



## SIMULAÇÃO ACOPLADA CFD-DEM DE REATORES NUCLEARES DE LEITO FLUIDIZADO

Lucilla Coelho de Almeida

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Nuclear.

Orientador: Su Jian

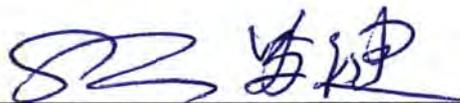
Rio de Janeiro  
Março de 2018

SIMULAÇÃO ACOPLADA CFD-DEM DE REATORES NUCLEARES DE  
LEITO FLUIDIZADO

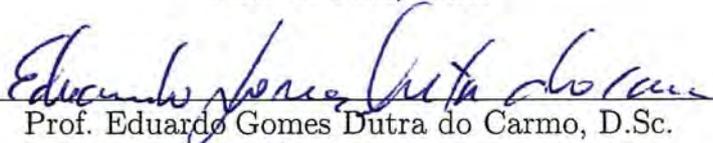
Lucilla Coelho de Almeida

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ  
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE)  
DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS  
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR  
EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR.

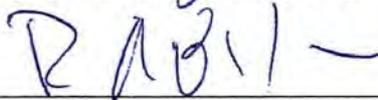
Examinada por:



Prof. Su Jian, D.Sc.



Prof. Eduardo Gomes Dutra do Carmo, D.Sc.



Dr. Paulo Augusto Berquo de Sampaio, Ph.D.



Prof. Leonardo Santos de Brito Alves, Ph.D.



Profa. Flávia Schwarz Franceschini Zinani, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL  
MARÇO DE 2018

Almeida, Lucilla Coelho de

Simulação Acoplada CFD-DEM de Reatores Nucleares de Leito Fluidizado/Lucilla Coelho de Almeida. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2018.

XVI, 141 p.: il.; 29,7cm.

Orientador: Su Jian

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Nuclear, 2018.

Referências Bibliográficas: p. 132 – 141.

1. CFD. 2. DEM. 3. Reatores nucleares. 4. Leitos fluidizados. 5. Transferência de calor. I. Jian, Su. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

*Aos meus pais Elair e Milton (in  
memoriam) e Maria José e  
Antônio.*

# Agradecimentos

Em primeiro lugar, agradeço ao Prof. Su Jian, pela confiança, dedicação e paciência ao longo desses cinco anos e encorajamento para que este trabalho fosse concluído.

À Liliane Rocha, pelo carinho, pelas inúmeras vezes que me lembrou de inscrições e por tudo que conseguiu resolver remotamente.

À ESSS, pela confiança em mim depositada. Aos colegas do grupo de desenvolvimento do Rocky, em especial ao Damiani e Tiago Nóbrega, pelo suporte constante e por transformarem os momentos difíceis em motivos para boas risadas. Aos colegas Karina Fazolin e Gabriel Marcílio pelas bem-sucedidas tentativas de sabotar meus sábados de trabalho.

Aos meus tios-padrinhos-pais, Antônio e Maria José, meus primos-irmãos Rodrigo e Diego, e meus sogros João Américo e Nilva por todo carinho e torcida.

Por fim, agradeço ao João Aguirre, pela parceria ao longo desses muitos anos trabalhando juntos e pelo apoio incondicional para o desenvolvimento deste trabalho. Sem seu apoio certamente não teria conseguido.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

## SIMULAÇÃO ACOPLADA CFD-DEM DE REATORES NUCLEARES DE LEITO FLUIDIZADO

Lucilla Coelho de Almeida

Março/2018

Orientador: Su Jian

Programa: Engenharia Nuclear

Dentre as vantagens dos reatores nucleares do tipo leito fluidizado, a transferência de calor e mistura aprimoradas, a vazão do fluido refrigerante como um mecanismo de controle adicional e a possibilidade de remover o combustível do núcleo por gravidade no caso de um acidente se destacam. A modelagem acurada das partículas e do fluido é necessária para avaliar de forma confiável a eficiência termo-hidráulica e a margem de segurança desses reatores. Este trabalho apresenta um acoplamento CFD-DEM usando uma formulação de condução de calor melhorada para partículas esféricas. As partículas são tratadas como uma fase discreta, seguindo a abordagem DEM, enquanto o fluido é tratado como uma fase contínua, descrito pelas equações de Navier-Stokes promediadas no volume da célula. Em vez de aproximar a temperatura da superfície pela temperatura média da partícula como na abordagem de parâmetros concentrados clássica, desenvolveu-se um modelo aprimorado que relaciona a temperatura média da partícula com a temperatura e o fluxo de calor na superfície usando aproximações do tipo Hermite para integrais. Casos simples foram utilizados para validar a metodologia de acoplamento proposta. O método foi então aplicado à simulação de um leito fluidizado borbulhante do tipo Geldart D. Os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais de pressão e velocidade, mostrando boa concordância. Os resultados de temperatura mostram que a suposição da temperatura uniforme pode influenciar o cálculo da transferência de calor entre as partículas e, portanto, prever temperaturas menores do que as reais no leito.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

## CFD-DEM COUPLED SIMULATION OF FLUIDIZED BED NUCLEAR REACTORS

Lucilla Coelho de Almeida

March/2018

Advisor: Su Jian

Department: Nuclear Engineering

Amongst the advantages of fluidized bed nuclear reactors, the improved heat transfer and mixing, the adjustment of the refrigerant flow rate as an extra control mechanism and the possibility of removing the fuel by gravity from the movable core in the event of an accident stand out. Accurate modelling of the particles and the refrigerant behavior is required to reliably evaluate the thermo-hydraulic efficiency and margin of safety of these reactors. This work presents a CFD-DEM coupling approach using an improved heat conduction formulation for spherical particles. In this approach, particles are treated as a discrete phase following the DEM approach, while the fluid is treated as a continuous phase, described by the volume averaged Navier-Stokes equations. Instead of approximating the surface temperature by the average temperature of the particle through classical lumped approach, an improved lumped model was developed, relating the surface to particle average temperatures and surface heat flux by Hermite-type approximations for integrals. Simple cases were used to validate the proposed coupling methodology and their results compared against analytical or empirical results. Then, the proposed method was applied to the simulation of a Geldart D bubbling fluidized bed. The numerical results obtained using the classical and improved formulations are compared with experimental pressure and velocity data, showing good agreement. The temperature results show that the uniform particle temperature assumption can influence the heat transfer calculation, predicting smaller bed temperatures than obtained in reality.

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>xi</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xv</b>
<b>Lista de Abreviaturas</b>	<b>xvi</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Contextualização . . . . .	1
1.2 Motivação . . . . .	2
1.3 Objetivos e Originalidade . . . . .	2
1.4 Organização do texto . . . . .	3
<b>2 Revisão Bibliográfica</b>	<b>4</b>
2.1 Leitos fluidizados . . . . .	4
2.1.1 Regimes de fluidização . . . . .	5
2.1.2 Classificação das partículas . . . . .	7
2.1.3 Previsão do regime de fluidização . . . . .	8
2.1.4 Perda de carga no leito . . . . .	10
2.2 Reatores nucleares do tipo leito fluidizado . . . . .	10
2.2.1 Vantagens de um reator de leito fluidizado . . . . .	11
2.2.2 Desvantagens dos reatores nucleares de leito fluidizado . . . . .	13
2.2.3 Histórico do desenvolvimento dos reatores de leito fluidizado . . . . .	14
2.3 Modelagem de leitos fluidizados . . . . .	24
2.3.1 Simulação de leitos fluidizados usando o acoplamento DEM-CFD . . . . .	27
2.4 Modelo de parâmetros concentrados clássicos e aprimorados . . . . .	32
2.5 Simulação de reatores nucleares de leito fluidizado . . . . .	32
<b>3 Formulação Matemática</b>	<b>34</b>
3.1 Modelagem da fase discreta . . . . .	34
3.1.1 Forças de contato . . . . .	34
3.1.2 Cálculo da força de interação com o fluido . . . . .	37

3.1.3	Leis de arrasto implementadas . . . . .	37
3.1.4	Balanco de energia na partícula . . . . .	42
3.1.5	Formulação aprimorada para o cálculo da transferência de calor entre o fluido e a partícula . . . . .	46
3.2	Modelagem das fases fluidas . . . . .	52
<b>4</b>	<b>Metodologia Computacional</b>	<b>54</b>
4.1	Solução da fase fluida . . . . .	54
4.1.1	Método de solução . . . . .	54
4.1.2	Transferência semi-implícita dos termos fontes . . . . .	56
4.1.3	Redistribuição da fração volumétrica e termos fontes . . . . .	57
4.2	Solução da fase particulada . . . . .	59
4.2.1	Cálculo do passo de tempo . . . . .	59
4.2.2	Detecção e cálculo dos contatos . . . . .	59
4.2.3	Sequência de cálculos no solver DEM . . . . .	60
4.3	Algoritmo do acoplamento . . . . .	62
<b>5</b>	<b>Verificação do Acoplamento Proposto</b>	<b>64</b>
5.1	Caso teste 1 - Partícula em queda livre . . . . .	64
5.1.1	Solução de referência . . . . .	64
5.1.2	Simulação computacional . . . . .	65
5.1.3	Resultados . . . . .	66
5.2	Caso teste 2 - Partícula em queda livre em meio bifásico . . . . .	68
5.2.1	Solução de referência . . . . .	68
5.2.2	Simulação computacional . . . . .	68
5.2.3	Resultados . . . . .	69
5.3	Caso teste 3 - Resfriamento transiente de um esfera . . . . .	71
5.3.1	Solução analítica . . . . .	71
5.3.2	Simulação computacional . . . . .	72
5.3.3	Resultados . . . . .	72
5.4	Caso teste 4 - Resfriamento transiente de um esfera com geração interna de energia . . . . .	74
5.4.1	Solução analítica . . . . .	74
5.4.2	Simulação computacional . . . . .	75
5.4.3	Resultados . . . . .	75
5.5	Caso teste 5 - Perda de carga em um leito fixo . . . . .	78
5.5.1	Solução de referência - Correlação empírica . . . . .	78
5.5.2	Simulação . . . . .	78
5.5.3	Resultados . . . . .	80
5.6	Caso teste 6 - Aquecimento de um leito fixo por convecção . . . . .	83

5.6.1	Solução analítica . . . . .	83
5.6.2	Resultados . . . . .	85
<b>6</b>	<b>Simulação do Leito Fluidizado</b>	<b>90</b>
6.1	Definição do caso a ser estudado . . . . .	90
6.2	O leito fluidizado escolhido . . . . .	91
6.2.1	Aparato experimental . . . . .	91
6.3	Definição da simulação . . . . .	93
6.3.1	Domínio computacional e discretização . . . . .	93
6.3.2	Condições iniciais e de contorno . . . . .	94
6.3.3	Os casos analisados . . . . .	95
6.3.4	Modelagem numérica . . . . .	97
6.4	Resultados . . . . .	97
6.4.1	Dinâmica do leito . . . . .	97
6.4.2	Dinâmica das bolhas . . . . .	100
6.4.3	Altura do leito . . . . .	104
6.4.4	Perda de carga . . . . .	105
6.4.5	Distribuição da fase sólida . . . . .	109
6.4.6	Distribuição de velocidade da fase sólida . . . . .	109
6.4.7	Análise da temperatura das partículas . . . . .	118
6.4.8	Análise da temperatura do gás . . . . .	125
<b>7</b>	<b>Conclusões e Sugestões</b>	<b>128</b>
7.1	Conclusões . . . . .	128
7.2	Sugestões para trabalhos futuros . . . . .	129
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>132</b>

# Lista de Figuras

2.1	Regimes de escoamento em leitos fluidizados. . . . .	5
2.2	Desenho esquemático de um leito de jorro. . . . .	7
2.3	Mapa de classificação de partículas de Geldart. . . . .	7
2.4	Mapa de classificação de regimes para leitos fluidizados gás-sólidos. . . . .	9
2.5	Diagrama de perda de carga versus velocidade em um leito fluidizado. . . . .	10
2.6	Visão esquemática de um reator de leito fluidizado sob condição de empacotamento e sob estado fluidizado. . . . .	11
2.7	Fatores de multiplicação infinitos e efetivos de um reator como função da porosidade. . . . .	13
2.8	Desenho esquemático do reator nuclear de leito fixo de Sefidvash. . . . .	15
2.9	Desenho esquemático do núcleo do reator nuclear de leito fixo. . . . .	19
2.10	Percurso do fluido refrigerante no reator nuclear de leito fixo. . . . .	19
2.11	Ilustração da cavidade no interior dos refletores do reator fluidizado de Kloosterman. . . . .	21
2.12	Fatores de multiplicação efetivos de um reator como função altura fluidizada do leito. . . . .	22
2.13	Esquema de um reator nuclear do tipo leito de jorro. . . . .	24
2.14	Representação gráfica das diferentes estratégias de modelagem de leitos fluidizados. . . . .	27
3.1	Decomposição da força de contato durante a colisão. . . . .	35
3.2	Curva típica de força normal contra deformação para o modelo de histerese linear. . . . .	36
3.3	Coefficiente de arrasto previsto pela correlação de Schiller & Naumann modificada . . . . .	39
3.4	Coefficiente de arrasto previsto pelas correlações implementadas para $\alpha_f = 0.4$ para diferentes $Re_p$ . . . . .	40
3.5	Coefficiente de arrasto para $Re_p = 1000$ e diferentes valores de $\alpha_f$ . . . . .	41
3.6	Número de Nusselt para uma partícula esférica sob diferentes números de Reynolds. . . . .	46

# Lista de Tabelas

5.1	Parâmetros do caso teste 1. . . . .	66
5.2	Parâmetros do caso teste 2. . . . .	68
5.3	Parâmetros do caso teste 3. . . . .	73
5.4	Parâmetros do caso teste 4. . . . .	76
5.5	Parâmetros do caso teste 5. . . . .	79
5.6	Parâmetros do caso teste 6. . . . .	83
6.1	Velocidade superficial do ar na entrada. . . . .	92
6.2	Propriedades adotadas nas simulações. . . . .	96
6.3	Casos simulados. . . . .	96

3.7	Número de Nusselt para um leito fixo de partículas esféricas usando a correlação de Gunn e dados experimentais. . . . .	47
4.1	Super-célula para redistribuição dos valores de fração volumétrica e demais termos fontes. . . . .	58
4.2	Representação do processo de redistribuição entre células . . . . .	58
4.3	Diagrama esquemático do método de detecção de contatos utilizado. . . . .	60
4.4	Algoritmo do acoplamento proposto. . . . .	63
5.1	Partícula em queda livre em um meio infinito. . . . .	64
5.2	Simulação de uma partícula em queda em um meio infinito. . . . .	66
5.3	Velocidade da partícula em queda em um meio infinito. . . . .	67
5.4	Deslocamento da partícula em queda em um meio infinito. . . . .	67
5.5	Simulação de uma partícula em queda em um domínio bifásico. . . . .	69
5.6	Velocidade da partícula em queda em um meio infinito bifásico. . . . .	70
5.7	Deslocamento da partícula em queda em um meio infinito bifásico. . . . .	70
5.8	Comparação entre as temperaturas média e superficial para uma esfera sólida submetida a convecção. . . . .	72
5.9	Comparação da temperatura média de uma esfera sólida submetida a convecção usando a formulação padrão e as formulações aprimoradas $H_{(2,0)}$ e $H_{(2,1)}$ . . . . .	73
5.10	Comparação entre as temperaturas média e superficial para uma esfera sólida com geração interna de calor submetida a convecção. . . . .	76
5.11	Comparação da temperatura média de uma esfera sólida com geração interna de calor submetida a convecção usando a formulação padrão e a formulação aprimorada. . . . .	77
5.12	Leito fixo de partículas utilizado no caso teste 5. . . . .	79
5.13	Evolução da pressão, fração de vazio e velocidade da água ao longo de uma linha central no domínio obtidas através da simulação e as estimadas utilizando a correlação de Ergun. . . . .	81
5.14	Regressão linear da pressão na região do leito fixo. . . . .	82
5.15	Evolução da temperatura do líquido em um leito fixo - Biot igual a 0,1. . . . .	86
5.16	Evolução da temperatura das partículas em um leito fixo - Biot igual a 0,1. . . . .	87
5.17	Evolução da temperatura do líquido em um leito fixo com partículas frias que são aquecidas pela passagem de um fluido quente para diferentes números de Biot usando a formulação aprimorada. . . . .	88
5.18	Evolução da temperatura das partículas que são aquecidas pela passagem de um fluido quente em um leito fixo para diferentes números de Biot usando a formulação aprimorada. . . . .	89

6.1	(a) Aparato experimental do SSCP-I e (b) Pontos de tomada de pressão - Figuras obtidas em (NETL SMALL SCALE PROBLEM I, 2018). . . . .	92
6.2	Pontos de medição de pressão. . . . .	93
6.3	Região de medição de velocidade das partículas por velocimetria de imagem. . . . .	93
6.4	(a) Domínio numérico, (b) Malha utilizada, (c) Leito inicial de partículas . . . . .	94
6.5	Velocidade do gás na entrada adimensionalizada pela velocidade final em cada caso estudado. . . . .	95
6.6	Dinâmica do leito para o caso 1. . . . .	99
6.7	Isosuperfícies de fração volumétrica de sólidos para o caso 1. . . . .	101
6.8	Isosuperfícies de fração volumétrica de sólidos para o caso 2. . . . .	102
6.9	Isosuperfícies de fração volumétrica de sólidos para o caso 3. . . . .	103
6.10	Altura do leito para os casos 1, 2 e 3. . . . .	104
6.11	Comparação da perda de carga obtida na simulação com a experimental para o caso 1. . . . .	105
6.12	Comparação da perda de carga obtida na simulação com a experimental para o caso 2. . . . .	106
6.13	Comparação da perda de carga obtida na simulação com a experimental para o caso 3. . . . .	106
6.14	Comparação entre a perda de carga média no leito obtida numericamente com resultados experimentais. . . . .	107
6.15	Comparação entre a perda de carga no leito para os casos 1 e 4. . . . .	108
6.16	Comparação entre a perda de carga média no leito para os casos 1 e 4. . . . .	108
6.17	Fração volumétrica média das partículas em um plano central para o caso 1. . . . .	109
6.18	Velocidade das partículas na região central para o caso 1. . . . .	110
6.19	Velocidade vertical média das partículas em um plano central para o caso 1. . . . .	111
6.20	Velocidade horizontal média das partículas em um plano central para o caso 1. . . . .	111
6.21	Velocidade y média das partículas em um plano central para o caso 1. . . . .	112
6.22	Velocidade das partículas na região central para o caso 1. . . . .	113
6.23	Velocidade vertical média das partículas para cada velocidade de gás estudada. . . . .	113
6.24	Velocidade horizontal média das partículas para cada velocidade de gás estudada. . . . .	114

6.25	Comparação dos perfis de velocidade vertical para os casos 1, 2 e 3 com os resultados experimentais. . . . .	116
6.26	Comparação dos perfis de velocidade horizontal para os casos 1, 2 e 3 com os resultados experimentais. . . . .	117
6.27	Temperatura das partículas no caso 4. . . . .	119
6.28	Temperatura das partículas no caso 6. . . . .	120
6.29	Comparação entre a temperatura média no leito sem geração de energia usando as formulações padrão (caso 1) e aprimorada (caso 4). . .	121
6.30	Comparação entre a temperatura média no leito com geração de energia usando as formulações padrão (caso 5) e aprimorada (caso 6). . .	122
6.31	Comparação entre as temperaturas mínima e máxima no leito sem geração de energia usando as formulações padrão (caso 1) e aprimorada (caso 4). . . . .	122
6.32	Comparação entre as temperaturas mínima e máxima no leito com geração de energia usando as formulações padrão (caso 5) e aprimorada (caso 6). . . . .	123
6.33	Densidade de probabilidade de temperatura usando as formulações padrão (caso 1) e aprimorada (caso 4) no leito sem geração de energia.124	
6.34	Densidade de probabilidade de temperatura usando as formulações padrão (caso 5) e aprimorada (caso 6) no leito com geração de energia.124	
6.35	Temperatura média do fluido na saída para os casos 1, 4, 5 e 6. . . .	125
6.36	Temperatura média do fluido na saída assim como um ajuste linear das temperaturas para os casos 1 e 4. . . . .	126
6.37	Temperatura média do fluido na saída assim como um ajuste linear das temperaturas para os casos 5 e 6. . . . .	127

# Lista de Abreviaturas

BWR	Boiling Water Reactors, p. 2
CFD	Computational Fluid Dynamics, p. 2
DEM	Discrete Element Method, p. 2
DNS	Direct Numerical Simulation, p. 26
HTGR	High Temperature Gas-Cooled Reactors, p. 11
LB	Lattice-Boltzmann, p. 26
LOCA	Loss-of-coolant accident, p. 2
LWR	Light-water Reactors, p. 1
NETL	National Energy Technology Laboratory, p. 91
PC-SIMPLE	Phase Coupled SIMPLE, p. 54
PWR	Pressurized Water Reactors, p. 2
QUICK	Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics, p. 55
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations, p. 55
SSCP-I	Small Scale Challenge Problem, p. 91
TFM	Two Fluid Model, p. 25
TRISO	Tristructural-isotropic, p. 14
UDF	User-defined function, p. 54
UFRGS	Universidade Federal do Rio Grande do Sul, p. 14

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Contextualização

A demanda por energia cresce conforme a população mundial aumenta de forma exponencial. A contribuição de fontes de energias renováveis, por outro lado aumenta de forma lenta. Neste cenário, o papel da energia nuclear se mostra essencial no futuro. A fim de implementar com êxito as usinas nucleares num futuro próximo, os principais desafios a serem superados estão relacionados à segurança, economia, proliferação e resíduos. Diversas propostas para lidar com estes desafios foram feitas ao longo dos anos.

Reatores nucleares por fissão podem ser classificados em três categorias, de acordo com SEFIDVASH (1996): sistemas evolucionários, projetos inovadores e conceitos emergentes. O design evolucionário compreende o desenvolvimento gradual e a implementação de melhorias nas usinas nucleares em um futuro a curto prazo com base nos resultados de anos de operação. Os projetos inovadores enfatizam a concepção e exploração de características ligadas ao aprimoramento da segurança da planta, como resfriamento passivo e eliminação de potenciais erros operacionais. Já os reatores de conceitos emergentes tem como objetivo, além da segurança inerente e resfriamento passivo do reator, tentar resolver os problemas da parte final do ciclo dos combustíveis.

Os núcleos dos reatores podem ser classificados em rígidos ou móveis. Os núcleos móveis são aqueles em que o combustível pode ser removido facilmente do núcleo por gravidade. Visto que os principais aspectos de segurança de reatores de água leve (LWR - Light-water Reactors) estão relacionados à habilidade de remover o calor residual do núcleo do reator (SEFIDVASH, 1996), o uso de reatores de núcleo móvel se mostra extremamente vantajoso.

Um dos reatores inovadores que têm ganho atenção dos pesquisadores são os reatores modulares pequenos, devido a sua flexibilidade para projetar e construir

a planta, a facilidade de operação e manutenção, a competitividade econômica e a viabilidade de ser implantado próximo a áreas industriais ou populadas (AGUNG *et al.*, 2006).

Dentre os conceitos propostos para reatores modulares com núcleo móvel está o de reator nuclear de leito fluidizado. Leitões fluidizados possuem diversas características que são vantajosas para um reator nuclear, como distribuição uniforme da temperatura devido a mistura, altas taxas de transferência de calor entre refrigerante e combustível e sua viabilidade de construção e operação tanto em grandes quanto pequenas escalas.

## 1.2 Motivação

Diversos projetos conceituais de reatores nucleares do tipo leito fluidizado tem sido propostos devido às suas muitas vantagens sobre reatores nucleares convencionais como os reatores a água pressurizada (PWR - Pressurized Water Reactors) e os reatores de água em ebulição (BWR - Boiling Water Reactors). Dentre suas características, a transferência de calor e mistura aprimoradas permitem uma distribuição de temperatura mais uniforme, reduzindo o risco de pontos quentes e temperatura excessiva do combustível. Ademais, a relação entre a altura do leito e a neutrônica do reator transforma a regulação da vazão do fluido refrigerante em um mecanismo de controle. Além disso, a possibilidade de remover o combustível por gravidade do núcleo móvel no caso de um acidente do tipo de perda de refrigeração (LOCA - Loss-of-coolant accident) aumenta a sua segurança.

A termo-hidráulica desses reatores nucleares de leito fluidizado está relacionada com a porosidade do leito, que por sua vez está ligada a vazão do fluido refrigerante. Sendo assim, a modelagem acurada das partículas e do fluido refrigerante é necessária para avaliar de forma confiável a eficiência termo-hidráulica e a margem de segurança de um reator de leito fluidizado.

## 1.3 Objetivos e Originalidade

O objetivo deste trabalho é desenvolver uma metodologia para simulação de reatores nucleares do tipo leito fluidizado que possa ser aplicada como ferramenta de projeto e avaliação de reatores conceituais. Para tal, o acoplamento entre o método de elementos discretos (DEM - Discrete Element Method) com a fluidodinâmica computacional (CFD - Computational Fluid Dynamics) usando uma formulação de condução de calor melhorada para partículas esféricas foi implementado.

Em vez de aproximar a temperatura da superfície pela temperatura média da partícula como na abordagem de parâmetros concentrados clássica, desenvolveu-

se um modelo aprimorado que relaciona a temperatura média da partícula com a temperatura e o fluxo de calor na superfície usando aproximações do tipo Hermite para integrais.

Para validação da metodologia de acoplamento, casos simples foram utilizados e os resultados numéricos confrontados com soluções analíticas ou correlações empíricas.

O método foi então aplicado à simulação de um leito fluidizado com partículas do tipo Geldart D. Os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais de pressão e velocidade, mostrando boa concordância. Os resultados de temperatura mostram que a suposição da temperatura uniforme pode influenciar o cálculo da transferência de calor entre as partículas e, portanto, prever temperaturas menores do leito.

## 1.4 Organização do texto

O Capítulo 2 apresenta uma breve revisão bibliográfica sobre leitos fluidizados e as características de seus regimes de escoamento, visto que a capacidade do modelo matemático de reproduzir o comportamento esperado para dado tipo de fluido e grupo de partículas é essencial para sua aplicabilidade. Em seguida, resume as diferentes abordagens existentes para descrever a fluidodinâmica das fases gás e partículas em leitos fluidizados e uma revisão dos trabalhos recentes adotando o acoplamento DEM-CFD para simulação de leitos fluidizados é apresentada.

O Capítulo 2 também apresenta uma revisão dos reatores nucleares conceituais de tipo leito fluidizado propostos na literatura, assim como cobre os trabalhos que utilizaram metodologia semelhante para simulação de tais reatores.

No Capítulo 3, a formulação matemática do acoplamento proposto entre os softwares de DEM e de CFD é discutida detalhadamente. As modelagens das fases fluida e particulada são descritas e suas equações apresentadas.

No Capítulo 4, a metodologia computacional é descrita, o algoritmo de simulação é explicado e a interação entre os softwares de CFD e DEM é detalhada.

O Capítulo 5 apresenta a validação da modelagem proposta através da comparação de resultados analíticos ou empíricos com os resultados obtidos usando o acoplamento DEM-CFD para casos simples.

De posse de uma metodologia validada, o acoplamento DEM-CFD implementado foi aplicado em um leito fluidizado do tipo borbulhante e os resultados numéricos são analisados e comparados com dados experimentais no Capítulo 6.

Por fim, o Capítulo 7 apresenta as conclusões obtidas e as sugestões para trabalhos futuros vislumbradas ao longo do desenvolvimento deste trabalho.

# Capítulo 2

## Revisão Bibliográfica

O presente capítulo apresenta uma revisão bibliográfica sobre leitos fluidizados e as características de seus regimes de escoamento, visto que a capacidade do modelo matemático de reproduzir o comportamento esperado para dado tipo de fluido e grupo de partículas é essencial para sua aplicabilidade.

Em seguida, resume as diferentes abordagens existentes para descrever a hidrodinâmica das fases gás e partículas em leitos fluidizados e uma revisão dos trabalhos recentes adotando o acoplamento DEM-CFD para simulação de leitos fluidizados é apresentada.

Por fim, uma revisão dos reatores nucleares conceituais de tipo leito fluidizado propostos na literatura é revisada, assim como os trabalhos que utilizaram metodologia semelhante para simulação de tais reatores.

### 2.1 Leitos fluidizados

Fluidização é a operação na qual partículas sólidas são mantidas suspensas, comportando-se como um fluido, através da passagem de um gás ou líquido. Um leito é dito fluidizado quando um fluido escoar verticalmente para cima através de um leito de partículas sólidas, as quais são suspensas, porém não transportadas (SEFIDVASH, 1985). A faixa de velocidades do fluido é bastante ampla, variando entre a velocidade mínima de fluidização até a velocidade com a qual as partículas são carregadas para fora do leito. Como o leito se encontra num estado turbulento, com movimento constante, obtém-se elevadas taxas de mistura e transferência de calor e/ou massa.

Leitos fluidizados podem ser caracterizados através da análise de seus regimes de escoamento e das propriedades das partículas a serem fluidizadas. A classificação quanto ao regime de escoamento em geral é realizada em função do comportamento das bolhas (FAN e ZHU, 1998), enquanto que as partículas fluidizadas são categorizadas em função de suas densidades e dimensões.

### 2.1.1 Regimes de fluidização

Quando a vazão é baixa, o fluido escoar através dos espaços entre partículas sem perturbar o arranjo das mesmas, ou seja, o leito se mantém fixo ou empacotado, conforme pode ser visualizado na Figura 2.1(a).

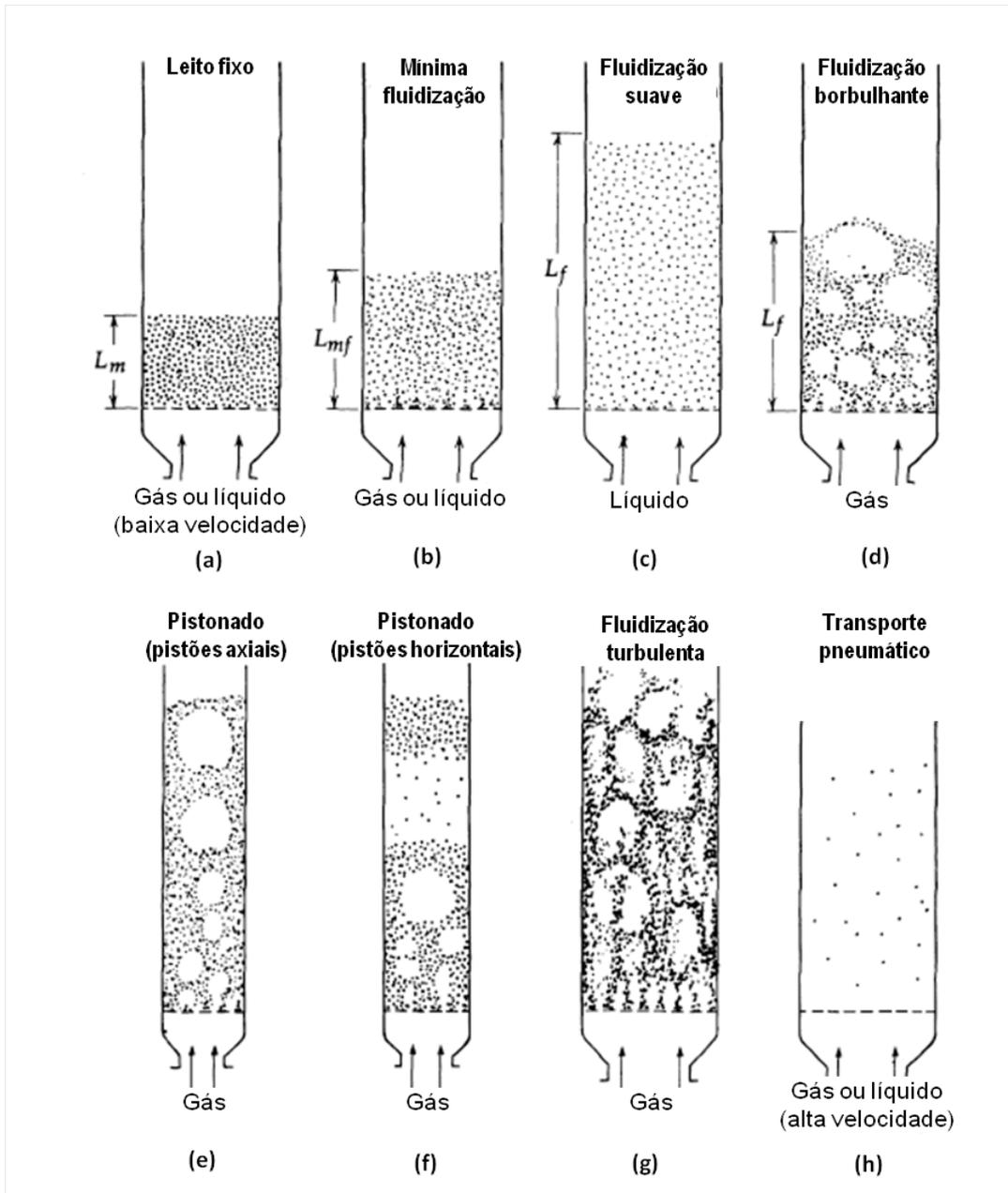


Figura 2.1: Diferentes configurações de escoamento em leitos fluidizados - adaptado de KUNII e LEVENSPIEL (1991).

Conforme se aumenta a vazão do fluido, atinge-se uma condição crítica em que o peso do leito se iguala à força de arrasto nas partículas e as partículas são suspensas, levando ao estágio de fluidização incipiente, conforme a Figura 2.1(b). A velocidade superficial correspondente do fluido é conhecida como velocidade mínima

de fluidização,  $u_{mf}$ . Qualquer aumento na velocidade do fluido além desta faz com que as partículas se separem e o leito se expanda.

O comportamento do leito com o aumento da vazão depende do tipo de fluido utilizado. Se um líquido for um agente fluidizante, a expansão do leito ocorre mais suavemente e não se costuma observar irregularidades na distribuição das partículas. Esta conformação de leito é conhecida como leito fluidizado suave ou leito fluidizado particulado, conforme a Figura 2.1(c).

No caso de um leito em que o agente fluidizante é um gás, o comportamento é distinto. Conforme se aumenta a vazão, grandes instabilidades ocorrem e bolhas (regiões com alta fração volumétrica de gás) são geradas e coalescem formando bolhas maiores. A movimentação das partículas é vigorosa e o leito não se expande muito além de seu volume ao atingir o estado de fluidização incipiente. Esta conformação de leito, apresentada na 2.1(d), é conhecida como leito fluidizado borbulhante e se assemelha a um líquido borbulhando. A velocidade superficial do gás na incipiência de atingir o regime borbulhante é conhecida como velocidade mínima de borbulhamento,  $u_{mb}$ .

Conforme se aumenta a vazão, aumenta a taxa de coalescência das bolhas, que aumentam de diâmetro. No caso de um leito de pequeno diâmetro e partículas finas, pode ocorrer a formação de pistões axiais, conforme ilustrado na Figura 2.1(e). No caso de partículas grandes, ocorre a formação de pistões horizontais, conforme a Figura 2.1(f).

Tanto os leitos a gás quando por líquido são chamados de leitos fluidizados densos quando existe uma definição razoavelmente clara da superfície do leito.

Por fim, o leito fluidizado turbulento, conforme mostrado na Figura 2.1(g), ocorre quando a velocidade do gás atinge a velocidade terminal das partículas,  $u_t$ . Não é possível mais distinguir a superfície do leito e a frequência de quebra das bolhas é aumentada, reduzindo a presença de grandes bolhas, enquanto que é possível observar o movimento turbulento de clusters de sólidos.

Um posterior aumento de velocidade do gás faz com que as partículas sejam carregadas para fora do leito, conforme a Figura 2.1(h). Neste estado tem-se um leito fluidizado disperso ou diluído com transporte pneumático de sólidos. Neste caso, para regimes de operação estacionários, é necessário que se colete as partículas que foram carregadas para fora do leito. Quando a quantidade de material transportado pneumaticamente é alta, sistemas estes conhecido como leitos fluidizados rápidos, é comum se utilizar coletores na região externa do leito.

Os leitos de jorro, ilustrado na Figura 2.2 ocorrem quando partículas maiores são utilizadas em um leito por onde é injetado um gás, com alta velocidade. As partículas no centro são jogadas para o topo do leito enquanto que o restante das partículas se move lentamente para baixo.



Figura 2.2: Desenho esquemático de um leito de jorro.

### 2.1.2 Classificação das partículas

O comportamento da fluidização é função de propriedades das partículas, como tamanho e densidade. A principal forma de se classificar partículas em leitos fluidizados foi proposta por GELDART (1972), dividindo-as em quatro grupos (A, B, C e D) em função do diâmetro característico das partículas e da diferença de densidade entre as partículas e a fase fluida. O mapa de classificação de regimes de fluidização obtido empiricamente é apresentado na Figura 2.3, onde  $\rho_p$  e  $\rho_g$  são as densidades das partículas e do gás e  $\bar{d}_p$  é o diâmetro médio das partículas.

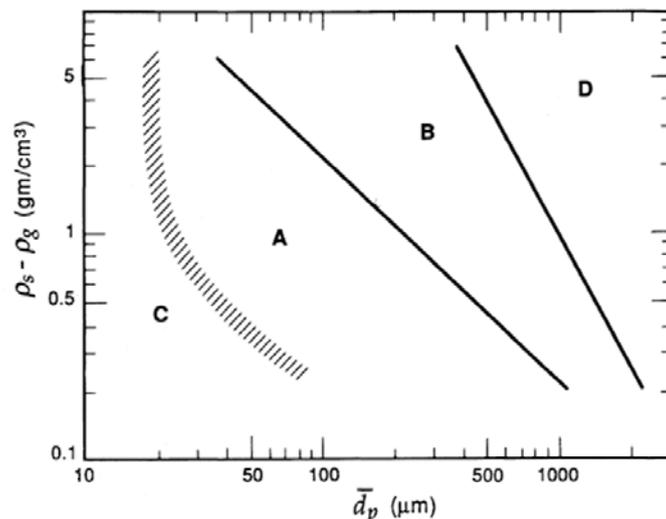


Figura 2.3: Mapa de classificação de partículas de Geldart - adaptado de KUNII e LEVENSPIEL (1991).

Partículas do Grupo A possuem diâmetros na faixa de 30–100  $\mu\text{m}$  e/ou baixa den-

sidade ( $\rho_p < 1400 \text{ kg m}^{-3}$ ). Quando fluidizado, o leito formado por estas partículas se expande antes que bolhas apareçam, ou seja, a velocidade mínima de fluidização é menor que a velocidade mínima de borbulhamento ( $u_{mf} < u_{mb}$ ). Dessa forma, um leito formado por partículas do Grupo A pode ser operado no regime particulado ou borbulhante. Apesar do tamanho das bolhas aumentar ao longo da coluna devido à coalescência das bolhas, existe um tamanho máximo estável para as bolhas, em torno de 10 cm.

Partículas do Grupo B possuem a velocidade mínima de fluidização aproximadamente igual à velocidade mínima de borbulhamento ( $u_{mf} \approx u_{mb}$ ), de forma que o regime de fluidização particulado não ocorre. O tamanho das bolhas aumenta ao longo da coluna, independente do tamanho médio das partículas, de forma que não existe um tamanho máximo para este grupo.

Partículas com diâmetro menor que  $20 \mu\text{m}$  pertencem ao Grupo C e são muito difíceis de serem fluidizadas devido ao fato de serem muito coesivas, já que suas forças entre partículas são comparáveis às forças gravitacionais. Entretanto, quando fluidizadas, a expansão do leito é bastante elevada.

O Grupo D é composto por partículas grandes ( $d_p > 1 \text{ mm}$ ). Da mesma forma que no Grupo B, as bolhas aparecem assim que se atinge a velocidade mínima de fluidização. A mistura das partículas não é pior que nos grupos A e B e uma elevada vazão de gás é necessária para a fluidização. As bolhas formadas atingem tamanhos elevados devido à coalescência, chegando ao tamanho do leito e formando pistões horizontais. Além disso, as bolhas ascendem mais rapidamente que o resto do gás escoando através do leito.

### 2.1.3 Previsão do regime de fluidização

Mapas empíricos, baseados em dados experimentais obtidos sob diferentes condições experimentais, são frequentemente adotados para prever o regime de fluidização com base na velocidade superficial do fluido e a que grupo as partículas pertencem, permitindo a adequação da configuração do leito ao material particulado para otimização da operação.

A Figura 2.4 apresenta um mapa de regime construído por KUNII e LEVENSPIEL (1991) para todas as configurações possíveis de leitos fluidizados gás-sólido em função do tamanho adimensional das partículas,  $d_p^*$ , calculada conforme a Equação 2.1 e da velocidade adimensional do gás,  $u_g^*$ , calculada conforme a Equação 2.2.

$$d_p^* \equiv d_p \left[ \frac{\rho_g (\rho_p - \rho_g) g}{\mu_f} \right]^{\frac{1}{3}} = Ar^{\frac{1}{3}}, \quad (2.1)$$

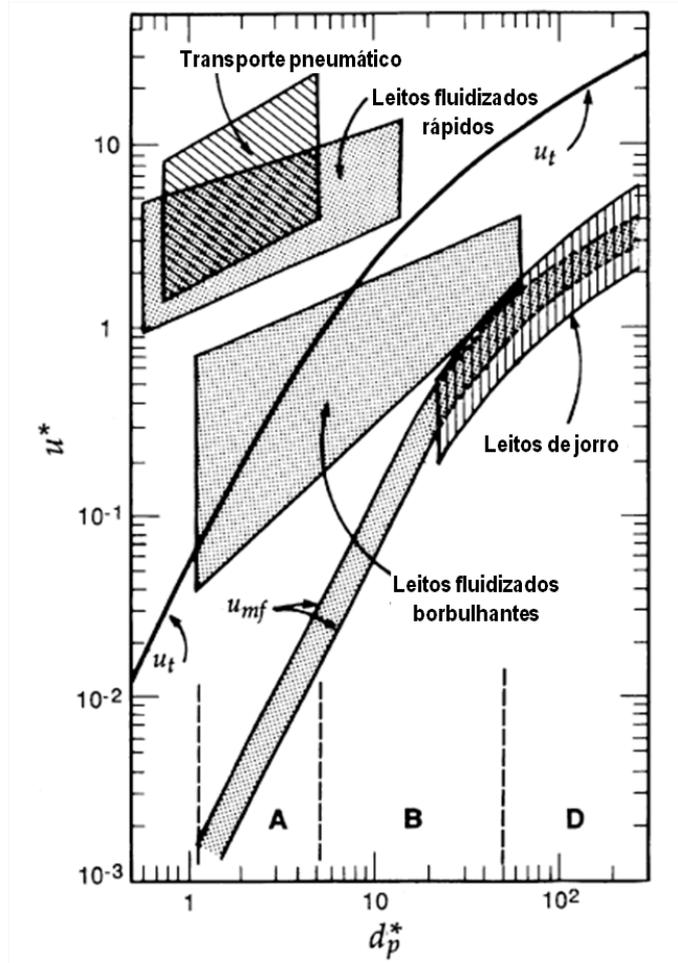


Figura 2.4: Mapa de classificação de regimes para leitos fluidizados gás-sólidos adaptado de KUNII e LEVENSPIEL (1991).

$$u_g^* \equiv u_g \left[ \frac{\rho_g^2}{\mu_f (\rho_p - \rho_g) g} \right]^{\frac{1}{3}} = \frac{Re_p}{Ar^{\frac{1}{3}}}. \quad (2.2)$$

Nas equações 2.1 e 2.2,  $u_g$  é a velocidade superficial do gás,  $\rho_g$  é a densidade do gás,  $\rho_p$  é a densidade da partícula,  $\mu_g$  é a viscosidade do gás,  $Ar$  é o número de Arquimedes  $\left( Ar = \frac{g d_p^3 \rho_g (\rho_p - \rho_g)}{\mu_f^2} \right)$  e  $Re_p$  é o número de Reynolds da partícula  $\left( Re_p = \frac{\rho_g u_g d_p}{\mu_f} \right)$ .

Mapas como este mostram, por exemplo, a velocidade mínima de fluidização e a velocidade terminal para leitos com partículas de um único tamanho. Também mostram que partículas do grupo A e B de Geldart operam de forma estável, enquanto que para partículas do grupo D, a faixa de velocidades para o regime borbulhante é estreita.

### 2.1.4 Perda de carga no leito

A avaliação da perda de carga versus a velocidade do fluido é comumente realizada em estudos de leito fluidizado por permitir a obtenção de informações sobre a qualidade da fluidização mesmo sem observações visuais. A Figura 2.5 ilustra este diagrama para um leito composto por areia fluidizado a gás.

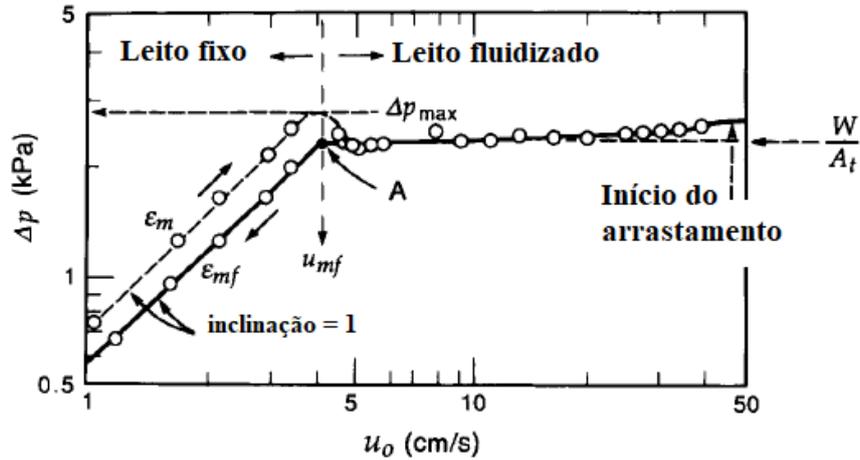


Figura 2.5: Diagrama de perda de carga versus velocidade em um leito formado por areia - adaptado de KUNII e LEVENSPIEL (1991).

Para velocidades baixas do fluido, o leito se mantém fixo e a perda de carga é proporcional à velocidade do gás, aumentando até atingir um valor máximo,  $\Delta p_{max}$ , que em geral é ligeiramente maior que a pressão estática do leito. Com um sequencial aumento da velocidade, a fração de vazio aumenta de  $\epsilon_m$  para  $\epsilon_{mf}$ , resultando num decréscimo da perda de carga para o valor da pressão estática do leito.

