devido à dificuldade de elencar esses dois tipos de fenômenos.

Por fim, este trabalho abre possibilidades para vários trabalhos futuros como:

- Estudo de metodologias para a verificação numérica do acoplamento do sistema de equações do modelo da dinâmica das partículas.
- Resolução numérica de um modelo matemático para o escoamento contínuo.
- Inclusão da variação de massa e de temperatura relacionadas ao processo da combustão de biomassa no modelo das partículas.

## REFERÊNCIAS

- BALAKRISNAN, V. All about dirac delta function. **Resonance**, Springer India, v. 8, n. 8, p. 48–58, 2003.
- BASU, P. **Combustion and gasification in fluidized beds**. 1. ed. Boca Raton, Estados Unidos: CRC Press, 2006. 496 p.
- BATISTELLA, L. **Avaliação das emissões gasosas geradas na combustão de lodo de esgoto sanitário em combustor de leito móvel**. 168 p. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Santa Catarina, 2015.
- BURDEN, R.; FAIRES, D. **Numerical analysis**. 9. ed. Boston: Cengage Learning, 2010. 872 p.
- CALEGARI, P. C. **Simulação computacional de escoamentos reativos de baixo número de Mach aplicando técnicas de refinamento adaptativo de malhas**. 146 p. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, São Paulo, São Paulo, 2012.
- CENTENO-GONZÁLEZ, F. O. et al. CFD modeling of combustion of sugarcane bagasse in an industrial boiler. **Fuel**, v. 193, p. 31–38, 2017.
- CURTIS, J. S.; WACHEM, B. van. Modeling particle-laden flows: a research outlook. **AIChE Journal**, v. 50, n. 11, p. 2638–2645, 2004.
- EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA - EPE. **Balanco energético 2017 (ano base 2016)**. Rio de Janeiro: Ministério de Minas e Energia, 2016. 296 p.
- FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. **Computational methods for fluid dynamics**. 3. ed. Nova York, Estados Unidos: Springer-Verlag, 2002. 431 p.
- FORTUNA, A. d. O. **Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos**. 2. ed. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2012. 552 p.
- GENG, Y.; CHE, D. An extended DEM–CFD model for char combustion in a bubbling fluidized bed combustor of inert sand. **Chemical engineering science**, v. 66, p. 207–219, 2011.
- GRAMMELIS, P.; KARAMPINIS, E.; NIKOLOPOULOS, A. Fluidized bed combustion of solid biomass for electricity and/or heat generation. In: **Solid biofuels for energy: a lower greenhouse gas alternative**. 1. ed. Londres, Reino Unido: Springer-Verlag, 2011. p. 242.
- GRIFFITH, B. E.; PESKIN, C. S. On the order of accuracy of the immersed boundary method: Higher order convergence rates for sufficiently smooth problems. **Journal of computational physics**, v. 208, p. 75–105, 2005.
- GUERRERO, J. C. O. **Modelagem da combustão de biomassa em leito utilizando a dinâmica dos fluidos computacional (CFD)**. 100 p. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Itajuba, Itajuba, Minas Gerais, 2015.

HOOMANS, B. P. B. et al. Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidised bed: a hard-sphere approach. **Chemical engineering science**, v. 51, n. 11, p. 99–118, 1996.

INTERNATIONAL ENERGY AGENCY - IEA. **World energy balances: overview**. Paris, França: IEA, 2017. 21 p.

JENKINS, B. et al. Combustion properties of biomass. **Fuel Processing Technology**, v. 58, p. 17–46, 1998.

JIANG, X. et al. Models for the combustion of single solid fuel particles in fluidized beds: A review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 68, p. 410–431, 2017.

KHAN, A. et al. Biomass combustion in fluidized bed boilers: potential problems and remedies. **Fuel Processing Technology**, v. 90, p. 21–50, 2009.

KLOSS, C. et al. comprehensive DEM-DPM-CFD simulations - model synthesis, experimental validation and scalability. In: **Seventh International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries**. Melbourne, Australia: CSIRO, 2009. p. 7.

KUSSE, B. R.; WESTWIG, E. A. **Mathematical physics applied mathematics for scientists and engineers**. 2. ed. New York: WILEY-VHC, 2006. 700 p.

LOHA, C. et al. Advances in mathematical modeling of fluidized bed gasification. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 40, p. 688–715, 2014.

LOO, S. van; KOPPEJAN, J. **The handbook of biomass combustion and co-firing**. 1. ed. Londres, Reino Unido: Earthscan, 2008. 465 p.