Para velocidades acima de velocidade mínima de fluidização, o leito se expande e bolhas são formadas, resultando em não-homogeneidades. Apesar do aumento da velocidade, a perda de carga se mantém oscilando ao redor do mesmo valor. Quando a velocidade do fluido é reduzida, as partículas que estavam fluidizadas se acomodam formando um leito fixo com fração de vazio  $\epsilon_{mf}$ .

Em geral, a velocidade mínima de fluidização é estimada através do ponto de interseção da linha de perda de carga versus velocidade para o leito fixo de fração volumétrica  $\epsilon_{mf}$  com a linha horizontal correspondente ao peso sobre a área transversal (ponto A) (KUNII e LEVENSPIEL, 1991).

## 2.2 Reatores nucleares do tipo leito fluidizado

Diversos projetos para núcleos de reatores além dos tradicionais reatores com núcleo rígido foram investigados desde que a fissão nuclear passou a ser utilizada

para obtenção de energia. Dentre esses, vários projetos em que o combustível se encontra na forma de esferas em suspensão foram publicados (AGUNG *et al.*, 2006; HARMS e KINGDON, 1994; KLOOSTERMAN *et al.*, 2001; MIZUNO *et al.*, 1990; ROTS *et al.*, 1996; SAHIN e SEFIDVASH, 2008; SEFIDVASH, 1980).

De forma geral, um reator nuclear de leito fluidizado consiste de um tubo cilíndrico de grafite e uma parte inferior que se conecta a uma câmara de combustível. Em contraste com outros reatores nucleares a altas temperaturas (HTGR - High Temperature Gas-Cooled Reactors), onde o combustível é apresentado em forma de pelotas ou varetas, as partículas estão dispostas na parte inferior da cavidade, formando um leito fixo. O fluido refrigerante flui de baixo para cima através do tubo, fluidizando desta forma o leito de partículas (AGUNG, 2007). A Figura 2.6 mostra um desenho esquemático de um reator de leito fluidizado sob configuração de leito fixo (à esquerda) e num estado fluidizado (à direita).

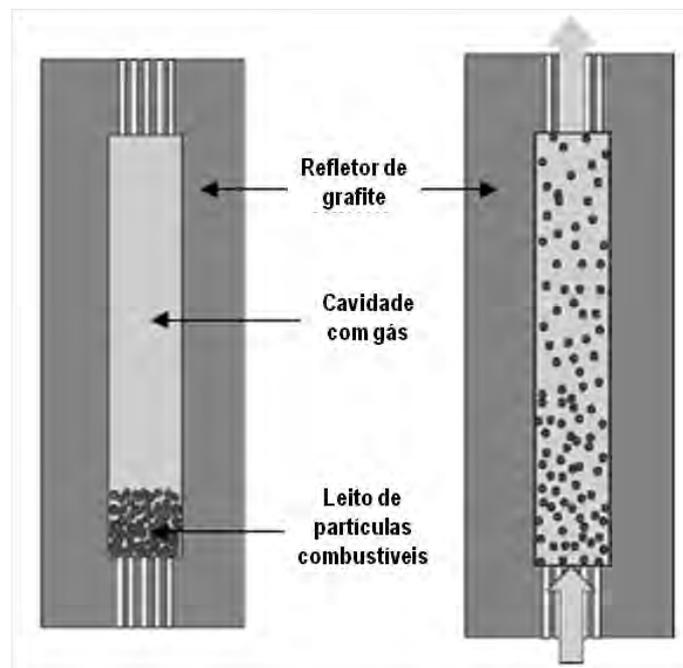


Figura 2.6: Visão esquemática de um reator de leito fluidizado sob condição de empacotamento (esquerda) e sob estado fluidizado (direita).

### 2.2.1 Vantagens de um reator de leito fluidizado

Esta particular atenção dada aos reatores nucleares do tipo leito fluidizado se deve ao fato de que, além das altas taxas de transferência de calor entre o fluido e partículas que são obtidas com esta configuração geométrica, a conseqüente mistura e agitação proporcionam uma distribuição de temperatura uniforme ao longo do leito. Isso acarreta na redução de risco de pontos quentes e permite a obtenção de uma temperatura elevada para o fluido sem acarretar em uma temperatura excessiva do

combustível. Pelos mesmos motivos é possível obter uma queima uniforme e elevada de todo o combustível, independente da forma da distribuição do fluxo neutrônico (AGUNG, 2007; SEFIDVASH, 1985).

### **Ajuste de vazão como mecanismo de controle adicional**

Avaliações neutrônicas sob regime permanente em unidades homogêneas foram realizadas e demonstraram a influência da altura do leito na reatividade para diversos níveis de enriquecimento, diâmetros do tubo e altura do leito colapsado (SEFIDVASH, 1980). SEFIDVASH (1985) mostrou que a reatividade inicialmente aumenta conforme a altura e a porosidade do leito aumentam e os nêutrons se tornam mais termalizados. Posteriormente, para porosidades maiores, a reatividade diminui quando a absorção neutrônica do reator domina a já estabelecida condição termalizada do reator. A Figura 2.7, adaptada de SEFIDVASH (1985), apresenta os fatores de multiplicação infinitos e efetivos de um reator como função da porosidade  $\epsilon$  e da razão entre a altura fluidizada e colapsada do leito ( $H/H_0$ ) para diferentes níveis de enriquecimento de 1.9, 2.2, 2 e 2.5 %.

Dessa forma, como o leito se expande conforme a vazão do fluido refrigerante é aumentada, e esta mudança na configuração geométrica do leito afeta a neutrônica do reator, o controle da vazão de entrada pode ser utilizada como um mecanismo de controle da produção de energia, reduzindo assim a dependência de outros mecanismos de controle (PAIN, 2003, 2005). É interessante adicionar que esta é uma característica de segurança intrínseca desses reatores, já que no caso de falha da bomba ou overspeed, a reatividade decai automaticamente e o reator se torna subcrítico.

### **Remoção do combustível por gravidade**

Outra característica muito importante é o fato de reatores de leito fluidizado tornarem acidentes do tipo LOCA (loss-of-coolant accidents) menos prováveis (se não impossíveis) do que nos reatores com núcleo fixo, e conseqüentemente, evitar casos em que o ocorra o derretimento do núcleo (KINGDON e HARMS, 1996). Como o conceito de tais reatores se baseia no ideia de manter o combustível físsil suspenso em um arranjo crítico devido à passagem de um líquido ou gás refrigerante, no caso de parada de circulação do fluido refrigerante, o combustível em forma de pelotas em suspensão automaticamente retorna por gravidade a um arranjo subcrítico, eliminando o risco de derretimento do combustível.

Além disso, devido à possibilidade de remover o combustível por gravidade no caso de um acidente com perda de refrigeração e armazená-lo em um local passivamente resfriado fora do núcleo, proporciona um aumento da segurança do reator (SEFIDVASH, 1996).

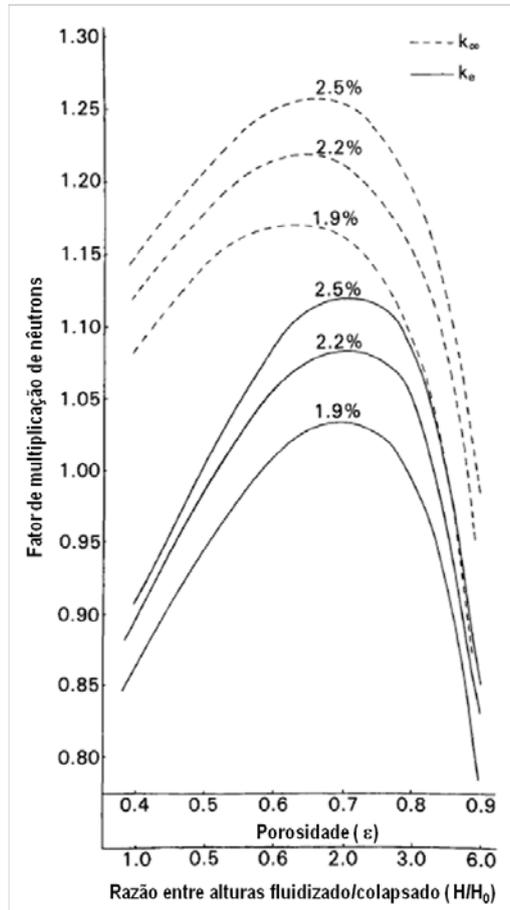


Figura 2.7: Fatores de multiplicação infinitos e efetivos de um reator como função da porosidade  $\epsilon$  e da razão entre a altura fluidizada e colapsada do leito ( $H/H_0$ ) - adaptada de SEFIDVASH (1985).

### Projeto simples e modular

Por fim, como este tipo de reator é modular, reatores de diversos tamanhos podem ser produzidos a partir do módulo básico, trazendo flexibilidade para desenvolver, planejar e construir a planta. Devido ao projeto mais simples e às suas características de segurança inerentes e passivas, a operação e manutenção deste reator é mais simples.

### 2.2.2 Desvantagens dos reatores nucleares de leito fluidizado

Uma desvantagem deste tipo de reator é a característica caótica do escoamento que se estabelece quando grandes bolhas e pistões se propagam através do leito (DAVIDSON *et al.*, 1985), impactando na taxa de fissão e na criticalidade do reator. Dessa forma, é imprescindível que exista uma modelagem acurada do reator de forma a se prever o comportamento do reator durante a partida, sob regime estacionário e

nos diversos cenários de acidentes.

### **2.2.3 Histórico do desenvolvimento dos reatores de leito fluidizado**

Pelotas muito pequenas são complicadas de serem produzidas ou requerem velocidades do fluido muito baixas para serem mantidas suspensas, inviabilizando a remoção de calor. Pelotas grandes demais requerem vazões muito elevadas para serem mantidas em suspensão, reduzindo a razão entre a potência de saída de um reator e a potência necessária para manter as pelotas em suspensão. KINGDON e HARMS (1996) avaliou a razão de potência para os fluidos mais adotados nos projetos de reatores de leito fluidizado (hélio, água leve e chumbo líquido) e verificou que esta razão seria superior a  $10 \times 10^3$  em reatores cilíndricos utilizando pelotas de carbeto de urânio ou dióxido de urânio com tamanhos adequados para a fabricação e gerenciamento.

Mesmo análises conservativas reduzindo o fluxo neutrônico do reator em uma ordem de magnitude mostram que a razão é superior a  $10 \times 10^2$ , evidenciando que reatores baseados no conceito de pelotas em suspensão são viáveis em relação à fração de potência que deve ser reciclada ao sistema de bombeamento a fim de manter o fluido a uma velocidade suficiente para fluidização das partículas.

#### **O reator de leito fluidizado de Sefidvash - leito fluidizado**

SEFIDVASH (1980, 1985, 1996), professor da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS) publicou, ainda em 1980, uma série de trabalhos com o projeto conceitual de um reator nuclear de leito fluidizado usando água como fluido refrigerante e elementos combustíveis esféricos. Por ser de pequeno porte e modular, com projeto simples, é econômico frente aos vigentes reatores pressurizados a água (PWR). Além disso, possui características de segurança intrínseca e resfriamento passivo. A Figura 2.9 mostra a vista superior de um reator composto por 19 módulos e a vista frontal de um desses módulos básicos.

As pastilhas de combustível são esferas de dióxido de urânio de 7 mm revestidas por uma camada de zircaloy de 5 mm ou partículas combustíveis tri-isotrópicas (TRISO - Tristructural-isotropic) . Cada partícula TRISO consiste de um núcleo de dióxido de urânio enriquecido de 0,2–0,3 mm revestidos por diversas camadas de grafite e carbeto de silício. Uma camada interna de carbono de baixa densidade permite o inchaço do óxido causado pela irradiação sem dano ao carbeto de silício, que serve para conter os produtos de fissão oriundos das reações nucleares. Uma camada externa de carbono pirolítico adiciona resistência.

A parte superior do módulo inclui o núcleo cilíndrico circunscrito por um canal

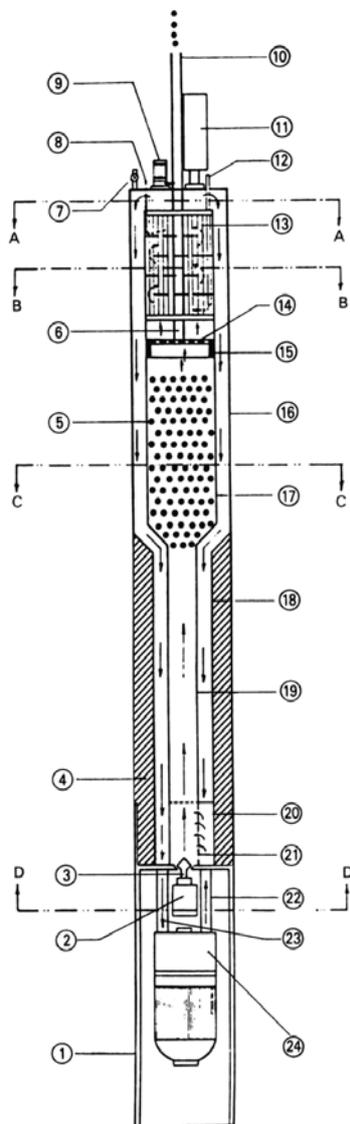


Figura 2.8: Desenho esquemático do reator nuclear de leito fixo de Sefidvash - adaptado de SEFIDVASH (1996). (1) Suporte estrutural, (2) Válvula de abertura hidráulica, (3) Válvula de descarga de combustível, (4) Envoltório de grafite, (5) Núcleo do reator, (6) Eixo do limitador de nível, (7) Despressurizador, (8) Saída de vapor, (9) Controlador do limitador de nível, (10) Alimentação de combustível, (11) Pressurizador, (12) Entrada de água, (13) Gerador de vapor, (14) Limitador de nível, (15) Casca absorvedora, (16) Canal hexagonal, (17) Tudo de fluidização, (18) Canal circular, (19) Câmara de combustível, (20) Distribuidor, (21) Perfurações na entrada, (22) Entrada do fluido refrigerante, (23) Saída do fluido refrigerante (24) Bomba primária, (25) Refletor de grafite, (26) Escudo biológico.

hexagonal e um gerador de vapor do tipo casco-tubo integrado. Um anel é formado entre o tubo de fluidização e o canal hexagonal, por onde passa o fluido refrigerante ao retornar após passar pelo trocador de calor. Na parte inferior do módulo está a câmara de combustível, onde ficam os elementos combustíveis quando não fluidizados. Esta câmara possui uma válvula de descarga que permite que os elementos sejam descarregados para um tanque de resfriamento permanente. Os elementos novos são alimentados ao reator pelo topo do módulo enquanto que os elementos gastos deixam o módulo através de uma válvula localizada no inferior da câmara de combustível.

O fluido refrigerante entra através de um distribuidor de fluxo, circula através da câmara de combustível e do núcleo, onde retira o calor gerado pela fissão nuclear. Em seguida, passa através do gerador de vapor onde transfere o calor absorvido no núcleo e retorna através do anel existente entre o núcleo e a carcaça. Na parte superior do módulo existe uma tela móvel que limita a altura máxima do leito e garante que as partículas de combustível não seja carregadas com o fluido refrigerante para o trocador de calor. Conectado a esta tela existe um anel de controle composto por material absorvedor de nêutrons, que penetra no núcleo agindo como barra de controle.

Quando a velocidade do fluido atinge a velocidade terminal de fluidização, os elementos de combustível são carregados para o núcleo do reator, onde são fluidizados e trocam calor com o fluido refrigerante. Numa condição de acidente em que a bomba pare ou tenha a rotação reduzida, a velocidade do fluido se reduz para menos que a velocidade mínima de fluidização e os elementos combustíveis deixam o núcleo do reator, retornando à câmara combustível pela ação da gravidade onde permanecem em uma condição subcrítica ou podem ser descarregados através da válvula de descarga para um tanque de resfriamento permanente.

Na partida do reator, o núcleo se encontra a uma temperatura muito menor que a temperatura de operação e o reator é levado até a potência máxima através do ajuste simultâneo da velocidade de fluido refrigerante e da altura do limitador de nível. Durante a operação normal, o controle fino de reatividade é feito através do ajuste da vazão de fluido refrigerante. O desligamento do reator é conseguido pela redução da velocidade do fluido e conseqüente redução da porosidade do leito até que atinja a condição subcrítica.

SEFIDVASH (1985) apresentou cálculos estacionários para a física do reator adaptando um código desenvolvido para a análise de reatores usando varetas cilíndricas de combustível refrigerados a água (Leopard code - Westinghouse, 1983). A reatividade inicialmente aumenta com a porosidade do leito conforme os neutrões gradualmente se termalizam até um valor máximo, onde a reatividade começa a cair com o aumento da porosidade quando a absorção neutrônica do moderador domina

a condição termalizada. Sendo assim, a vazão da bomba se torna uma forma de controle da potência do reator, já que controla a fluidização do leito. Além do mais, traz para o reator uma característica intrínseca de segurança, visto que no caso de falha da bomba a reatividade automaticamente cai.

Diferentes estudos para avaliar a estabilidade dinâmica do reator de leito fluidizado sob diferentes circunstâncias foram realizados (BORGES e VILHENA, 1995; STRECK, 1988; VILHENA, 2005). O modelo de cinética pontual, que considera variação de fluxo na direção axial foi aplicado para avaliar os transientes curtos enquanto que a teoria da bifurcação foi usada para estudar os transientes longos. Os resultados mostraram que a estabilidade dinâmica deste reator conceitual tem comportamento similar ao de reatores do tipo PWR, no sentido de que ambos respondem com um crescimento médio da potência frente a oscilações estacionárias da reatividade em torno da criticalidade. STRECK (1988) mostra que, para a condição de operação estudada, a diferença nos picos de potência de um reator nuclear do tipo leito fluidizado e um PWR simulado é de 3,6 % por centímetro de amplitude de oscilação da altura do leito fluidizado.

Em relação à transferência de calor, SEFIDVASH (1985) apresentou cálculos sob regime estacionário que mostram que devido à elevada área de superfície para troca de calor e ao elevado coeficiente de transferência de calor por convecção, a máxima potência extraída do núcleo do reator é limitada pela vazão mássica de refrigerante, que reflete na porosidade desejada para a operação. O mesmo trabalho mostra que para as duas vazões estudadas, a diferença máxima entre a temperatura no combustível e na superfície do elemento esférico é de 5 °C, enquanto que a diferença entre a superfície do elemento e o fluido varia entre 2 °C na entrada e 5 °C no topo do reator. Além disso, as máximas temperaturas encontradas (abaixo de 400 °C) ficam bem abaixo dos limites de segurança do reator.

A transferência de calor transiente no caso de um evento de perda de refrigeração (LOCA) foi estudada pelo método de parâmetros concentrados e por um método exato e mostraram que os elementos de combustível manteriam a integridade. Análises térmicas da câmara de combustível também mostraram que mesmo no caso de total vaporização da água e com o retorno dos elementos à câmara nesta condição mostram que o reator é passivamente resfriado (SEFIDVASH, 1996).

SEFIDVASH (1996) propôs a construção do tubo de fluidização com um perfil cônico a fim de eliminar as oscilações no leito fluidizado, reduzindo a velocidade e a porosidade ao longo da altura do reator de forma lenta e contínua. Outra proposta de modificação foi operar o reator com um ciclo direto sob operação a pressão supercrítica, usando vapor supercrítico como fluido refrigerante. A produção de potência deste reator seria maior com este conceito modificado já que a diferença de entalpia entre a entrada e saída é muito mais elevada que em um reator pressurizado

ou mesmo em um reator em ebulição, além de não precisar de separação entre água e vapor nem de geradores de vapor.

### **O reator de leito fixo de Sefidvash**

O reator de leito fixo proposto por SAHIN e SEFIDVASH (2008) é um caso especial do reator nuclear de leito fluidizado, no qual os elementos combustíveis são fluidizados na câmara de combustível e são levados ao núcleo, onde são mantidos fixos pela pressão imposta pelo fluido que escoar através do leito. Uma vantagem desta configuração é de eliminar a preocupação com as consequências do atrito entre os elementos combustíveis que existem no caso do leito fluidizado.

Da mesma forma que o reator de leito fixo, cada módulo contém na parte superior o núcleo e um gerador de vapor do tipo casco-tubo e na parte inferior a câmara de combustível, conforme a Figura 2.9. Barras de controle para controle do reator são localizadas no centro e ao longo da circunferência externa. O núcleo é composto por dois tubos de zircaloy concêntricos e perfurados de 20 cm e 160 cm de diâmetro, onde os elementos são mantidos suspensos durante a operação do reator. A câmara de combustível reserva é um tubo de 40 cm de diâmetro composta de uma liga com alta absorção de nêutrons, diretamente conectada ao tubo que compõe o núcleo. A câmara de combustível consiste de um tubo helicoidal de 25 cm flangeada à câmara de combustível reserva. Uma tela na parte inferior mantém os elementos de combustível na câmara.

Um limitador da altura do leito é usado para controlar a reatividade durante a operação e partida do reator. Durante operação, atua permitindo a entrada de combustível fresco no núcleo para compensar a mudança de reatividade a longo prazo devido ao esgotamento do combustível. No momento de partida, a reatividade do reator é manipulada através do ajuste do limitador de nível, sem a necessidade de um grande número de barras de controle como é comum em reatores convencionais. Dessa forma, reduz-se consideravelmente as distorções de potência e fluxo (SAHIN e SEFIDVASH, 2008).

Um sistema de pressurização mantém o fluido refrigerante sob pressão constante. Conforme ilustrado na Figura 2.10, o fluido refrigerante é bombeado através da câmara de combustível, de onde segue verticalmente até o tubo perfurado interno. Então o fluido atravessa horizontalmente através dos elementos de combustível até o tubo perfurado externo, seguindo verticalmente até o gerador de vapor, retornando à bomba pela passagem anular concêntrica. Dependendo da velocidade da bomba, o fluido refrigerante carrega as partículas da câmara de combustível para o núcleo, formando um leito fixo suspenso. Quando há necessidade de desligamento do reator, o leito fixo se desmancha e os elementos combustíveis retornam para a câmara de combustível, na qual permanecem em uma condição subcrítica e passivamente

resfriados, transferindo calor por convecção natural.

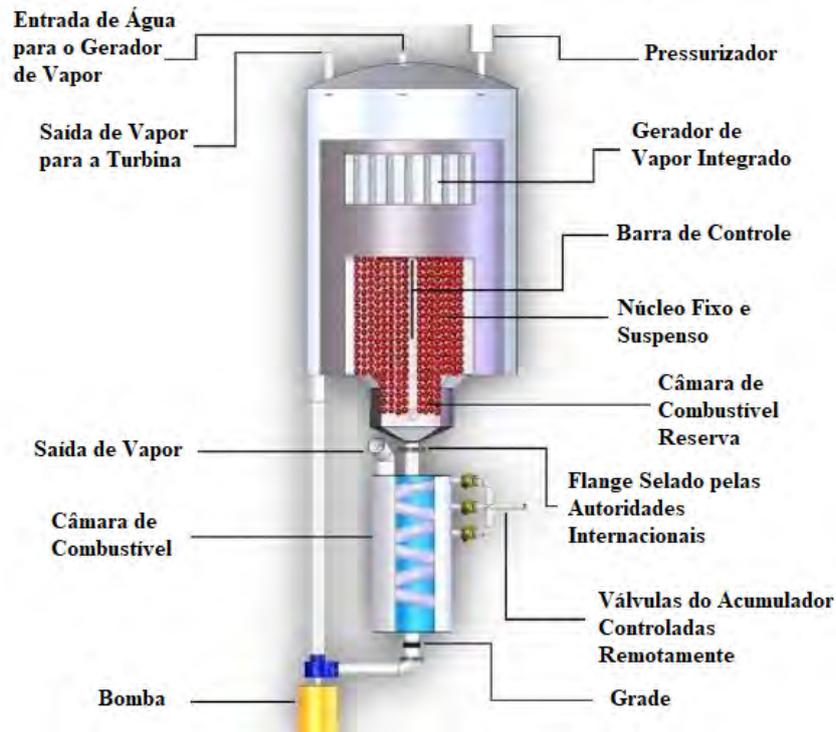


Figura 2.9: Desenho esquemático do núcleo do reator nuclear de leito fixo - adaptado de SAHIN e SEFIDVASH (2008).

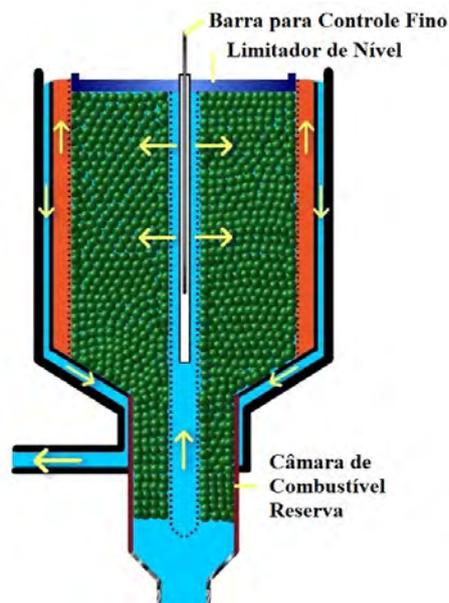


Figura 2.10: Percurso do fluido refrigerante no reator nuclear de leito fixo.

Cálculos neutrônicos mostraram que o comportamento do reator nuclear de leito fixo é similar aos PWRs convencionais. A vida do núcleo pode chegar a 17 anos caso o enriquecimento do combustível seja de 19 %, enquanto que com enriquecimento

de 9% a vida é de 7 anos. Com um enriquecimento de 5% a troca da câmara combustível deve ser feita a cada 3 anos. A recarga envolve a conexão e desconexão de uma câmara de combustível de 5 m<sup>3</sup> ao reator através de um flange que é selado pelas autoridades responsáveis, o que facilita os procedimentos de segurança e ajuda com a resistência à proliferação.

### **O reator de leito fluidizado de Mizuno**

MIZUNO *et al.* (1990) propôs uma alternativa às plantas de reatores nucleares de água fervente (BWR - Boiling Water Reactors) vigentes, na qual o combustível esférico fica suspenso na água refrigerante, que pode entrar em ebulição. O reator de ebulição combina as características de segurança passiva do reator de Sefidvash com o mecanismo de trava por densidade. No caso de falha da bomba, o combustível desce até um tanque de armazenamento para remoção do calor residual.

Neste reator conceitual, o núcleo é composto por canais hexagonais de 300 mm de diâmetro, onde as partículas de 10 mm de diâmetro externo são fluidizadas pelo escoamento vertical do fluido refrigerante. Uma malha de aço inoxidável com boro previne o carreamento de partículas e controla a reação nuclear. A parte inferior é composta por um tudo circular de 260 mm que possui uma peneira no seu fundo para reter os elementos de combustível no caso de desligamentos controlados. A parte externa deste tubo é coberta de aço com boro para manter o combustível em condição subcrítica neste caso.

A reatividade do combustível é controlada sem o uso de barras de controle através do ajuste da velocidade do fluido refrigerante, já que a reatividade depende da distância entre os elementos de combustível, aumentando com a porosidade até um certo limite máximo e decaindo com o subsequente aumento da fração de vazio. Durante a partida, após todos os elementos terem adentrado nos canal de fluidização, o que ocorre com metade da velocidade normal de fluidização, as peneiras da parte inferior são retiradas, fazendo com que o canal e o tanque estejam ligados diretamente e permitindo que os elementos caiam naturalmente no tanque em caso de falha de refrigeração. No caso de parada controlada, as peneiras são recolocadas para segurar os elementos conforme a velocidade do fluido é reduzida.

O autor também publicou um estudo realizado com um canal de vidro e aço carbono e esferas de aço para avaliar a perda abrasiva e a deformação dos elementos combustíveis e das paredes do canal, já que durante a fluidização há colisões frequentes entre os elementos e entre elementos e as paredes. Após dezenas de horas de fluidização, não houve dano nas paredes de vidro, indicando que a força das colisões é pequena. As partículas de aço foram inspecionadas por microscopia e não mostraram deformações após horas de experimentos, comprovando que não há risco com relação à integridade do material combustível e das paredes devido às colisões.

## O reator de leito fluidizado de Kloosterman

HARMS e KINGDON (1994); KINGDON (1998); ROTS *et al.* (1996) propuseram reatores no qual partículas combustíveis de urânio são fluidizadas pelo escoamento de hélio pressurizado sob altas velocidades. O estudo novamente explora o fato de que as reações nucleares ocorrem quando a fração de vazio atinge um dado valor e cessam assim que o leito colapsa, ou seja, quando não há escoamento do fluido refrigerante. No caso de um acidente com falha na bomba, novamente o conceito de sub-criticalidade através do colapso do núcleo é explorado.

KLOOSTERMAN *et al.* (2001) propôs um reator modular conceitual usando o conceito de fluidização gás-sólido usando partículas de combustível revestidas do tipo TRISO em um cilindro de grafite verticalmente orientado com diâmetro externo de 3 m e diâmetro interno de 1 m.

Hélio é usado como fluido refrigerante, fluidizando o leito ao escoar da base para o topo do tubo. O uso de um gás inerte permite a operação a altas temperaturas e com alta eficiência térmica, enquanto que a ausência de mudança de fase é vantajosa devido a segurança inerente. A Figura 2.11 contém uma ilustração da cavidade no interior dos refletores do reator. Uma das partículas é magnificada e cortada para mostrar o núcleo e as camadas de revestimento

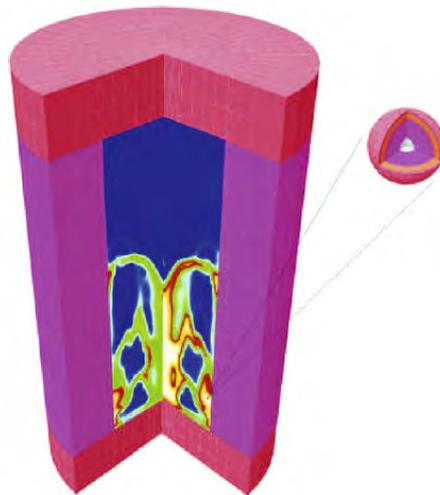


Figura 2.11: Ilustração da cavidade no interior dos refletores do reator fluidizado a hélio, contendo um leito fluidizado de partículas do tipo TRISO. Uma das partículas é magnificada e cortada para mostrar o núcleo e as camadas de revestimento - adaptada de MILES *et al.* (2010).

Da mesma forma que nos reatores citados anteriormente, a reatividade do reator é limitada pela altura do leito quando expandido. No estado colapsado, o reator é subcrítico devido a falta de moderação. Quando a vazão de hélio supera a velocidade mínima de fluidização, mais nêutrons escapam para as paredes de grafite, onde são

moderados e refletidos, e a reatividade do núcleo aumenta. Entretanto, ao expandir demasiadamente o núcleo, a quantidade de nêutrons que escapa é grande demais e a reatividade do núcleo decai. A Figura 2.12 apresenta o fator de multiplicação efetivo do reator na condição de 'hot-zero-power' e  $T = 543\text{ K}$  como função da expansão do núcleo. Para valores entre o leito colapsado (136 cm) e aproximadamente 270 cm, a reatividade aumenta com a expansão do leito, enquanto que para valores acima, decai. Dessa forma, com o projeto apropriado das partículas combustíveis, a potência do reator pode ser controlada através da vazão de hélio.

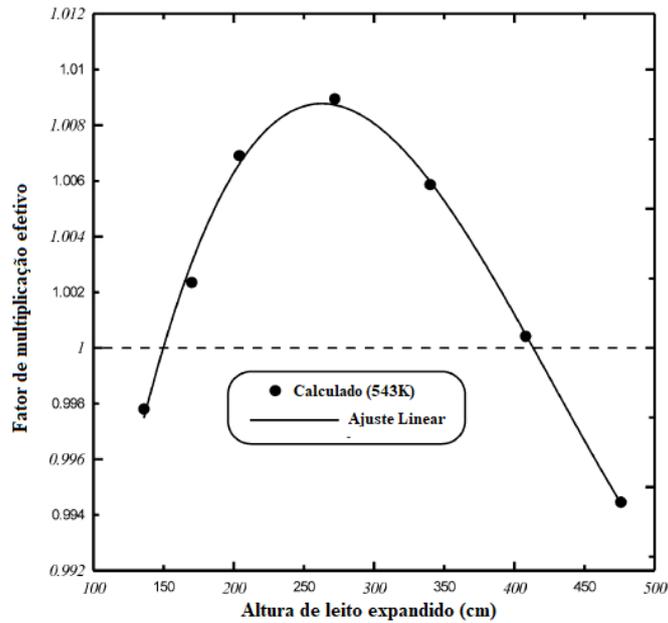


Figura 2.12: Fatores de multiplicação efetivos de um reator como função altura fluidizada do leito - adaptada de KLOOSTERMAN *et al.* (2001).

Os autores propuseram um modelo para o reator combinando: um modelo de fluidização para estimar a fração de vazio no núcleo como função da vazão do fluido refrigerante; um modelo termo-hidráulico para obter as temperaturas do combustível e do hélio; e um modelo neutrônico para descrever a potência do reator como função da fração de vazio e das temperaturas. Análises do estado estacionário do reator usando este modelo mostraram que o reator é estável em relação a pequenas variações do fluido refrigerante. Análises transientes deste mesmo modelo mostraram que para as condições de um salto na vazão de fluido, um decréscimo da temperatura em que o fluido entra no reator e para a perda da remoção de calor do hélio, a temperatura do combustível permanece inferior a  $1600\text{ }^{\circ}\text{C}$ .

### O reator FLUBER de Agung

AGUNG *et al.* (2006) propôs diversas modificações ao reator proposto por KLOOSTERMAN *et al.* (2001) a fim de atingir a curva de reatividade com o formato

desejado e aumentar a margem de shutdown (aumentando a absorção neutrônica quando o leito é colapsado). Dentre as sugestões, o autor sugeriu o uso de um refletor poroso no fundo do reator, de forma que a termalização dos nêutrons pelo grafite seja menos efetiva e a reatividade do reator quando colapsado seja menor. AGUNG *et al.* (2006) também propôs a adição de boro no refletor instalado no fundo e em um anel nas paredes próximo ao fundo do reator. Dessa forma, aumenta-se a absorção de nêutrons no fundo do reator quando o leito está empacotado, porém quando a altura do leito aumenta, o efeito de absorção diminui.

Outra sugestão foi de aumentar a seção transversal do núcleo de forma a reduzir a altura do leito empacotado e assim a probabilidade de captura de nêutrons no núcleo. Por último o autor também sugere alterar a razão moderador/combustível através do aumento do diâmetro do núcleo de combustível nas partículas.

Um modelo 0-D combinando a hidrodinâmica do leito fluidizado com a cinética do reator foi desenvolvido para avaliar o reator sob estado estacionário e o efeito das modificações propostas. Os resultados mostraram que, com as alterações propostas, a maior reatividade ocorre quando o leito está em máxima expansão. Isto difere dos projetos pré-existentes deste tipo de reator, onde um máximo de reatividade existe em um valor intermediário de expansão. O reator pode atingir uma temperatura de saída elevada (1163 K) e gerar uma potência térmica de 120 MW. Além disso, os resultados mostraram que a potência do reator pode ser controlada facilmente ajustando a vazão de hélio sem o uso de barras de controle.

Nos trabalhos de AGUNG *et al.* (2009) e LATHOUWERS *et al.* (2003), o objetivo foi avaliar o comportamento transiente do reator e sua estabilidade sob sua faixa de operação. O impacto da variação da vazão mássica de fluido e da temperatura de entrada foram investigados e o sistema se mostrou estável sob a faixa de operação. Apesar da potência total do reator flutuar e atingir valores maiores, a temperatura do combustível é mantida abaixo dos limites seguros em todos os casos avaliados.

### **O reator de leito de jorro de Wang**

WANG *et al.* (2009) publicou uma outra variação ao reator de leito fluidizado à hélio tradicional, o reator nuclear de leito de jorro, ilustrado na Figura 2.13. O reator, de forma geral, consiste de uma coluna cilíndrica ligada a uma região cônica com pequeno ângulo de inclinação. O leito de jorro normalmente apresenta uma região central onde ocorre o jato de fluido, na qual a concentração de partículas se aproxima de zero; a região onde ocorre o chafariz; e uma região anular, onde a concentração de partículas se aproxima do limite de empacotamento.

A ideia por trás desta configuração de reator é a de que a gradual diminuição da velocidade do fluido ao longo da altura do reator controla a formação de bolhas. Além disso, as taxas de transferência de calor são aumentadas em relação ao reator

de leito fluidizado tradicional devido ao maior nível de turbulência encontrado no sistema.

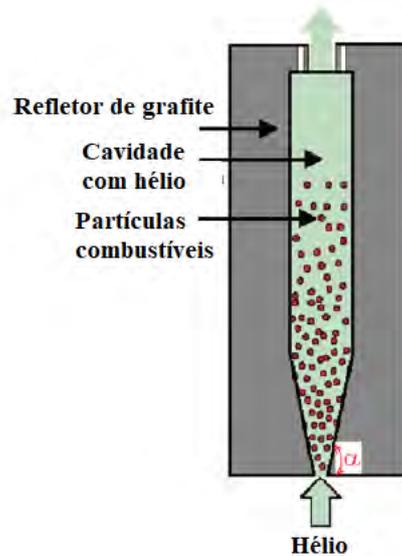


Figura 2.13: Esquema de um reator nuclear do tipo leito de jorro - adaptado de WANG *et al.* (2009).

## 2.3 Modelagem de leitos fluidizados

A fim de aprimorar o projeto e o aumento de escala de leitos fluidizados é vital que se conheça a hidrodinâmica e os fenômenos de transporte que ocorrem nestes sistemas. Apesar da vasta aplicação de leitos fluidizados nas indústrias química e nuclear, muito do desenvolvimento e projeto de reatores de leito fluidizado ocorreu baseada no empiricismo. A quantidade de trabalhos publicados na literatura envolvendo a investigação experimental dos fenômenos de transporte em leitos fluidizados é notável.

É bastante comum o emprego de colunas quasi-bidimensionais para a visualização do escoamento através do auxílio de técnicas de imagem como câmeras de alta resolução ou velocimetria por imagem de partículas. Também é comum o uso de sondas de medição em leitos tridimensionais. No primeiro caso, a influência das paredes pode mascarar o comportamento do sistema, enquanto que no segundo caso a presença das sondas podem perturbar o escoamento localmente, influenciando a medição.

Com o aumento do poder computacional, a modelagem computacional de leitos fluidizados passou a receber maior atenção da comunidade científica, já que possibilita que se observe o interior destes sistemas com uma riqueza de detalhes inviável de ser obtida experimentalmente, sem perturbação do sistema por uso de técnicas

invasivas e a medição de propriedades das partículas e do fluido simultaneamente.

Além disso, a utilização de ferramentas computacionais permite que se avalie diferentes condições de operação e configurações geométricas sem a necessidade da construção de protótipos experimentais, reduzindo consideravelmente o custo e o tempo de projeto.

Entretanto, a complexidade dos escoamentos gás-sólido presentes nestes sistemas torna a modelagem dos mesmos uma tarefa desafiadora. A construção de modelos confiáveis para sistemas fluido-granular de grande escala foi seriamente prejudicada pela falta de entendimento dos fundamentos de escoamentos gás-partículas densos, principalmente quanto aos fenômenos relacionados tanto às interações partículas-gás quanto às interações entre partículas e entre partículas e paredes (DEEN *et al.*, 2007). A principal fonte de dificuldades é a larga escala de comprimentos existentes no sistema, visto que as maiores estruturas são da ordem de grandeza do dispositivo, ou seja, metros, enquanto que as transferências de momentum, calor e massa ocorrem na escala micrométrica das interações entre partículas e partículas-gás.

O escoamento gás-sólido em um leito fluidizado pode ser modelado em escalas de comprimento e tempo diferentes. Diversos modelos fenomenológicos ou correlações empíricas foram propostas na literatura para a previsão da performance de leitos fluidizados a nível do equipamento. Um exemplo desta abordagem é a adoção da equação de Ergun (1952) (ERGUN, 1952) para estimativa da velocidade mínima de fluidização.

As abordagens existentes para descrever a hidrodinâmica das fases gás e particulados podem ser enquadradas em duas categorias do ponto de vista da fase particulada: a abordagem contínua, a nível macroscópico, e a abordagem discreta, a nível das partículas.

Na abordagem macroscópica, também conhecida como método Euler-Euler ou método de dois fluidos (TFM - Two Fluid Model), as fases fluida e sólida são tratadas como contínuas e interpenetrantes em uma célula computacional que é muito maior que as partículas individuais, mas ainda pequena quando comparada a escala de tamanho do processo. Com base em técnicas de promediação local, variáveis médias locais são usadas nas equações de conservação, que são por sua vez resolvidas por meio da fluidodinâmica computacional (CFD). A vantagem desta abordagem é seu custo computacional razoável para problemas de aplicação prática, a tornando a mais utilizada para modelagem de processos de fluidização (GIDASPOW, 1994).

Entretanto, além de ser incapaz de prever o escoamento das partículas individualmente, a capacidade da abordagem contínua de produzir bons resultados é dependente diretamente das relações constitutivas para a modelagem das interações entre as fases e a reologia da fase granular. A obtenção de uma teoria geral para escoamentos granulares é uma tarefa complicada e por isso é uma linha de pesquisa

considerável na comunidade científica.

Na abordagem discreta, também conhecida como método Euler-Lagrange, a movimentação das partículas individualmente é obtida diretamente através da integração numérica das equações de Newton que governam a translação e a rotação de cada uma das partículas no sistema. Por levar em conta as interações que ocorrem no sistema (fluido-partícula, partícula-partícula, partícula-paredes), a abordagem discreta pode ser utilizada para representar as interações da fase particulada em escalas maiores (VAN DER HOEF *et al.*, 2006) e produzir relações de fechamento para a abordagem macroscópica, o que acabou por motivar a pesquisa e a modelagem numérica das microescalas.

As escalas espaciais para a resolução do escoamento do fluido também podem variar de menores que a escala da partícula, podendo ser discreta (como no caso do acoplamento do método Lattice-Boltzmann (LB) com DEM) ou contínua (como no caso de acoplar simulação numérica direta (DNS - Direct Numerical Simulation) com DEM) até a ordem de grandeza da célula computacional. Os modelos de escalas sub-partículas, apesar de serem extremamente custosos computacionalmente e portanto inviáveis para a aplicações práticas na engenharia, são de grande valor para a pesquisa em relação à física de partículas devido a sua capacidade de determinar as forças de interação entre o fluido e as partículas.

Na combinação DNS-DEM, por exemplo, uma resolução espacial para o escoamento entre as partículas, mesmo quando as partículas estão no maior empacotamento possível e o escoamento ocorre entre seus poros, é adotada e as partículas são tratadas como fronteiras móveis. Dessa forma, resultados detalhados das interações hidrodinâmicas entre as partículas e o fluido são produzidos. A principal fraqueza desse método é sua incapacidade de lidar com as colisões entre partículas (ZHU *et al.*, 2007), de forma que foram aplicados principalmente em casos em que as interações hidrodinâmicas são dominantes.

Em um nível intermediário entre o uso de modelos com resolução sub-partícula para o fluido, como no caso de DNS-DEM, e o uso de resoluções da ordem da malha tanto para a partícula quanto para o fluido, como no caso de modelos contínuos baseados em teoria cinética granular, está o acoplamento CFD-DEM. Nesta abordagem, adotada neste trabalho, as partículas são modeladas como uma fase discreta, seguindo a abordagem DEM, enquanto que o fluido é tratado como uma fase contínua, descrita pelas equações promediadas de Navier-Stokes em uma célula computacional. Este método é considerado promissor visto que é computacionalmente muito menos custoso quando comparado aos acoplamentos DNS-DEM ou LB-DEM e com resolução da fase particulada muito superior ao método de dois fluidos.

A Figura 2.14, adaptada de DEEN *et al.* (2007), ilustra claramente as diferentes estratégias de modelagem de leitos fluidizados. Na extrema esquerda (Figura (a))

encontra-se um leito fluidizado em escala real, modelado como um todo usando modelos fenomenológicos. Em seguida, uma seção deste leito é modelada pelo modelo de dois fluidos, onde o sombreamento em cinza representa a fração volumétrica da fase sólida (Figura (b)). À direita, a mesma seção é modelada usando o método de elementos discretos para as partículas: no canto superior direito, Figura (c), a fase gás é resolvida usando a mesma malha do modelo de dois fluidos, enquanto que no canto inferior direito, Figura (d), a fase gasosa é resolvida em uma malha muito menor que o tamanho das partículas.

A estratégia de modelagem representada na Figura 2.14(c) é a adotada no presente trabalho.

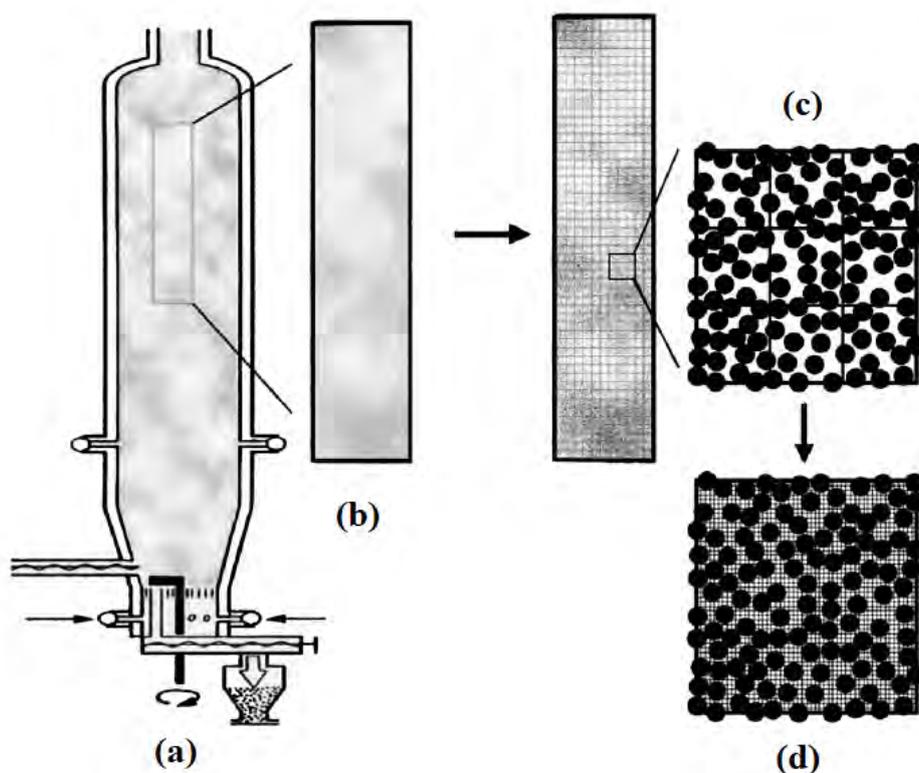


Figura 2.14: Representação gráfica das diferentes estratégias de modelagem de leitos fluidizados - adaptado de DEEN *et al.* (2007).

### 2.3.1 Simulação de leitos fluidizados usando o acoplamento DEM-CFD

O acoplamento do método de partículas distintas com um método de volumes finitos para a solução da fase fluida em leitos fluidizados através da solução das equações de Navier-Stokes foi reportado por TSUJI *et al.* (1993) e HOOMANS *et al.* (1996), usando o modelo de esferas macias e rígidas, respectivamente. Sua aplicabilidade para modelagem de leitos fluidizados tem sido verificada desde então

através da comparação com dados experimentais, mostrando resultados promissores como nos trabalhos de DEEN *et al.* (2007); TSUJI *et al.* (1993); VAN DER HOEF *et al.* (2006). Uma revisão bastante completa sobre a modelagem de leitos fluidizados usando DEM-CFD até a data de 2007, tanto usando a abordagem de esferas rígidas quanto a de esferas macias, é encontrada no trabalho de DEEN *et al.* (2007).

Devido ao custo computacional do uso de DEM, diversos trabalhos apresentaram o uso do acoplamento DEM-CFD para descrever leitos fluidizados quasi-2D mostrando concordância satisfatória entre os resultados numéricos e as medições experimentais. XU e YU (1997) apresentaram um modelo bidimensional baseado no modelo de esferas macias para a modelagem de leitos fluidizados gás-sólidos semelhante ao trabalho de TSUJI *et al.* (1993), porém usando um modelo de detecção de colisões em geral adotado em simulações de esferas rígidas e conseguiram reproduzir o comportamento da perda de carga versus velocidade superficial do gás, incluindo o estágio de desfluidização do leito. XU *et al.* (2000) empregou a mesma modelagem para a modelagem de um leito fluidizado com injeção lateral de gás.

GOLDSCHMIDT *et al.* (2002, 2004) comparou seus resultados usando o acoplamento DEM-CFD com os obtidos através do uso do modelo contínuo de dois fluidos e com resultados experimentais em leitos bidimensionais. Os autores obtiveram melhor concordância com os resultados experimentais usando o acoplamento DEM-CFD e atribuíram as diferenças entre as duas abordagens numéricas à falta de rotação das partículas no modelo de dois fluidos.

GERA *et al.* (1998) usou o a abordagem de dois fluidos (TFM) e o acoplamento DEM-CFD para avaliar a hidrodinâmica de um leito fluidizado bidimensional com partículas grandes. Os resultados obtidos para a velocidade de ascensão das bolhas, variações na fração volumétrica de fluido e velocidades médias das partículas e do fluido mostraram concordância qualitativa com as observações experimentais usando os dois modelos. Os autores ressaltam, entretanto, a forte sensibilidade dos resultados no modelo de dois fluidos aos parâmetros necessários para levar em conta as interações entre partículas, que tiveram que ser ajustados para cada caso simulado.

CHIESA *et al.* (2005) comparou os resultados obtidos usando o acoplamento DEM-CFD com o modelo de dois fluidos com resultados experimentais de um leito fluidizado em escala laboratorial e reportou resultados melhores com o uso da abordagem Euler-Lagrange que com a Euler-Euler, apesar do custo computacional consideravelmente maior com a arquitetura computacional da época.

LIU *et al.* (2013) publicou um trabalho com o desenvolvimento do acoplamento DEM-CFD usando o modelo multifásico do software Fluent, apresentando alguns exemplos de leitos fluidizados na validação da modelagem proposta. Os resultados, quando comparados com dados experimentais ou resultados de simulações prévios obtidos na literatura se mostraram satisfatórios. Entretanto, espessuras da ordem de

uma ou poucas partículas foram utilizadas o invés de um leito fluidizado realmente tridimensional.

### **Dinâmica das bolhas**

O acoplamento DEM-CFD vem sendo utilizado para estudar a dinâmica das bolhas em leitos fluidizados, incluindo a formação, coalescência e quebra (OUYANG e LI, 2001; XU e YU, 1997; XU *et al.*, 2000; YUU *et al.*, 2000). WUA *et al.* (2009) modelou um leito fluidizado tridimensional usando o acoplamento DEM-CFD no qual as interações entre partículas são calculadas através do modelo de esferas rígidas implementadas no software Fluent. Diferente da maioria dos trabalhos publicados, uma malha não-estruturada foi adotada nas simulações, que mostraram a habilidade do modelo de capturar características importantes do escoamento em leitos fluidizados como a formação das bolhas.

Uma sequência de trabalhos analisando o efeito das propriedades das partículas e do gás na fluidização de partículas do tipo Geldart A foi publicada por YE *et al.* (2004, 2005a,b). HOOMANS *et al.* (1996, 2001) usou o acoplamento DEM-CFD para estudar um leito fluidizado com velocidade do gás igual a 1,5 vezes a velocidade mínima de fluidização e ressaltou a importância dos parâmetros de colisão para a reprodução acurada dos dados experimentais.

LU *et al.* (2015) apresentou o acoplamento DEM-CFD para a simulação de um leito fluidizado bidimensional usando um algoritmo de inundação para o reconhecimento e acompanhamento das bolhas e mostraram um resultado comparável com correlações empíricas e dados experimentais publicados na literatura para o diâmetro e velocidade das bolhas.

### **Misturação e segregação das partículas**

Em muitas aplicações industriais de leitos fluidizados, a misturação e segregação são fenômenos de suma importância. HOOMANS *et al.* (2000) utilizou a abordagem Euler-Lagrange para avaliar a segregação das partículas em função de seus tamanhos e densidades em um leito fluidizado. BOKKERS *et al.* (2004) posteriormente aplicou o acoplamento DEM-CFD para avaliar a segregação de misturas binárias de partículas devido a ascensão de uma bolha em um leito tridimensional e comparou os resultados numéricos com experimentais, obtendo boa concordância. Os autores mostraram que a lei de arrasto possui forte influência na predição da mínima velocidade de fluidização. LUO *et al.* (2015) publicou um estudo usando o acoplamento DEM-CFD para estudar o comportamento de mistura e dispersão de partículas em um leito fluidizado sob diferentes vazões do fluido.

## Paralelização

Como no acoplamento DEM-CFD todas as partículas do domínio são monitoradas e o cálculo das forças de interação requer o acompanhamento de pares de partículas em contato, o custo computacional destas simulações é alto, adicionado ao esforço computacional da solução da fase fluida usando CFD. Dessa forma, para que as simulações não fossem limitadas a um número relativamente pequeno de partículas, a busca pela paralelização massiva e eficiente das simulações de DEM vêm sendo buscada. JAJCEVIC *et al.* (2013) apresentam a simulação DEM-CFD de leitos fluidizados com até 25 milhões de partículas usando um código DEM paralelizado usando placas gráficas com a arquitetura CUDA.

ALOBALID e EPPLE (2012) publicaram um trabalho com a validação do acoplamento DEM-CFD em um leito fluidizado do tipo jorro com um código paralelizado em até 36 processadores. Uma boa concordância entre os resultados numéricos e experimentais de fração volumétrica e perda de carga em diferentes posições no leito foi obtida.

## Formato de partículas

As partículas encontradas na natureza e nos processos de engenharia raramente são esféricas, mas sim possuem um formato irregular. Diversos trabalhos experimentais mostraram que o formato da partícula tem influência na dinâmica de leitos fluidizados. Assim, recentemente tem sido publicados diversos trabalhos sobre simulações de leitos com partículas não-esféricas usando o acoplamento DEM-CFD. Este tipo de acoplamento se mostra uma ferramenta promissora para a investigação do efeito do formato das partículas na fluidização ZHONG *et al.* (2016).

ZHONG *et al.* (2009) reportaram o uso do acoplamento DEM-DEM para analisar o escoamento em um leito fluidizado de partículas com formato cilíndrico, formadas através da aglomeração de partículas esféricas. Os resultados numéricos foram comparáveis aos resultados experimentais de perda de carga no leito.

HILTON *et al.* (2010) avaliou o efeito do formato da partícula na velocidade mínima de fluidização através da simulação DEM-CFD de leitos fluidizados formados por partículas com formato de cuboides e partículas elipsoidais com diferentes razões de aspecto. Os resultados mostraram que a velocidade mínima de fluidização das partículas não-esféricas foi menor que a de partículas esféricas devido à redução da porosidade e do aumento da força de arrasto.

ZHOU *et al.* (2011) simulou a fluidização de partículas elipsoidais com diversas razões de aspecto. Os padrões de escoamentos observados experimentalmente foram observados nas simulações usando o acoplamento DEM-CFD. Os resultados também mostraram que as partículas não adquiriam orientação randômica no leito, mas que

partículas oblatas tinham orientação preferencial vertical enquanto que partículas prolatas possuíam preferencialmente orientação horizontal.

REN *et al.* (2012, 2014) apresentou uma série de estudos da dinâmica de um leito de jorro com partículas com formato de grãos de milho e cilindroides. A comparação com resultados experimentais mais uma vez mostrou a habilidade do acoplamento DEM-CFD de prever o comportamento de leitos fluidizados formados por partículas não-esféricas. OSCHMANN *et al.* (2014, 2015) investigaram o processo de mistura de partículas como cilindros e cuboides em um leito fluidizado. Os resultados mostraram que a acurácia na representação do formato da partícula possui uma forte influência nos resultados, visto que a área projetada na direção do escoamento é alterada. VOLLMARI *et al.* (2015, 2016) investigaram a perda de carga em um leito fluidizado composto por partículas não-esféricas aproximadas por poliedros e mostraram que cilindros alongados têm uma tendência a se alinhar com o escoamento conforme a velocidade superficial é aumentada.

### **Transferência de calor**

Apesar da transferência de calor e massa em leitos fixos ou fluidizados ser de grande importância industrial, somente recentemente o acoplamento DEM-CFD passou a ser utilizado para estudo deste tipo de processo (ZHOU *et al.*, 2006, 2007). ZHOU *et al.* (2010) utilizaram o acoplamento DEM-CFD considerando a transferência de calor para avaliar o coeficiente de transferência de calor global em leitos fluidizados. HOU *et al.* (2012) utilizaram a mesma metodologia para a simulação da transferência de calor em um leito fluidizado borbulhante com um tubo horizontal. Ambos os trabalhos utilizaram o modelo de esferas macias para o cálculo das colisões e utilizaram correções para a super estimativa da área de transferência de calor e do tempo de contato obtidos com este modelo quando a rigidez da partícula é artificialmente reduzida para acelerar as simulações. PATIL *et al.* (2014) utilizaram DEM para estudar os efeitos não-isotérmicos na formação e ascensão de bolhas em leitos fluidizados, obtendo bons resultados para partículas pequenas quando comparados a resultados experimentais.

O estado da arte do acoplamento DEM-CFD com transferência de calor adota a abordagem de parâmetros concentrados clássica. Esta pressupõe que a temperatura é suficientemente uniforme ao longo do raio da partícula, de forma que a temperatura da superfície da partícula pode ser aproximada como a temperatura média da partícula. A resistência interna, no entanto, só pode ser negligenciada nos casos em que o número de Biot é menor do que 0,1, o que não é o caso em muitas aplicações de engenharia, onde os materiais têm baixas condutividades térmicas ou diâmetros acima de vários milímetros. Assim, a hipótese de uma temperatura uniforme não pode ser justificada e uma abordagem mais precisa deve ser adotada.

## 2.4 Modelo de parâmetros concentrados clássicos e aprimorados

Os modelos de parâmetros concentrados aprimorados foram desenvolvidos por diferentes abordagens (COTTA *et al.* (1990); REGIS *et al.* (2000a); SU (2001, 2004)). Um formalismo sistemático foi apresentado por COTTA e MIKHAILOV (1997) para fornecer formulações de parâmetros concentrados aprimoradas para problemas de condução de calor estacionários ou transientes. Essas formulações tem como base as aproximações de Hermite para as integrais que definem temperaturas médias e fluxos de calor.

Neste método, a temperatura média e o fluxo de calor, em uma ou mais coordenadas espaciais, são aproximados pelas fórmulas de Hermite para integrais. Relações analíticas entre as temperaturas no contorno e a temperatura média são produzidas. Essas relações são então utilizadas no lugar da igualdade plana assumida no modelo de parâmetros concentrados clássica.

O objetivo é reduzir, sempre que possível, o número de coordenadas espaciais a serem consideradas na formulação de condução de calor, sem negligenciar sua contribuição para o processo geral de transferência de calor. Leva-se em consideração a influência das condições de contorno naquela direção em particular. Esta abordagem mostrou-se eficiente em uma variedade de aplicações práticas CORREA e COTTA (1998); COTTA *et al.* (1990); REGIS *et al.* (2000b); SCOFANO-NETO e COTTA (1993); SU *et al.* (2009); SU e COTTA (2001).

Na tentativa de melhorar a aproximação do modelo de parâmetros concentrados clássico, este trabalho apresenta uma formulação de parâmetros concentrados melhorada para a condução de calor em partículas esféricas para simulações DEM-CFD. O modelo proposto é aplicado a um leito fluidizado e os resultados que utilizam a formulação melhorada são comparados com a formulação padrão.

## 2.5 Simulação de reatores nucleares de leito fluidizado

Uma desvantagem de reatores nucleares baseados no conceito de leito fluidizado é a característica caótica do escoamento de partículas, levando à variação local da criticalidade e impactando na taxa de fissão. A fim de estudar a influência desta variabilidade do sistema na potência do reator e na temperatura do fluido na saída do reator, PAIN *et al.* (2002) realizaram simulações de um reator nuclear de leito fluidizado conceitual usando hélio como refrigerante e partículas do tipo TRISO com cerca 0,1 cm de diâmetro acoplando a solução neutrônica com a fluidodinâmica

e transferência de calor. O modelo de dois fluidos usando teoria cinética granular para modelar as interações entre partículas foi utilizado para solução da fase sólida. Essa solução foi acoplada com a solução da equação de transporte de nêutrons de Boltzmann, avaliando assim a distribuição espacial e temporal do fluxo de nêutrons e da temperatura no reator. O trabalho, apesar de usar a aproximação de axi-simetria e pequenos tempos de simulação, mostra o potencial deste tipo de simulação para aumentar o conhecimento da complexa dinâmica no interior destes reatores. Também comprova a capacidade do leito fluidizado de obter distribuições uniformes de temperaturas e com isso aprimorar a transferência de calor e a potência produzida pelo reator apesar das flutuações de frações volumétricas locais.

Como o estudo de PAIN *et al.* (2002) mostrou a sensibilidade da potência de fissão ao movimento das partículas no leito, a mesma modelagem foi utilizada por PAIN (2003) para avaliar se o ajuste da porosidade do grafite que reveste o núcleo seria capaz de tornar o reator estável apesar da movimentação radial e axial dos elementos combustíveis.

O mesmo reator foi estudado por PAIN (2005) utilizando a mesma modelagem, porém tridimensional. Este foi o primeiro modelo 3D de um reator nuclear de leito fluidizado publicado, demonstrando o valor dos métodos numéricos para modelar reatores conceituais ou existentes. No trabalho, os autores foram capazes de reproduzir a dinâmica das bolhas em um leito fluidizado com partículas do grupo Geldart D reportada na literatura.

WANG *et al.* (2009) publicou um estudo da hidrodinâmica de um reator nuclear conceitual de leito fluidizado do tipo jorro, com hélio sendo fluido refrigerante e partículas de 25 mm de diâmetro, apesar da alta vazão necessária para manter partículas de tal dimensão fluidizadas por um gás. A modelagem bidimensional usou o modelo de dois fluidos usando teoria cinética granular, considerando o sistema isotérmico. Os autores avaliaram a influência da velocidade de entrada do jato e dos ângulos cônicos na uniformidade da distribuição das partículas ao longo do tempo. As simulações mostraram que a habilidade de mistura neste reator de leito fluidizado do tipo jorro levam à distribuição uniforme das partículas, aprimorando a transferência de calor e com isso uniformizam a produção de energia do reator.

GUO *et al.* (2014) apresentaram resultados obtidos com o acoplamento DEM-CFD de um leito fluidizado com partículas dos grupos Geldart A e B. Seu objetivo final era acoplar o método DEM com a simulação de CFD e também um código de análise de segurança de um reator (SIMMER-III) para simulação do comportamento transiente das partículas e a sua termo-hidráulica. Os autores mostraram concordância razoável entre os dados experimentais e os resultados numéricos, ressaltando o método como promissor para simulação de acidentes disruptivos em reatores nucleares.

# Capítulo 3

## Formulação Matemática

Neste capítulo, a formulação matemática do acoplamento CFD-DEM proposto é discutida detalhadamente. As modelagens das fases fluida e particulada são descritas e suas equações apresentadas.

### 3.1 Modelagem da fase discreta

No presente trabalho, a fase sólida é considerada discreta e cada uma das partículas no domínio é acompanhada de forma Lagrangeana através da solução explícita das equações de Newton. A equação que governa o movimento translacional das partículas é apresentada na Equação (3.1), enquanto que a equação que governa seus movimentos rotacionais é apresentada na Equação 3.2.

$$m_p \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \mathbf{F}_c + \mathbf{F}_{f \rightarrow p} + m_p \mathbf{g}, \quad (3.1)$$

$$\mathbf{J}_p \frac{d\boldsymbol{\omega}_p}{dt} = \mathbf{M}_c, \quad (3.2)$$

onde  $m_p$  é a massa da partícula,  $\mathbf{g}$  é a aceleração da gravidade,  $\boldsymbol{\omega}_p$  é a velocidade angular da partícula,  $\mathbf{J}_p$  é seu momento de inércia,  $\mathbf{F}_c$  é a força de contato devido à colisões entre partículas e entre partículas e paredes,  $\mathbf{M}_c$  é o torque aplicado pelas forças de contato e  $\mathbf{F}_{f \rightarrow p}$  é a força adicional responsável por contabilizar a interação entre o fluido e a partícula, cujo cálculo é apresentado na seção 3.1.2.

#### 3.1.1 Forças de contato

O presente trabalho adota o modelo de esferas macias, no qual as partículas podem se sobrepor ligeiramente durante as colisões e a força de contato é calculada em função desta deformação. A força de contato é decomposta em dois componentes ortogonais, consistindo da força normal,  $\mathbf{F}_N$ , e a força tangencial,  $\mathbf{F}_T$ , conforme

ilustrado na Figura 3.1. O cálculo destas duas forças será apresentado nas seções a seguir.

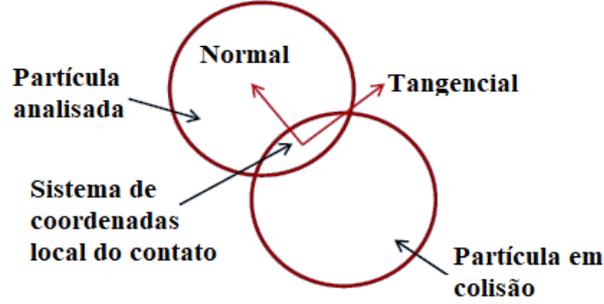


Figura 3.1: Decomposição da força de contato durante a colisão de duas partículas.

### Força de contato normal

O modelo de histerese linear (WALTON, 1993) é adotado no presente trabalho para o cálculo da força normal durante as colisões. A força de contato normal,  $\mathbf{F}_N$ , é calculada de acordo com a Equação 3.3:

$$\mathbf{F}_N = \begin{cases} \min(\mathbf{F}_N^0 + K_U \Delta\delta, K_L \delta), & \text{para } \Delta\delta \geq 0, \\ \max(\mathbf{F}_N^0 + K_U \Delta\delta, 0.001 K_L \delta), & \text{para } \Delta\delta < 0, \end{cases} \quad (3.3)$$

onde  $\mathbf{F}_N^0$  é a força de contato normal do passo de tempo anterior,  $K_L$  e  $K_U$  são as rigidezes de carregamento e descarregamento,  $\delta$  é a sobreposição normal na colisão,  $\delta^0$  é a sobreposição do passo de tempo anterior e  $\Delta\delta$  é a diferença entre a sobreposição atual e a sobreposição do passo de tempo anterior.

Conforme apresentado na Equação 3.4,  $\Delta\delta$  é positiva enquanto as partículas se movem em direção uma da outra (fase de aproximação) e negativa quando as partículas se separam (fase de afastamento).

$$\Delta\delta = \delta - \delta^0 \quad (3.4)$$

A Figura 3.2 ilustra um ciclo típico de carregamento/descarregamento. Durante a fase inicial de aproximação, entre os pontos A e B, ocorre o processo de carregamento, no qual a força aumenta linearmente com a sobreposição com uma inclinação  $K_L$ . Ao atingir a máxima sobreposição, a fase de afastamento se inicia e a força cai deste valor máximo até zero com uma sobreposição  $\delta = \left(\frac{1-K_L}{K_U}\right)$  seguindo a linha com inclinação  $K_U$ .

A deformação plástica do contato só existe enquanto existir o contato, e portanto qualquer deformação residual é desprezada após o contato cessar. A energia dissipada na colisão é numericamente igual à área sombreada na Figura 3.2.

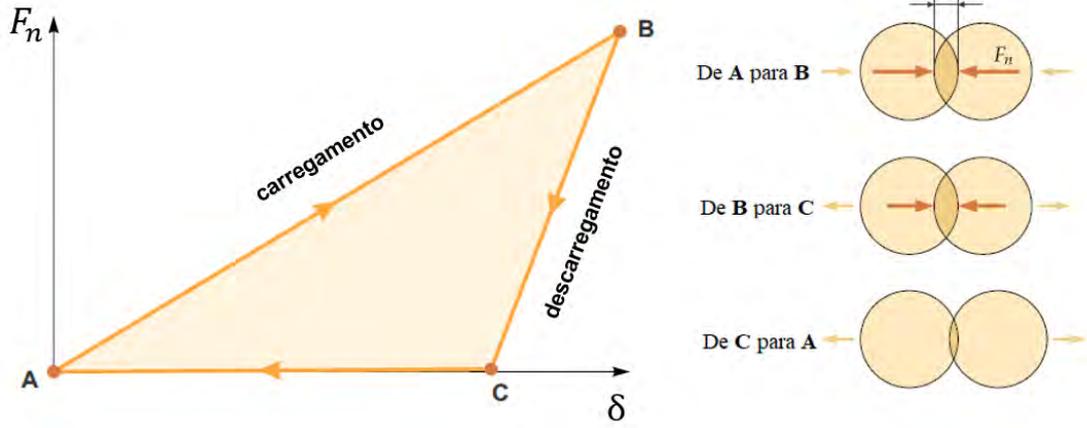


Figura 3.2: Curva típica de força normal contra deformação para o modelo de histerese linear.

As rigidezes de carregamento,  $K_L$ , e de descarregamento,  $K_U$ , são calculadas como funções da rigidez da partícula,  $K_i$ , e do coeficiente de restituição do par em colisão,  $\varepsilon$ , conforme:

$$K_L = \frac{K_i K_j}{K_i + K_j}, \quad (3.5)$$

$$K_U = \frac{K_i K_j}{(K_i + K_j) \varepsilon^2}, \quad (3.6)$$

onde a rigidez das partículas é calculada em função do módulo de Young,  $E_i$ , e do diâmetro da partícula,  $d_i$ , como:

$$K_i = E_i d_i. \quad (3.7)$$

### Força de contato tangencial

A força tangencial é relacionada à força normal de acordo com a lei de Coulomb, onde a força tangencial deve ser menor ou igual a força normal multiplicada pelo coeficiente de atrito estático,  $\eta_{st}$ , no caso de não-deslizamento e dinâmico,  $\eta_d$ , no caso em que ocorre deslizamento. Em geral, os coeficientes de atrito seguem a relação  $\eta_d < \eta_{st}$ .

Para o cálculo da força tangencial,  $\mathbf{F}_T$ , um modelo elástico-friccional é adotado, conforme a Equação 3.8:

$$\mathbf{F}_T = \begin{cases} \min(\mathbf{F}_T^0 + K_L ds_T, \eta_{st} \mathbf{F}_N) & \text{se em deslizamento} \\ \min(\mathbf{F}_T^0 + K_L ds_T, \eta_d \mathbf{F}_N) & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (3.8)$$

onde  $\mathbf{F}_T^0$  é a força tangencial do passo de tempo anterior,  $ds_T$  é o deslocamento tangencial relativo durante o contato,  $\eta_{st}$  é o coeficiente de fricção estático e  $\eta_d$  é o

coeficiente de fricção dinâmico.

Considera-se que o deslizamento ocorre a partir do momento em que a força tangencial excede o limite de  $\eta_{st}\mathbf{F}_N$ . Por outro lado, se assume que o deslizamento deixa de existir assim que a força tangencial fica abaixo de  $\eta_d\mathbf{F}_N$ .

### 3.1.2 Cálculo da força de interação com o fluido

A força de interação com fluido,  $\mathbf{F}_{f \rightarrow p}$ , é geralmente separada em dois termos: o primeiro sendo a força de arrasto,  $\mathbf{F}_D$ , e o segundo composto pelas demais forças, como apresentado na Equação 3.9. Dentre as forças não-arrasto mais comuns estão a força de gradiente de pressão,  $\mathbf{F}_{\nabla p}$ , força de massa virtual,  $\mathbf{F}_{VM}$  e força de sustentação (tanto de Saffman quanto de Magnus),  $\mathbf{F}_L$ .

$$\mathbf{F}_{f \rightarrow p} = \mathbf{F}_D + \mathbf{F}_{N-D} = \mathbf{F}_D + \mathbf{F}_{\nabla p} + \mathbf{F}_L + \mathbf{F}_{VM} + \mathbf{F}_{outras}. \quad (3.9)$$

Dependendo das condições do escoamento, a maioria destas forças pode ser desprezada e somente a força de arrasto e de gradiente de pressão são consideradas. Este é o caso do presente estudo, onde a diferença da massa específica do fluido e do material particulado é elevada.

$$\mathbf{F}_{f \rightarrow p} = \mathbf{F}_D + \mathbf{F}_{\nabla p}. \quad (3.10)$$

A força de gradiente de pressão,  $\mathbf{F}_{\nabla p}$ , é calculada pela Equação 3.11:

$$\mathbf{F}_{\nabla p} = -V_p \nabla p, \quad (3.11)$$

onde  $V_p$  é o volume da partícula e  $\nabla p$  é o gradiente de pressão na posição da partícula.

A força de arrasto,  $\mathbf{F}_D$ , sobre as partículas é calculada conforme a Equação 3.12:

$$\mathbf{F}_D = \frac{1}{2} C_D \rho_f A' |\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p| (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p), \quad (3.12)$$

onde  $\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p$  é a velocidade relativa entre a partícula e a fase fluida,  $A'$  é a área da partícula projetada na direção do escoamento. O coeficiente de arrasto,  $C_D$ , é calculado usando uma das correlações apresentadas na seção 3.1.3, dependendo do caso estudado.

### 3.1.3 Leis de arrasto implementadas

As leis de arrasto utilizadas neste trabalho são apresentadas nesta seção. Em todas as correlações apresentadas, o número de Reynolds baseado no diâmetro da partícula,  $d_p$ , e na velocidade relativa entre a partícula e o fluido,  $Re_p$ , é adotado,

conforme a Equação 3.13.

$$Re_p = \frac{\rho_f |\mathbf{v} - \mathbf{u}| d_p}{\mu_f}. \quad (3.13)$$

### Schiller & Naumann (1933)

A fim de verificar o acoplamento, alguns testes utilizando uma única partícula foram realizados. Dessa forma, a correlação de Schiller & Naumann (1933) (PRITCHARD, 2010) foi implementada. Esta correlação fornece o coeficiente de arrasto,  $C_D$ , para partículas esféricas para  $Re < 800$  com um desvio máximo de 5% em relação aos dados experimentais. A versão original desta correlação é dada pela Equação 3.14 CROWE *et al.* (2011).

$$C_D = \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}). \quad (3.14)$$

Uma modificação comumente adotada para a inclusão do regime inercial ( $Re > 1000$ ) (ANS, 2013a,b; CROWE *et al.*, 2011) é apresentada na Equação 3.15. Esta é a versão implementada neste trabalho.

$$C_D = \max \left[ \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}), 0.44 \right]. \quad (3.15)$$

A Figura 3.3 mostra o ajuste da Equação 3.15 contra dados experimentais obtidos com partículas esféricas publicados em PRITCHARD (2010).

### Wen & Yu (1966)

Para escoamentos densos, leis de arrasto diferentes devem ser utilizadas. Diversas correlações são encontradas na literatura, sendo a maioria destas correções (modificações) de leis de arrasto para partículas em regime diluído, Essas modificações tem como base principal a fração volumétrica do fluido,  $\alpha_f$ , ou a fração volumétrica da fase particulada,  $\alpha_s$ .

Para uma concentração de partículas relativamente baixa, ( $\alpha_s < 0.2$ ), Wen & Yu (1966) desenvolveram uma correlação de arrasto baseada em uma série de experimentos em leitos fluidizados (GIDASPOW, 2012). Esta correlação inclui uma correção (baseada na fração volumétrica do fluido) para a correlação de Schiller & Naumann (1933), conforme a Equação 3.16.

$$C_D = \max \left\{ \frac{24}{\alpha_f Re_p} [1 + 0.15 (\alpha_f Re_p)^{0.687}] \alpha_f^{-1.65}, 0.44 \alpha_f^{-1.65} \right\}. \quad (3.16)$$

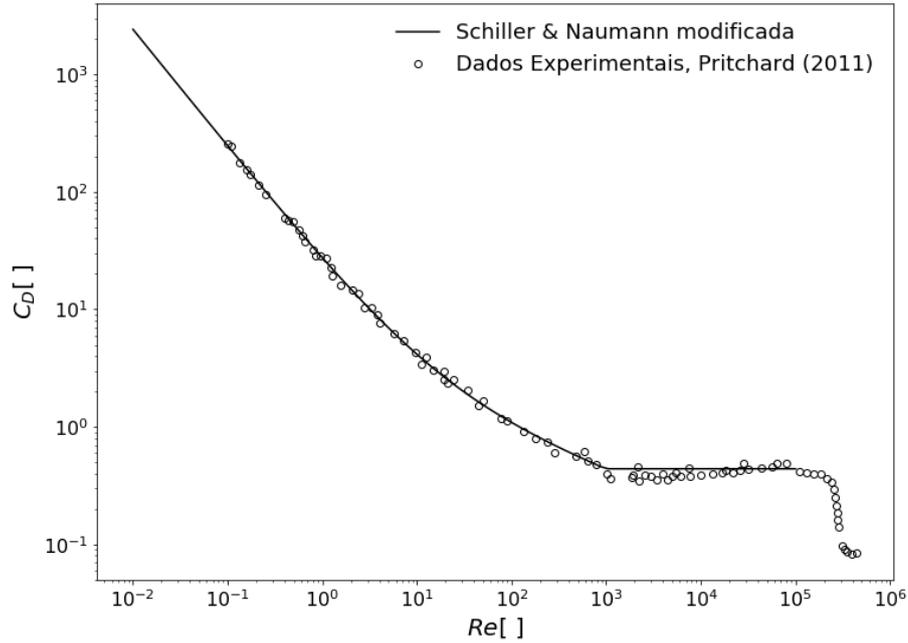


Figura 3.3: Coeficiente de arrasto previsto pela correlação de Schiller & Naumann modificada contra dados experimentais obtidos de PRITCHARD (2010).

### Ergun (1958)

Para concentrações mais elevadas de partículas, a correlação de Wen & Yu (1966) apresenta consideráveis desvios dos dados experimentais. Para estes casos com fração volumétrica de sólidos desde  $\alpha_s > 0.2$  ao limite máximo de empacotamento (que em geral se encontra na faixa de 60 - 70%), Ergun (1958) desenvolveu uma correlação baseada na perda de carga em leitos fixos (CROWE *et al.*, 2011; GIDASPOW, 2012). A forma final da equação de Ergun (1958) é apresentada na Equação 3.17.

$$C_D = 200 \frac{\alpha_s}{\alpha_f Re} + \frac{7}{3}. \quad (3.17)$$

### Huilin & Gidaspow (2003)

A fim de encontrar uma correlação válida para toda a faixa de concentração de sólidos (variando de 0 ao limite máximo de empacotamento), que possuísse uma transição suave entre as correlações de Wen & Yu (1966) e Ergun (1958); Huilin & Gidaspow (2003) aplicaram uma função de ligação para promover a conexão baseada na fração volumétrica do fluido. A forma final da correlação de Huilin & Gidaspow (2003) é dada pela Equação 3.18, enquanto que a função de ligação,  $\psi$ , é calculada

de acordo com a Equação 3.19.

$$C_{D_{H\&G}} = \psi C_{D_{Ergun}} + (1 - \psi) C_{D_{Wen\&Yu}}, \quad (3.18)$$

$$\psi = \frac{\arctan [150 \cdot 1.75 (0.8 - \alpha_f)]}{\pi} + 0.5. \quad (3.19)$$

Na Figura 3.4 foram plotados os coeficientes de arrasto previstos por estas leis de arrasto para escoamentos densos com fração volumétrica de fluido igual a  $\alpha_f = 0.4$ , juntamente com dados experimentais obtidos em DI FELICE (1994). A esta fração volumétrica de sólidos, as correlações se mostram muito próximas.

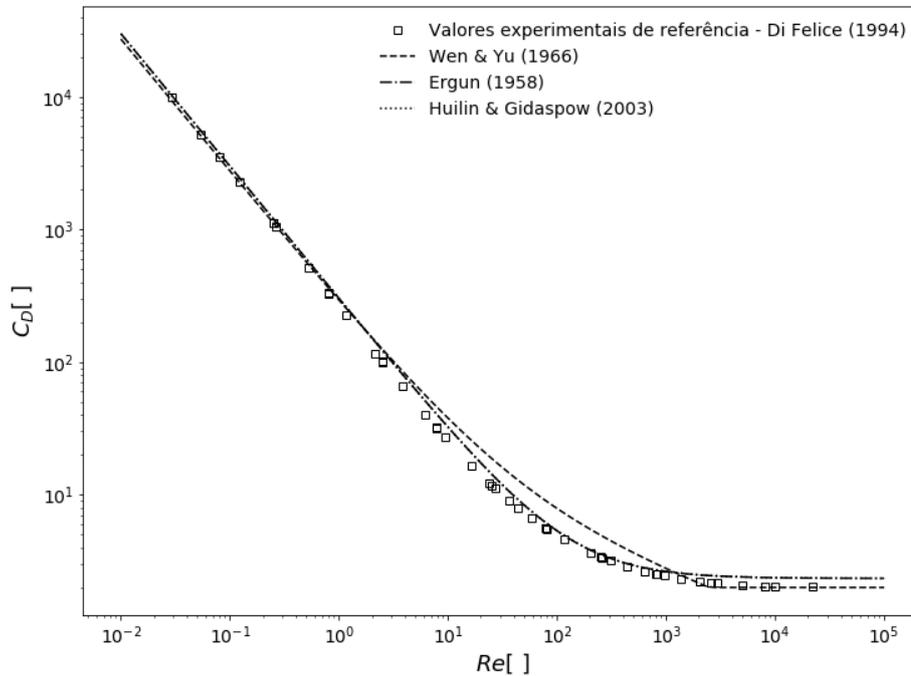


Figura 3.4: Previsão do coeficiente de arrasto pelas correlações implementadas para  $\alpha_f = 0.4$  para diferentes  $Re_p$  contra dados experimentais obtidos em DI FELICE (1994).

Na Figura 3.5 foram plotados os coeficientes de arrasto previsto por estas mesmas leis para um número de Reynolds fixo ( $Re_p = 1000$ ) e fração volumétrica de fluido variando. Neste gráfico, é possível perceber que as variações entre as leis são significativas, levando à grandes diferenças na previsão das interações entre as fases sólidas e fluidas.

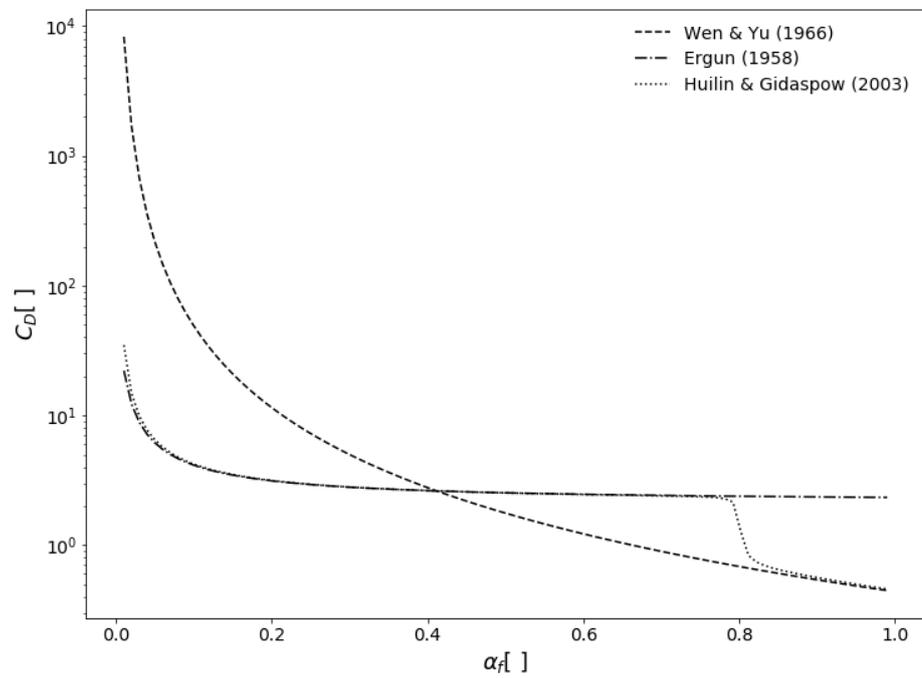


Figura 3.5: Previsão do coeficiente de arrasto pelas correlações implementadas para  $Re_p = 1000$  e diferentes valores de  $\alpha_f$ .

### 3.1.4 Balanço de energia na partícula

Junto com as equações que governam o movimento da partícula, é resolvida uma equação para o balanço de energia sobre a mesma. Considerando que a partícula pode ter um termo fonte de geração de energia, a variação da temperatura média da partícula ao longo do tempo pode ser obtida como:

$$m_p c_{pp} \frac{dT_{av}}{dt} = \dot{q}_p + \dot{q}''' V_p, \quad (3.20)$$

onde  $T_{av}$  é a temperatura média da partícula,  $c_{pp}$  é o calor específico do material do qual a partícula é composta,  $V_p$  é o volume da partícula,  $\dot{q}'''$  é a taxa volumétrica de geração de energia e  $\dot{q}_p$  é a taxa de transferência de calor para a partícula.

Existem diferentes formas de transferência de calor em um sistema particulado denso. De acordo com VARGAS e MCCARTHY (2002), os modos mais comuns de transferência de calor na fase particulada ocorrem seguem os seguintes mecanismos:

- Condução térmica através da partícula
- Condução térmica através da área de contato entre duas partículas
- Condução térmica com o fluido presente entre partículas vizinhas
- Transferência por radiação com o fluido
- Transferência por radiação com as partículas vizinhas
- Transferência por convecção, caso haja escoamento
- Aquecimento por fricção no contato entre partículas e partículas e paredes

De acordo com (ZABRODSKY, 1966), a transferência de calor por radiação pode ser desprezada a temperaturas relativamente baixas (tipicamente abaixo de 700 K. Como todos os casos avaliados neste trabalhos têm temperaturas bem inferiores a essa, todos os modos de transferência de calor por radiação foram desconsiderados.

Desprezando a transferência por radiação, BATCHELOR e O'BRIEN (1977) mostrou que a condução através da fase sólida (no interior da partícula e entre partículas) domina o processo de condução quando:

$$\frac{k_s d_c}{k_f \bar{d}_p} \gg 1, \quad (3.21)$$

onde  $k_s$  é a condutividade da fase sólida,  $k_f$  é a condutividade do meio intersticial,  $d_c$  é o diâmetro do contato e  $\bar{d}_p$  é o diâmetro média das partículas. A expressão

mostrada na Equação 3.21 é satisfeita quando as razões entre as condutividades é elevada  $\left(\frac{k_s}{k_f}\right)$  ou para partículas no vácuo ( $k_f \rightarrow 0$ ).

MOLERUS (1997) mostrou que, na presença de um gás intersticial estagnado, a condução entre partículas é o processo dominante em leitos fixos ou se movendo lentamente. Dessa forma, a condução entre as partículas e o fluido intersticial foi desprezada no presente trabalho.

O calor gerado no atrito das partículas com outras partículas e com as paredes também foi desconsiderado visto que, sob as baixas velocidades, sua magnitude é desprezível frente às outras formas de transferência de calor.

Dessa forma, a taxa de transferência de calor para a partícula,  $\dot{q}_p$ , na Equação 3.20, contabiliza somente a transferência de calor que ocorre no contato com outras partículas ou paredes,  $\dot{q}_c$ , e a transferência de calor entre a partícula e a fase fluida,  $\dot{q}_{f \rightarrow p}$ , conforme a Equação 3.22.

$$\dot{q}_p = \dot{q}_c + \dot{q}_{f \rightarrow p}. \quad (3.22)$$

O cálculo da transferência de calor entre o fluido e a partícula,  $\dot{q}_{f \rightarrow p}$ , e o cálculo da transferência de calor que ocorre no contato,  $\dot{q}_c$ , são apresentados a seguir.

### Cálculo da transferência de calor durante o contato

O modelo usado para a transferência de calor nas colisões entre partículas e partículas e paredes é baseado na solução quasi-estacionária da colisão entre duas esferas (AMRITKAR, 2013). Esta abordagem é particularmente útil para aplicações onde acontecem colisões envolvendo mais de duas partículas ao mesmo tempo, como é o caso de escoamentos particulados densos.

A taxa total de transferência de calor entre a partícula  $i$  e todos os seus ( $N$ ) vizinhos  $j$  é calculada como:

$$\dot{q}_c = \sum_{j=1, j \neq i}^N \dot{q}_{c,ij}, \quad (3.23)$$

onde  $\dot{q}_{c,ij}$  é o calor trocado entre a partícula  $i$  e uma partícula ou parede  $j$ .

O calor transportado através da interface de colisão por unidade de tempo pode ser escrito em termos da condutância do contato,  $H_c$ , usando um modelo linear como:

$$\dot{q}_{c,ij} = H_c (T_{S,j} - T_{S,i}), \quad (3.24)$$

onde  $T_{S,i}$  é a temperatura da superfície da partícula  $i$ ,  $T_{S,j}$  é a temperatura da superfície da partícula ou parede  $j$ .

A condutância do contato é calculada como:

$$H_c = k_{c,ij}d_{c,ij}. \quad (3.25)$$

A condutividade térmica efetiva do contato,  $k_{c,ij}$ , é calculada de acordo com a equação 3.26, enquanto que o diâmetro do contato,  $d_{c,ij}$ , considerado muito menor que o diâmetro equivalente das partículas  $i$  e  $j$  envolvidas na colisão, é calculado conforme CHAUDHURI *et al.* (2006):

$$k_{c,ij} = \frac{2}{\frac{1}{k_i} + \frac{1}{k_j}}, \quad (3.26)$$

$$d_{c,ij} = \left( \frac{4F_{N,ij}d_{ij}}{E_{ij}} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (3.27)$$

onde  $F_{N,ij}$  é a magnitude da força normal no contato entre  $i$  e  $j$ ,  $d_{ij}$  é a média harmônica dos diâmetros das partículas envolvidas, como mostrado na Equação 3.28, e  $E_{ij}$  é o módulo de Young equivalente do contato, calculado conforme a Equação 3.29.

$$d_{ij} = \frac{2}{\frac{1}{d_i} + \frac{1}{d_j}}, \quad (3.28)$$

$$E_{ij} = \frac{4}{3} \frac{1}{\frac{1-\sigma_i^2}{E_i} + \frac{1-\sigma_j^2}{E_j}}, \quad (3.29)$$

onde  $\sigma_i$  é a razão de Poisson da partícula ou parede. No caso de colisão com a parede,  $d_j = d_i$  na Equação 3.28.

### Cálculo da transferência de calor entre o fluido e a partícula

A taxa de transferência de calor entre o fluido e a partícula,  $\dot{q}_{f \rightarrow p}$ , é calculada através da lei de resfriamento de Newton, dada pela Equação 3.30, que dita que a taxa de transferência de calor para um corpo é diretamente proporcional à diferença de temperatura entre a superfície do corpo e o fluido.

$$\dot{q}_{f \rightarrow p} = hA_p(T_f - T_S), \quad (3.30)$$

onde  $T_S$  é a temperatura na superfície da partícula,  $T_f$  é a temperatura do fluido local,  $A_p$  é a área superficial da partícula.

O coeficiente de transferência de calor,  $h$ , depende tanto de propriedades físicas do fluido quanto das condições de operação. Como exemplo, para o mesmo conjunto de fluido e partículas, um escoamento turbulento tem um coeficiente de transferência de calor mais alto do que um escoamento laminar. O coeficiente médio de trans-

ferência de calor por convecção,  $h$ , é calculado como função do número de Nusselt,  $Nu$ , por:

$$h = \frac{Nu k_f}{d_p}, \quad (3.31)$$

onde  $k_f$  é a condutividade térmica da fase fluida.

Diferentes correlações são encontradas na literatura para o cálculo do número de Nusselt, geralmente em função do número de Reynolds e do número de Prandtl, este último definido na equação 3.32:

$$Pr = \frac{c_{p_f} \mu_f}{k_f}. \quad (3.32)$$

Para este trabalho foram implementadas duas correlações para o cálculo do número de Nusselt: uma para os casos de validação que usam apenas uma partícula e uma para os casos em que o escoamento é denso. As correlações para o cálculo do número de Nusselt presentes trabalho são apresentadas a seguir.

### **Ranz & Marshall (1952)**

A correlação de Ranz & Marshall (1952) (BERGMAN *et al.*, 2011; E, 2006) é válida para o cálculo do número de Nusselt para partículas esféricas solitárias sob número de Reynolds abaixo de  $Re < 5 \cdot 10^4$  conforme a Equação 3.33:

$$Nu = 2 + 0.6Re^{1/2}Pr^{1/3}. \quad (3.33)$$

Na Figura 3.6 foram plotadas os números de Nusselt previstos usando a correlação de Ranz & Marshall para uma única partícula esférica em água e em ar, sob diferentes números de Reynolds, contra dados experimentais publicados em ROWE e LEWIS (1965).