LU, G.; THIRD, J.; MÜLLER, C. Discrete element models for non-spherical particle systems: from theoretical developments to applications. **Chemical Engineering Science**, v. 127, p. 425–465, 2015.

LU, H.; BAXTER, L. L. Biomass combustion characteristics and implications for renewable energy. In: **Solid biofuels for energy: a lower greenhouse gas alternative**. 1. ed. Londres, Reino Unido: Springer-Verlag, 2011. p. 242.

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004. 453 p.

MASON, P. et al. Single particle flame-combustion studies on solid biomass fuels. **Fuel**, v. 151, p. 21–30, 2015.

MORAES, A. A. U. de. **Modelagem e simulação combustão em leito fluidizado de carvão mineral com alto teor de cinzas com dessulfuração por calcário**. 255 p. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, São Carlos, São Paulo, 2011.

NUSSBAUMER, T. Combustion and co-combustion of biomass: fundamentals, technologies, and primary measures for emission reduction. **Energy & Fuels**, v. 17, p. 1510–1521, 2003.

OKA, S. N. **Fluidized bed combustion**. 1. ed. Nova York, Estados Unidos: Marcel Dekker, Inc., 2004. 600 p.

- OUADI, M. et al. Thermo-catalytic reforming of municipal solid waste. **Waste Management**, v. 68, n. Supplement C, p. 198–206, 2017.
- PACIONI, T. R. **Gaseificação de biochar de bagaço de maçã de de borra de café com CO<sub>2</sub>: estudo cinético**. 134 p. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Santa Catarina, 2013.
- RANADE, V. V. **Computacional flow modeling for chemical reactor engineering**. 1. ed. Bath, Reino Unido: Academic Press, 2002. 474 p.
- RAVELLI, S.; PERDICHIZZI, A.; BARIGOZZI, G. Description, applications and numerical modelling of bubbling fluidized bed combustion in waste-to-energy plants. **Progress in energy and combustion science**, v. 34, p. 224–253, 2008.
- ROSAL, A. G. C. **Modelagem e simulação de um gaseificador de biomassa em leito fluidizado borbulhante para produção de energia**. 64 p. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Pernambuco, Recife, Pernambuco, 2008.
- SCALA, F.; SALATINO, P. Modelling fluidized bed combustion of high-volatile solid fuels. **Chemical Engineering Science**, v. 57, p. 1175 – 1196, 2002.
- SINGH, R. I.; BRINK, A.; HUPA, M. CFD modeling to study fluidized bed combustion and gasification. **Applied thermal engineering**, v. 52, p. 585–614, 2013.
- SOUZA-SANTOS, M. L. de. **Soild fuels combustion and gasification: modeling, simulation and equipment operation**. 1. ed. Nova York, Estados Unidos: Marcel Dekker, Inc., 2004. 463 p.
- STOER, J.; BULIRSCH, R. **Introduction to numerical analysis**. 2. ed. New York, Estados Unidos: Springer Verlag, 2002. 745 p.
- TEIXEIRA, E. R. **Propriedades de leito usados na combustão de biomassa em leito fluidizado**. 149 p. Dissertação (Mestrado) — Universidade do Aveiro, Aveiro, Portugal, 2010.
- U.S. ENERGY INFORMATION ADMINISTRATION - U.S. EIA. **International Energy Outlook Executive Summary**. Washington, DC, Estados Unidos: U.S. Department of Energy, 2017. 14 p.
- VERISSIMO, G. L. **Estudo computacional da gaseificação de bagaço da cana-de-açúcar em um reator de leito fluidizado**. 223 p. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2014.
- VIRMOND, E. **Utilização de resíduos agroindustriais como fonte alternativa de energia**. 265 p. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Santa Catarina, 2011.
- YANG, H. et al. In-depth investigation of biomass pyrolysis based on three major components: hemicellulose, cellulose and lignin. **Energy & fuels**, v. 20, p. 388–393, 2006.
- YANG, W. C. **Handbook of fluidization and fluid-particle systems**. 1. ed. Nova York, Estados Unidos: Marcel Dekker, Inc., 2003. 851 p.
- YANG, Y. B. et al. Effect of fuel properties on biomass combustion. Part II. Modelling approach—identification of the controlling factors. **Fuel**, v. 84, p. 2116–2130, 2005.