### **Gunn (1978)**

A correlação empírica de (GUNN, 1978) é empregada para calcular a transferência de calor em um leito fixo ou fluidizado de partículas com fração volumétrica de fluido na faixa de  $0.35 \leq \alpha_f \leq 1$ , escoando sob número de Reynolds até  $Re \leq 10^5$ . A correlação empírica de Gunn (1978) é apresentada na Equação 3.34

$$Nu = (7 - 10\alpha_f + 5\alpha_f^2) \left(1 + 0.7Re^{0.2}Pr^{1/3}\right) + (1.33 - 2.4\alpha_f + 1.2\alpha_f^2) Re^{0.7}Pr^{1/3}. \quad (3.34)$$

Na Figura 3.7 foram plotados os valores previstos para o número de Nusselt usando a correlação de Gunn para diversos valores de número de Reynolds contra

resultados experimentais obtidos por diferentes autores (GUNN e DE SOUZA, 1974; LITTMAN e SILVA, 1970; MIYAUCHI *et al.*, 1976; TURNER e OTTEN, 1973).

### 3.1.5 Formulação aprimorada para o cálculo da transferência de calor entre o fluido e a partícula

A abordagem de parâmetros concentrados clássica assume que a temperatura na superfície da partícula,  $T_S$ , pode ser aproximada pela temperatura média da partícula,  $T_{av}$ , ou seja:

$$T_S = T_{av}. \quad (3.35)$$

Na tentativa de melhorar a aproximação da abordagem de parâmetros concentrados padrão, um modelo aprimorado foi desenvolvido para providenciar uma melhor relação entre a temperatura de superfície e a temperatura média na partícula. Isto é alcançado através de aproximações do tipo de Hermite para as integrais que definem a temperatura média e o fluxo de calor. Esta é umas das contribuições desta tese.

A forma geral da aproximação de Hermite para uma integral, baseada nos valores do integrando,  $y(x)$ , e suas derivadas nos limites de integração  $a$  e  $b$ ,  $y^{(\nu)}(x)$ , é dada

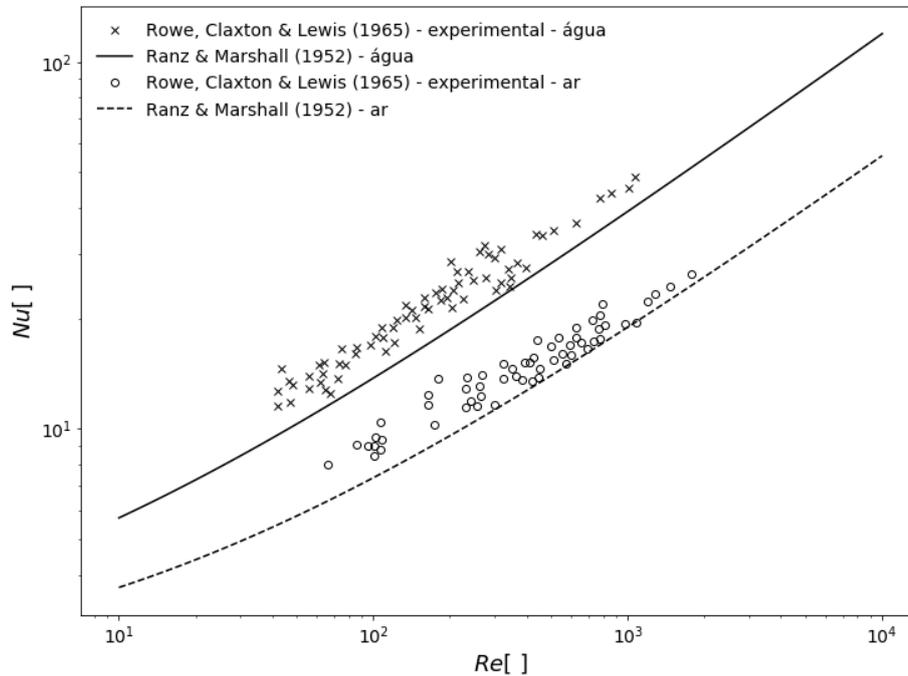


Figura 3.6: Previsão do número de Nusselt usando a correlação de Ranz & Marshall para uma partícula esférica sob diferentes números de Reynolds.

por MENNIG *et al.* (1983) como:

$$\int_a^b y(x)dx = \sum_{\nu=0}^{\alpha} C_{\nu}(\alpha, \beta) p^{\nu+1} y^{(\nu)}(a) + \sum_{\nu=0}^{\beta} D_{\nu}(\beta, \alpha) (-1)^{\nu} p^{\nu+1} y^{(\nu)}(b), \quad (3.36)$$

onde  $p = b - a$  e os coeficientes  $C_{\nu}$  e  $D_{\nu}$  são dados por:

$$C_{\nu}(\alpha, \beta) = \frac{(\alpha + 1)! (\alpha + \beta + 1 - \nu)!}{(\nu + 1)! (\alpha - \nu)! (\alpha + \beta + 2)!}. \quad (3.37)$$

A variação da temperatura da partícula,  $T(r, t)$ , ao longo do raio para cada tempo é descrita por:

$$\rho_p c_{p_p} \frac{\partial T(r, t)}{\partial t} = \frac{k_p}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \right) + q'''(t) \quad (3.38)$$

onde  $\rho_p$  é a densidade da partícula,  $c_{p_p}$  é o calor específico da partícula,  $k_p$  é a condutividade térmica da partícula e  $q'''(t)$  é a taxa volumétrica de geração de calor

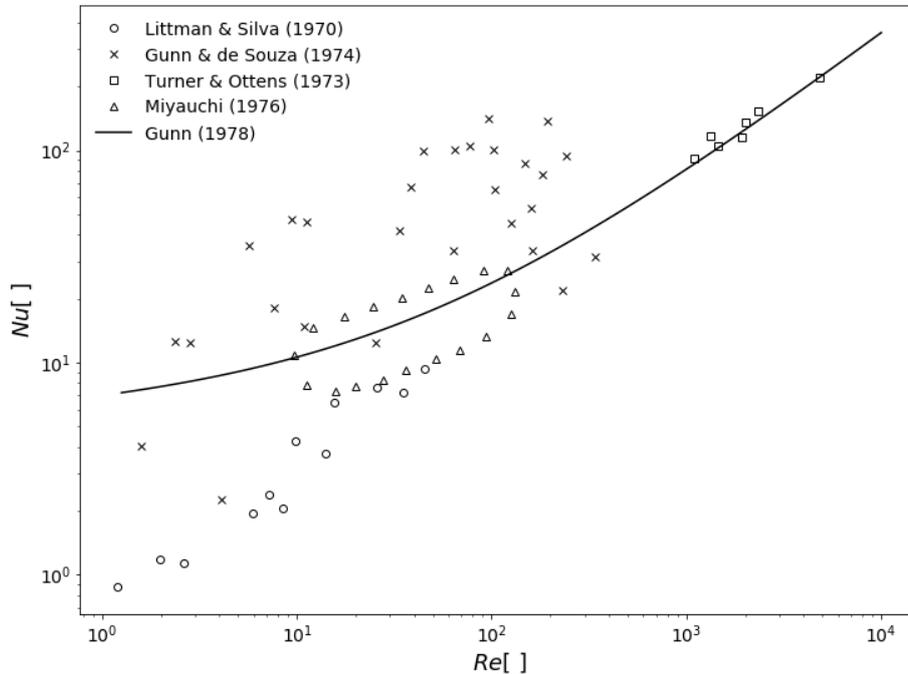


Figura 3.7: Previsão do número de Nusselt para um leito fixo de partículas esféricas usando a correlação de Gunn e a comparação com dados experimentais.

As seguintes condições de contorno se aplicam:

$$\left. \frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad (3.39)$$

$$-k_p \left. \frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \right|_{r=R} = h(t) (T_S(t) - T_m(t)) + q''(t), \quad (3.40)$$

onde  $T_m(t)$  é a temperatura local do fluido no instante  $t$ ,  $T_S(t)$  é a temperatura na superfície da partícula no instante  $t$ ,  $h(t)$  é o coeficiente médio de transferência de calor por convecção no instante  $t$  e  $q''$  é o fluxo de calor por condução durante a colisão com outras partículas e com as paredes.

A aproximação por Hermite  $H_{(0,0)}$  para a integral da temperatura em toda a partícula, onde  $y(r) = \frac{\partial T(r, t)}{\partial r}$ , é dada por:

$$\int_0^R \left( \frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \right) dr = C_0(0, 0)Ry(0) + D_0(0, 0)Ry(R). \quad (3.41)$$

Como pela condição de contorno 3.39 o fluxo no centro da partícula é zero, tem-se que  $y(0) = 0$ . Sendo  $D_0(0, 0) = \frac{1}{2}$ , tem-se que

$$\int_0^R \left( \frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \right) dr = \frac{R}{2} \left. \frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \right|_{r=R}, \quad (3.42)$$

Usando a condição de contorno 3.40:

$$\frac{R}{2} \left. \frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \right|_{r=R} = \frac{R}{2k_p} \left( h(t)T_m(t) - h(t)T_S(t) - q''(t) \right), \quad (3.43)$$

Usando agora a identidade da integral, onde  $T_0(t)$  é a temperatura no centro da partícula:

$$\int_0^R \left( \frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \right) dr = T_S(t) - T_0(t), \quad (3.44)$$

Chega-se então que:

$$T_S(t) - T_0(t) = \frac{R}{2k_p} \left( h(t)T_m(t) - h(t)T_S(t) - q''(t) \right). \quad (3.45)$$

A temperatura média da partícula,  $T_{av}$  é dada pela Equação 3.46:

$$T_{av}(t) = \frac{\int_0^R 4\pi r^2 T(r, t) dr}{\frac{4}{3}\pi R^3} = \frac{3}{R^3} \int_0^R r^2 T(r, t) dr, \quad (3.46)$$

E a derivada da temperatura média é dada pela Equação 3.47.

$$\frac{\partial T_{av}(t)}{\partial t} = \frac{3}{R^3} \int_0^R r^2 \frac{\partial T(r, t)}{\partial t} dr, \quad (3.47)$$

### Aproximação de Hermite para a temperatura média

A aproximação de Hermite para uma integral, apresentada na equação 3.36, é baseada nos valores do integrando e suas derivadas nos limites de integração. Para a aproximação da temperatura média, os valores do integrando e suas derivadas são:

$$\begin{aligned} y(r) &= r^2 T(r) \\ y'(r) &= r^2 T'(r) + 2rT(r) \\ y''(r) &= r^2 T''(r) + 4rT'(r) + 2T(r) \\ y'''(r) &= r^2 T'''(r) + 6rT''(r) + 6rT'(r) \end{aligned} \quad (3.48)$$

Para que o limite de integração inferior (centro da partícula,  $r = 0$ ) seja levado em conta na aproximação, é necessário que uma aproximação de Hermite de ordem igual ou superior a 2 seja usado para o limite de integração inferior (centro da partícula), ou seja,  $H_{(\alpha \geq 2, \beta)}$ . O uso de uma aproximação de Hermite de ordem igual a 3 para o limite de integração superior, entretanto, não levaria em conta a contribuição da temperatura no centro para a temperatura média. Por sua vez, o uso de uma aproximação de Hermite de ordem igual a 4 iria requerer o conhecimento da derivada segunda da temperatura no centro da partícula, o que não está disponível para o problema em questão.

Por outro lado, o uso de uma aproximação de Hermite de ordem superior a 1 para o limite de integração superior requer o conhecimento da segunda derivada da temperatura na superfície da partícula, o que não é conhecido para o problema em questão.

Sendo assim, aproximações de Hermite de ordem  $H_{(2, \beta \leq 1)}$  foram utilizados no trabalho para a aproximação da temperatura média. Na seção 5.3, as formulações aprimoradas usando as aproximações de Hermite  $H_{(2,0)}$  e  $H_{(2,1)}$  foram confrontadas na solução de um problema simples cuja solução analítica é conhecida.

### Aproximação de Hermite $H_{(2,0)}$ para a temperatura média

Usando a aproximação de Hermite  $H_{(2,0)}$  para a temperatura média, tem-se que:

$$\begin{aligned} T_{av}(t) \frac{R^3}{3} &= C_0(2, 0) Ry(0) + C_1(2, 0) R^2 y'(0) \\ &+ C_2(2, 0) R^3 y''(0) + D_0(0, 2) Ry(R), \end{aligned} \quad (3.49)$$

Como:

$$\begin{aligned}
 y(0) &= 0 \\
 y'(0) &= 0 \\
 y''(0) &= 2T_0(t) \\
 y(R) &= R^2T_S(t)
 \end{aligned}
 \tag{3.50}$$

Chega-se a:

$$T_{av}(t) \frac{R^3}{3} = 2C_2(2,0)R^3T_0(t) + D_0(0,2)R^3T_S(t)
 \tag{3.51}$$

Como os coeficientes são:

$$\begin{aligned}
 C_2(2,0) &= \frac{1}{24} \\
 D_0(0,2) &= \frac{1}{4}
 \end{aligned}
 \tag{3.52}$$

Tem-se que:

$$T_{av}(t) = \frac{1}{4}T_0(t) + 3T_S(t)
 \tag{3.53}$$

Rescrevendo-se a equação anterior, chega-se que a temperatura no centro da partícula,  $T_0(t)$ , é calculada como:

$$T_0(t) = 4T_{av}(t) - 3T_S(t)
 \tag{3.54}$$

Por fim, substituindo-se a Equação 3.54 na equação 3.45, é possível escrever a temperatura na superfície da partícula,  $T_S(t)$  em função da temperatura média,  $T_{av}(t)$ :

$$T_S(t) = T_{av}(t) + \frac{R}{8k_p} \left[ h(T_f(t) - T_S(t)) - q_c'' \right].
 \tag{3.55}$$

Esta temperatura na superfície,  $T_S(t)$ , é usada para o cálculo das taxas de transferência de calor por condução e convecção (Equações 3.24 e 3.30, respectivamente), necessárias para resolver a equação de balanço de energia e obter a variação da temperatura média (Equação 3.20).

### Aproximação de Hermite $H_{(2,1)}$ para a temperatura média

Usando a aproximação de Hermite  $H_{(2,1)}$  para a temperatura média, tem-se que:

$$\begin{aligned} T_{av}(t) \frac{R^3}{3} &= C_0(2, 1)Ry(0) + C_1(2, 1)R^2y'(0) + C_2(2, 1)R^3y''(0) \\ &+ D_0(1, 2)Ry(R) - D_1(1, 2)R^2y'(R), \end{aligned} \quad (3.56)$$

Como:

$$\begin{aligned} y(0) &= 0 \\ y'(0) &= 0 \\ y''(0) &= 2T_0(t) \\ y(R) &= R^2T_S(t) \\ y'(R) &= 2RT_S(t) + R^2 \left. \frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \right|_{r=R}, \end{aligned} \quad (3.57)$$

sendo que os coeficientes são:

$$\begin{aligned} C_0(2, 1) &= \frac{1}{5} \\ C_1(2, 1) &= \frac{3}{20} \\ C_2(2, 1) &= \frac{1}{60} \\ D_0(1, 2) &= \frac{2}{5} \\ D_1(1, 2) &= \frac{1}{20}, \end{aligned} \quad (3.58)$$

Tem-se que:

$$\begin{aligned} T_{av}(t) \frac{R^3}{3} &= \frac{1}{30}R^3T_0(t) + \frac{2}{5}R^3T_S(t) \\ &- \frac{1}{20}R^2 \left( 2RT_S(t) + R^2 \left. \frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \right|_{r=R} \right). \end{aligned} \quad (3.59)$$

Substituindo a condição de contorno 3.40 na equação 3.59 tem-se que:

$$\begin{aligned} T_{av}(t) \frac{R^3}{3} &= \frac{1}{30}R^3T_0(t) + \frac{2}{5}R^3T_S(t) \\ &- \frac{1}{10}R^3T_S(t) - \frac{1}{20}R^4 \left( \frac{h(t)(T_S(t) - T_m(t)) + q''(t)}{k_p} \right) \end{aligned} \quad (3.60)$$

Rescrevendo-se a equação anterior, chega-se que a temperatura no centro da

partícula,  $T_0(t)$ , é calculada como:

$$T_0(t) = 10T_{av}(t) - 9T_S(t) + \frac{3R}{2} \left( \frac{h(T_f(t) - T_S(t)) - q_c''}{k_p} \right). \quad (3.61)$$

Por fim, substituindo-se a Equação 3.61 na equação 3.45, é possível escrever a temperatura na superfície da partícula,  $T_S(t)$  em função da temperatura média,  $T_{av}(t)$ :

$$T_S(t) = T_{av}(t) + \frac{R}{5k_p} \left[ h(T_f(t) - T_S(t)) - q_c'' \right]. \quad (3.62)$$

Esta temperatura na superfície,  $T_S(t)$ , é usada para o cálculo das taxas de transferência de calor por condução e convecção (Equações 3.24 e 3.30, respectivamente), necessárias para resolver a equação de balanço de energia e obter a variação da temperatura média (Equação 3.20).

## 3.2 Modelagem das fases fluidas

Neste trabalho, as fases fluidas são descritas através das clássicas equações de balanço de energia e Navier-Stokes promediadas no volume das células (DREW, 1993). A equação de conservação de massa é dada pela Equação 3.63 enquanto a equação de balanço de quantidade de movimento é dada pela Equação 3.64.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_f \rho_f) + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \mathbf{u}_f) = 0 \quad (3.63)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_f \rho_f \mathbf{u}_f) + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \mathbf{u}_f \mathbf{u}_f) = -\alpha_f \nabla p + \nabla \cdot (\alpha_f \mathbf{\Gamma}_f) + \alpha_f \rho_f \mathbf{g} + \mathbf{F}_{p \rightarrow f} \quad (3.64)$$

onde  $p$  é a pressão compartilhada entre todas as fases,  $\alpha_f$  é a fração volumétrica,  $\rho_f$  é a massa específica e  $\mathbf{u}_f$  é a velocidade, todos da fase fluida. O termo  $\mathbf{F}_{p \rightarrow f}$  representa a fonte de quantidade de movimento devido à interação da fase fluida com a fase particulada e  $\mathbf{\Gamma}_f$  é o tensor de tensões viscosas da fase fluida, definido na Equação 3.65.

$$\mathbf{\Gamma}_f = \mu_f (\nabla \mathbf{u}_f + \nabla \mathbf{u}_f^T) + \left( \lambda_f - \frac{2}{3} \mu_f \right) \nabla \cdot \mathbf{u}_f \mathbf{I}. \quad (3.65)$$

Já para descrever o balanço de energia, uma equação de balanço para entalpia é escrita para cada fase fluida, conforme a Equação 3.66.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_f \rho_f h_f) + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \mathbf{u}_f h_f) = \alpha_f \frac{\partial p_f}{\partial t} + \alpha_f \mathbf{\Gamma}_f : \nabla \mathbf{u}_f - \nabla \cdot \mathbf{q}_f + Q_{p \rightarrow f} \quad (3.66)$$

onde  $h_f$  é a entalpia específica do fluido,  $\mathbf{q}_f$  é o fluxo de calor,  $Q_{p \rightarrow f}$  é o calor trocado entre a fase fluida e fase particulada.

Um termo fonte é incluído na equação da continuidade da fase dispersa para impor a fração volumétrica calculada no lado DEM em cada célula da malha.

As equações de balanço de quantidade de movimento e energia da fase que representa a fase discreta não são resolvidas pelo Fluent<sup>®</sup>, visto que é o solver de DEM que calcula a velocidade, posição e temperatura de cada partícula ao longo do tempo.

Os termos de transferência de quantidade de movimento e energia entre fluido e partículas não são calculados no lado do solver de CFD, mas sim pelo solver de DEM e incluídos nas equações de conservação de quantidade de movimento e energia da fase contínua através dos termos fontes  $\mathbf{F}_{p \rightarrow f}$  e  $Q_{p \rightarrow f}$ .

# Capítulo 4

## Metodologia Computacional

Neste capítulo, a metodologia computacional é descrita, o algoritmo de simulação é explicado e a interação entre os softwares Rocky (DEM) e Fluent (CFD) é detalhada.

### 4.1 Solução da fase fluida

#### 4.1.1 Método de solução

No modelo multifásico Euleriano do software ANSYS Fluent (ANS, 2013b), as equações de conservação para a fase fluida são idênticas às equações do modelo CFD-DEM apresentado anteriormente na seção 3.2, de forma que este software foi utilizado para resolver a fase fluida.

A escolha do software comercial Fluent se deveu principalmente ao suporte de funções definidas pelo usuário (UDF -user-defined functions) para a customização de algumas partes do código. Esta funcionalidade permitiu a definição de termos fontes nas equações de conservação da fase fluida, que fizeram a integração dentre a solução da fase discreta e a solução da fase contínua.

O solver do Fluent é baseado na pressão (pressure-based solver). Neste método, em que a restrição de conservação de massa (continuidade) do campo de velocidade é obtida resolvendo-se uma equação de pressão (ou correção de pressão). A equação de pressão é derivada das equações de continuidade e de balanço de quantidade de movimento de tal forma que o campo de velocidade, corrigido pela pressão, satisfaz a continuidade. Como as equações governantes são não-lineares e acopladas umas às outras, o processo de solução envolve iterações em que o conjunto inteiro de equações governantes é resolvido repetidamente até que a convergência numérica seja obtida.

O algoritmo segregado PC-SIMPLE (Phase Coupled SIMPLE), que é uma extensão do algoritmo SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equati-

ons) para modelos multifásicos, foi adotado para o acoplamento pressão-velocidade. Neste método os termos de acoplamento são tratados implicitamente e fazem parte da matriz de solução. O acoplamento pressão-velocidade é baseado na equação de continuidade volumétrica total e os efeitos dos termos de acoplamento interfaciais são incorporados às equações de correção de pressão. Informações mais detalhadas sobre este método segregado de acoplamento podem ser encontradas em VASQUEZ e IVANOV (2000).

As equações integrais de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e outros escalares como as grandezas relativas aos modelos de turbulência são resolvidas usando o método de volumes finitos clássico (PATANKAR, 1980) para converter as equações de transporte em equações algébricas que podem ser resolvidas numericamente. O método contempla as seguintes etapas:

1. O domínio é dividido em volumes de controles discretos usando uma malha computacional.
2. As equações governantes são integradas em cada volume de controle individual para a geração de equações discretas que expressam as leis de conservação em uma base de volume de controle.
3. Estas equações discretizadas são então linearizadas gerando um sistema de equações algébricas com uma matriz de coeficientes esparsa.
4. O sistema de equações lineares resultante é resolvido usando um solver de equações lineares técnicas de ponto implícito (Gauss-Seidel) em conjunto com um método de malhas múltiplas (algebraic multigrid) (HUTCHINSON e RAITHBY, 1986) para atualizar as variáveis dependentes a cada passo de tempo.

O solver Fluent armazena as variáveis discretas no centro das células. Porém, valores nas faces são necessários para os termos convectivos das equações discretizadas, e devem portanto ser interpolados a partir dos valores dos centros das células. Um esquema de segunda ordem upwind (Second-Order Upwind (ANS, 2013b)) foi adotado para o cálculo dos valores das faces na equação de conservação de quantidade de movimento linear e para as equações de energia cinética turbulenta e taxa de dissipação de energia cinética turbulenta, enquanto que o modelo QUICK (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics) foi adotado para a interpolação da fração volumétrica em todas as simulações deste trabalho.

Um esquema implícito de primeira ordem foi adotado para discretização temporal, limitação imposta pelo uso de funções definidas pelo usuário (UDFs) no Fluent. Para avaliação dos gradientes e derivadas, o método Least-Square Cell-Based (ANS, 2013b) foi empregado.

### 4.1.2 Transferência semi-implícita dos termos fontes

A fim de aprimorar a convergência, um tratamento semi-implícito foi adotado para os termos fontes de momentum e energia no lado CFD do acoplamento. Neste procedimento, ao invés de simplesmente utilizar os valores da força da taxa de transferência de calor calculados no lado DEM, estes termos são divididos em uma parte explícita e uma parte implícita.

Para se aplicar esse procedimento, em cada célula da malha são somadas as forças provenientes de cada partícula cujo centróide se localiza no interior da célula:

$$\mathbf{F}_{p \rightarrow f} = -\frac{\sum_{p=1}^N \mathbf{F}_D + \mathbf{F}_{\nabla p}}{V_c}, \quad (4.1)$$

$$\mathbf{F}_{p \rightarrow f} = -\frac{\sum_{p=1}^N \beta_{pf} (\mathbf{v}_p - \mathbf{u}_f)}{V_c} - \frac{\sum_{p=1}^N \mathbf{F}_{\nabla p}}{V_c}. \quad (4.2)$$

Na equação 4.2,  $\beta_{pf}$  é o coeficiente de troca de momentum entre a fase sólida e a fase fluida, dado pela Equação 4.3.

$$\beta_{pf} = \frac{1}{2} C_D \rho_f A' |\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p| \quad (4.3)$$

onde  $C_D$  é o coeficiente de arrasto, calculado usando as correlações apresentadas na seção 3.1.3 e  $A'$  é a área projetada da partícula na direção em que a força está sendo calculada.

O primeiro termo do lado direito da Equação 4.2 pode ser aberto em dois termos, conforme a Equação 4.4.

$$\mathbf{F}_{p \rightarrow f} = -\frac{\sum_{p=1}^N \beta_{pf} \mathbf{v}_p}{V_c} - \frac{\sum_{p=1}^N \beta_{pf} \mathbf{u}_f}{V_c} - \frac{\sum_{p=1}^N \mathbf{F}_{\nabla p}}{V_c} \quad (4.4)$$

No método clássico de volumes finitos, a velocidade do fluido é considerada constante dentro de uma célula. Sendo assim, o segundo termo do lado direito da Equação 4.4 pode ser escrito conforme a Equação 4.5:

$$\mathbf{F}_{p \rightarrow f} = -\frac{\sum_{p=1}^N \beta_{pf} \mathbf{v}_p}{V_c} - \frac{\sum_{p=1}^N \beta_{pf}}{V_c} \mathbf{u}_f - \frac{\sum_{p=1}^N \mathbf{F}_{\nabla p}}{V_c} \quad (4.5)$$

Reescrevendo a Equação 4.5 se deixam evidentes as porções explícitas e implícitas das forças de interação entre as fases, conforme a Equação 4.6:

$$\mathbf{F}_{p \rightarrow f} = -\frac{\sum_{p=1}^N \beta_{pf} \mathbf{v}_p + \mathbf{F}_{\nabla p}}{V_c} - \frac{\sum_{p=1}^N \beta_{pf}}{V_c} \mathbf{u}_f \quad (4.6)$$

A Equação 4.6 pode então ser separada em um termo explícito, calculado dire-

tamente no lado DEM e um termo implícito, que é função da velocidade do fluido no passo de tempo atual, conforme a Equação 4.5.

$$\mathbf{F}_{p \rightarrow f} = -\frac{\sum_{p=1}^N \beta_{pf} \mathbf{v}_p + \mathbf{F}_{\nabla p}}{V_c} - \frac{\sum_{p=1}^N \beta_{pf}}{V_c} \mathbf{u}_f \quad (4.7)$$

O calor trocado com a fase particulada é calculado no lado DEM e enviado para o solver de CFD via um termo fonte. A taxa de transferência de calor com o fluido em cada célula é calculada através da equação 3.30 como:

$$Q_{p \rightarrow f} = \frac{\sum_{p=1}^N h A_p (T_S - T_f)}{V_c} \quad (4.8)$$

Esta equação é dividida em dois termos, separando a parte explícita e a parte implícita do termo fonte linearizado:

$$Q_{p \rightarrow f} = \frac{\sum_{p=1}^N h A_p T_S}{V_c} - \frac{\sum_{p=1}^N h A_p T_f}{V_c} \quad (4.9)$$

### 4.1.3 Redistribuição da fração volumétrica e termos fontes

O acoplamento DEM-CFD foi desenvolvido para o caso ideal em que as partículas são menores que a célula, de forma que a fração volumétrica de partículas possa ser calculada pela Equação 4.10:

$$\alpha_p = \frac{\sum_{p=1}^N V_p}{V_c} \quad (4.10)$$

onde  $V_c$  é o volume da célula computacional e  $V_p$  é o volume da partícula.

Entretanto, como a localização da partícula no elemento computacional é baseada no centróide da partícula e a malha não é necessariamente uniforme, situações em que o volume total de partículas seja maior que o volume da célula computacional podem acontecer ao se usar diretamente a Equação 4.10.

A fim de evitar o aparecimento de valores não realistas no domínio, uma etapa posterior de redistribuição do volume das partículas e das forças de interação entre as células é realizada. Para tal, define-se um raio de promediação,  $r_\Delta$ , e se cria uma nova célula, aqui chamada de super-célula, formada pela célula original e as células vizinhas que possuem o centróide localizado no interior de uma esfera com raio igual a  $r_\Delta$ , conforme a Figura 4.2.

Um esquema de distribuição uniforme é então utilizado: o volume,  $V_p$ , de cada uma das  $N_{p,SC_c}$  partículas localizadas no centro desta super-célula é somado e dividido pelo volume total desta super-célula,  $V_{SC}$ , para se obter a contribuição para a

fração volumétrica de todas as células que formam esta super-célula,  $\alpha_{p,i}$  :

$$\alpha_{p,i} = \frac{\sum_{p=1}^{N_{p,SCc}} V_p}{V_{SC}}, \quad (4.11)$$

onde  $V_{SC}$  é calculado em função do número de células compondo a super-célula,  $N_c$ , e do volume de cada uma dessas células,  $V_c$ , como:

$$V_{SC} = \sum_{c=1}^{N_c} V_c. \quad (4.12)$$

Este processo é repetido para todas as  $N_T$  células do domínio fluido, ou seja,  $N_T$  super-células são geradas. A contribuição de cada uma dessas super-células é somada para se obter o valor final da fração volumétrica de sólidos em cada uma das  $N_T$  células do domínio fluido.

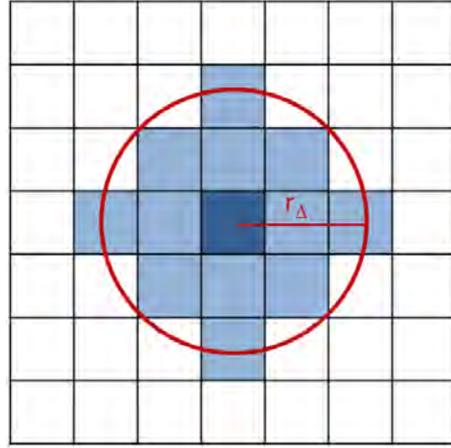


Figura 4.1: Super-célula usada na redistribuição dos valores de fração volumétrica e demais termos fontes enviados para o solver de CFD.

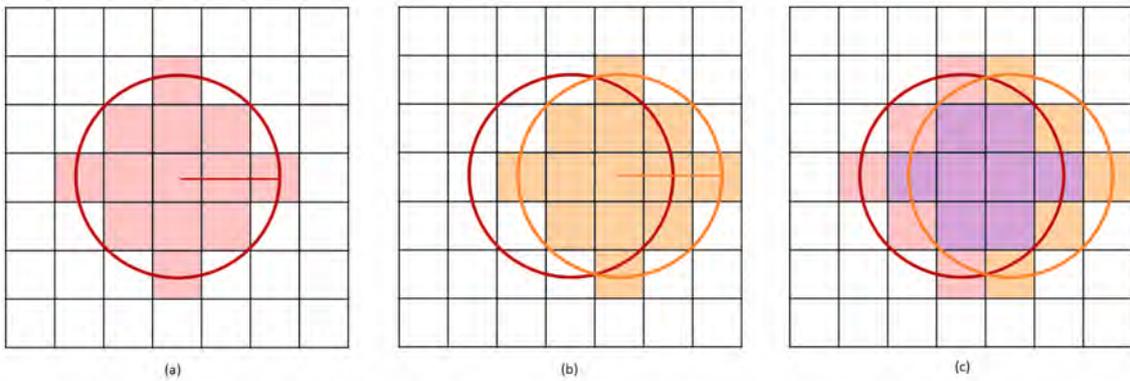


Figura 4.2: Representação do processo de redistribuição entre células (a) contribuição da super-célula delimitada pelo círculo vermelho, (b) contribuição da super-célula delimitada pelo círculo laranja, (c) soma das contribuições das duas super-células anteriores.

De forma consistente, o mesmo processo de redistribuição é realizado para os valores de força de interação com o fluido,  $\mathbf{F}_{p \rightarrow f}$ , e de taxa de transferência de calor,  $Q_{p \rightarrow f}$ , antes de enviá-los ao solver de CFD.

## 4.2 Solução da fase particulada

A solução da fase particulada é obtida de forma explícita no código comercial Rocky. A seção a seguir apresenta a sequência de cálculos realizados, além de algum detalhamento de etapas críticas na solução.

### 4.2.1 Cálculo do passo de tempo

A solução das equações do modelo de DEM são resolvidas de forma explícita, usando um método de primeira ordem. O erro na solução é da ordem do passo de tempo utilizado, que em geral é bem pequeno. Para que as forças de contato no modelo de histerese linear sejam calculadas de forma acurada e a simulação seja estável, é necessário que um número mínimo de passos de tempo,  $N_L$ , sejam realizados durante a fase de aproximação entre as partículas.

O passo de tempo do solver DEM é calculado no início da simulação em função de  $N_L$ , das rigidezes dos contatos e da massa efetiva dos pares em contato,  $m_{eff}$ , conforme a Equação 4.13.

$$dt = \min \left( \frac{\pi}{2N_L} \sqrt{\frac{m_{eff}}{K_U}}, \frac{\pi}{8} \sqrt{\frac{m_{eff}}{K_U}} \right) \quad (4.13)$$

### 4.2.2 Detecção e cálculo dos contatos

A detecção dos contatos entre partículas e entre partículas e paredes é feita baseada na identificação de candidatos de contato. Uma vez identificado um par candidato, este possível contato entra para uma lista de candidatos de contato, para quais a detecção do contato é realizada.

É importante que o número de potenciais pares de contato seja reduzido a fim de reduzir o custo computacional relativo à etapa de detecção de contatos. O método de identificação dos pares de candidatos a contato do Rocky é proprietário da empresa ESSS. Este se baseia no método das projeções (MIRINAVICIUS *et al.*, 2010), ilustrado na Figura 4.3 para um caso bidimensional. Nesta, as partículas 1 e 2 estão em contato enquanto que a partícula 3 não está em contato com as duas primeiras.

O algoritmo de busca de contatos inicia buscando os paralelepípedos alinhados com os eixos que envelopam cada uma das partículas. Cada paralelepípedo é então projetado nos eixos coordenados. No exemplo, as projeções da partícula  $i$  no eixo

$x$  são denotadas por  $b_{ix}$  e  $e_{ix}$  enquanto que as projeções no eixo  $y$  são denotadas por  $b_{iy}$  e  $e_{iy}$ . A ideia por trás deste método é que só pode haver interseção entre partículas (mas não necessariamente) se houver interseção entre os paralelepípedos correspondentes.

Dados os  $N$  paralelepípedos, todos os pares de contatos podem ser facilmente identificados considerando a sobreposição dos paralelepípedos. Caso o contato seja detectado as forças de contato entre partículas e entre partículas e contornos, conforme descritas na seção 3.1.1, são computadas.

Este método de detecção de contatos se baseia na hipótese de que as partículas se movem relativamente pouco em cada passo de tempo do solver de DEM, de forma que o conjunto dos pares de paralelepípedos em interseção não muda significativamente a cada passo de tempo.

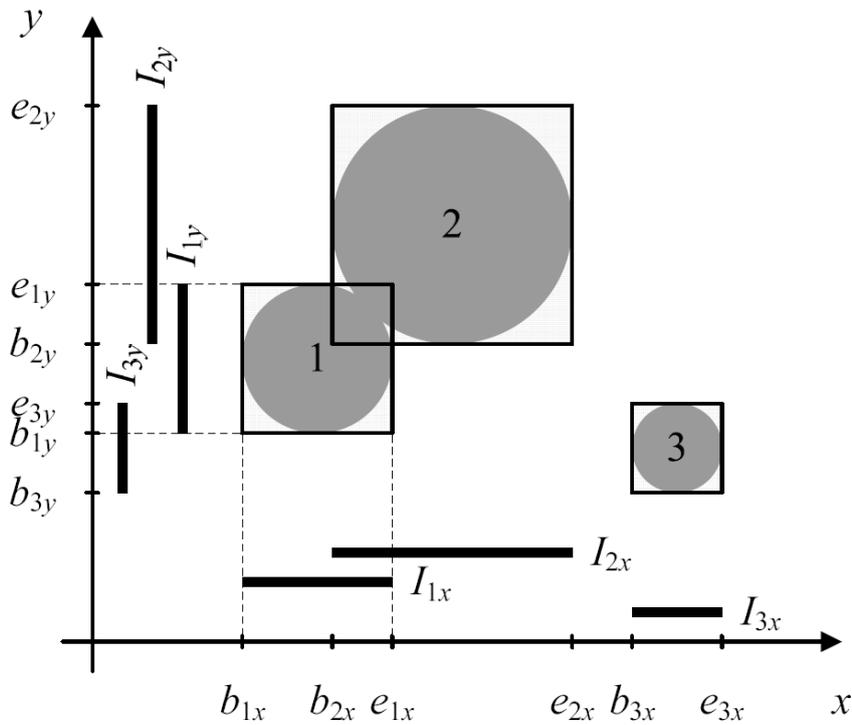


Figura 4.3: Diagrama esquemático do método de detecção de contatos utilizado - adaptado de MIRINAVICIUS *et al.* (2010).

### 4.2.3 Sequência de cálculos no solver DEM

#### Detecção dos contatos

A primeira etapa do solver de DEM é localizar os candidatos a contato, e dentre esses, verificar quais contatos realmente ocorrem no passo de tempo avaliados, conforme a seção 4.2.2.

### **Cálculo das forças de contato**

As forças e momento sobre cada partícula, oriundas de cada um dos contatos correntes da partícula são somados, gerando uma força e um momento resultante para cada partícula.

### **Cálculo da condução de calor entre partículas**

O calor trocado devido ao contato com outras partículas ou paredes,  $\dot{q}_{p,c}$ , é calculado conforme a seção 3.1.4 através do somatório do calor trocado em todas as colisões nas quais a partícula de interesse se envolve no passo de tempo atual.

### **Cálculo da fração volumétrica de partículas**

A fração volumétrica de partículas em cada célula computacional é calculada conforme descrito na seção 4.1.3. Estes valores são utilizados no cálculo das forças de interação das partículas com o fluido e também transferidos para o solver de CFD para a solução da fase fluida.

### **Cálculo das forças de interação com o fluido**

As forças oriundas da interação com o fluido são calculadas conforme a seção 3.1.2, onde a velocidade do fluido, o gradiente de pressão e as demais propriedades físicas do fluido necessárias para o cálculo das forças são obtidas da célula em que a partícula se localiza.

Os valores de força total de interação com o fluido são armazenados na célula onde a partícula se localiza e somados às contribuições das demais partículas no interior da mesma célula. Posteriormente essa força é promediada na célula usando o esquema descrito na seção 4.1.3 para transferência para o solver de CFD.

### **Cálculo da transferência de calor entre partículas e fluido**

O cálculo da taxa de transferência de energia para o fluido,  $\dot{q}_{f \rightarrow p}$ , é executado conforme a seção 3.1.4. Posteriormente o valor da transferência de calor entre partículas e fluido é promediado na célula usando o esquema descrito na seção 4.1.3 para transferência para o solver de CFD.

### **Atualização da posição e velocidade das partículas**

De posse de todas as forças agindo sobre a partícula, a aceleração linear da partícula é calculada pela Equação 3.1, enquanto que a aceleração angular da partícula é obtida através da Equação 3.2. Ambas as equações são resolvidas explicitamente no tempo com o passo de tempo definido conforme a seção 4.2.1. A

aceleração linear e angular das partículas são então utilizadas para a atualização das posições e velocidades das partículas.

### **Atualização da temperatura das partículas**

De posse da taxa de transferência de calor para a partícula,  $\dot{q}_p$ , a temperatura da partícula é atualizada através da solução explícita da equação de resfriamento para cada partícula, dada pela Equação 3.20.

### **Cálculo dos termos fontes**

Terminada a sequência de cálculos referentes às partículas, são então calculados os termos fontes a serem enviados para o solver de CFD conforme descrito na seção 4.1.2 e 4.1.3

## **4.3 Algoritmo do acoplamento**

A forma em que o acoplamento foi implementado permite que ambos os solvers trabalhem em paralelo. No trabalho em questão, a fase fluida teve sua solução obtida usando N processadores, enquanto que a fase particulada foi obtida através do uso de placas gráficas (Graphics Processing Unit - GPU).

A Figura 4.4 apresenta o algoritmo adotado no acoplamento. A seguinte sequência de operações é realizada ao longo da solução do sistema particulado:

1. Cálculo do passo de tempo do solver de DEM enquanto que o passo de tempo do solver de CFD é definido pelo usuário.
2. Cálculo do campo inicial da fase fluida (velocidades, pressão e propriedades físicas) no solver de CFD e transferência para o solver de DEM.
3. Cálculo da fração volumétrica das partículas e os valores iniciais para os termos de acoplamento (forças de interação e taxas de transferência de calor) no solver de DEM e transferência para o solver de CFD.
4. Correção do passo de tempo do solver de CFD de forma que seja um múltiplo inteiro do passo de tempo do solver DEM.
5. Atualização do campo inicial da fase particulada no solver de CFD.
6. Execução paralela de um passo de tempo do solver CFD e n passos de tempo do solver DEM.
7. Transferência semi-implícita das forças de interação e explícita das taxas de transferência de energia do solver DEM para o solver CFD.

8. Transferência dos campos de velocidade, pressão e das propriedades físicas dos fluidos em cada célula do solver CFD para o solver DEM.
9. Repetição do processo até atingir-se o tempo total de simulação desejado.

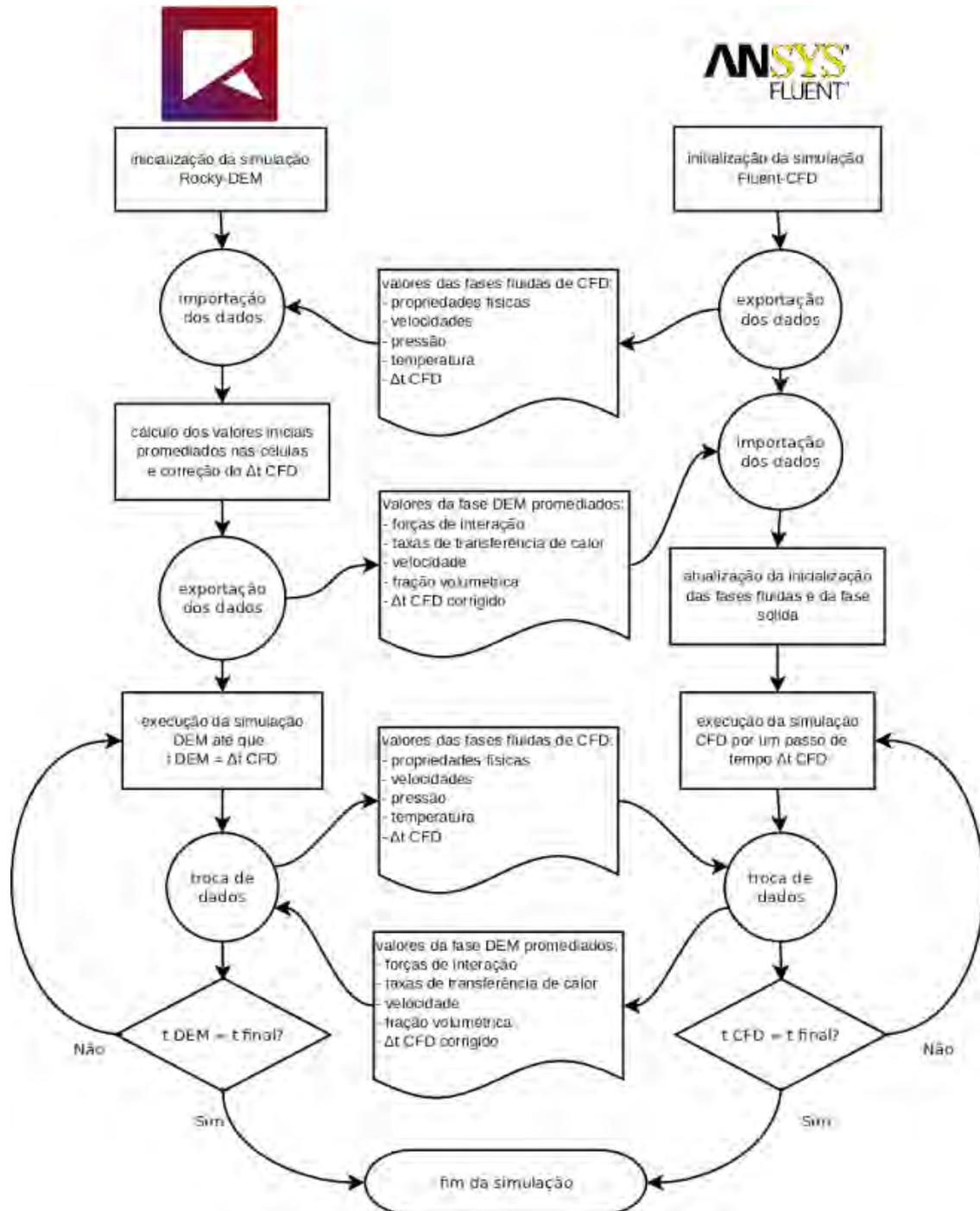


Figura 4.4: Algoritmo do acoplamento proposto.

# Capítulo 5

## Verificação do Acoplamento Proposto

O presente capítulo descreve cada um dos testes simples e controlados utilizados para verificar a correta implementação do modelo proposto e discute os resultados obtidos.

### 5.1 Caso teste 1 - Partícula em queda livre

Uma partícula em queda livre em um meio infinito foi o primeiro caso teste criado a fim de verificar a correta avaliação e integração das forças devido ao fluido no solver de DEM.

#### 5.1.1 Solução de referência

Como a partícula se desloca sozinha e não existem colisões com outras partículas ou paredes, as únicas forças agindo sobre esta partícula são a força peso,  $\mathbf{F}_g$ , o empuxo,  $\mathbf{F}_b$  e a força de arrasto,  $\mathbf{F}_D$ , conforme ilustrado na Figura 5.1.

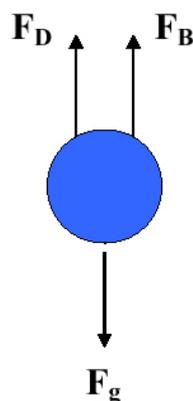


Figura 5.1: Partícula em queda livre em um meio infinito.

A força de arrasto,  $\mathbf{F}_D$ , é calculada conforme a Equação 5.1:

$$\mathbf{F}_D = \frac{1}{2}\rho_f C_D A |\mathbf{u}_r| \mathbf{u}_r \quad (5.1)$$

onde  $\rho_f$  é a densidade do fluido,  $\mathbf{u}_r$  é a velocidade relativa entre a partícula e o fluido,  $C_D$  é o coeficiente de arrasto e  $A$  é a área da partícula.

A diferença entre a força peso e a força de empuxo é dada pela Equação 5.2.

$$\mathbf{F}_g - \mathbf{F}_b = (\rho_p - \rho_f) V_p \mathbf{g} \quad (5.2)$$

Assim, a força líquida sobre a partícula é dada por:

$$\mathbf{F}_{net} = (\rho_p - \rho_f) V_p \mathbf{g} - \frac{1}{2}\rho_f C_D A |\mathbf{u}_r| \mathbf{u}_r \quad (5.3)$$

A correlação de Schiller-Naumann (PRITCHARD, 2010), apresentada na seção 3.1.3, fornece o coeficiente de arrasto para partículas esféricas conforme a Equação 5.4:

$$C_D = \max \left[ \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}), 0.44 \right] \quad (5.4)$$

Considerando que a partícula se move somente na direção  $Z$  e o fluido se encontra estagnado, chega-se a:

$$m_p \frac{dv_z}{dt} = m_p (\rho_p - \rho_f) V_p g_z - \frac{1}{2}\rho_f C_D A v_{zr}^2 \quad (5.5)$$

Ao se integrar numericamente esta equação, a velocidade e a posição desta partícula são conhecidas ao longo do tempo e estes valores são utilizados para comparação com os resultados obtidos através do acoplamento DEM-CFD.

## 5.1.2 Simulação computacional

Um acoplamento do tipo 1-via foi utilizado para validação, de forma que o movimento da partícula não é sentido pelo fluido, mantido estagnado com propriedades físicas constantes em um domínio com dimensões bem maiores que a partícula, conforme pode ser visto na Figura 5.2. A partícula é então lançada para cima e sobe até que atinge a velocidade nula. A partir deste ponto, sua posição e velocidade são monitoradas ao longo do tempo.

A partícula utilizada possui diâmetro igual a 0,2mm e sua massa específica é de 2500 kg m<sup>-3</sup>. Água foi o fluido considerado, com densidade de 1000 kg m<sup>-3</sup> e viscosidade igual a 0,001 Pa.s. A Tabela 5.1 resume os principais parâmetros do caso.

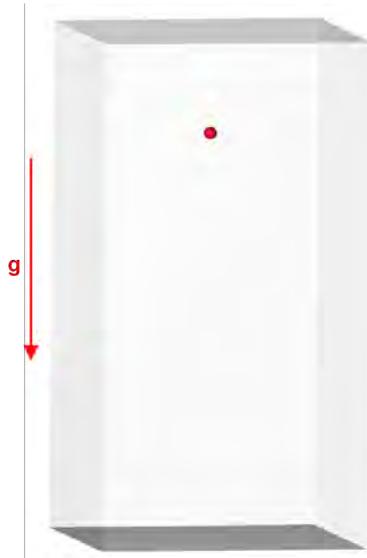


Figura 5.2: Simulação de uma partícula em queda em um meio infinito.

Tabela 5.1: Parâmetros do caso teste 1.

	Propriedade	Valor
Domínio	Dimensões	4 x 4 x 8 cm
Partícula	Diâmetro	0,2 mm
	Densidade	2500 kg m <sup>-3</sup>
Água	Viscosidade	1,0 × 10 <sup>-3</sup> Pa s
	Densidade	1000 kg m <sup>-3</sup>

### 5.1.3 Resultados

A Figura 5.3 apresenta a comparação entre os resultados de velocidade da partícula em cada instante de tempo obtidas na simulação usando o acoplamento 1-via e a obtida através da solução da Equação 5.5. A concordância entre os resultados é notável.

A Figura 5.4 apresenta a comparação do deslocamento desta partícula em relação ao ponto em que sua velocidade é nula. Nota-se uma excelente concordância entre os resultados obtidos usando o acoplamento 1-via e os resultados obtidos através da solução da Equação 5.5.

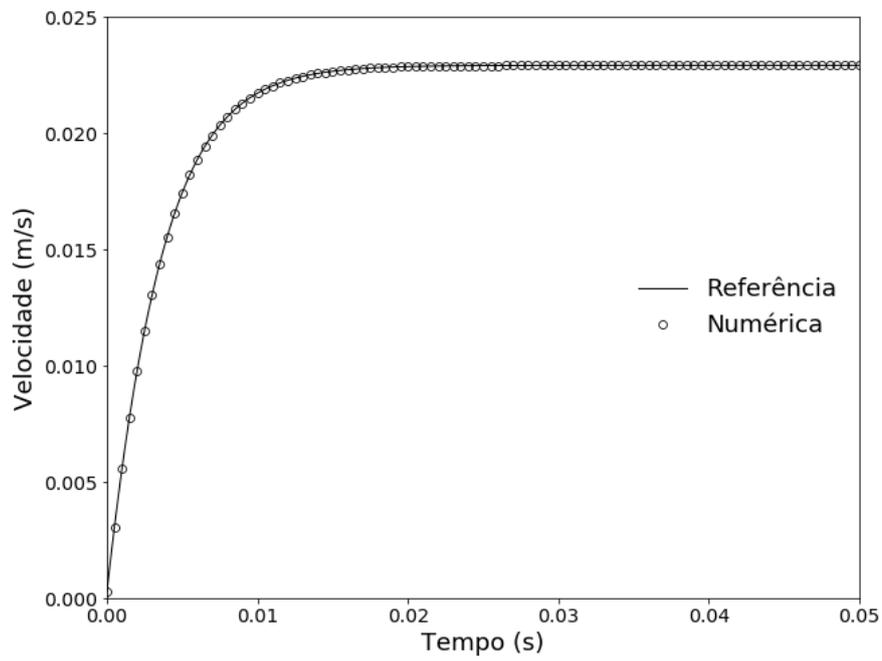


Figura 5.3: Velocidade da partícula em queda em um meio infinito.

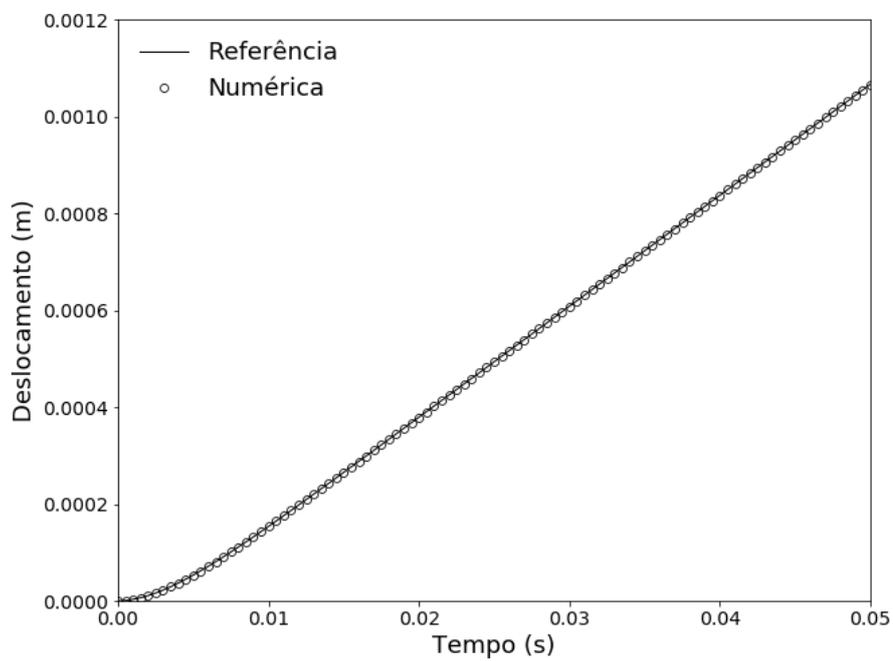


Figura 5.4: Deslocamento da partícula em queda em um meio infinito.

## 5.2 Caso teste 2 - Partícula em queda livre em meio bifásico

Visto que a abordagem escolhida para o acoplamento não possui limitação quanto ao número de fases fluidas, é possível a adoção da modelagem proposta para simulação de reatores em que vapor de água coexista com água no estado líquido. Sendo assim, o segundo caso teste utilizado para verificação do acoplamento é semelhante ao primeiro caso teste, porém a queda da partícula foi acompanhada em um domínio preenchido por dois fluidos diferentes.

### 5.2.1 Solução de referência

A Equação 5.5 foi integrada numericamente para a obtenção da velocidade e da posição da partícula ao longo do tempo. A única ressalva em relação ao procedimento adotado no caso teste 1 é que a distância da interface entre as fases fluidas foi monitorada e o valor da massa específica e viscosidade do fluido utilizadas para a solução analítica foram variadas de acordo com a região do domínio na qual a partícula se encontrava.

### 5.2.2 Simulação computacional

O domínio utilizado para a simulação do caso teste 2 foi o mesmo do caso teste 1, porém preenchido por água na sua metade inferior e por ar na sua metade superior. A Figura 5.5 apresenta um plano no centro do domínio colorido de acordo com a densidade no instante inicial da simulação. É importante ressaltar que a espessura da interface neste caso é nula. A presença desta região de transição que aparece na Figura 5.5 se deve ao uso de um software de pós-processamento que mostra os resultados interpolados nos nós.

A Tabela 5.2 resume os principais parâmetros do caso teste 2.

	Propriedade	Valor
Domínio	Dimensões	4 x 4 x 8 cm
Partícula	Diâmetro	0,2 mm
	Densidade	2500 kg m <sup>-3</sup>
Ar	Viscosidade	1,0 × 10 <sup>-5</sup> Pa.s
	Densidade	1 kg m <sup>-3</sup>
Água	Viscosidade	1,0 × 10 <sup>-3</sup> Pa.s
	Densidade	1000 kg m <sup>-3</sup>

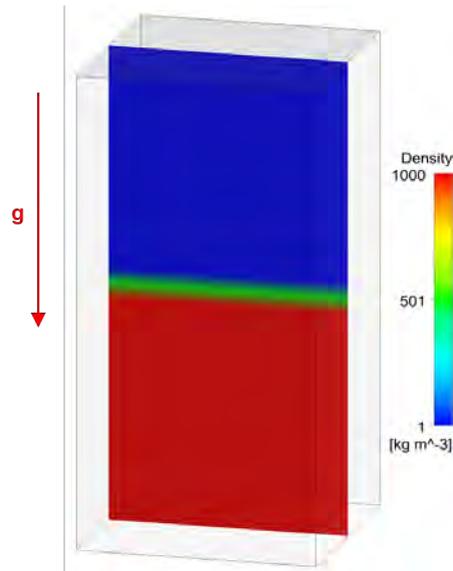


Figura 5.5: Simulação de uma partícula em queda em um domínio bifásico.

### 5.2.3 Resultados

A Figura 5.6 apresenta a comparação entre a velocidade da partícula obtida na simulação usando o acoplamento 1-via e com a solução da Equação 5.5. A velocidade da partícula aumenta linearmente com a posição enquanto esta se encontra na região superior do domínio composta de ar. No momento em que a partícula entra na região composta por água, sua velocidade reduz drasticamente até que a velocidade terminal da partícula em água seja atingida. A partir deste ponto a velocidade da partícula se mantém constante, conforme esperado.

A Figura 5.7 apresenta a comparação dos deslocamentos da partícula obtidos na simulação com o acoplamento 1-via e o deslocamento obtido analiticamente. Na região composta por ar, a partícula se desloca rapidamente já que sua velocidade aumenta continuamente com o tempo. Após atingir a interface ar-água, sua velocidade e seu deslocamento em cada instante de tempo são reduzidos. Após atingir a sua velocidade terminal na água, seu deslocamento a cada instante de tempo é constante até o final da simulação.

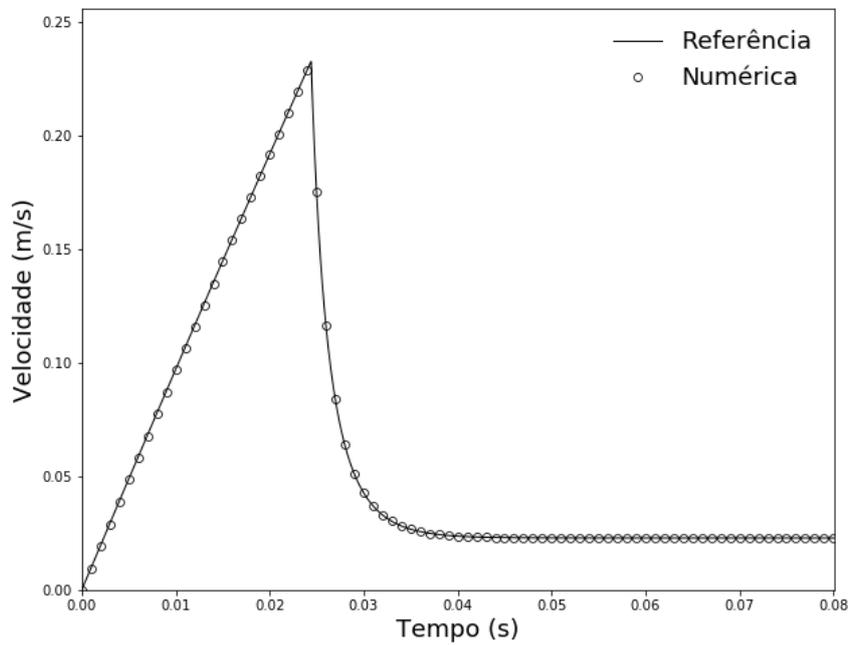


Figura 5.6: Velocidade da partícula em queda em um meio infinito bifásico.

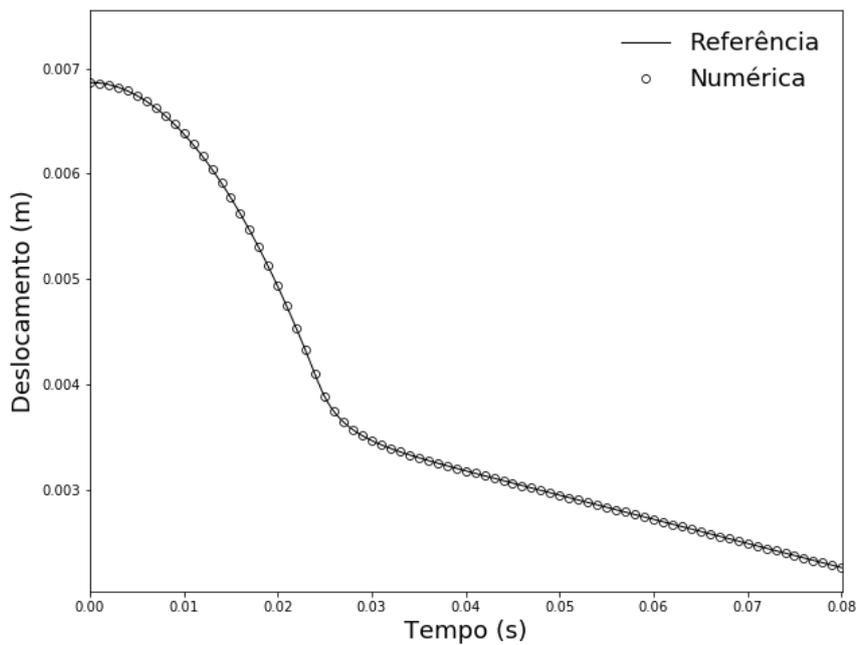


Figura 5.7: Deslocamento da partícula em queda em um meio infinito bifásico.

## 5.3 Caso teste 3 - Resfriamento transiente de um esfera

O terceiro teste foi criado a fim de avaliar a correta implementação da troca de calor entre fluido e partícula devido a convecção usando a formulação padrão e a formulação aprimorada para a condução de calor. Neste teste, uma esfera de raio  $b = 1,0\text{m}$  e difusividade térmica  $\alpha = 1\text{ m s}^{-2}$ , inicialmente a temperatura  $T_i = 1\text{ K}$ , por convecção para um fluido a temperatura  $T_f = 0\text{ K}$ .

### 5.3.1 Solução analítica

A formulação matemática do problema é:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (5.6)$$

com as seguintes condições de contorno/inicial:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial r}(r \rightarrow 0) &= 0, \\ -k \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=b} &= h T|_{r=b}, \\ T(t = 0) &= T_i. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Seguindo a solução dada por HAHN e ÖZISIK (2012), a temperatura em qualquer posição radial é dada pela Equação 5.8, enquanto que a temperatura média pode ser calculada pela Equação 3.46.

$$T(r, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \frac{\sin(\lambda_n r)}{r} e^{-\alpha \lambda_n^2 t}, \quad (5.8)$$

onde

$$C_n = \frac{\int_{r=0}^b r F(r) \sin(\lambda_n r) dr}{\int_{r=0}^b \sin^2(\lambda_n r) dr}, \quad (5.9)$$

e  $\lambda_n$  são as raízes da seguinte equação transcendental:

$$\lambda_n \cot \lambda_n b = - \left( \frac{h}{k} - \frac{1}{b} \right) \lambda_n \quad \text{for } n = 1, 2, 3... \quad (5.10)$$

A Figura 5.8 mostra a comparação das temperaturas média e da superfície para a partícula obtidas na solução analítica. Observa-se claramente que conforme o número de Biot aumenta, a temperatura da superfície se torna consideravelmente menor que a temperatura média da partícula. Dessa forma, a hipótese de tempera-

tura uniforme adotada na formulação de parâmetros concentrados padrão se torna inválida.

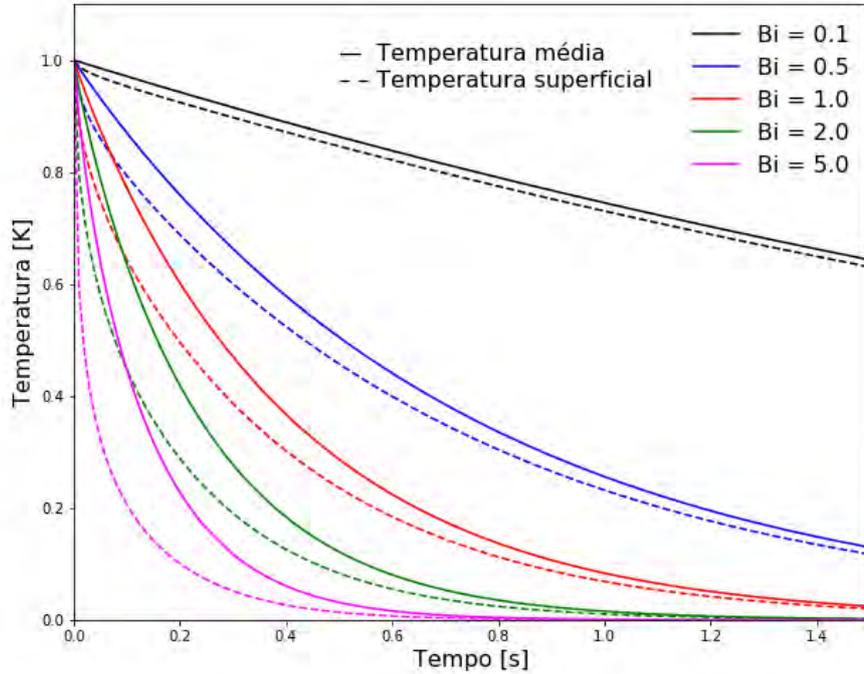


Figura 5.8: Comparação entre as temperaturas média e superficial para uma esfera sólida submetida a convecção.

### 5.3.2 Simulação computacional

Somente o solver de DEM foi utilizado para a simulação do presente caso. A fase fluida não foi resolvida e o coeficiente de transferência de calor por convecção,  $h$ , foi entregue diretamente ao solver de DEM, variado de forma que o número de Biot se encontrasse na faixa de 0,1 a 5,0. As formulações aprimoradas usando os polinômios de Hermite  $H_{(2,0)}$  e  $H_{(2,1)}$ , descritas na seção 3.1.5, foram utilizadas para a solução do problema.

A Tabela 5.3 resume os principais parâmetros do caso teste 3.

### 5.3.3 Resultados

Para os mesmos números de Biot, a Figura 5.9 mostra a comparação entre a solução analítica e os resultados obtidos com a formulação padrão e as formulações aprimoradas usando os polinômios de Hermite  $H_{(2,0)}$  e  $H_{(2,1)}$ . Conforme esperado, para  $Bi = 0.1$  todas as formulações deram resultados parecidos e em concordância

Tabela 5.3: Parâmetros do caso teste 3.	
Propriedade	Valor
Diâmetro da partícula	1 m
Difusividade térmica	$1 \text{ m s}^{-2}$
Temperatura inicial da partícula	1 K
Temperatura do fluido	0 K
Número de Biot	1–100

com os resultados analíticos. Conforme o número de Biot aumenta, entretanto, a temperatura obtida usando a formulação de parâmetros concentrados padrão diverge consideravelmente dos resultados analíticos.

Por outro lado, a concordância entre os resultados analíticos e os obtidos usando a formulação aprimorada  $H_{(2,1)}$  são notáveis. A concordância dos resultados obtidos com a formulação aprimorada  $H_{(2,0)}$ , apesar de superiores aos resultados obtidos com a formulação padrão, ainda discordam significativamente dos resultados de referência para os números de Biot mais elevados.

Dessa forma, a formulação aprimorada usando o polinômio de Hermite  $H_{(2,1)}$  foi a utilizada para a solução dos demais casos apresentados nesta tese.

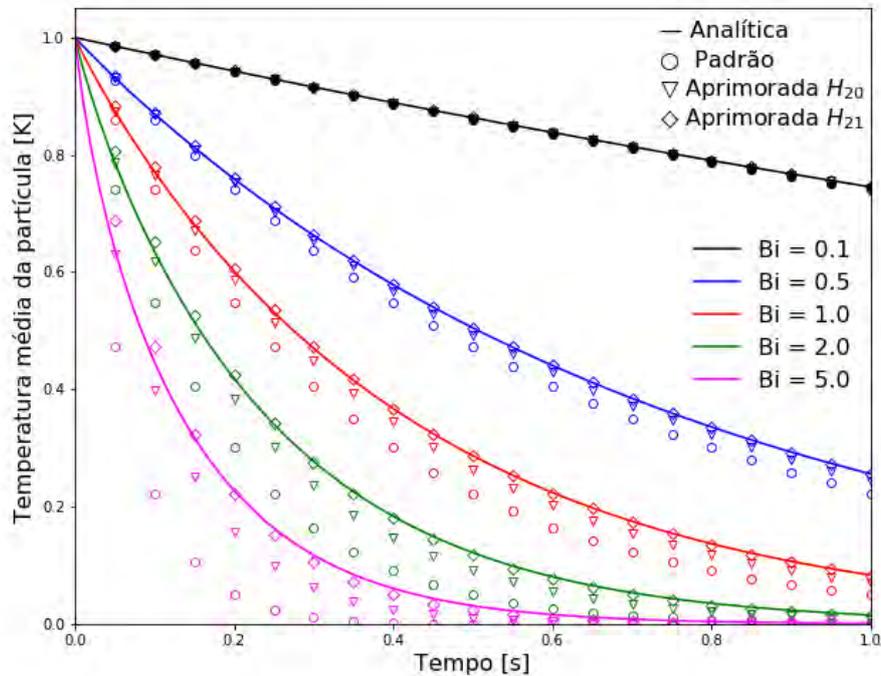


Figura 5.9: Comparação da temperatura média de uma esfera sólida submetida a convecção usando a formulação padrão e as formulações aprimoradas  $H_{(2,0)}$  e  $H_{(2,1)}$ .

## 5.4 Caso teste 4 - Resfriamento transiente de um esfera com geração interna de energia

O quarto teste é semelhante ao teste apresentado na seção 5.3, porém a partícula possui um termo fonte volumétrico de energia constante. Visa-se assim avaliar a implementação da troca de calor entre fluido e partícula devido a convecção usando a formulação padrão e a formulação aprimorada para a condução de calor para casos em que há geração de energia na partícula.

Neste teste, uma esfera de raio  $b = 1,0 \text{ m}$  e difusividade térmica  $\alpha = 1 \text{ m s}^{-2}$ , inicialmente a temperatura  $T_i = 1 \text{ K}$ , dissipa calor por convecção para um fluido a temperatura  $T_f = 0 \text{ K}$ . Adicionalmente, a esfera possui uma taxa de geração de energia constante  $q''' = 1,0 \text{ W m}^{-3}$ .

### 5.4.1 Solução analítica

A formulação matemática do problema é:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{q'''}{k} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (5.11)$$

com as seguintes condições de contorno/inicial:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial r}(r \rightarrow 0) &= 0, \\ -k \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=b} &= h T|_{r=b}, \\ T(t=0) &= T_i. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Seguindo a solução dada por HAHN e ÖZISIK (2012), a temperatura em qualquer posição radial é dada pela Equação 5.13, enquanto que a temperatura média pode ser calculada pela Equação 3.46.

$$T(r, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \frac{\sin(\lambda_n r)}{r} e^{-\alpha \lambda_n^2 t} + \left( K_2 - \frac{q'''}{6k} r^2 \right), \quad (5.13)$$

onde

$$C_n = \frac{\int_{r=0}^b r F(r) \sin(\lambda_n r) dr}{\int_{r=0}^b \sin^2(\lambda_n r) dr}, \quad (5.14)$$

$$K_2 = \left( \frac{b q'''}{6h} \right) \left( 2 + \frac{hb}{k} \right) \quad (5.15)$$

e  $\lambda_n$  são as raízes da seguinte equação transcendental:

$$\lambda_n \cot \lambda_n b = - \left( \frac{h}{k} - \frac{1}{b} \right) \lambda_n \quad \text{for } n = 1, 2, 3... \quad (5.16)$$

Na equação 5.13 o termo mais a direita é a solução do problema estacionário, retornando a distribuição parabólica esperada para uma esfera sob regime transiente com geração uniforme de calor.

A Figura 5.10 mostra a comparação das temperaturas média e da superfície para a partícula obtidas através da solução analítica. Com o termo de geração de energia constante, após um curto período de tempo, a solução converge para um valor constante de temperatura, tanto na superfície quanto temperatura média.

Esse valor de temperatura de superfície constante em regime permanente é o valor que, para o valores do coeficiente de transferência de calor por convecção  $h$  e temperatura do fluido dados, causa uma taxa de transferência de calor por convecção igual à taxa de geração de calor no interior da partícula.

Por sua vez, a diferença entre a temperatura média e a temperatura da superfície em regime permanente é constante nesses casos porque essa diferença reflete a variação da temperatura no interior da partícula devido à condução e a geração de energia. Como as propriedades relacionadas com esses fenômenos não são alteradas no caso teste (condutividade térmica e taxa volumétrica de geração de energia, mantidos constantes), observa-se a mesma diferença em todos os casos.

Observa-se claramente que conforme o número de Biot aumenta, a diferença entre a temperatura da superfície e a temperatura média da partícula, principalmente na parte transiente do fenômeno, se torna considerável. Dessa forma, a hipótese de temperatura uniforme adotada na formulação de parâmetros concentrados padrão se torna inválida.

## 5.4.2 Simulação computacional

Somente o solver de DEM foi utilizado para a simulação do presente caso. A fase fluida não foi resolvida e o coeficiente de transferência de calor por convecção,  $h$ , foi entregue diretamente ao solver de DEM, variado de forma que o número de Biot se encontrasse na faixa de 0,1 a 5,0.

A Tabela 5.4 resume os principais parâmetros do caso teste 4.

## 5.4.3 Resultados

Para os mesmos números de Biot, a Figura 5.11 mostra a comparação entre a solução analítica e os resultados obtidos com as formulações padrão e aprimorada. Conforme esperado, para  $Bi = 0.1$  ambas as formulações deram resultados

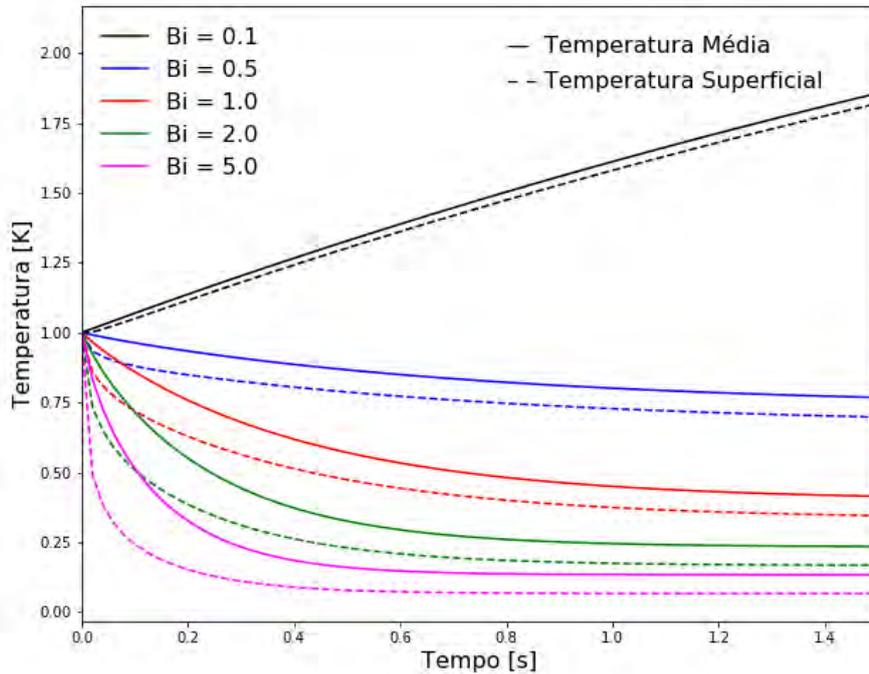


Figura 5.10: Comparação entre as temperaturas média e superficial para uma esfera sólida com geração interna de calor submetida a convecção.

Tabela 5.4: Parâmetros do caso teste 4.

Propriedade	Valor
Diâmetro da partícula	1 m
Difusividade térmica	$1 \text{ m s}^{-2}$
Temperatura inicial da partícula	1 K
Temperatura do fluido	0 K
Número de Biot	1–100
Taxa de geração interna de energia	$1,0 \text{ W m}^{-3}$

parecidos e em concordância com os resultados analíticos. Conforme o número de Biot aumenta, entretanto, a temperatura obtida usando a formulação de parâmetros concentrados padrão diverge dos resultados analíticos. Os resultados utilizando a formulação aprimorada seguem os resultados analíticos com precisão satisfatória.

Nota-se que a formulação padrão de parâmetros concentrados faz com que a temperatura média da partícula acompanhe mais a curva analítica de temperatura de superfície, tendendo para o mesmo valor em regime permanente. Isso ocorre justamente porque na formulação padrão é justamente a temperatura média que se utiliza para o cálculo das taxas de transferência. Dessa forma a temperatura média é forçada para baixo, de forma a gerar uma taxa de transferência de calor por convecção igual à taxa de geração de energia na partícula.

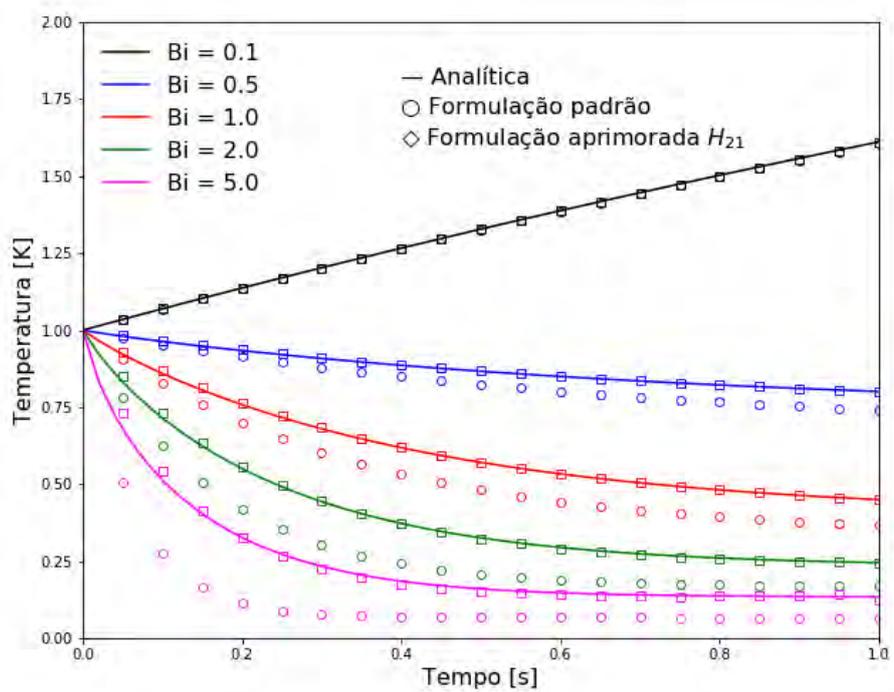


Figura 5.11: Comparação da temperatura média de uma esfera sólida com geração interna de calor submetida a convecção usando a formulação padrão e a formulação aprimorada.

## 5.5 Caso teste 5 - Perda de carga em um leito fixo

Neste teste é simulado um leito fixo de partículas através do qual um fluido escoar. A escolha deste caso teste se deve ao fato de que a predição correta da perda de carga em um leito fixo depende da acurácia da predição não só da velocidade do fluido e da força devido ao arrasto, mas também da fração de vazio. Sendo assim, os resultados obtidos com o acoplamento 2-vias foram comparados com os resultados obtidos com a vastamente utilizada correlação de Ergun ERGUN (1952).

### 5.5.1 Solução de referência - Correlação empírica

A perda de carga no interior do leito de partículas pode ser estimada através da correlação de Ergun ERGUN (1952), conforme a Equação 5.17.

$$\frac{\Delta p}{\Delta y} = 150 \frac{(1 - \epsilon)^2 \mu U}{\epsilon^3 d_p^2} + 1,75 \frac{(1 - \epsilon) \rho_f U^2}{d_p} \quad (5.17)$$

onde  $\epsilon$  é a fração de vazio (ou porosidade) do leito e  $U$  é a velocidade superficial do fluido.

A velocidade real do fluido no interior do leito fixo,  $u$ , é obtida em função da velocidade superficial (que é constante ao longo de todo domínio, visto que não há variação de área) e da fração de vazio local, conforme a Equação 5.18:

$$u = \frac{U}{\epsilon} \quad (5.18)$$

A fração de vazio, por sua vez, é estimada em função do número de partículas que compõem o leito e o volume total da região preenchida por partículas.

### 5.5.2 Simulação

O domínio computacional é constituído de um canal retangular com seção transversal igual a 1 cm e altura de 50 cm. Uma malha regular, com 1 elemento na seção retangular e 50 elementos ao longo do comprimento foi utilizada.

O leito é composto por 58 085 partículas esféricas de 1,0 mm, com densidade igual a  $5000 \text{ kg m}^{-3}$ , conforme a Figura 5.12. O fluido que escoar através do leito é água, com densidade igual a  $1000 \text{ kg m}^{-3}$  e viscosidade igual a  $1,0 \times 10^{-3} \text{ Pa.s}$ . A velocidade superficial da água na entrada é de  $1,0 \text{ m s}^{-1}$ . A Tabela 5.5 resume os principais parâmetros do caso 5.

Neste teste as partículas foram mantidas fixas em suas posições originais. A lei de arrasto de Ergun, apresentada na seção 3.1.3 foi utilizada para o cálculo da força de arrasto nas partículas.

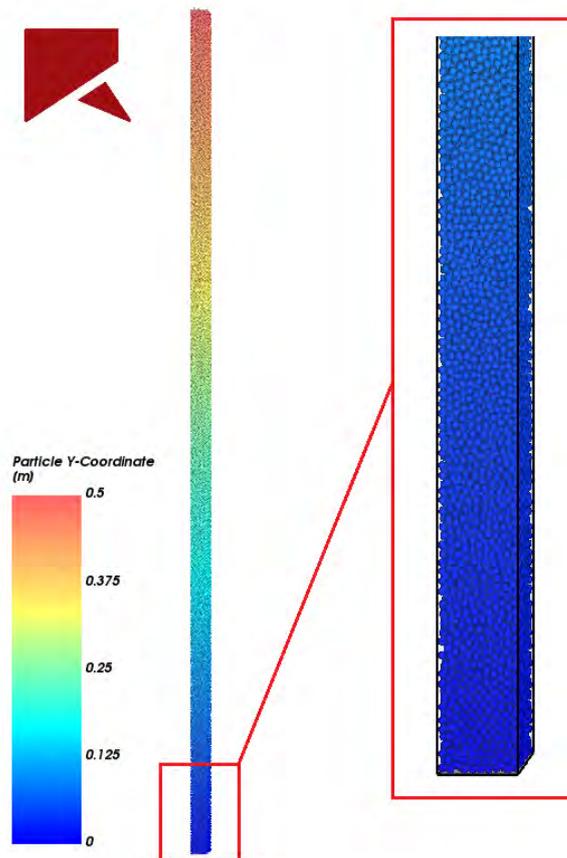


Figura 5.12: Leito fixo de partículas utilizado no caso teste 5.

Tabela 5.5: Parâmetros do caso teste 5.

		Valor
Domínio	Dimensões	1 x 1 x 50 cm
	Espaçamento da malha	10 mm
Partícula	Diâmetro	1,0 mm
	Densidade	5000 kg m <sup>-3</sup>
	Altura do leito	50 cm
	Número de partículas	58 085
Água	Viscosidade	1,0 × 10 <sup>-3</sup> Pa s
	Densidade	1000 kg m <sup>-3</sup>

### 5.5.3 Resultados

A Figura 5.13 apresenta a evolução da pressão, fração de vazio (porosidade) e velocidade da água ao longo de uma linha central no domínio obtidas através da simulação e as estimadas utilizando a correlação de Ergun. A fração de vazio obtida na simulação oscila em torno do valor estimado. Isso se deve ao fato de que a fração de sólidos (e todas as outras grandezas que são transferidas ao lado CFD) na simulação são calculadas como a soma dos valores referentes às partículas cujo centróide está em uma dada célula de CFD e posteriormente redistribuída entre as células compreendidas em uma super-célula, conforme a Seção 4.1.3.

Neste caso teste, como as partículas são significativamente menores do que o tamanho dos elementos de malha, foi usado um raio para esta célula de redistribuição igual a  $1d$ , fazendo com que os valores calculados para cada célula sejam usados apenas nela mesma.

Conforme esperado, a velocidade acompanha os resultados da porosidade, variando ligeiramente em torno do valor da velocidade estimada. Quando a fração de vazio é ligeiramente inferior à fração de vazio esperada, a velocidade é ligeiramente inferior. Quando a fração de vazio é ligeiramente superior, a velocidade é ligeiramente inferior à estimada.

A distribuição de pressão obtida na simulação apresentou boa concordância com a solução analítica. A perda de carga total do leito simulado é de 6697,39 kPa, enquanto o valor estimado pela equação de Ergun é de 6846,61 kPa. Gerando um erro de 2.1%.

Através de uma regressão linear dos valores obtidos na simulação, a perda de carga por unidade de comprimento na região do leito é  $13\,690,80\text{ kPa m}^{-1}$  enquanto que o valor previsto pela equação de Ergun é igual a  $13\,693,13\text{ kPa m}^{-1}$ , de forma que o erro relativo na previsão obtido usando o acoplamento proposto é de 0.017%. A Figura 5.14 apresenta a curva ajustada através da regressão linear com os valores obtidos na simulação.

Essa diferença da perda de carga por unidade de comprimento e da perda de carga total se dá ao fato de que pequenas variações de pressão surgem na simulação junto às condições de contorno por causa da variação (mais significativa nesses pontos) da fração volumétrica de partículas.

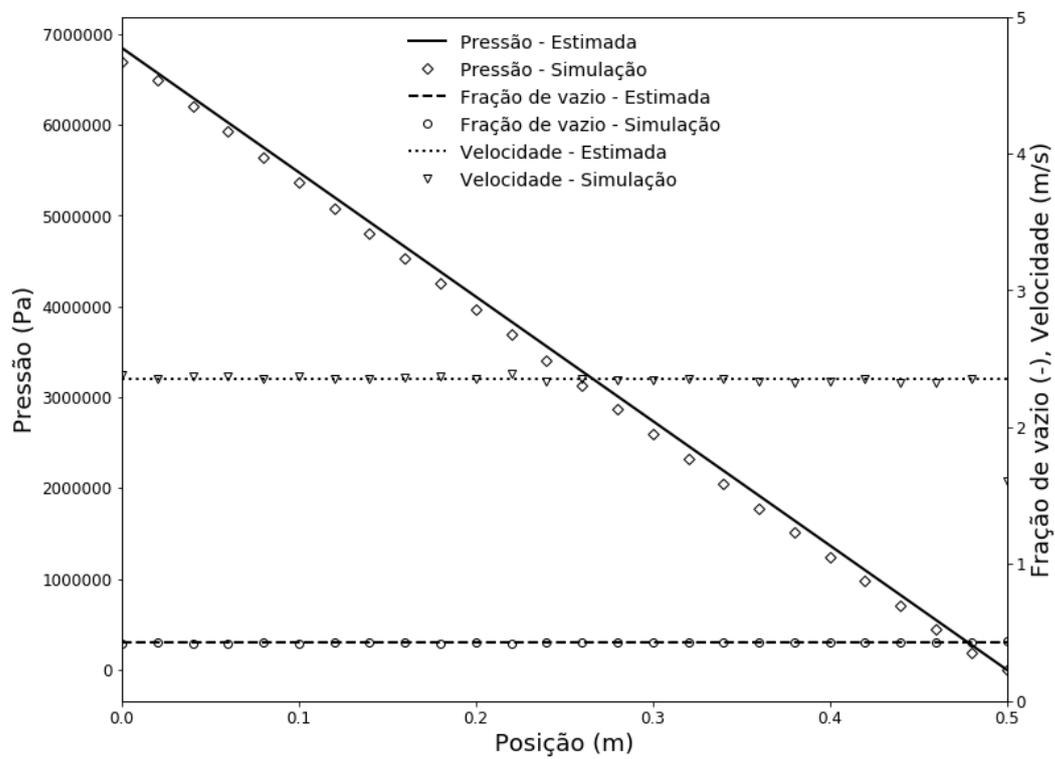


Figura 5.13: Evolução da pressão, fração de vazio e velocidade da água ao longo de uma linha central no domínio obtidas através da simulação e as estimadas utilizando a correlação de Ergun.

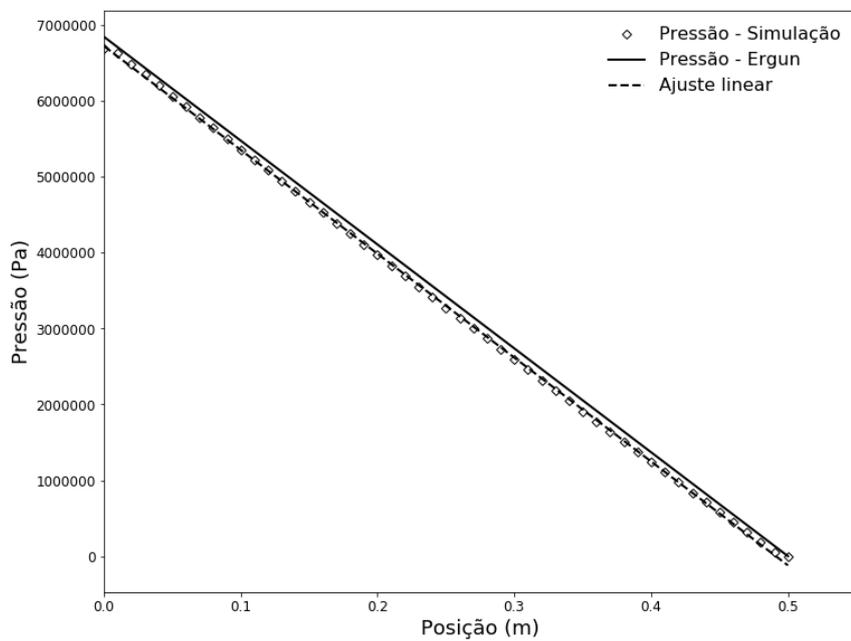


Figura 5.14: Regressão linear da pressão na região do leito fixo.

## 5.6 Caso teste 6 - Aquecimento de um leito fixo por convecção

Para verificação da implementação do acoplamento térmico usando tanto a formulação padrão quanto a formulação aprimorada, em casos de altas frações volumétricas de partículas, foi utilizado o mesmo leito fixo utilizado no caso teste anterior (5.5). Neste teste as partículas e o fluido são inicializados com temperatura igual a 300 K. O fluido é injetado na base do leito com uma velocidade fixa de  $1,0 \text{ ms}^{-1}$  e temperatura igual a 500 K, trocando calor com as partículas enquanto escoava através do leito.

As propriedades fluidodinâmicas e térmicas são listadas na tabela 5.6. A condutividade térmica do fluido foi variada dentro da faixa  $1\text{--}100 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$  a fim de se ter diferentes números de Biot e avaliar o comportamento das formulações padrão e aprimorada.

Tabela 5.6: Parâmetros do caso teste 6.