## **ANEXO A - TRABALHOS PREDECESSORES**

**Autor:** Paulo Cesar Correa Galeano

**Painel nº:** 272

**E-mail:** paulo\_correa19@hotmail.com

**Tipo de Bolsa:** Sem Bolsa

**Área do Conhecimento:** Ciências Exatas e da Terra

**Sub-área do Conhecimento:** Matemática Aplicada

**Instituição:** UFSC

**Orientador:** PRISCILA CARDOSO CALEGARI

**Depto:** CAMPUS ARARANGUÁ - CARA

**Centro:** CAMPUS DE ARARANGUÁ

**Laboratório:**

**Colaboradores:**

**Título:** Resolução numérica de equações diferenciais ordinárias

**Resumo:**

Inúmeros problemas que são encontrados na engenharia, biologia, economia, física, podem ser modelados por equações diferenciais ordinárias. O presente trabalho tem como objetivo estudar, analisar e aplicar metodologias numéricas na resolução de equações diferenciais ordinárias e sistemas de equações diferenciais ordinárias. Dentre os modelos matemáticos estudados, destacamos os modelos para problemas de crescimento populacional e o sistema de equações diferenciais que descreve o movimento de uma partícula. Os métodos numéricos empregados foram os da classe Runge-Kutta de primeira, segunda e quarta ordem de aproximação. Para a verificação numérica e validação dos métodos estudados realizaram-se testes de convergência numérica. Conforme esperado, o método de Runge-Kutta de quarta ordem obteve uma melhor aproximação em comparação aos outros métodos. Como próximo passo pretende-se aplicar os métodos numéricos verificados para resolver o problema de transporte de um conjunto finito de partículas, com o objetivo de analisar problemas de aplicação na área de dinâmica dos fluidos computacional.

**Palavras-chave:** análise numérica, equações diferenciais ordinárias, métodos de Runge-Kutta

**Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics**

---

## Verificação numérica de um modelo matemático para o transporte de gotículas com evaporação

Paulo Cesar Correa Galeano<sup>1</sup>

Laboratório de Computação Científica, UFSC, Araranguá, SC

Priscila Cardoso Calegari<sup>2</sup>

Departamento de Computação, UFSC, Araranguá, SC

### 1 Introdução

Um escoamento multifásico é constituído por duas ou mais fases com propriedades físicas distintas. Esse tipo de escoamento possui aplicações em diversas áreas, como conversão de energia, processamento de materiais e nas indústrias do petróleo, química e alimentícia. Os escoamentos multifásicos podem ser classificados em: gás-líquido, gás-sólido, líquido-sólido e trifásicos, como visto em [1, 3, 5]. O presente trabalho tem como interesse a investigação de um modelo matemático para um escoamento bifásico, gás-líquido, onde a fase líquida é composta por gotículas, por exemplo, um *spray*, como em [1–3]. Um modelo matemático para as gotículas (fase dispersa) é descrito e o método de Runge-Kutta de segunda ordem é utilizado para a verificação numérica do transporte e da evaporação das gotículas em um meio gasoso, conforme [1, 4]. A formulação euleriana-lagrangiana é utilizada para as fases contínua (gás) e dispersa, respectivamente, como visto em [2]. Este trabalho é considerado um passo inicial para o estudo da dinâmica de um *spray* de etanol em uma câmara de combustão.

### 2 Modelo matemático

Um modelo matemático para a posição e a evaporação das gotículas, em um escoamento bidimensional, é dado pelas equações diferenciais ordinárias,

$$\frac{dx_p}{dt} = u_p, \quad (1)$$

$$\frac{dy_p}{dt} = v_p, \quad (2)$$

$$\frac{dm_p}{dt} = -\frac{1}{\tau_m} m_p, \quad (3)$$

---

<sup>1</sup>paulo.correa@grad.ufsc.br

<sup>2</sup>priscila.calegari@ufsc.br

sendo  $(x_p, y_p)$  a posição da gotícula  $p$ ,  $u_p$  e  $v_p$  as componentes da velocidade,  $m_p$  a massa e  $\tau_m$  é o tempo de vida da gotícula. O modelo matemático simplificado (1)-(3) assume que:  $u_p$  e  $v_p$  são iguais as componentes da velocidade do escoamento (fase contínua), as gotículas são esféricas, dessa forma,  $m_p = \frac{\pi d_p^3 \rho_d}{6}$ , onde  $d_p$  é o diâmetro da gotícula e  $\rho_d$  a massa específica da fase dispersa, conforme [1,3]. O campo de velocidade da fase contínua é imposto analiticamente e a interação ocorre somente no sentido gás-líquido, sem o efeito recíproco. A velocidade da gotícula  $p$ ,  $\mathbf{u}_p = (u_p, v_p)$ , é obtida a partir da velocidade do escoamento, por meio de uma interpolação para a posição da gotícula. Considera-se ainda que todas as gotículas tenham a temperatura de saturação, de forma que não há variação de temperatura. Assim, a fase contínua possui uma temperatura constante e maior que a temperatura de saturação das gotículas. Despreza-se as interações entre as gotículas.