		Valor
Domínio	Dimensões	1 x 1 x 50 cm
	Espaçamento da malha	10 mm
Partícula	Diâmetro	1,0 mm
	Densidade	$5000 \text{ kg m}^{-3}$
	Capacidade calorífica	$500 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
	Condutividade térmica	1,0 ; 2,5 ; 10,0 ; $100 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$
	Número de Biot	9,58 ; 3,93 ; 0,96 ; 0,1
	Temperatura inicial	300 K
	Número de partículas	58 085
Água	Viscosidade	$1,0 \times 10^{-3} \text{ Pa s}$
	Densidade	$1000 \text{ kg m}^{-3}$
	Capacidade calorífica	$3000 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
	Condutividade térmica	$0,025 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$
	Temperatura inicial	300 K
	Temperatura na entrada	500 K

### 5.6.1 Solução analítica

A verificação do modelo é feita comparando os resultados analíticos obtidos para a transferência de calor transiente em um leito fixo unidimensional com fração volumétrica fixa e perfeitamente isolado proposta por SCHUMANN (1929). Todas as propriedades físicas são consideradas constantes e independentes da temperatura. Tanto a difusão no líquido quanto a troca de calor por condução entre partículas são desprezadas. As equações diferenciais para o balanço de energia nas fase fluida

e particulada são dadas na Equações 5.19 e 5.20:

$$\alpha_f \rho_f c_{p,f} \frac{\partial T_f}{\partial t} = -\alpha_f \rho_f c_{p,f} u_f \frac{\partial T_f}{\partial z} - ha (T_f - T_p) \quad (5.19)$$

$$(1 - \alpha_f) c_{p,p} \frac{\partial T_p}{\partial t} = ha (T_f - T_p) \quad (5.20)$$

onde  $a$  é a área superficial específica, definida como:

$$a = \frac{6(1 - \alpha_f)}{d_p} \quad (5.21)$$

Definindo as temperaturas adimensionais como

$$T_g^* = \frac{T_f - T_{f,0}}{T_{f,i} - T_{f,0}}, \quad (5.22)$$

$$T_p^* = \frac{T_p - T_{f,0}}{T_{f,i} - T_{f,0}}, \quad (5.23)$$

e definindo um tempo adimensional,  $t^*$ , e uma altura adimensional,  $z^*$ , como:

$$t^* = h_p \left( t - \frac{z}{u_f} \right), \quad (5.24)$$

$$z^* = h_g \frac{z}{u_f}, \quad (5.25)$$

onde

$$h_g = \frac{ha}{\alpha_f \rho_f c_{p,f}} \quad (5.26)$$

$$h_p = \frac{ha}{(1 - \alpha_f) \rho_p c_{p,p}} \quad (5.27)$$

A solução é dada por:

$$T_p^* = e^{-z^* - t^*} \sum_{n=1}^{\infty} (z^*)^n M_n(z^* t^*) \quad (5.28)$$

$$T_g^* = e^{-z^* - t^*} \sum_{n=0}^{\infty} (z^*)^n M_n(z^* t^*) \quad (5.29)$$

dado que

$$M_0(x) = J_0(2i\sqrt{x}) \quad (5.30)$$

$$M_n(x) = \frac{d^n M_0(x)}{d\alpha^n} \quad (5.31)$$

Os detalhes da solução analítica podem ser encontrados em (SALEHI *et al.*, 2017; SCHUMANN, 1929).

## 5.6.2 Resultados

As simulações foram executadas e os valores de temperatura de fluido e de partículas, ao longo do leito, foram registrados para análise. Primeiro se avaliam os resultados da simulação para baixos números de Biot, para os quais a solução analítica é válida, depois se comparam os resultados das formulações padrão e aprimorada para casos com diferentes números de Biot. A solução de Schumann só é válida até onde a frente de fluido quente avançou. Sendo assim, nos gráficos a seguir, a solução analítica é limitada, a cada tempo analisado, às alturas em que a solução é válida.

### **Análise da temperatura do fluido e partículas para baixos valores do número de Biot**

A Figura 5.15 mostra a comparação entre a temperatura do fluido ao longo do altura do leito obtida analiticamente e a temperatura obtida através das simulações usando as abordagens padrão e aprimorada para diferentes tempos, para a condição de maior condutividade térmica das partículas (número de Biot igual a 0,1).

A Figura mostra a temperatura das partículas obtida para os mesmos tempos usando a formulação padrão e a formulação aprimorada, assim como a temperatura prevista analiticamente para o caso com Biot igual a 0,1.

Conforme esperado, para um número de Biot baixo, as soluções, tanto para a temperatura do fluido quanto a temperatura das partículas, obtidas pela formulação padrão e pela formulação aprimorada são bastante próximas. Além disso, a concordância entre os perfis de temperatura obtidos através do acoplamento DEM-CFD e a solução analítica é bastante razoável, permitindo concluir que a implementação do acoplamento térmico base tanto para a formulação padrão quanto para a formulação aprimorada foi feita corretamente.

A Figura 5.17 mostra os perfis de temperatura do fluido para diferentes instantes de tempo obtidos com o acoplamento DEM-CFD usando a formulação aprimorada para diferentes números de Biot (ou seja, para cada uma das condutividades térmicas

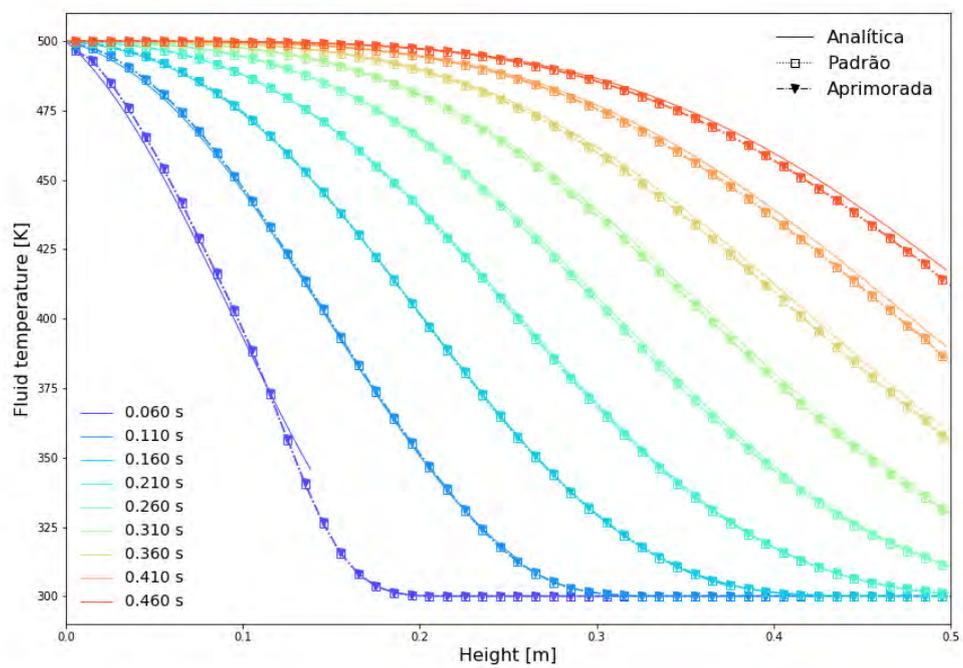


Figura 5.15: Evolução da temperatura do líquido em um leito fixo com partículas frias que são aquecidas pela passagem de um fluido quente - número de Biot igual a 0,1.

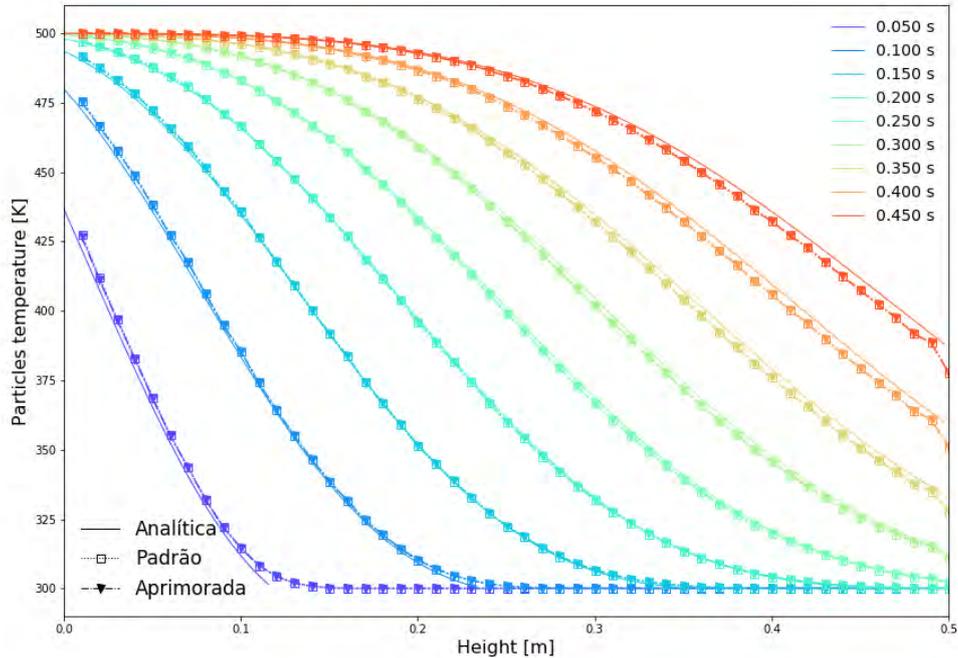


Figura 5.16: Evolução da temperatura das partículas em um leito fixo que são aquecidas pela passagem de um fluido quente - número de Biot igual a 0,1.

da partícula avaliadas). A Figura 5.18 mostra a temperatura das partículas para os mesmos instantes de tempo os mesmos casos mostrados na Figura 5.16.

Como a formulação aprimorada permite que a temperatura na superfície seja superior à temperatura média das partículas, quanto menor a condutividade da partícula, mais próxima a temperatura na superfície à temperatura do fluido e portanto menor a troca de calor com o fluido. Conforme pode ser visto na Figura 5.17, conforme o número de Biot aumenta, maiores temperaturas do gás são encontradas conforme se avança no leito, já que o fluido perdeu menos calor para as partículas.

A Figura 5.18, por sua vez, mostra claramente que conforme se aumenta o número de Biot, menores as temperaturas das partículas, visto que a troca de calor com o fluido quente é reduzida em relação ao caso com Biot mais baixo. É importante ressaltar que estas diferenças nos perfis de temperatura do fluido e das partículas para diferentes condutividades não seriam percebidas caso a formulação de parâmetros concentrados padrão fosse utilizada no balanço de energia nas partículas.

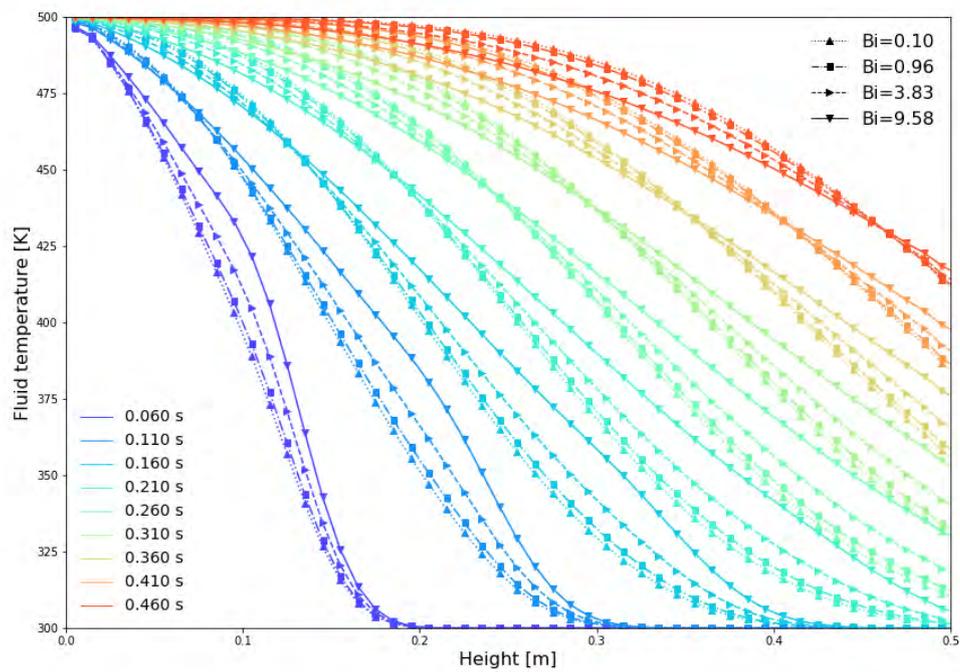


Figura 5.17: Evolução da temperatura do líquido em um leito fixo com partículas frias que são aquecidas pela passagem de um fluido quente para diferentes números de Biot usando a formulação aprimorada.

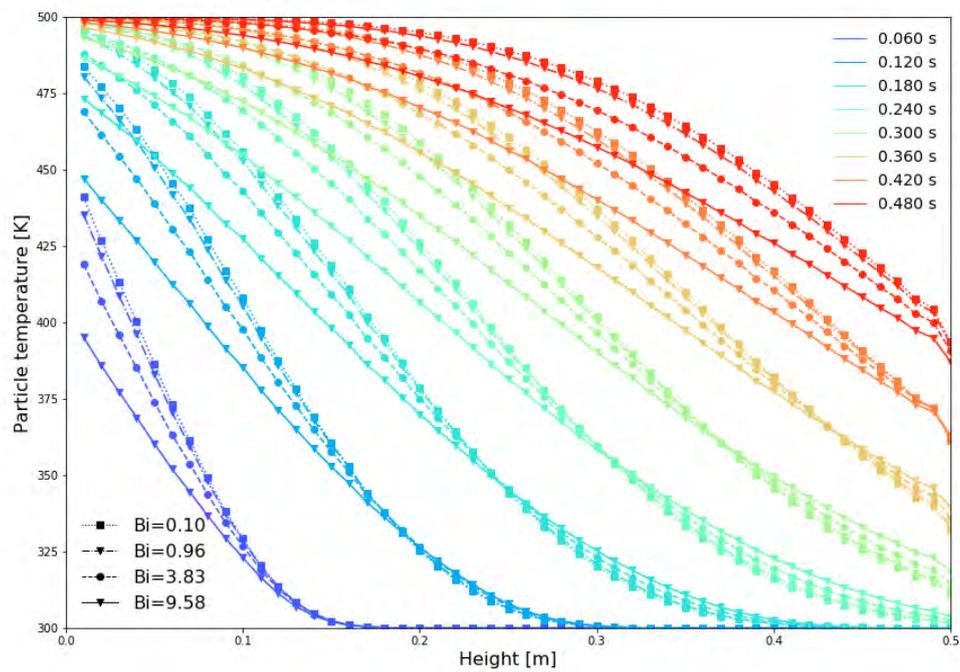


Figura 5.18: Evolução da temperatura das partículas que são aquecidas pela passagem de um fluido quente em um leito fixo para diferentes números de Biot usando a formulação aprimorada.

# Capítulo 6

## Simulação do Leito Fluidizado

Após a validação da metodologia proposta, apresentada no Capítulo 5, o acoplamento DEM-CFD foi aplicado em um leito fluidizado do tipo borbulhante. O presente capítulo descreve o problema em detalhes e analisa os resultados obtidos.

### 6.1 Definição do caso a ser estudado

Conforme foi apresentado na seção 2.2.3, diversos reatores nucleares do tipo leito fluidizado foram propostos devido às suas diversas características que são vantajosas para um reator nuclear. Dentre elas, pode-se citar: a distribuição uniforme da temperatura devido à misturação, altas taxas de transferência de calor entre refrigerante e combustível, sua viabilidade de construção e operação tanto em grandes quanto pequenas escalas e a possibilidade de retirar o combustível do núcleo por gravidade no caso de um acidente.

Dessa forma, é importante que se possua uma ferramenta numérica que permita avaliar de forma acoplada a termo-hidráulica desses reatores nucleares de leito fluidizado. Uma modelagem acurada se faz necessária para que se possa prever com confiabilidade o comportamento do reator durante a operação, como durante a partida e nos diversos cenários de acidentes possíveis.

O objetivo deste trabalho é a obtenção de uma metodologia para simulação de reatores nucleares do tipo leito fluidizado que possa ser aplicada como ferramenta de projeto e avaliação de reatores conceituais, permitindo avaliar a eficiência e margem de segurança desses equipamentos sob diversos cenários.

Ao invés de se focar em um reator nuclear específico, optou-se por aplicar a metodologia a um leito fluidizado padrão, visto que o comportamento desses leitos foi extensamente reportado na literatura. Características gerais da fluidodinâmica de leitos fluidizados são conhecidas, conforme apresentado na seção 2.1, de forma que se pode avaliar qualitativamente o comportamento do leito estudado.

Como não se dispunha de dados experimentais para avaliação quantitativa, foi realizada uma busca na literatura por tais dados e um leito fluidizado foi escolhido para ser simulado. Por outro lado, dados referentes à transferência de calor são escassos, principalmente em casos em que o número de Biot é elevado, e muitos se baseiam em métodos de medição difíceis de serem reproduzidos numericamente, como dados de imagem.

## 6.2 O leito fluidizado escolhido

No ano de 2013, o Laboratório Nacional de Tecnologia em Energia (National Energy Technology Laboratory - NETL), parte do Departamento de Energia dos Estados Unidos, publicou seu primeiro desafio de simulação de escoamentos multifásicos (Small Scale Challenge Problem - SSCP-I) (NETL SMALL SCALE PROBLEM I, 2018). Estes desafios têm como objetivo aprimorar a confiabilidade das modelagens computacionais de escoamentos multifásicos através da validação dos resultados obtidos confrontando-os com dados experimentais acurados e bem definidos.

Usando técnicas experimentais mais atuais como transdutores de pressão e velocimetria de imagem, ambos de alta velocidade, dados experimentais de velocidade das partículas e perda de carga foram disponibilizados e utilizados por diferentes grupos na comunidade científica para validarem seus modelos multifásicos. Sendo assim, este caso foi o escolhido para ser reproduzido usando o acoplamento proposto.

Apesar do leito escolhido não ter dados relativos à transferência de calor, como se assumiu nas simulações que as propriedades térmicas são invariantes com a temperatura, a transferência de calor entre fluido e partículas foi analisada e um termo fonte volumétrico constante de energia nas partículas foi adicionado. Dessa forma, os resultados hidrodinâmicos puderam ser comparados com os dados reportados pelo NETL, enquanto que os resultados térmicos permitem avaliar a transferência de calor no leito fluidizado usando a formulação de parâmetros concentrados clássica e a formulação de parâmetros concentrados aprimorada.

### 6.2.1 Aparato experimental

O equipamento consiste de um leito fluidizado do tipo borbulhante com seção transversal retangular, conforme ilustrado na Figura 6.1 (a). Um transdutor de frequência de 1,0 Hz foi usado para medir a perda de carga entre dois pontos de medição, conforme pode ser visualizado na Figura 6.1 (b).

O leito é composto por 1,9 kg de partículas do grupo Geldart D com alta esfericidade e tamanho uniforme, com diâmetro equivalente de 3,26 mm e densidade de

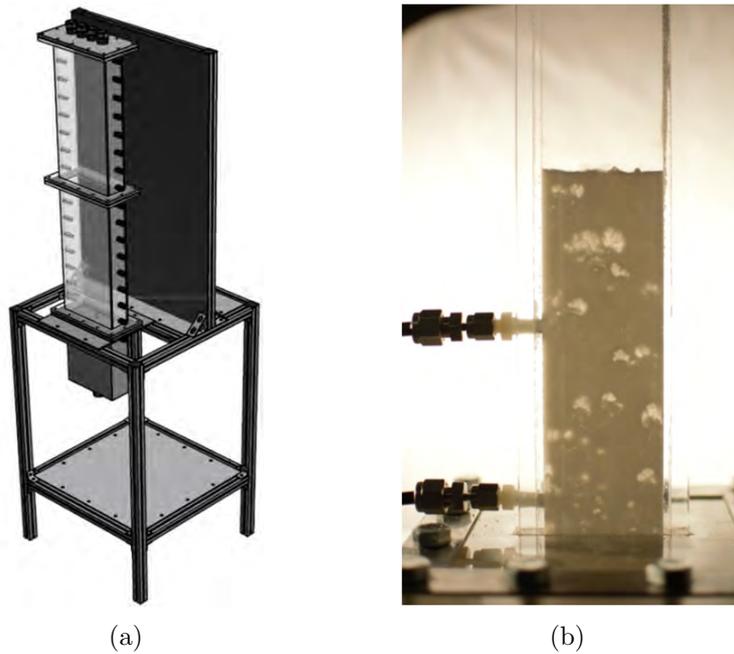


Figura 6.1: (a) Aparato experimental do SSCP-I e (b) Pontos de tomada de pressão - Figuras obtidas em (NETL SMALL SCALE PROBLEM I, 2018).

$1131 \text{ kg m}^{-3}$ .

O fluido que escoia através do leito é ar, com massa específica de  $1,20 \text{ kg m}^{-3}$  e viscosidade igual a  $1,9 \times 10^{-5} \text{ Pa s}$ . Três diferentes vazões mássicas de ar foram utilizadas, resultando em três diferentes velocidades superficiais do gás na entrada do leito, conforme a Tabela 6.1.

Tabela 6.1: Velocidade superficial do ar na entrada.

Caso	Velocidade [m/s]
1	2,19
2	3,28
3	4,38

Um transdutor de baixa frequência (1 Hz) foi utilizado para medir a perda de carga média entre dois pontos de medição, localizados a distâncias de 0,0413 m e 0,3048 m do distribuidor de fluxo, conforme ilustrado na Figura 6.2.

Velocimetria por imagem de partículas (PIV) de alta velocidade foi utilizada para a obtenção de dados de velocidade das partículas a uma frequência de amostragem de 1–1,5 kHz. As medições foram realizadas em uma região delimitada por um paralelepípedo centrado a 0,0762 m do distribuidor de gás e profundidade de 3 mm em relação a parede, conforme ilustrado na Figura 6.3.

Esta região é dividida em 5 sub-regiões iguais de lado 0,0457 m e a velocidade de todas as partículas residentes em cada uma dessas sub-regiões em cada instante de medição é armazenada. A média da velocidade em cada sub-região, assim como

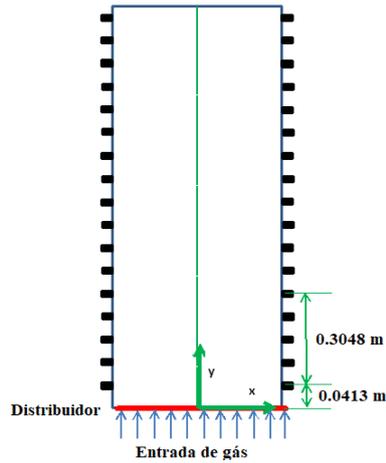


Figura 6.2: Posicionamento dos pontos de medição de pressão.

o intervalo de confiança de 95 % foi disponibilizado para cada uma das velocidades superficiais de entrada e utilizado para comparação com os resultados da simulação.

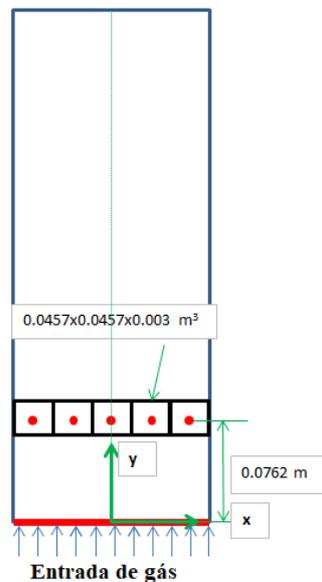


Figura 6.3: Região utilizada para medição de velocidade das partículas usando velocimetria de imagem.

## 6.3 Definição da simulação

### 6.3.1 Domínio computacional e discretização

O sistema experimental foi modelado por uma coluna com seção transversal retangular com 7,62 cm de espessura, 22,86 cm de largura e 121,92 cm de altura. Apesar do desenho em CAD completo ter sido disponibilizado pelo NETL, o distribuidor de gás não foi incluído. O gás entra no domínio através da base com

velocidade superficial uniforme, como mostrado na Figura 6.4(a), e deixa o domínio através do topo, que está sob condições atmosféricas.

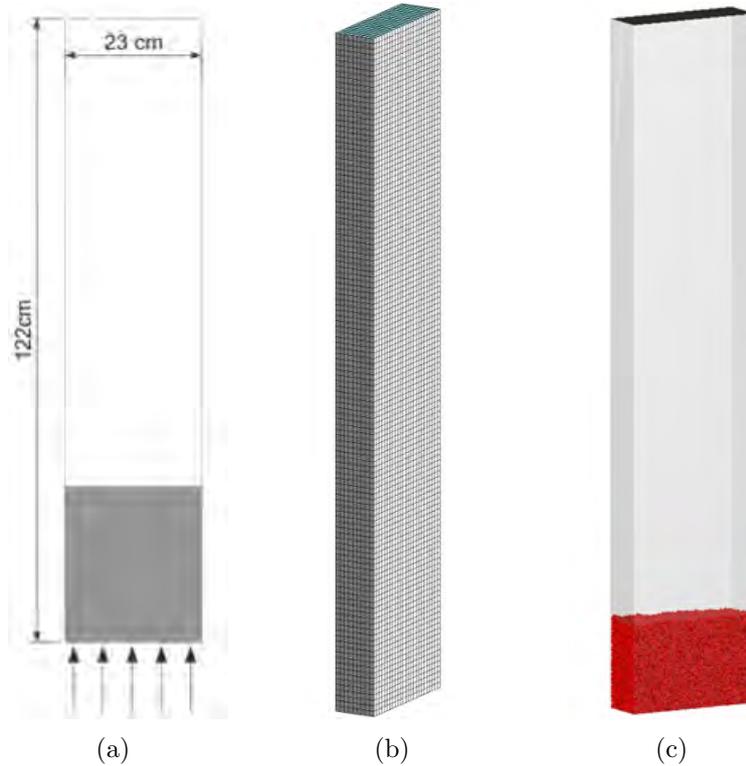


Figura 6.4: (a) Domínio numérico, (b) Malha utilizada, (c) Leito inicial de partículas

Como as equações de conservação para a fase gasosa são escritas para quantidades promediadas no volume, o volume característico do elemento de malha deve ser maior que o volume da partícula. PEPIOT e DESJARDINS (2012) sugerem que o volume do elemento seja pelo menos uma ordem de grandeza maior que o volume da partícula, de forma que para uma malha uniforme, o tamanho de elemento tem que ser tal que  $\Delta x > \left(\frac{10\pi}{6}\right)^{\frac{1}{3}} d_p$ . Sendo assim, uma malha uniforme com  $23 \times 8 \times 122$  elementos foi adotada, conforme a Figura 6.4(b), com a relação de  $\Delta x \approx 3d_p$ .

### 6.3.2 Condições iniciais e de contorno

Para inicialização do leito, 92 949 partículas perfeitamente esféricas, com diâmetro de 3,26 mm e temperatura igual a 50 °C foram geradas no topo do domínio. Estas caíram sob efeito da gravidade, formando um leito empacotado com altura de 16,4 cm, como pode ser visto na Figura 6.4(c).

Em dois dos casos simulados (vide tabela 6.3), as partículas possuem uma taxa volumétrica de geração de energia,  $q'''$ , constante. O valor para esta taxa foi calculado de forma que a diferença entre a temperatura do fluido na entrada e na saída, após o estabelecimento de um regime permanente, seja de 20 °C.

Para o gás, a velocidade superficial e a temperatura de entrada de  $10\text{ }^\circ\text{C}$  foram as condições prescritas na entrada. A fim de avaliar a perda de carga com o aumento da vazão mássica do gás, ao invés de se iniciar com a velocidade final, optou-se por utilizar uma rampa de velocidades na entrada. A velocidade superficial do gás foi aumentada linearmente de  $0\text{ m s}^{-1}$  até a velocidade final,  $U_{final}$ , de cada um dos casos estudados (conforme a Tabela 6.1) num intervalo de 2s e posteriormente mantida neste valor, conforme a Figura 6.5.

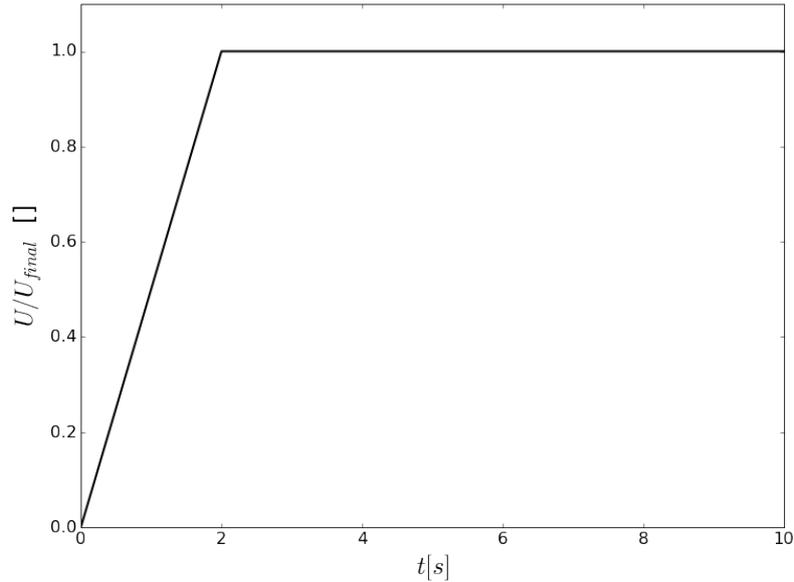


Figura 6.5: Velocidade do gás na entrada adimensionalizada pela velocidade final em cada caso estudado.

Na saída, a pressão foi fixada em 1 atm. Para as paredes, consideradas lisas e adiabáticas, a condição de não-deslizamento foi imposta para a fase fluida. Os coeficientes de atrito estático e dinâmico e o coeficiente de restituição nas colisões entre partículas e paredes são iguais a 0,3.

Nas colisões entre partículas, os coeficientes de atrito estático e dinâmico são iguais a 0,7, enquanto que o coeficiente de restituição de energia é de 0,3. Estes valores foram disponibilizados pelo NETL juntamente com os dados experimentais. A tabela 6.2 resume as propriedades em comum adotadas em todas as simulações.

### 6.3.3 Os casos analisados

A tabela 6.3 resume os 6 casos analisados. Doravante os casos serão citados como casos 1–6. Dentre as três velocidades de gás, o caso de menor velocidade de gás foi o escolhido para avaliar as diferenças entre as formulações usando o método de parâmetros concentrados clássico e o método de parâmetros concentrados aprimorado.

Tabela 6.2: Propriedades do domínio, paredes, partículas e fluido.

	<b>Propriedade</b>	<b>Valor</b>
<b>Domínio</b>	Dimensões	7,62 x 22,86 x 121,92 cm
	Malha	8 x 24 x 124
<b>Paredes</b>	Módulo de Young	$1,0 \times 10^{11} \text{ N m}^{-2}$
	Coefficiente de fricção	0,3
	Coefficiente de restituição	0,3
	Fluxo de calor	Adiabáticas
<b>Partículas</b>	Diâmetro equivalente	3,26 mm
	Densidade	$1131 \text{ kg m}^{-3}$
	Massa do inventário	1,9 kg
	Coefficiente de fricção	0,7
	Coefficiente de restituição	0,3
	Módulo de Young	$1,0 \times 10^7 \text{ N m}^{-2}$
	Calor específico	$800 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
	Condutividade térmica	$0,25 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$
	Termo de geração de energia	$680,133 \text{ kW m}^{-3}$
	Temperatura inicial	50 °C
Passo de tempo de DEM	$2,6 \times 10^{-6} \text{ s}$	
<b>Gás</b>	Densidade	$1,20 \text{ kg m}^{-3}$
	Viscosidade	$1,9 \times 10^{-5} \text{ Pa s}$
	Calor específico	$1000 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
	Condutividade térmica	$0,024 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$
	Temperatura inicial	10 °C
	Temperatura na entrada	10 °C
	Velocidade superficial na entrada	Ver tabela 6.4
	Passo de tempo de CFD	$1,0 \times 10^{-3} \text{ s}$

Tabela 6.3: Casos simulados.

<b>Caso</b>	<b>Velocidade [m/s]</b>	<b>Termo fonte de energia</b>	<b>Versão do acoplamento</b>
Caso 1	2,19	Não	Padrão
Caso 2	3,28	Não	Padrão
Caso 3	4,38	Não	Padrão
Caso 4	2,19	Não	Aprimorada
Caso 5	2,19	Sim	Padrão
Caso 6	2,19	Sim	Aprimorada

### 6.3.4 Modelagem numérica

As propriedades físicas do gás são constantes, não variando com a temperatura nem pressão ao longo da simulação.

A correlação de arrasto de Huilin & Gidaspow, apresentada na seção 3.1.3, foi adotada para o cálculo da força de interação entre partículas e o fluido.

A correlação de Gunn, apresentada na seção 3.1.4, foi adotada para o cálculo no número de Nusselt, que por sua vez é utilizado para o cálculo do coeficiente de transferência de calor entre as partículas e o fluido.

Um raio de promediação,  $r_{\Delta} = 4$ , foi utilizado no processo de redistribuição entre as células da fração volumétrica de partículas, da força total de interação com o fluido e da taxa de transferência de calor, conforme apresentado na seção 4.1.3.

O modelo  $\kappa - \epsilon$  foi adotado para representar os efeitos da turbulência na fase fluida. Nesse modelo o tensor de Reynolds é aproximado por uma relação linear com a taxa de deformação média da fase contínua por meio da viscosidade turbulenta. A viscosidade turbulenta, por sua vez, é escrita em termos da energia cinética turbulenta,  $\kappa$ , e da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta da fase contínua,  $\epsilon$ .

Em casos multifásicos, as equações de transporte para  $\kappa$  e  $\epsilon$  são próximas às equações do modelo  $\kappa - \epsilon$  padrão para escoamentos monofásicos, exceto por termos fontes inseridos para modelar a influência das fases dispersas na fase contínua. No presente trabalho, entretanto, os termos de transferência turbulenta de quantidade de movimento entre fases são desprezados e a equação de conservação de momentum para a fase dispersa não é resolvida.

O passo de tempo inicial para a solução da fase fluida é de  $1,0 \times 10^{-3}$  s. Conforme explicado na seção 4.3, este passo de tempo é corrigido após a inicialização do acoplamento de forma que seja um múltiplo inteiro do passo de tempo do solver DEM. A simulação foi acompanhada durante 10s de tempo real.

Detalhes do setup numérico podem ser encontrados na seção 4.1.1.

## 6.4 Resultados

### 6.4.1 Dinâmica do leito

A simulação computacional de leitos fluidizados tridimensionais permite acesso irrestrito ao interior do reator, sendo útil para avaliar o comportamento das bolhas e a distribuição espacial das partículas. Sendo assim, a fim de avaliar qualitativamente o comportamento do leito antes e após a fluidização, as partículas foram divididas em sete diferentes grupos em função de suas posições iniciais, conforme pode ser

visto para o caso 1 na Figura 6.6(a), e acompanhadas ao longo do tempo.

A Figura 6.6(b) mostra o leito no estado de fluidização incipiente. Abaixo desta velocidade, nenhuma atividade é observada no leito e as partículas se mantêm praticamente na mesma posição inicial, enquanto que a altura do leito não se altera frente ao valor da inicialização.

A Figura 6.6(c) mostra o avanço do processo de fluidização com o aumento gradual da velocidade superficial do gás, enquanto que a Figura 6.6(d) apresenta a posição das partículas no momento em que a velocidade final é atingida. Já a Figura 6.6(e) mostra o comportamento das partículas sob regime de fluidização borbulhante estável.

Por fim, a Figura 6.6(f) apresenta a configuração das partículas após 10s de simulação, as quais estão completamente misturadas, ratificando uma das principais vantagens do uso do conceito de leito fluidizado em reatores nucleares.

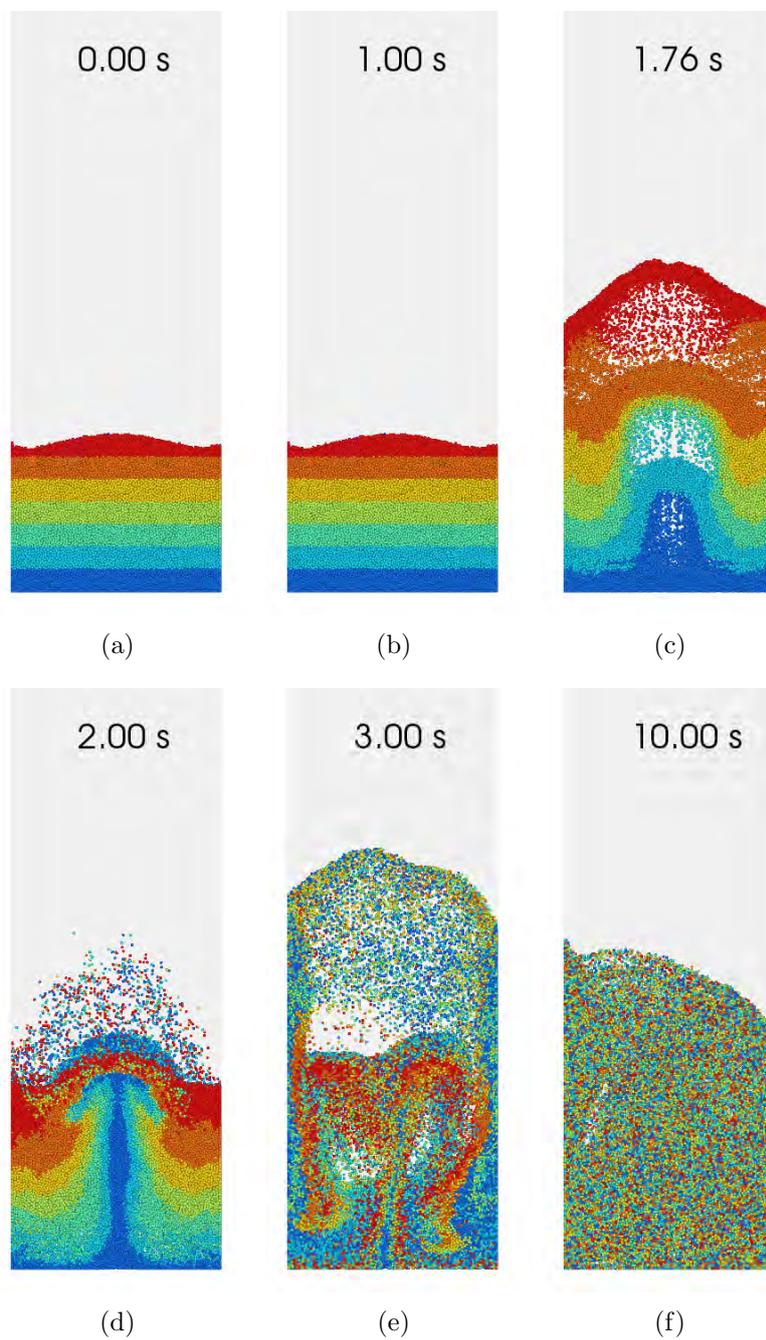


Figura 6.6: Comportamento das partículas em diferentes instantes de tempo coloridas pela posição inicial no leito para o caso 1.

## 6.4.2 Dinâmica das bolhas

Para acompanhar as bolhas formadas, isosuperfícies de fração volumétrica de sólidos igual a  $\alpha_p = 0,3$  foram geradas. As Figuras 6.7, 6.8 e 6.9 apresentam estas isosuperfícies e um plano central colorido pela fração volumétrica de sólidos em diferentes instantes de tempo após a velocidade mínima de fluidização ter sido atingida para os casos 1, 2 e 3, respectivamente. Apesar da escolha deste valor de fração volumétrica para acompanhar as bolhas ter sido arbitrário, a análise realizada com valores de  $\alpha_p = 0,25$  e  $\alpha_p = 0,35$  retornou o mesmo comportamento das bolhas.

Conforme esperado para um leito fluidizado a gás composto por partículas do grupo D de Geldart (vide seção 2.1), a formação de bolhas é observada desde o momento que a velocidade mínima de fluidização é atingida. Para os três casos analisados, a expansão do leito se inicia de forma bastante impulsiva, levando a um considerável fluxo ascendente de partículas, fenômeno muitas vezes observado para partículas do grupo D de Geldart (DAVIDSON *et al.*, 1985).

Bolhas com formato elíptico se formam no centro do leito, forçando as partículas na sua parte superior a se moverem para cima. Devido à coalescência, estas bolhas crescem conforme avançam no leito e tomam a forma de um pistão momentos antes de romper a superfície do leito. Conforme as partículas que foram arremessadas voltam ao leito, um regime estável de fluidização borbulhante se estabelece.

Com o aumento da velocidade do gás na entrada, maior o volume ocupado pelas bolhas e maior o aumento da altura do leito. Na velocidade mais alta, fica difícil identificar as bolhas como entidades individuais, visto que regiões de fração de vazio elevada conectam a entrada à parte superior do reator.

Para a menor velocidade de gás, os eventos de estouro das bolhas são bem definidos, lançando uma pequena porção de partículas para cima quando ocorrem. Já para a velocidade mais elevada, a definição da interface do leito se torna pouco clara, e partículas são transportadas para regiões mais elevadas do reator.

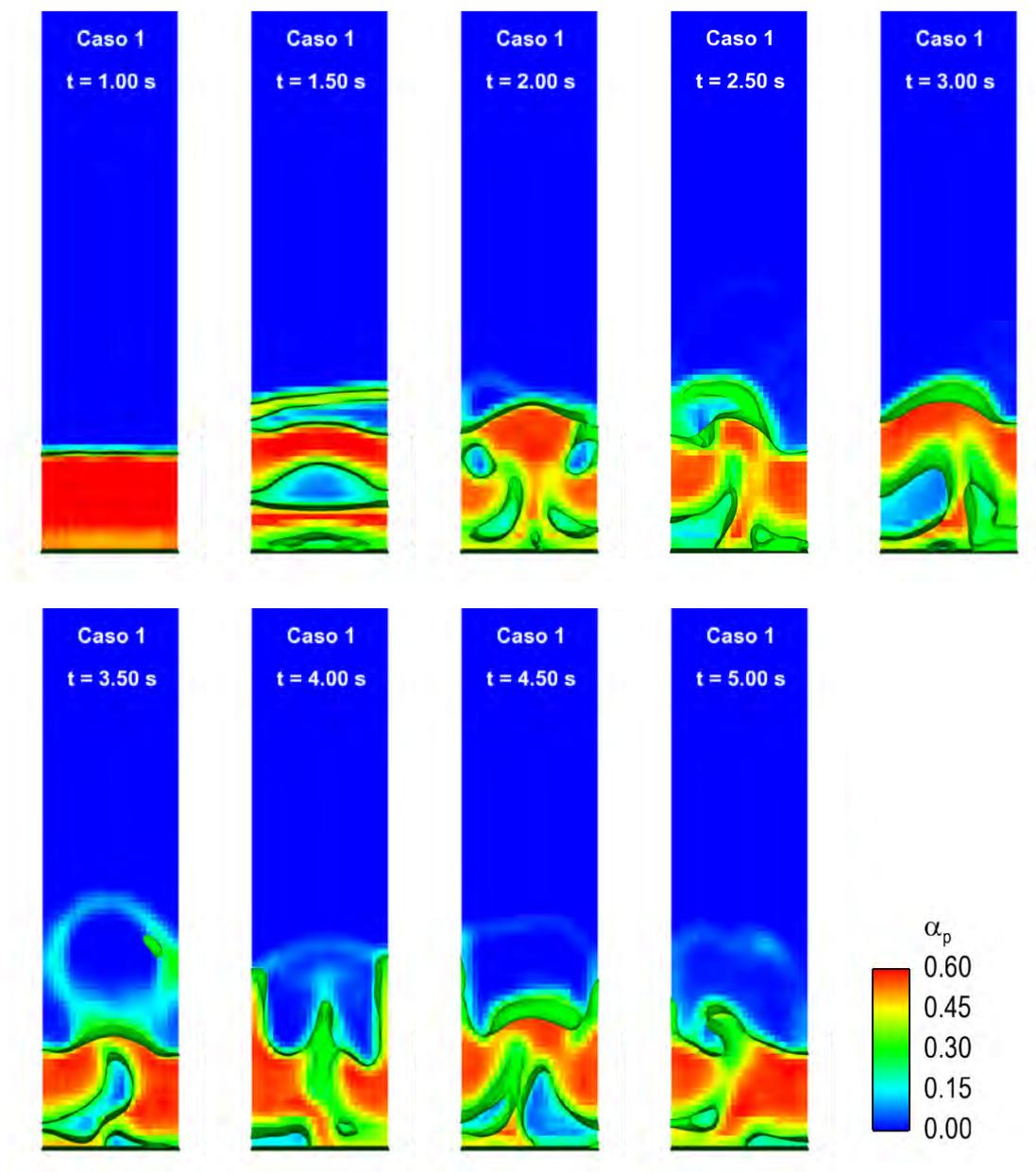


Figura 6.7: Isosuperfícies de fração volumétrica de sólidos igual a  $\alpha_p = 0,3$  para o caso 1.

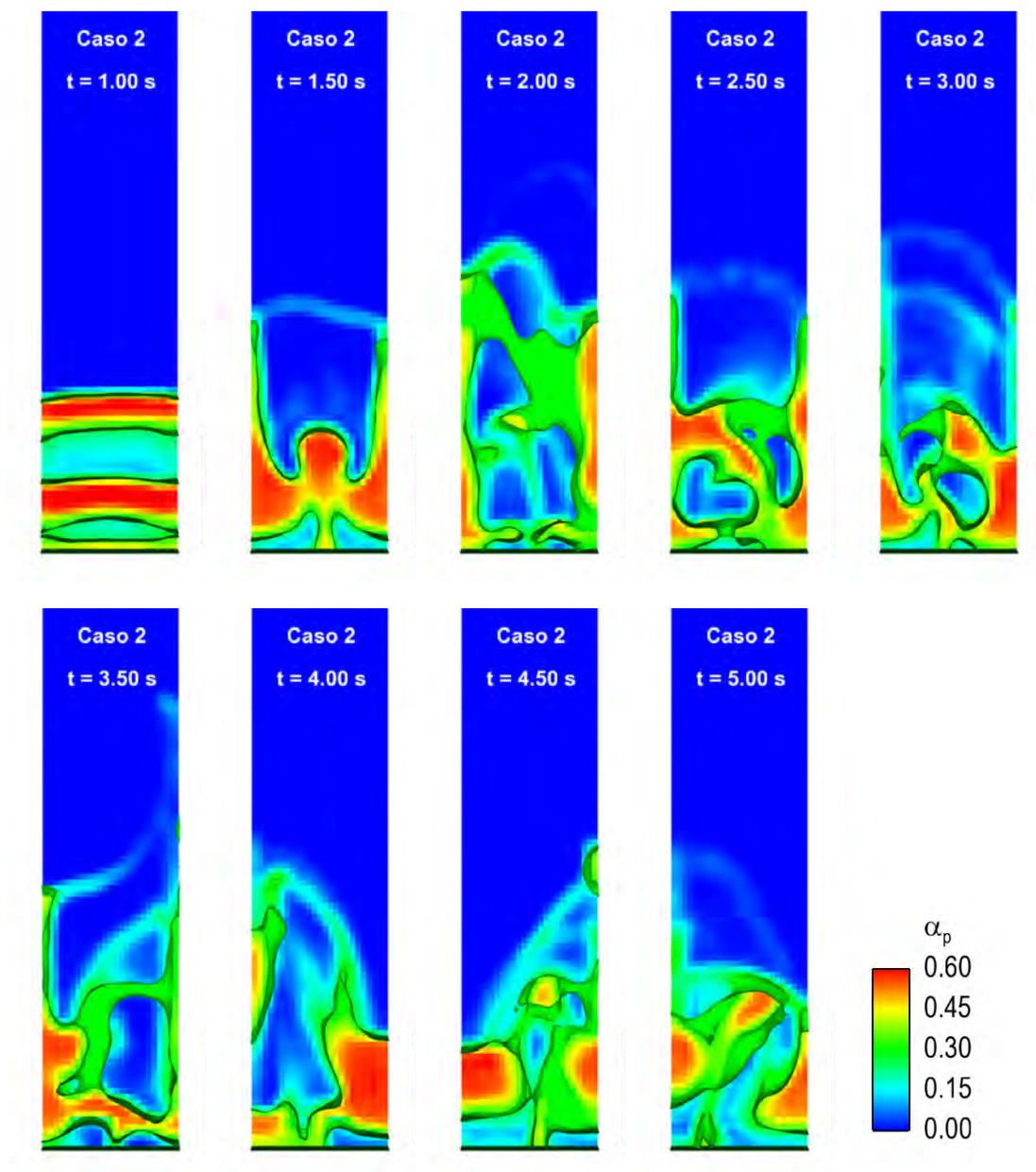


Figura 6.8: Isosuperfícies de fração volumétrica de sólidos igual a  $\alpha_p = 0,3$  para o caso 2.

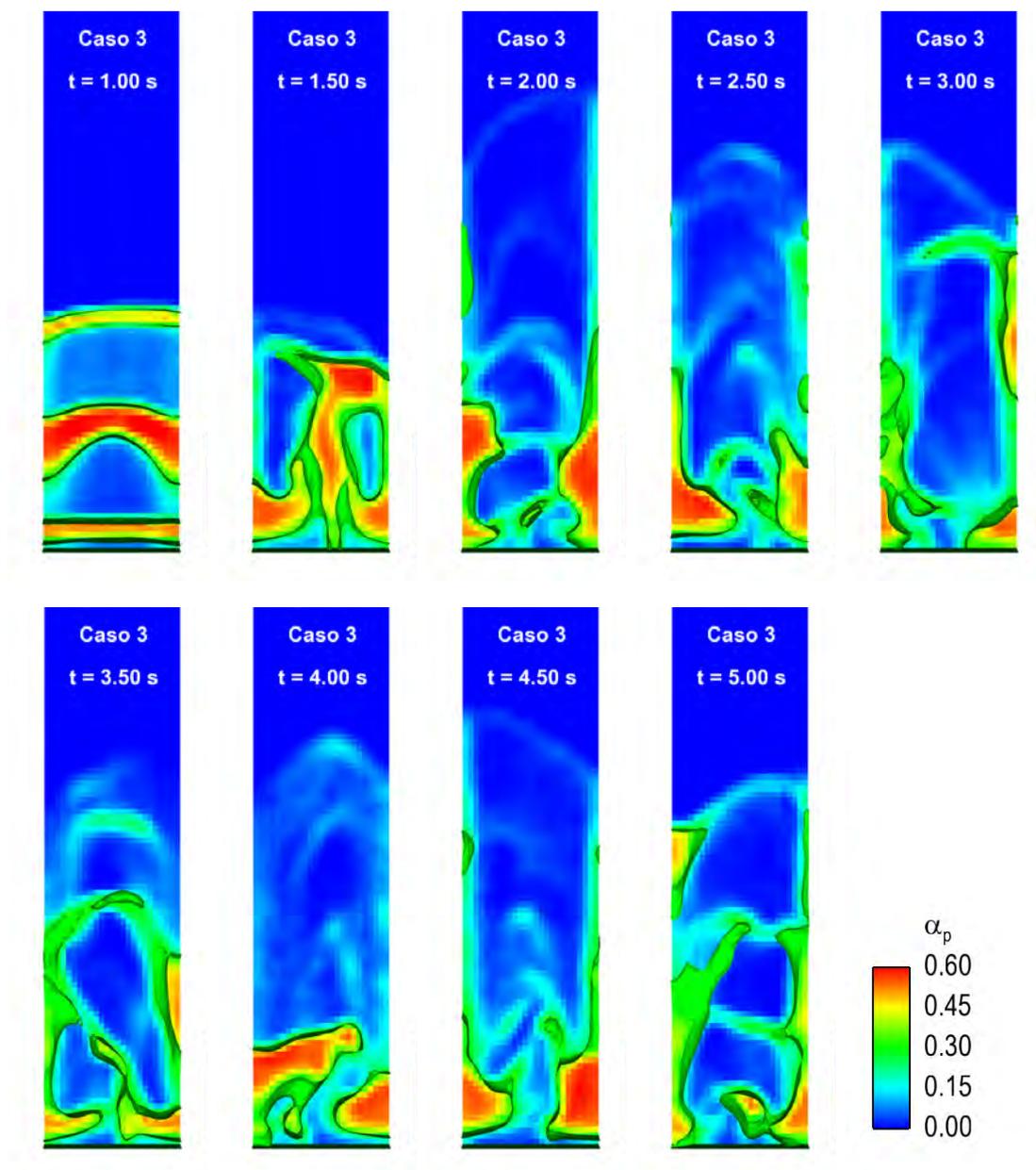


Figura 6.9: Isosuperfícies de fração volumétrica de sólidos igual a  $\alpha_p = 0,3$  para o caso 3.

### 6.4.3 Altura do leito

Apesar da análise visual das partículas e bolhas ter retornado o comportamento reportado na literatura para leitos fluidizados, optou-se por realizar uma análise mais quantitativa. A análise da altura do leito fluidizado reflete a flutuação característica de leitos fluidizados borbulhantes e fornece informações indiretas da movimentação das bolhas.

A altura média das partículas em cada instante de tempo,  $\langle z_p \rangle$ , foi calculada conforme sugerido por GOLDSCHMIDT *et al.* (2002) como:

$$\langle z_p \rangle = \frac{\sum_k^{N_c} \alpha_{p,k} z_{p,k}}{\sum_k^{N_c} \alpha_{p,k}} \quad (6.1)$$

onde  $\alpha_{p,k}$  é a fração volumétrica da fase particulada no elemento  $k$ ,  $z_{p,k}$  é a altura do centróide do elemento  $k$  e  $N_c$  é o número de elementos da malha.

A Figura 6.10 apresenta a evolução temporal das alturas médias adimensionalizadas pela altura inicial do leito para cada um dos casos analisados. Em concordância com estudos publicados na literatura (BUSCIGLIO *et al.*, 2009; PEPIOT e DESJARDINS, 2012) e com os resultados observados com a visualização das bolhas, tanto a altura média do leito como as flutuações de altura do leito aumentam com a velocidade do gás.

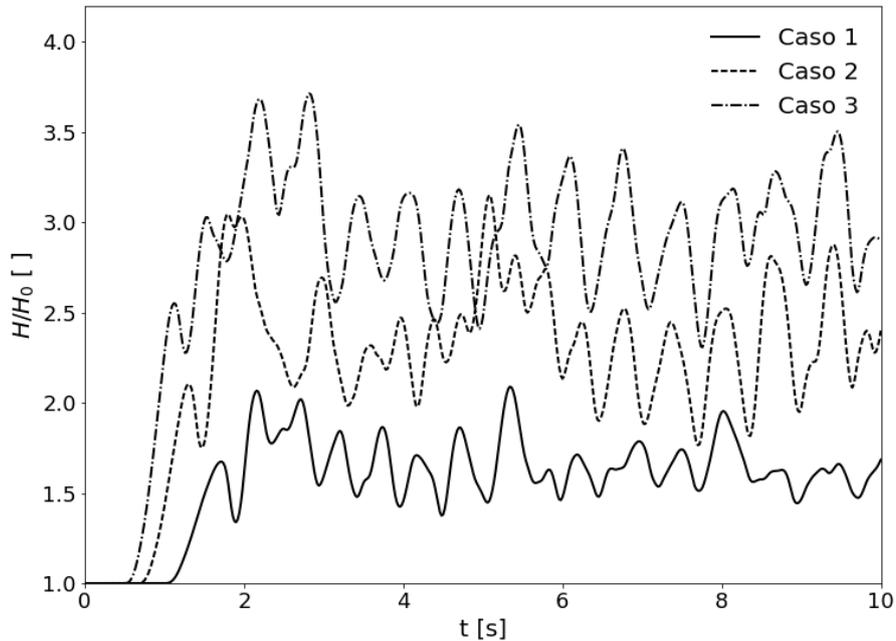


Figura 6.10: Evolução temporal das alturas médias adimensionalizadas pela altura inicial do leito para os casos 1, 2 e 3.

#### 6.4.4 Perda de carga

As Figuras 6.11, 6.12 e 6.13 mostram a comparação da perda de carga entre os dois pontos de medição obtida numericamente através do acoplamento CFD-DEM (curva contínua) a cada passo de tempo do solver de CFD ( $1,0 \times 10^{-3}$  s) contra o valor médio obtido experimentalmente (curva tracejada) para o caso 1, caso 2 e caso 3, respectivamente. Em cada um dos gráficos, a linha pontilhada vertical marca o instante de tempo em que a velocidade mínima de fluidização experimental é atingida.

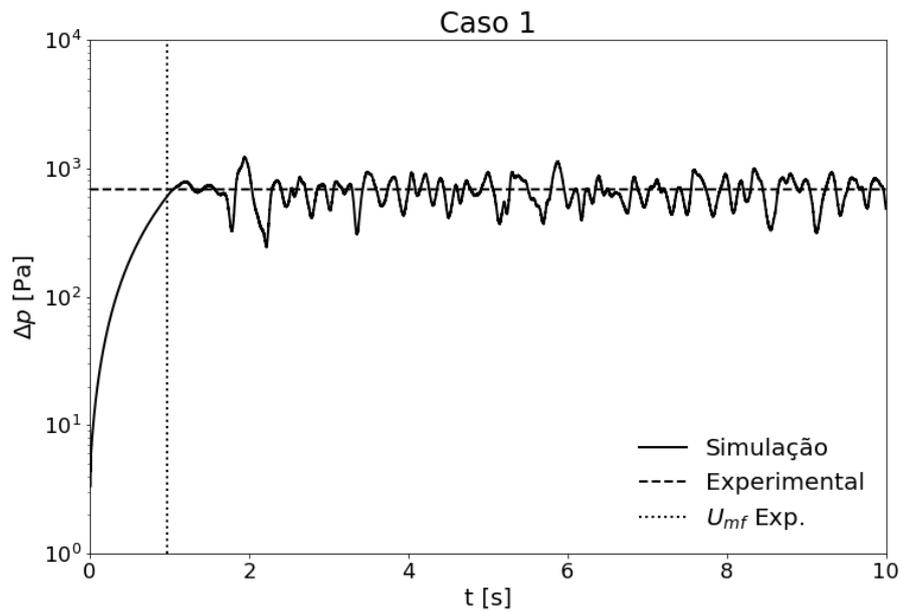


Figura 6.11: Comparação da perda de carga obtida na simulação com a experimental para o caso 1.

O comportamento flutuante das medições de pressão em leitos fluidizados do tipo borbulhante foi capturado pela simulação, que oscila em torno de um valor médio. A capacidade do modelo em capturar a transição de regime no leito fica evidenciada ao se comparar a linha de perda de carga versus tempo com a linha que demarca a velocidade mínima de fluidização experimental.

A perda de carga média entre os dois pontos de medição foi calculada através da média aritmética entre os valores da perda de carga no intervalo de tempo de 2 s a 10 s, ou seja, do momento em que a velocidade final é atingida ao último instante de simulação. A concordância entre a perda de carga experimental e a perda de carga média para as três vazões de gás estudadas, apresentada na Figura 6.14, é considerável. Conforme observado nas análises instantâneas, o erro de predição da perda de carga aumenta com a vazão de gás.

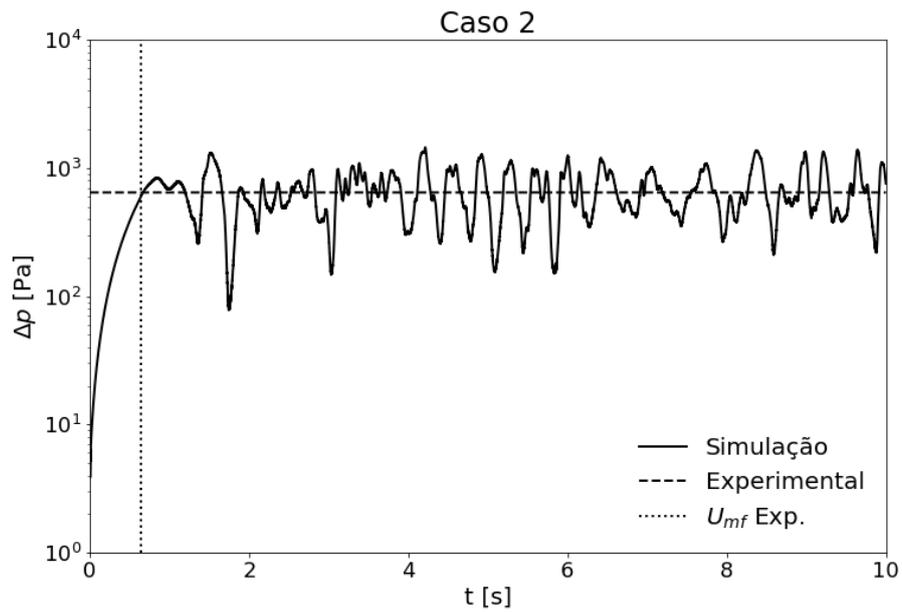


Figura 6.12: Comparação da perda de carga obtida na simulação com a experimental para o caso 2.

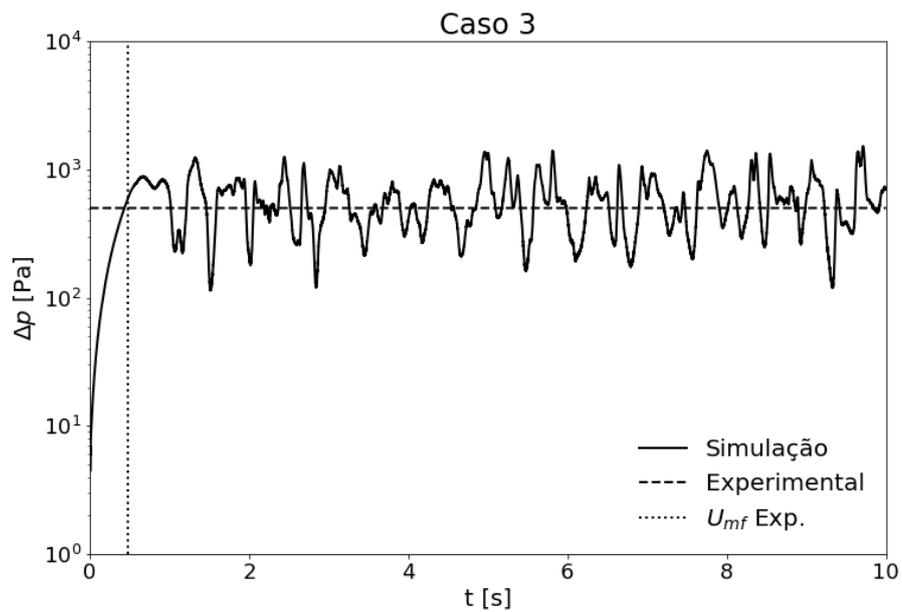


Figura 6.13: Comparação da perda de carga obtida na simulação com a experimental para o caso 3.

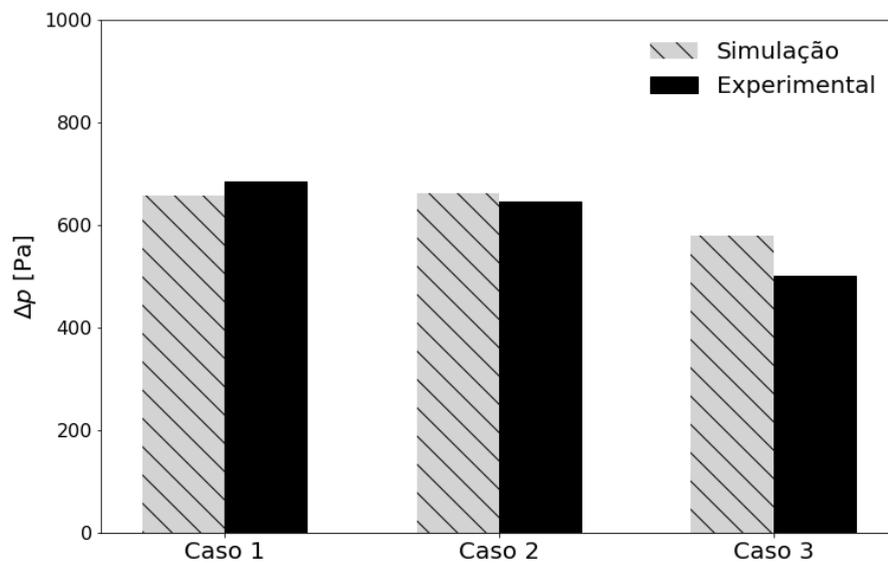


Figura 6.14: Comparação entre a perda de carga média no leito obtida numericamente com resultados experimentais.

A Figura 6.15 apresenta a comparação da perda de carga entre os dois pontos para os casos 1 e 4, ou seja, para a menor velocidade de gás com as formulações padrão e aprimorada com pontos obtidos a cada passo de tempo do solver de CFD ( $1,0 \times 10^{-3}$  s), enquanto que a Figura 6.16 apresenta a comparação da média da perda de carga entre os tempos 0,2s a 10,0s para os mesmos casos. Como as propriedades do gás não são alteradas com a temperatura, era esperado que a perda de carga fosse muito semelhante entre os casos 1, 4, 5 e 6.

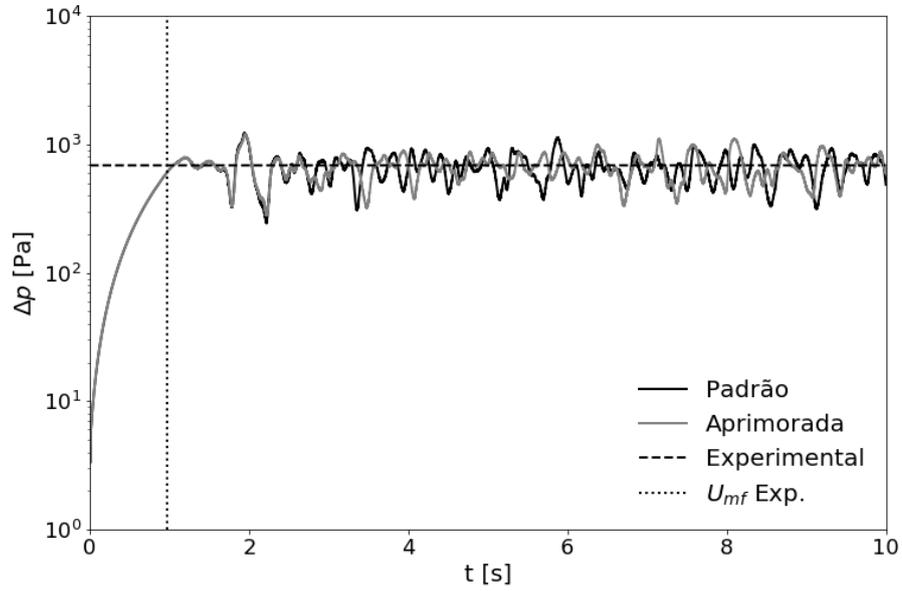


Figura 6.15: Comparação entre a perda de carga leito obtida numericamente usando as formulações padrão e aprimorada com resultados experimentais (casos 1 e 4).

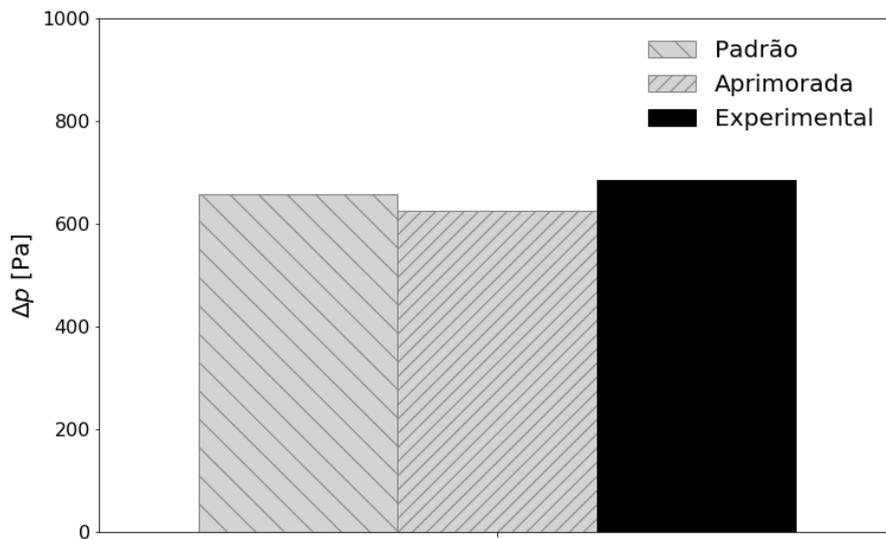


Figura 6.16: Comparação entre a perda de carga média no leito obtida numericamente usando as formulações padrão e aprimorada com resultados experimentais.

### 6.4.5 Distribuição da fase sólida

Para análise do comportamento médio da fração volumétrica das partículas no leito, o domínio foi discretizado em regiões idênticas à malha utilizada. A fração volumétrica de partículas foi calculada para cada instante de tempo. Em seguida, a fração volumétrica média entre 2s e 10s foi obtida através da média aritmética dos valores médios instantâneos da fração volumétrica.

A fração volumétrica média é apresentada em um plano central na Figura 6.17 para o caso 1. Como as bolhas ascendem pela região central do leito, carregando as partículas, conforme analisado na seção 6.4.2, a fração volumétrica média de partículas é inferior nesta região quando comparada com a fração volumétrica próxima às paredes. As bolhas coalescem ao subir no leito, formando pistões, que estouram ao chegar na superfície, fazendo com que a fração volumétrica média diminua conforme se caminha da base para a saída de gás.

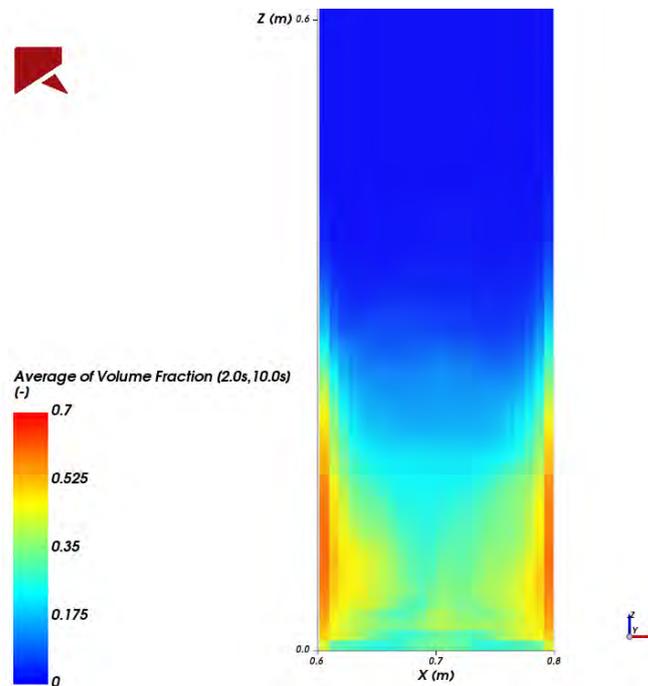


Figura 6.17: Fração volumétrica média das partículas entre 2s e 10s em um plano central para o caso 1.

### 6.4.6 Distribuição de velocidade da fase sólida

Em todos os casos estudados, um padrão de recirculação dupla foi observado. As partículas são carregadas na parte superior das bolhas de gás ao longo da área central do leito. Ao atingir o topo, as partículas se deslocam para as laterais do leito e em seguida seguem uma trajetória descendente acompanhando as paredes,

retornando para a região central ao atingir a região inferior e recomeçando o ciclo. O mesmo padrão foi encontrado no trabalho de LUO *et al.* (2015).

A Figura 6.18 apresenta os vetores de velocidade das partículas localizadas no centro do domínio em dois diferentes instantes de tempo com a menor velocidade de gás, onde é possível observar o padrão de recirculação dupla.

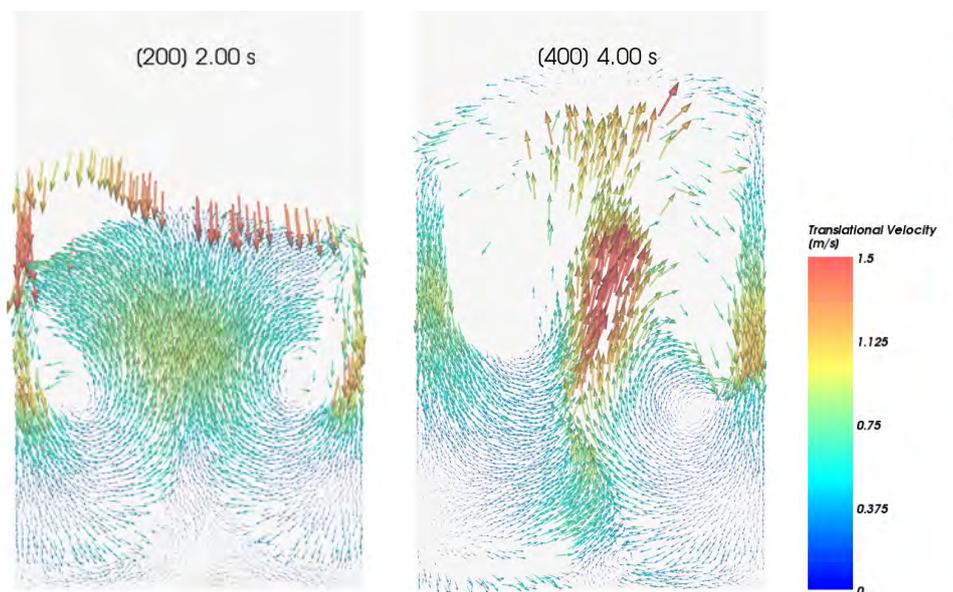


Figura 6.18: Velocidade das partículas na região central para o caso 1.

Para análise do comportamento médio da velocidade das partículas no leito, foi adotada a mesma discretização do domínio utilizada no cálculo da fração volumétrica média. A velocidade média das partículas em cada um desses elementos em cada instante de tempo foi calculada através da média aritmética das velocidades das partículas pertencentes ao elemento. Em seguida, a velocidade média de cada elemento entre 2s e 10s foi obtida através da média aritmética dos valores médios instantâneos.

A Figura 6.19 apresenta a velocidade vertical média das partículas em um plano central para o caso 1. Em concordância com a observação visual da dinâmica do leito, a região central do leito tem valores positivos para a componente z da velocidade, enquanto que as regiões mais distantes do centro possuem valores negativos.

A Figura 6.20 apresenta o comportamento médio da velocidade horizontal das partículas. Ao subirem no leito, as partículas são lançadas contras as paredes assim que as bolhas estouram a interface. Estas então descem pelas laterais até a região das base, onde são succionadas para o centro. Este comportamento é refletido nos padrões em direção à periferia no topo e em direção ao centro na região próxima à base.

A Figura 6.21 apresenta a componente da velocidade na profundidade do leito.

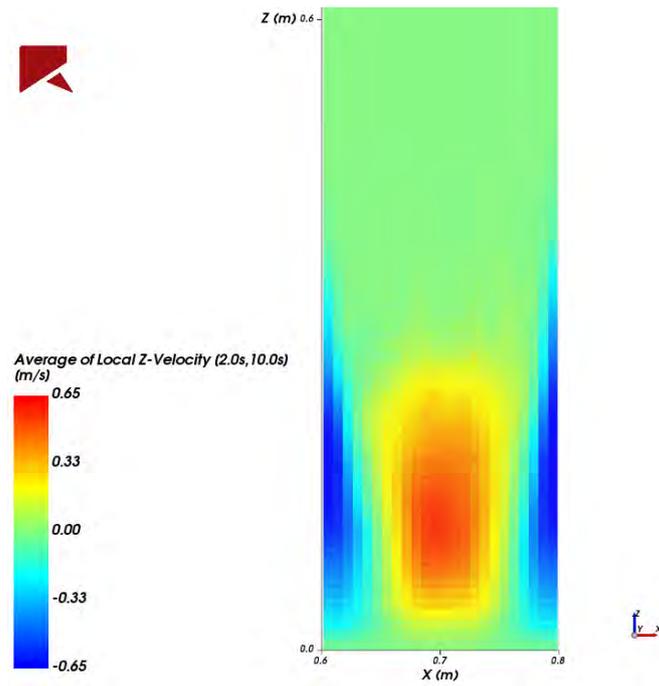


Figura 6.19: Velocidade vertical média das partículas em um plano central para o caso 1.

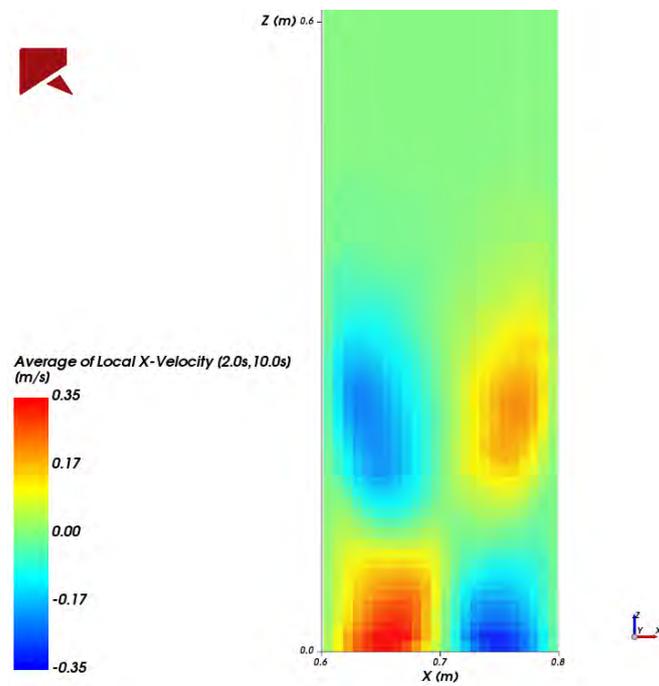


Figura 6.20: Velocidade horizontal média das partículas em um plano central para o caso 1.

A velocidade na direção  $y$  não apresenta nenhum padrão específico, de forma que seus valores médios são quase nulos.

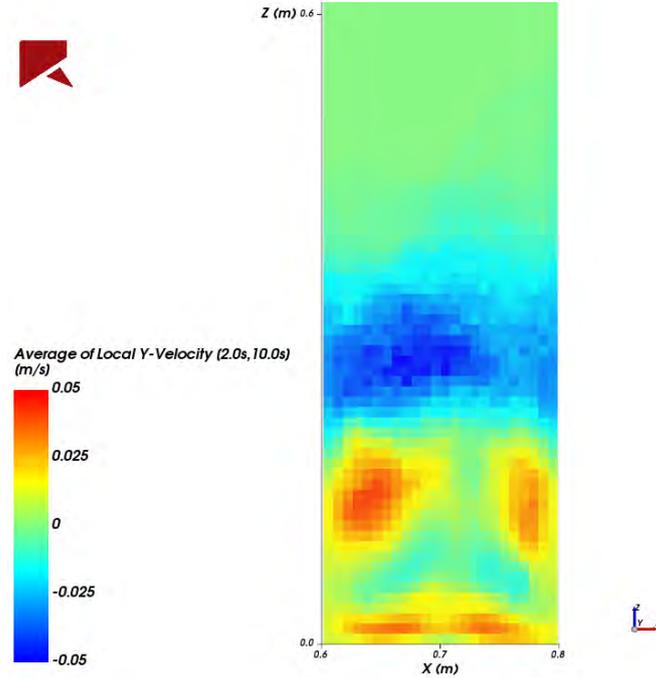


Figura 6.21: Velocidade  $y$  média das partículas em um plano central para o caso 1.

A fim de comparar quantitativamente a velocidade das partículas em cada um dos casos com os dados experimentais de velocidade vertical e horizontal, 5 regiões, com as mesmas dimensões reportadas pelo NETL, foram demarcadas para o cálculo das velocidades médias no tempo, conforme a Figura 6.22(a).

Em seguida, a velocidade média instantânea das partículas em cada região,  $\bar{\mathbf{v}}_{p,k}$ , foi calculada conforme a Equação 6.2:

$$\bar{\mathbf{v}}_{p,k} = \frac{\sum^{N_{p,k}} \mathbf{v}_p}{N_{p,k}} \quad (6.2)$$

onde  $N_{p,k}$  é o número de partículas em cada instante de tempo no volume  $k$  e  $\mathbf{v}_p$  é a velocidade de cada uma dessas partículas. A Figura 6.22(b) mostra as 5 regiões coloridas pelo valor da velocidade média das partículas no tempo  $t = 7s$  para o caso 1. A velocidade média instantânea em cada região foi então promediada entre os instantes 2 a 10s para os casos 1, 2 e 3.

Os perfis de velocidade vertical média são apresentados na Figura 6.23 para os casos 1, 2 e 3. O perfil de velocidade vertical é similar para os três casos, exibindo valores positivos na região central, onde as bolhas carregam as partículas para cima, e valores negativos nas regiões próximas às paredes, por onde as partículas retornam para preencher a região vazia. A magnitude da velocidade aumenta com o aumento da velocidade de entrada do gás devido ao maior arrasto das partículas.

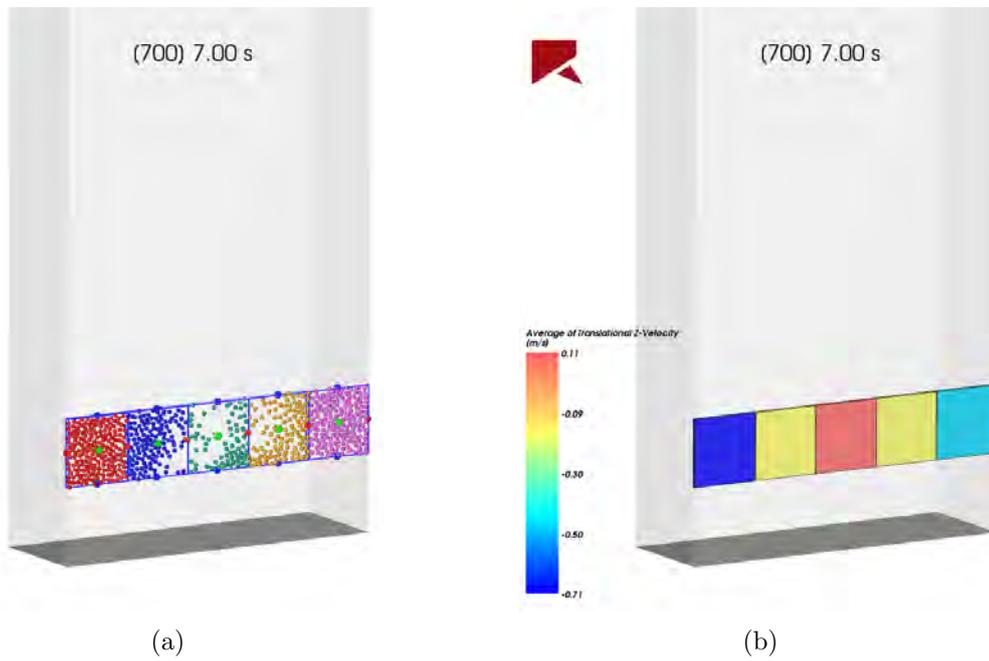


Figura 6.22: Velocidade das partículas na região central para o caso 1.

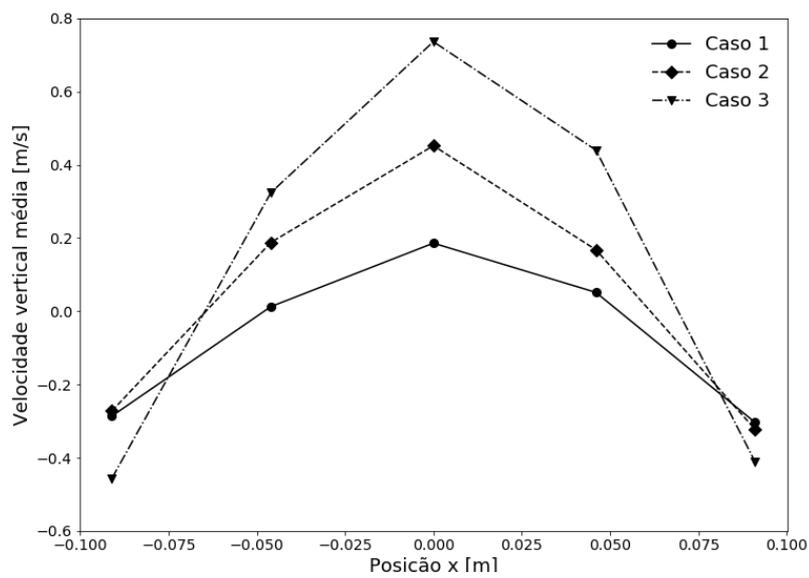


Figura 6.23: Velocidade vertical média das partículas para cada velocidade de gás estudada.

A Figura 6.24 apresenta os perfis de velocidade horizontal média para os casos 1, 2 e 3. Novamente, perfis semelhantes são encontrados para as três vazões de gás estudadas, com partículas se movendo das paredes em direção ao centro do leito.

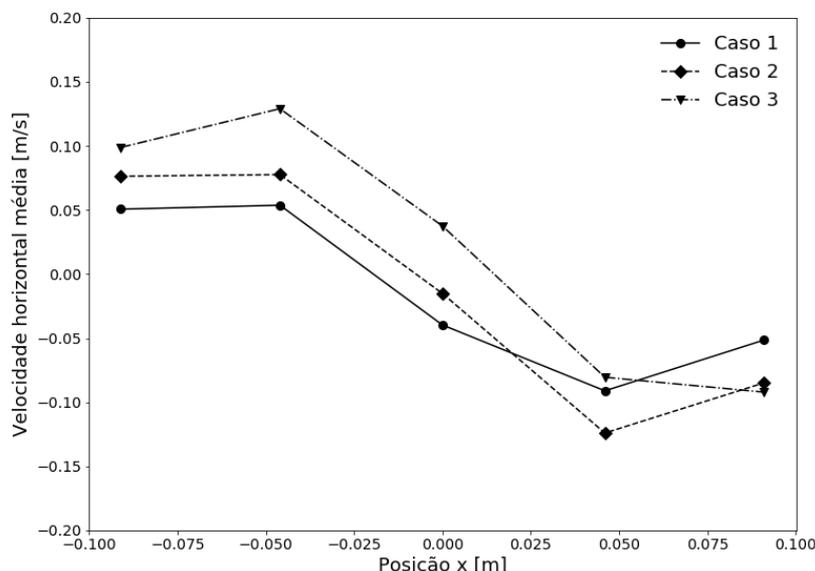


Figura 6.24: Velocidade horizontal média das partículas para cada velocidade de gás estudada.

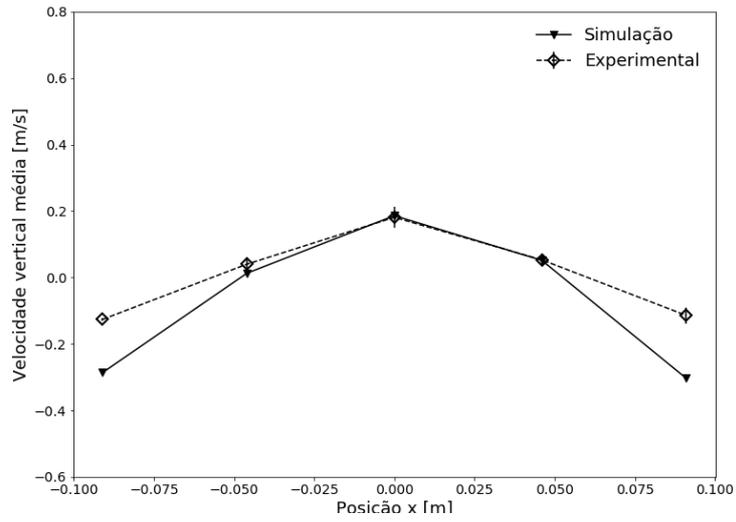
Cabe ressaltar, que ao contrário do esperado para uma geometria e injeção simétricas, um perfil assimétrico foi observado nas simulações, em especial para o caso de maior velocidade (caso 3). Isso pode ser um indicativo que o tempo de simulação utilizado no cálculo das médias temporais não foi suficiente.

A Figura 6.25 compara os perfis de velocidade vertical média com os resultados experimentais para os casos 1, 2 e 3. Os perfis obtidos numericamente apresentam a mesma tendência dos perfis obtidos experimentalmente, com velocidades positivas no centro e negativas nas regiões próximas da parede. A concordância entre os resultados numéricos e experimentais para os casos 1 e 2 é satisfatória, enquanto que para o caso 3 as discrepâncias são maiores e magnitude da velocidade é superestimada na simulação.

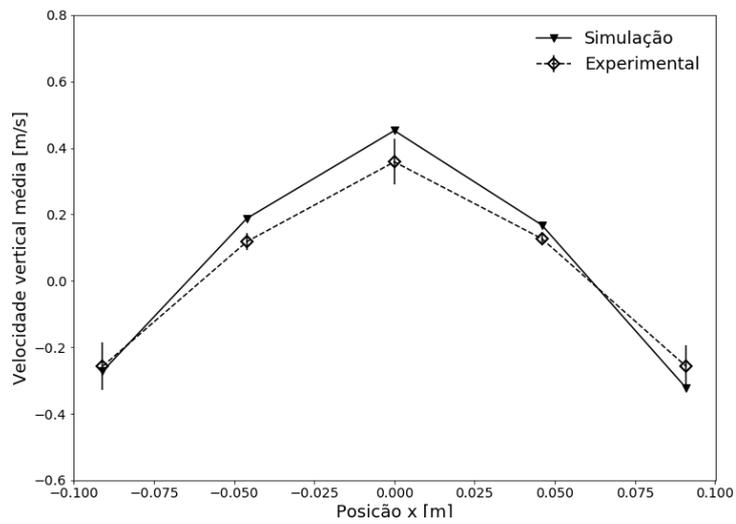
Algumas hipóteses são levantadas para explicar a diferença. A primeira é a de que, como a velocidade das partículas é função da quantidade de momentum trocada com a fase fluida, os resultados sugerem que a força de arrasto deve ser menor e o uso de outras correlações de arrasto pode sanar esta diferença. A segunda ressalva é que a malha utilizada nas simulações é relativamente grosseira. É possível que o uso de uma malha mais refinada nas paredes capture melhor a camada limite e reduza a velocidade da fase particulada nesta região, aproximando os valores dos resultados experimentais. Por fim, é preciso lembrar que o distribuidor de fluxo de gás não foi incluído nas simulações. A condição de contorno utilizada foi a de

velocidade uniforme ao longo da seção inferior no canal. Isso pode ter uma influência significativa sobre os perfis e portanto uma simulação incluindo o distribuidor na geometria pode reduzir as discrepâncias nos perfis de velocidade.

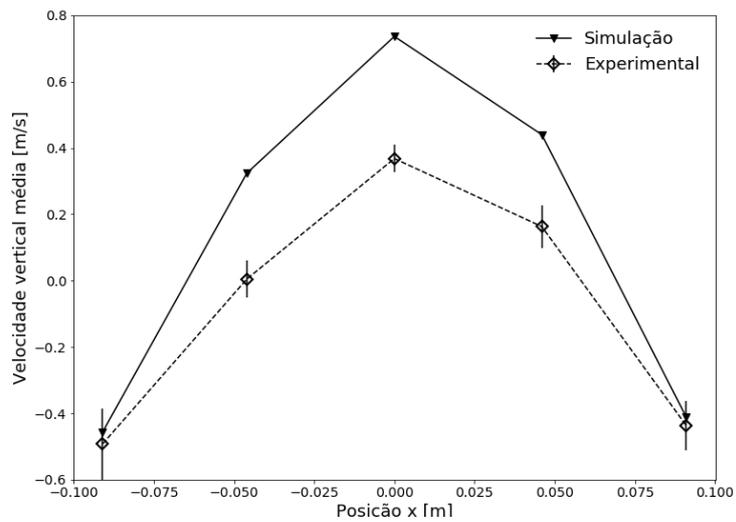
Finalmente, a Figura 6.26 apresenta a comparação dos perfis de velocidade horizontal para os casos 1, 2 e 3 com os resultados experimentais. A diferença das velocidades horizontais obtidas numericamente e a experimental são maiores do que as diferenças encontradas para a velocidade vertical. Como pode ser percebido a partir dos dados experimentais, ocorre uma inversão no sentido da velocidade horizontal conforme se aumenta a vazão de gás. Isso sugere que a posição onde foi feita a medição destes perfis se localiza na faixa de transição do sentido da velocidade mostrada na Figura 6.20. Esta inversão não foi percebida nos resultados numéricos. O fato das medidas terem sido feitas nesta região de transição faz com que um pequeno deslocamento desta região para cima ou para baixo cause uma grande diferença nas velocidades. Essa sensibilidade em relação à posição não é percebida nos gráficos de velocidade vertical. Como pode se ver na Figura 6.19, um pequeno deslocamento na posição não causaria uma grande variação no valor da velocidade.