### 3 Considerações finais

A verificação numérica da metodologia aplicada ao modelo matemático proposto apresenta ordem de convergência 2, conforme o esperado. Apesar de simplificado o modelo matemático implementado, para a evaporação das gotículas, é considerado importante como um primeiro passo da investigação. A partir deste modelo espera-se estender a metodologia para problemas mais complexos que incluam, por exemplo, a combustão.

### Agradecimentos

Os autores agradecem a direção e a comissão de pesquisa do Campus Araranguá.

### Referências

- [1] S. V. Apte, K. Madesh, P. Moin, and J. C. Oefelein. Large-eddy simulation of swirling particle-laden flow in coaxial-jet combustor. *International Journal of Multiphase flow*, 29 1311-1331 (2003).
- [2] P. C. Calegari, Simulação computacional de escoamentos reativos com baixo número de Mach aplicando técnicas de refinamento adaptativo de malhas, Tese de Doutorado em Matemática Aplicada, USP, (2012).
- [3] C. Crowe, J. D. Schwarzkopf, M. Sommerfeld, and Y. Tsuji. *Multiphase flows with droplets and particles*. CRC Press, New York, 1998.
- [4] P. Khare, S. Wang and V. Yang. Modeling of finite-size droplets and particles in multiphase flows, *Chinese Journal of Aerodynamics*, 28 No.4 974-982 (2015).
- [5] E. E. Paladino. Estudo do Escoamento Multifásico em Medidores de Vazão do tipo Pressão Diferencial. Tese de Doutorado em Engenharia Mecânica, UFSC, (2005).

## VERIFICAÇÃO NUMÉRICA DO TRANSPORTE DE PARTÍCULAS

**Paulo Cesar Correa Galeano, paulo.correa@grad.ufsc.br**

Laboratório de Computação Científica, UFSC, Araranguá, SC

**Priscila Cardoso Calegari, priscila.calegari@ufsc.br**

Departamento de Computação, UFSC, Araranguá, SC

**Abstract.** Um escoamento multifásico é constituído por duas ou mais fases com propriedades físicas distintas. Esse tipo de escoamento possui aplicações em diversas áreas, como conversão de energia, processamento de materiais e nas indústrias do petróleo, química e alimentícia, como visto em [1]. Existem diversos problemas de aplicação que envolvem o transporte de partículas, como a combustão de biomassa e *sprays* de etanol e a emissão de fuligem. O presente trabalho tem como interesse a investigação de modelos matemáticos para um escoamento bifásico, gás-líquido ou gás-sólido, onde a fase sólida (ou líquida) é composta por partículas. Um modelo matemático bidimensional para as partículas (fase dispersa) é descrito por meio de um sistema de equações diferenciais ordinárias. O método de Runge-Kutta de segunda ordem é utilizado para a verificação numérica do transporte das partículas em um meio gasoso. A formulação euleriana-lagrangiana é utilizada para as fases contínua (gás) e dispersa, respectivamente. O campo de velocidade do escoamento é imposto. O acoplamento entre as fases (em um sentido) é feito por meio da interpolação usando uma aproximação do delta de Dirac. A verificação numérica da metodologia aplicada ao modelo matemático proposto, apresenta ordem de convergência 2, conforme o esperado. Apesar de simplificado o modelo matemático implementado é considerado importante como um primeiro passo da investigação. Já foi investigada a verificação de um modelo matemático que incluía a evaporação de gotículas. Os próximos passos da investigação incluem a análise de distribuições de probabilidade para as posições e tamanhos (iniciais) das partículas visando a extensão da metodologia para problemas que envolvam a combustão. Dessa forma, pretende-se analisar alguns efeitos, como o tamanho das partículas, no processo de combustão.

**Keywords:** *Escoamento bifásico, Transporte de partículas, Modelo Euleriano-Lagrangiano.*

[1] C. Crowe, J. D. Schwarzkopf, M. Sommerfeld, and Y. Tsuji. Multiphase flows with droplets and particles. CRC Press, New York, 1998.

### RESPONSIBILITY NOTICE

The authors are the only responsible for the printed material included in this chapter.