(a) Caso 1

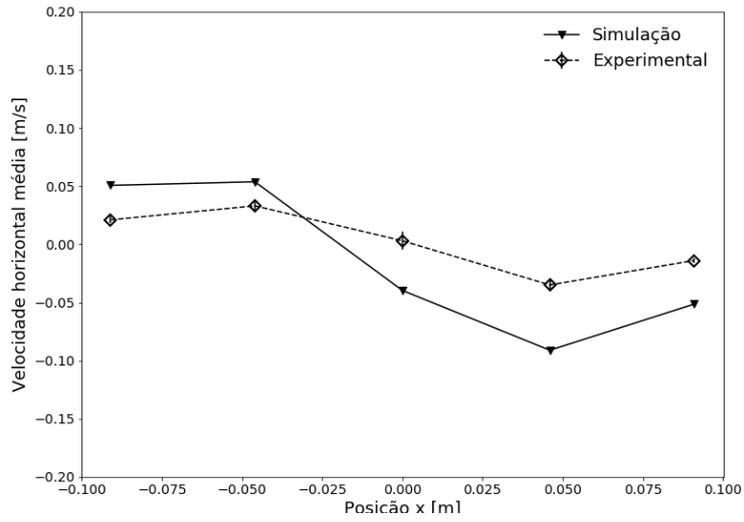


(b) Caso 2

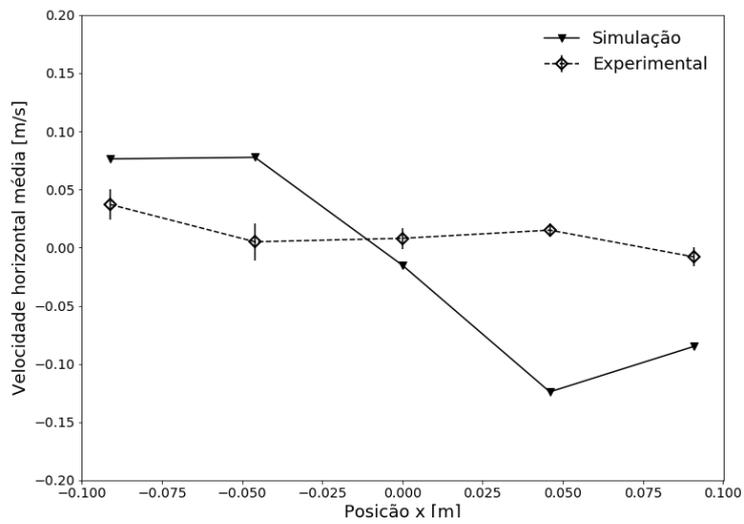


(c) Caso 3

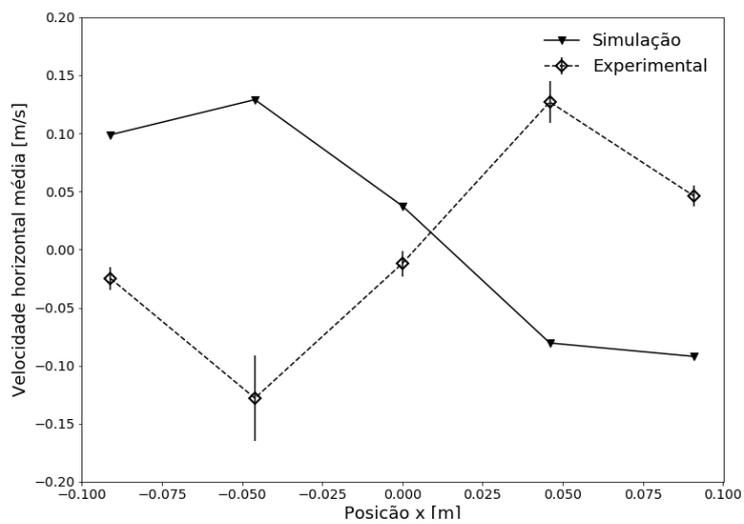
Figura 6.25: Comparação dos perfis de velocidade vertical para os casos 1, 2 e 3 com os resultados experimentais.



(a) Caso 1



(b) Caso 2



(c) Caso 3

Figura 6.26: Comparação dos perfis de velocidade horizontal para os casos 1, 2 e 3 com os resultados experimentais.

### 6.4.7 Análise da temperatura das partículas

A Figura 6.27 mostra as partículas coloridas pela temperatura em diferentes instantes para o caso 4 (caso usando a formulação aprimorada sem termo fonte de energia) enquanto que a Figura 6.28 apresenta os mesmos instantes de tempo para o caso 6 (caso usando a formulação aprimorada com termo fonte). No primeiro segundo de simulação, a fluidização é iminente e as partículas se encontram na mesma posição em que estavam no início da simulação. Somente as primeiras camadas possuem temperatura inferior ao restante do leito devido à troca de calor com o gás que entra no leito a 10 °C. Este gás se aquece e não consegue trocar calor com as partículas posicionadas mais altas no leito.

Após o processo de fluidização começar, estas partículas que estão na base do leito e possuem temperaturas inferiores são lançadas para posições mais altas no leito. Novas partículas são succionadas para a região da base e entram em contato com o gás frio que entra no leito, seguindo a dinâmica detalhada na seção 6.4.1. Esta mistura e agitação resulta em uma distribuição de temperatura relativamente uniforme ao longo do leito após alguns segundos, ressaltando umas das principais vantagens do uso de reatores nucleares do tipo leito fluidizado.

A temperatura final do leito com termo fonte de energia é, conforme se esperava, maior do que a temperatura final do leito sem geração de energia.

A Figura 6.29 mostra a evolução da temperatura média ao longo do tempo para os casos 1 e 4 (casos sem termo fonte, usando a formulação padrão e a formulação aprimorada, respectivamente). A Figura 6.30 apresenta a evolução da temperatura média do leito para os casos 5 e 6 (casos com termo fonte, usando a formulação padrão e a formulação aprimorada, respectivamente). Tanto para os casos que possuem o termo fonte de energia quanto para os casos sem termo fonte, a temperatura média das partículas é inferior nas simulações usando a formulação padrão do que nas simulações usando a formulação aprimorada. Este comportamento era esperado visto que na formulação aprimorada a temperatura na superfície das partículas é inferior à temperatura média e portanto a transferência de calor com o fluido é menor quando comparada com a formulação padrão. A diferença entre os valores médios é pequena e vai aumentando conforme o tempo passa. Casos com partículas com condutividade menores ou velocidades mais elevadas evidenciarão esta diferença pois o número de Biot seria mais elevado.

A Figura 6.31 apresenta as temperaturas máximas e mínimas das partículas a cada instante de tempo para os casos 1 e 4 (casos sem termo fonte, usando a formulação padrão e a formulação aprimorada, respectivamente). A Figura 6.32 apresenta a evolução das temperaturas máximas e mínimas para os casos 5 e 6 (casos com termo fonte, usando a formulação padrão e a formulação aprimorada,

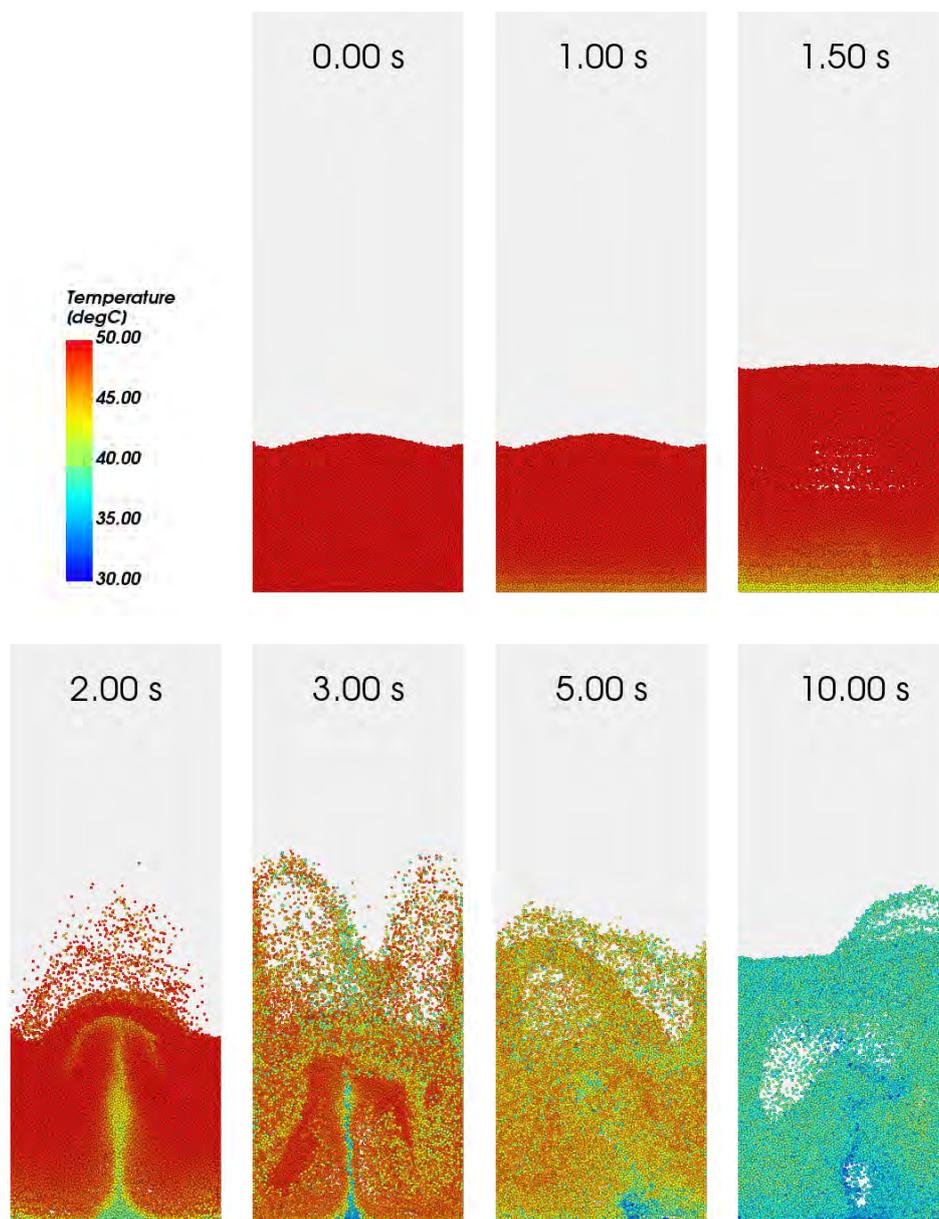


Figura 6.27: Temperatura das partículas no caso 4.

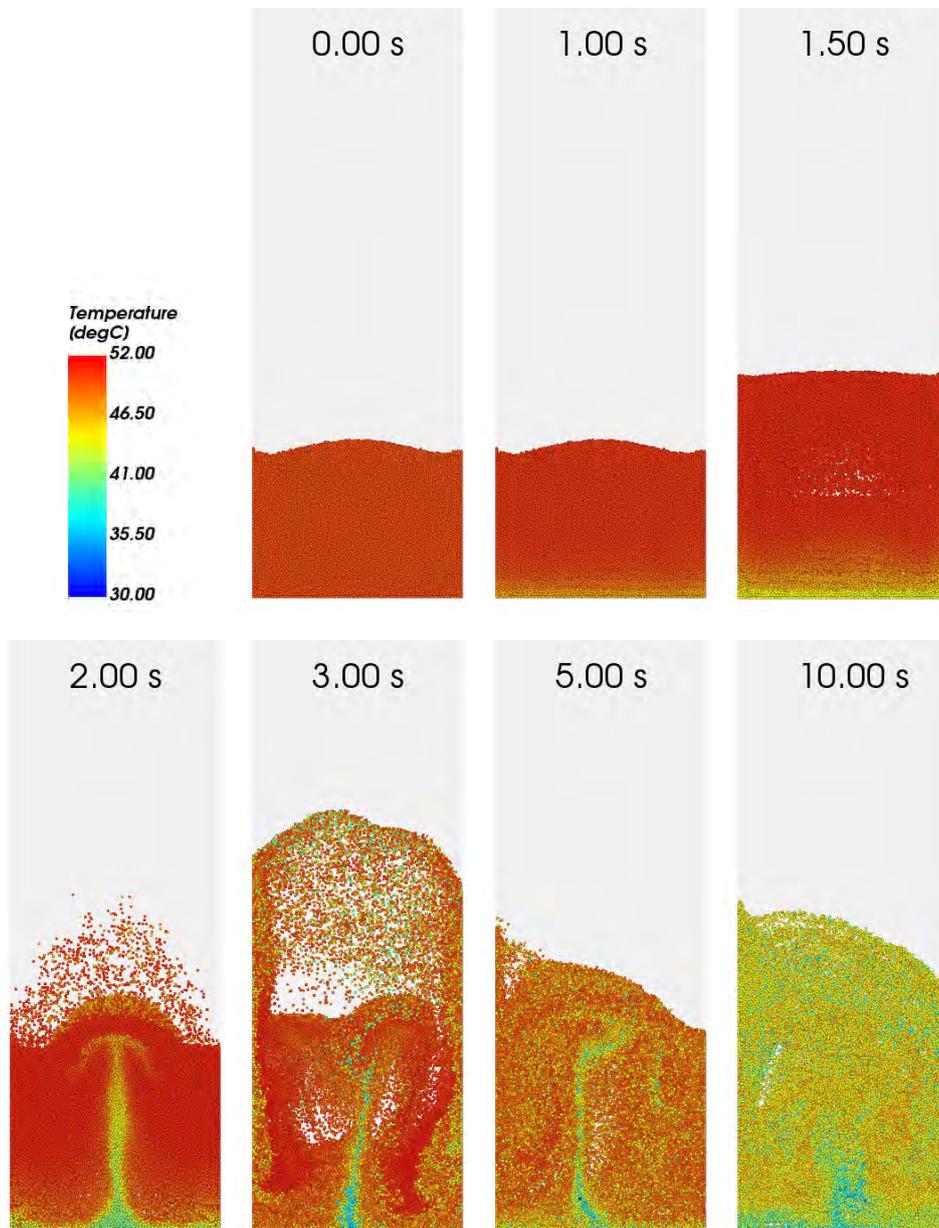


Figura 6.28: Temperatura das partículas no caso 6.

respectivamente). Tanto nos casos com termo fonte quando no sem termo fonte, as temperatura mínimas obtidas com o uso da formulação padrão são inferiores às temperaturas mínimas obtidas com a formulação aprimorada. Esse comportamento é também esperado visto que na formulação aprimorada a troca de calor entre o fluido e partículas é reduzida pois a temperatura da superfície se aproxima mais da temperatura do fluido do que na formulação padrão.

Em relação ao comportamento da temperatura máxima nas Figuras 6.31 e 6.32, a seguinte hipótese foi formulada para explicar a inversão observada nas curvas: como o fluido troca menos calor com as partículas na região próxima à entrada quando a formulação aprimorada é adotada, no início o gás consegue chegar com temperaturas menores em regiões mais altas do leito, resfriando mais as partículas do que o caso com a formulação padrão. Mais adiante no tempo, entretanto, como a formulação aprimorada faz com que se troque menos calor do que a formulação padrão, as curvas se invertem e a formulação aprimorada passa a apresentar valores maiores para a temperatura máxima, condizente com os valores de temperatura média e mínima.

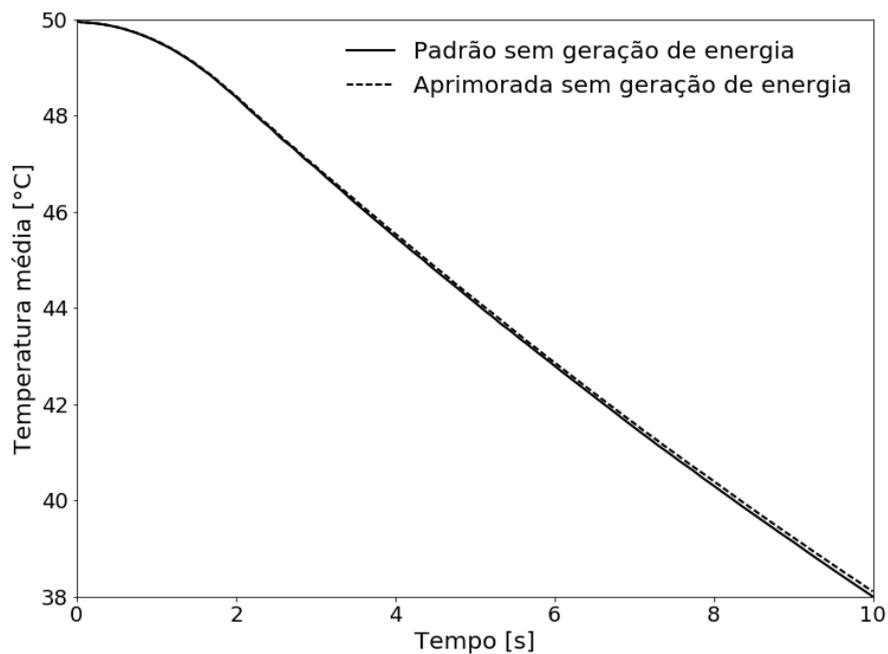


Figura 6.29: Comparação entre a temperatura média no leito sem geração de energia usando as formulações padrão (caso 1) e aprimorada (caso 4).

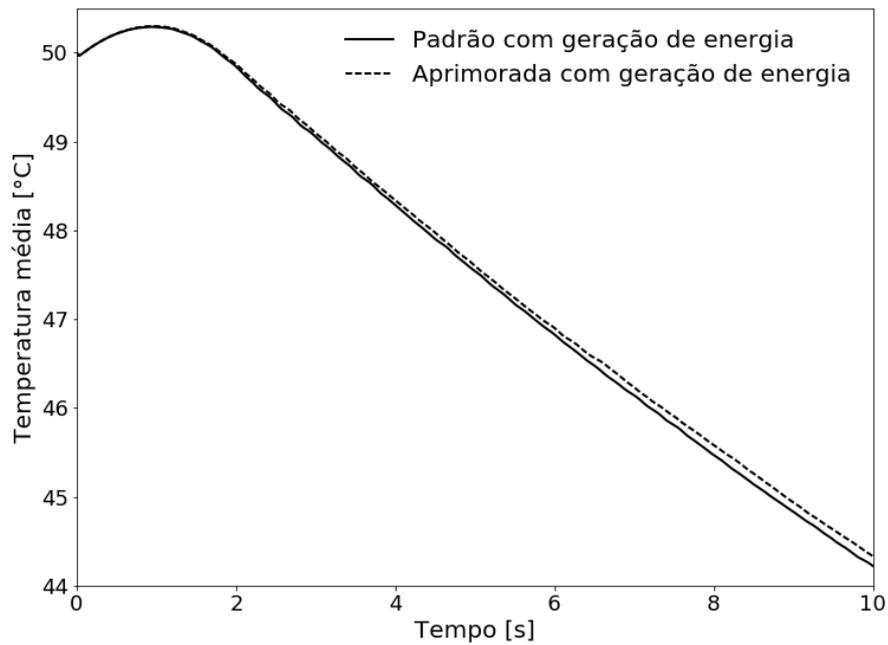


Figura 6.30: Comparação entre a temperatura média no leito com geração de energia usando as formulações padrão (caso 5) e aprimorada (caso 6).

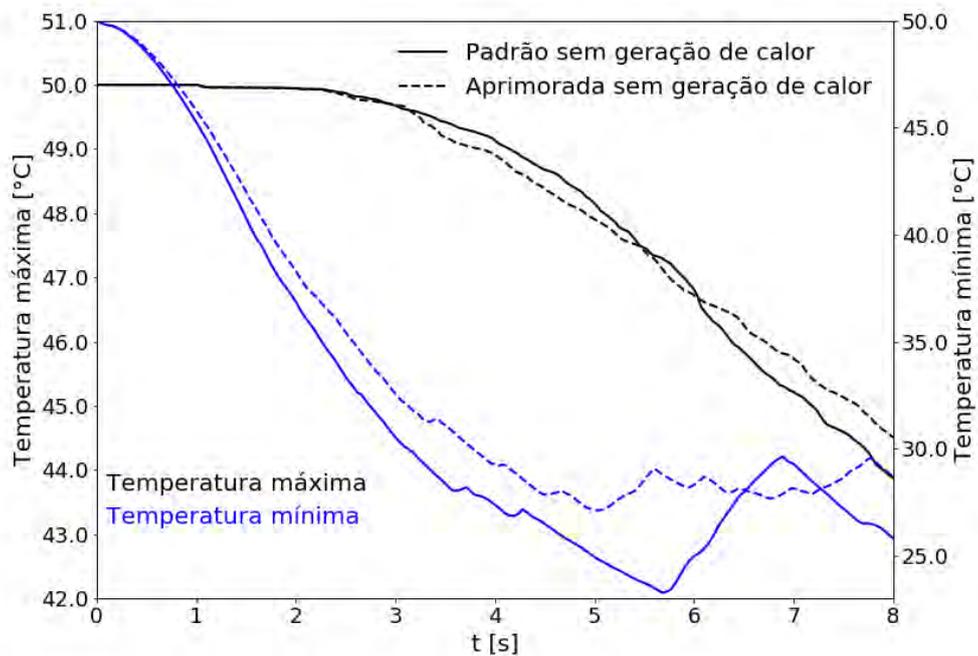


Figura 6.31: Comparação entre as temperaturas mínima e máxima no leito sem geração de energia usando as formulações padrão (caso 1) e aprimorada (caso 4).

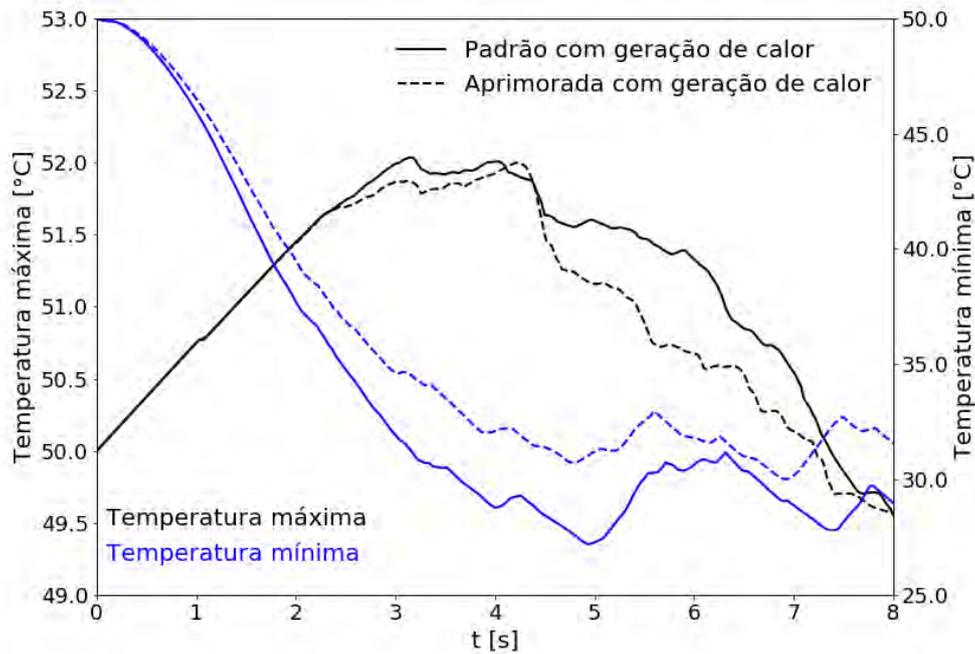


Figura 6.32: Comparação entre as temperaturas mínima e máxima no leito com geração de energia usando as formulações padrão (caso 5) e aprimorada (caso 6).

A Figura 6.33 apresenta a distribuição de temperatura das partículas para dois instantes de tempo para os casos 1 e 4 (casos sem termo fonte, usando a formulação padrão e a formulação aprimorada, respectivamente). A Figura 6.32 a apresenta a distribuição de temperatura das partículas para dois instantes de tempo para os casos 5 e 6 (casos com termo fonte, usando a formulação padrão e a formulação aprimorada, respectivamente). Como era de se esperar, a distribuição vai se estreitando conforme se avança no tempo para o caso sem termo fonte, para ambas as formulações. No tempo tendendo ao infinito, todas as partículas estarão com a mesma temperatura do fluido.

As observações realizadas anteriormente para as temperaturas mínimas e máximas podem ser visualizadas novamente nestes gráficos. Aos 5s, temperaturas máximas maiores são encontradas na formulação padrão do que na formulação aprimorada, em concordância com a hipótese levantada anteriormente. Maiores temperaturas máximas e mínimas são encontradas para o último instante de simulação usando a formulação aprimorada do que usando a formulação padrão.

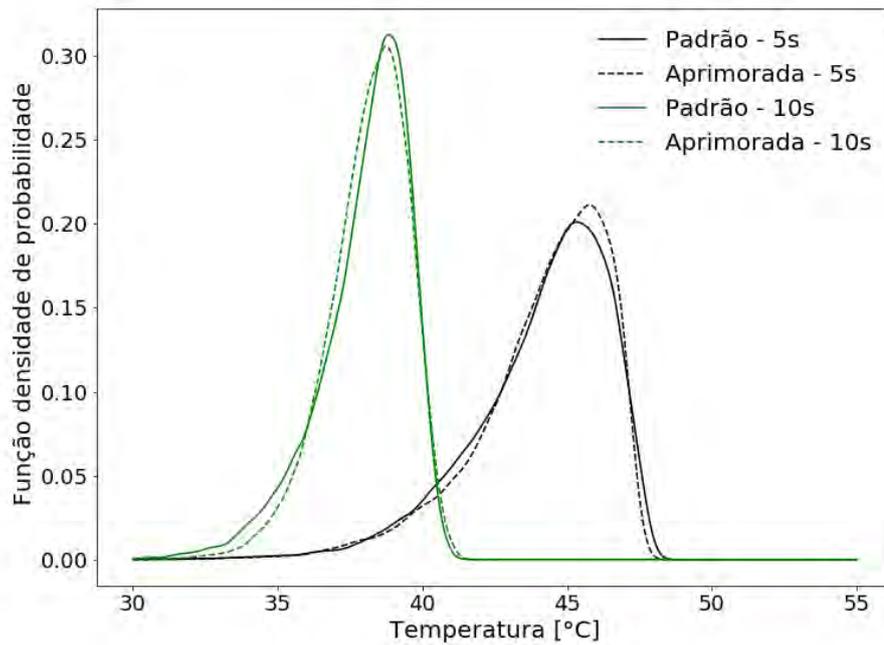


Figura 6.33: Densidade de probabilidade de temperatura usando as formulações padrão (caso 1) e aprimorada (caso 4) no leito sem geração de energia.

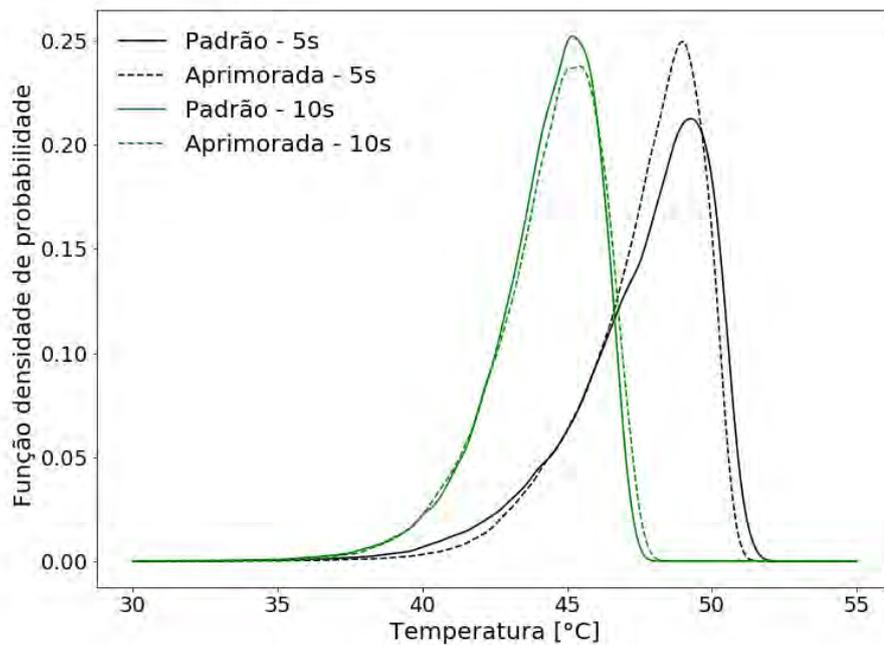


Figura 6.34: Densidade de probabilidade de temperatura usando as formulações padrão (caso 5) e aprimorada (caso 6) no leito com geração de energia.

### 6.4.8 Análise da temperatura do gás

A Figura 6.35 mostra a temperatura média do fluido na saída para os casos 1, 4, 5 e 6. Como esperado, a temperatura do fluido para os casos com termo fonte é maior do que a temperatura nos casos sem termo fonte já que a temperatura das partículas é maior e portanto maior a quantidade de calor trocado entre fluido e partículas.

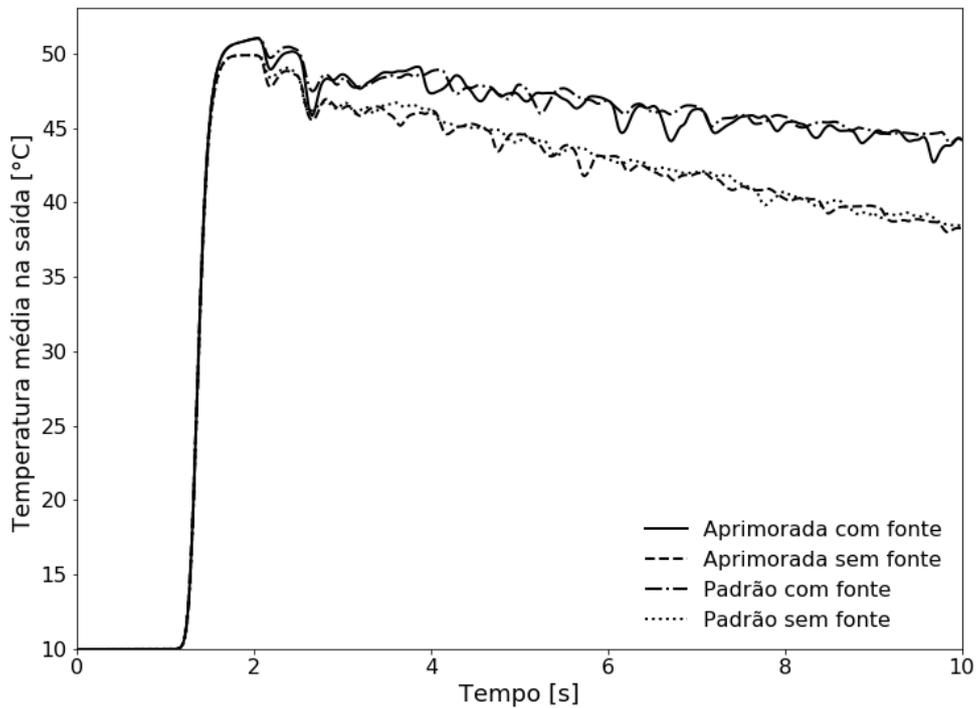


Figura 6.35: Temperatura média do fluido na saída para os casos 1, 4, 5 e 6.

A Figura 6.36 apresenta a temperatura média do fluido na saída assim como um ajuste linear das temperaturas para os casos 1 e 4 (casos sem termo fonte) após a chegada à velocidade final do gás (2s). A Figura 6.37 apresenta a temperatura média do fluido na saída assim como um ajuste linear para os casos 5 e 6 (casos com termo fonte) após a chegada à velocidade final do gás (2s). Como a formulação aprimorada permite que as temperaturas na superfície das partículas sejam inferiores às temperaturas superficiais no caso com a formulação padrão, a troca de calor com a formulação aprimorada é inferior, fazendo com que a temperatura do gás seja inferior na simulação com a formulação aprimorada, conforme pode ser verificado nas curvas de ajuste linear na Figura 6.36, para o caso sem termo fonte, e na Figura 6.37, para os casos com termo fonte.

As grandes flutuações observadas nos gráficos 6.36 e 6.37 representam a passagem

da gás proveniente das bolhas, que trocou menos calor com as partículas.

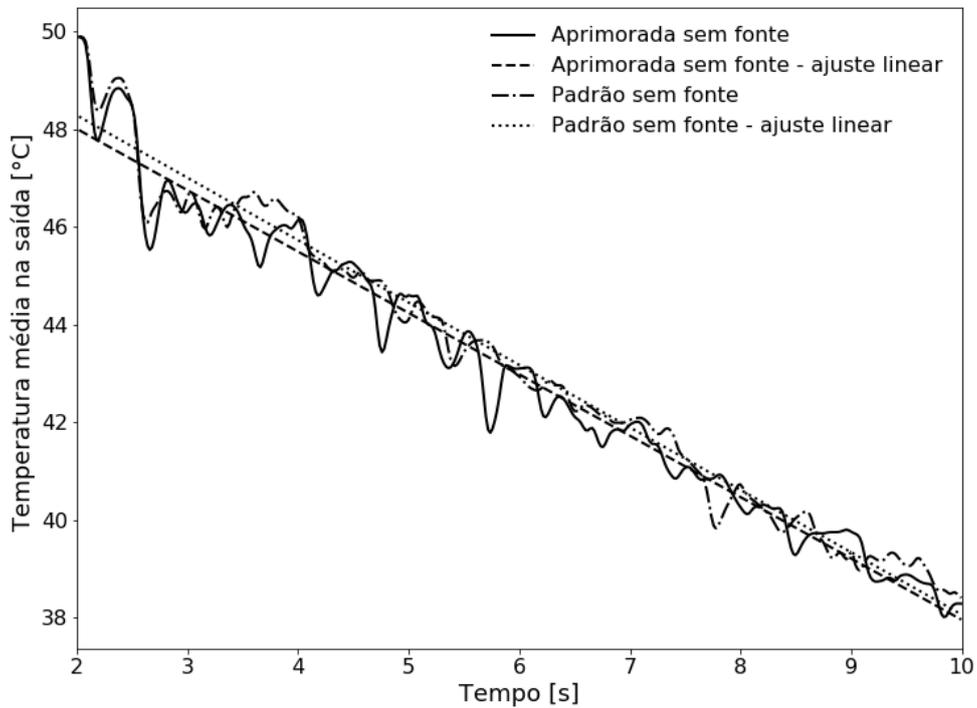


Figura 6.36: Temperatura média do fluido na saída assim como um ajuste linear das temperaturas para os casos 1 e 4.

Comparando os resultados obtidos para as temperaturas das partículas e do fluido nos casos com e sem termo fonte usando a formulação aprimorada e a formulação padrão, observa-se que a resistência interna da partícula altera os resultados de transferência de calor entre partículas e fluido. Caso as simulações fossem rodadas por tempos mais longos, estas diferenças entre as temperaturas médias calculadas usando os modelos de parâmetros concentrados padrão e a formulação aprimorada proposta seriam ressaltadas.

Um caso com número de Biot mais elevado (reduzindo-se a condutividade das partículas) evidenciaria ainda mais a diferença entre a formulação de parâmetros concentrados padrão e a formulação de parâmetros concentrados aprimorada proposta no presente trabalho.

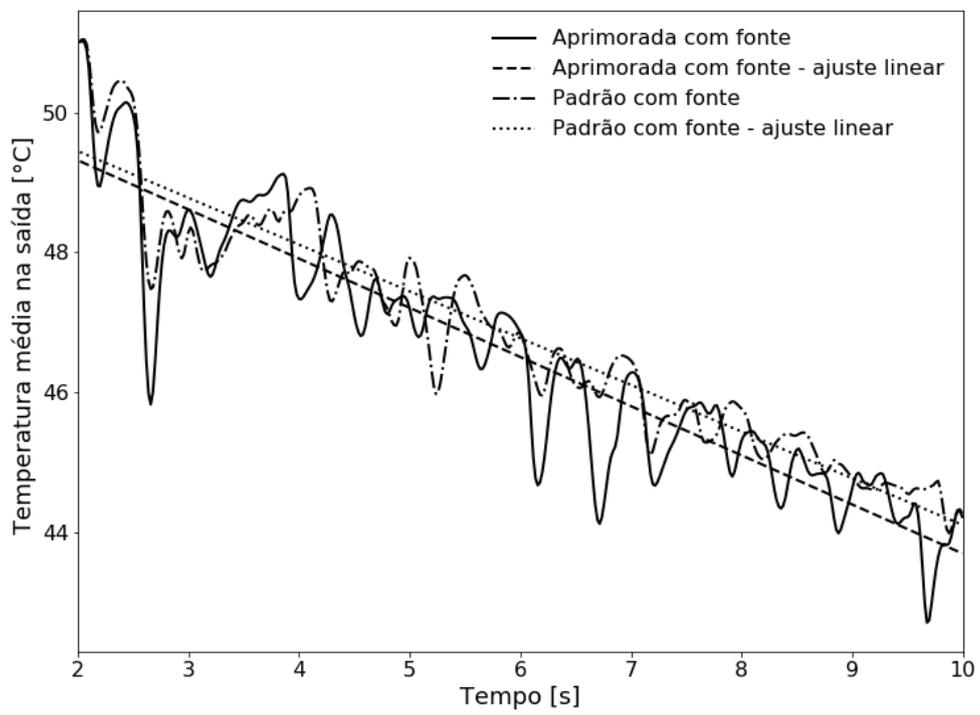


Figura 6.37: Temperatura média do fluido na saída assim como um ajuste linear das temperaturas para os casos 5 e 6.

# Capítulo 7

## Conclusões e Sugestões

### 7.1 Conclusões

O acoplamento CFD-DEM com a formulação aprimorada para a condução de calor na partícula esférica foi apresentado em detalhes. Esta formulação é baseada em aproximações do tipo Hermite para as integrais que definem a temperatura média da partícula e permite que a temperatura na superfície seja diferente da temperatura média da partícula.

Os testes simples mostraram que o acoplamento DEM-CFD proposto está corretamente implementado. Os processos de troca de quantidade de movimento e de transferência de calor entre a fase fluida e a fase particulada foram validados através da comparação com resultados analíticos ou empíricos.

Os testes envolvendo a transferência de calor entre a fase fluida e as partículas mostraram que a simplificação de temperatura uniforme na partícula (adotada na formulação de parâmetros concentrados clássica) leva a erros consideráveis no cálculo da temperatura da partícula e na quantidade de calor trocada com o fluido conforme o número de Biot aumenta. Mesmo para números de Biot ligeiramente maior que 0,1 a diferença é perceptível.

A concordância entre os resultados analíticos e os obtidos usando a formulação aprimorada são notáveis, indicando que esta abordagem é promissora para modelagem de sistemas em que a condutividade da partícula é baixa ou partículas não tão pequenas são adotadas.

O acoplamento CFD-DEM foi então utilizado para modelar um leito fluidizado borbulhante com partículas do tipo Geldart D. Três diferentes velocidades do gás foram estudadas e casos com e sem geração de energia interna nas partículas foram avaliados. Os comportamentos das partículas e das bolhas foram avaliados qualitativamente e estão em linha com os resultados reportados na literatura para este tipo de leito fluidizado.

A mistura rápida das partículas, característica deste tipo de leito, foi evidenciada ao se acompanhar a posição das partículas deste o momento inicial. A relação entre a altura do leito e a vazão de gás refletiu o comportamento reportado na literatura. A metodologia empregada para o acompanhamento das bolhas mostrou que o acoplamento proposto foi capaz de reproduzir o comportamento característico destas neste tipo de leito fluidizado.

Os resultados numéricos de perda de carga e velocidade foram comparados com dados experimentais, mostrando boa concordância. A análise da velocidade das partículas mostrou a capacidade do modelo proposto de refletir o padrão de circulação dupla reportado na literatura para este tipo de leito. Os perfis de velocidade vertical são qualitativamente concordantes com os perfis obtidos experimentalmente.

Os resultados confirmam a abordagem CFD-DEM proposta como uma alternativa adequada para a modelagem da fluidodinâmica de reatores nucleares de leito fluidizado, capaz de fornecer informações detalhadas sobre o comportamento do reator durante a operação, partidas e em casos de acidentes.

Os resultados para as temperaturas das partículas e do fluido nos casos com e sem termo fonte usando a formulação aprimorada mostraram que a resistência interna da partícula pode alterar significativamente os resultados de transferência de calor entre partículas e fluido (assim como na transferência por condução no contato). Tempos mais longos de simulação ou a escolha de um caso com número de Biot mais elevado ressaltariam as diferenças entre as temperaturas médias calculadas usando os modelos de parâmetros concentrados padrão e a formulação aprimorada proposta.

A formulação de parâmetros concentrados aprimorada proposta neste trabalho é bastante adequada para o uso em acoplamentos CFD-DEM, visto que adiciona somente uma variável ao estado das partículas e utiliza uma relação simples para relacionar as propriedades do material com as variáveis resolvidas. Dessa forma, esta formulação pode ser eficientemente incorporada ao fluxo de trabalho de um solver de DEM típico, levando a resultados físicos mais consistentes.

## 7.2 Sugestões para trabalhos futuros

Baseado nos resultados obtidos neste trabalho, sugestões para trabalhos futuros são discutidas a seguir:

1. Comparação dos diâmetros médios das bolhas com correlações empíricas

A comparação dos diâmetros médios das bolhas para diferentes vazões e a concordância com correlações empíricas de previsão do diâmetro destas bolhas

não foram estudadas e ficam como sugestões de pós-processamento para as próximas etapas.

## 2. Implementação de novas leis de arrasto

A super estimativa da magnitude da velocidade pode estar relacionada à super estimativa da força de arraste entre partículas e fluido obtida com a lei de arraste de Huilin & Gidaspow. Sendo assim, as leis de arrasto como Di Felice (DI FELICE, 1994) e Koch & Hill (KOCH e HILL, 2001), ambas também vastamente adotadas em simulações numéricas de leitos fluidizados, podem ser implementadas.

## 3. Inclusão do distribuidor de gás

Outra possibilidade para as discrepâncias nos perfis de velocidade vertical e horizontal pode ser explicada pelo uso de uma malha grosseira na região de entrada e próxima às paredes. Sendo assim fica como sugestão para próximos trabalhos simular este leito incluindo o distribuidor de gás na entrada, usando uma malha mais refinada.

## 4. Avaliação da influência do raio de promediamento

Na etapa atual não se avaliou a influência do parâmetro raio de redistribuição dos termos fontes e da fração volumétrica,  $r_{\Delta}$ , no comportamento do leito e perda de carga, sendo uma etapa pendente do estudo.

Além disso, um novo processo de redistribuição da fração volumétrica e dos termos fontes de momentum e calor que leve em conta a distância das células em relação à célula central está sendo implementado e deve ser aplicado à simulação deste leito fluidizado.

## 5. Avaliação do refino da malha

Apesar da malha adotada neste trabalho estar consistente com a modelagem utilizada no acoplamento, não se realizou um estudo da influência do refino de malha nos resultados. Dessa forma, próximos trabalhos devem avaliar deste mesmo leito para diferentes valores de  $\Delta x$ , respeitando o critério de  $\Delta x > \left(\frac{10\pi}{6}\right)^{\frac{1}{3}} d_p$ .

## 6. Análise da flutuação de pressão

Seria interessante analisar a flutuação de pressão no domínio frequência (análise de Fourier) ou no domínio tempo x frequência (análise de ondaletas) para comparação com dados experimentais.

## 7. Implementação da uma fonte de calor variável nas partículas

A fim de estudar a homogeneidade da distribuição do calor em um reator nuclear, e o impacto da vazão de gás na taxa de transferência de calor, uma fonte de calor dependente da fração de vazão local deve ser implementada a fim de representar a relação entre a reatividade do reator e a expansão do leito observada experimentalmente.

8. Obtenção de dados experimentais para a troca de calor

Dados experimentais referentes à troca de energia entre partículas e fluido devem ser obtidos a fim de se comparar com resultados numéricos de temperatura do fluido e das partículas.

9. Melhoria da formulação aprimorada através de variações incrementais na temperatura de superfície

Durante a elaboração do trabalho, testes realizados apresentaram dificuldades numéricas. Se identificou que esta instabilidade está ligado ao fato de que a variação da temperatura de superfície é abrupta (e instantânea). Melhorias na formulação proposta, alterando a temperatura na superfície de forma incremental (baseada nas taxas de transferência de calor e propriedades do material das partículas) serão estudadas pelo grupo.

# Referências Bibliográficas

- AGUNG, A., 2007, *Conceptual design of a fluidized bed nuclear reactor, statics, dynamics and safety-related aspects*. Tese de Doutorado, Delft University of Technology, Delft.
- AGUNG, A., LATHOUWERS, D., VAN DER HAGEN, T. H. J. J., et al., 2009, “On an improved design of a fluidized bed nuclear reactor - II: linear stability and transient analysis”, *Nuclear Technology*, v. 165, pp. 133–144.
- AGUNG, A., LATHOUWERS, D., VAN DER HAGEN, T. H. J. J., et al., 2006, “On an improved design of a fluidized bed nuclear reactor - I: design modifications and steady-state features”, *Nuclear Technology*, v. 153, pp. 117–131.
- ALOBALID, F., EPPLE, B., 2012, “Improvement, validation and application of CFD/DEM model to dense gas–solid flow in a fluidized bed”, *Particuo-logy*, v. 11, pp. 514—526.
- AMRITKAR, A. R., 2013, *Parallel implementation and application of particle scale heat transfer in the Discrete Element Method*. Tese de Doutorado, Virginia Polytechnic Institute and State University, Blacksburg, Virginia.
- 2013a, *CFX Solver Theory Guide*. ANSYS, Inc., Canonsburg, PA, a.
- 2013b, *Fluent Theory Guide*. ANSYS, Inc., Canonsburg, PA, b.
- BATCHELOR, G. K., O’BRIEN, R. W., 1977, “Thermal or electrical conduction through a granular material”, *Proceedings of the Royal Society of London*, v. 355, pp. 313–333.
- BERGMAN, T., INCROPERA, F., DEWITT, D., et al., 2011, *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. Wiley.
- BOKKERS, G., VAN SINT ANNALAND, M., KUIPERS, J., 2004, “Mixing and segregation in a bidisperse gas–solid fluidised bed: a numerical and experimental study”, *Powder Technology*, v. 140, pp. 176–186.

- BORGES, V., VILHENA, M., 1995, “Dynamic Stability of a Fluidized-Bed Nuclear Reactor”, *Nuclear Technology*, v. 111, pp. 251–259.
- BUSCIGLIO, A., VELLA, G., MICALE, G., et al., 2009, “Analysis of the bubbling behaviour of 2D gas solid fluidized beds. Part II. Comparison between experiments and numerical simulations via digital image analysis technique”, *Chemical Engineering Journal*, v. 148, pp. 145–163.
- CHAUDHURI, B., MUZZIO, F. J., TOMASSONE, M. S., 2006, “Modeling of heat transfer in granular flowing rotating vessels”, *Chemical Engineering Science*, v. 61, pp. 6348–6360.
- CHIESA, M., MATHIESEN, V., MELHEIM, J. A., et al., 2005, “Numerical simulation of particulate flow by the Eulerian–Lagrangian and the Eulerian–Eulerian approach with application to a fluidized bed”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 29, pp. 291–304.
- CORREA, E. J., COTTA, R., 1998, “Enhanced lumped-differential formulations of diffusion problems”, *Applied Mathematical Modelling*, v. 22, pp. 137–152.
- COTTA, R., MIKHAILOV, M., 1997, *Heat Conduction: Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation*. Wiley.
- COTTA, R., OZISIK, M., MENNIG, J., 1990, “Coupled integral-equation approach for solving phase-change problems in a finite slab”, *Journal of the Franklin Institute*, v. 327, pp. 225–234.
- CROWE, C. T., SCHWARZKOPF, J. D., SOMMERFELD, M., et al., 2011, *Multiphase Flows with Droplets and Particles, Second Edition*. CRC Press. ISBN: 9781439840511.
- DAVIDSON, J., CLIFT, R., HARRISON, D., 1985, *Fluidization*. Academic Press.
- DEEN, N., VAN SINT ANNALAND, M., VAN DER HOEF, M. A., et al., 2007, “Review of discrete particle modeling of fluidized beds”, *Chemical Engineering Science*, v. 62, pp. 28–44.
- DI FELICE, R., 1994, “The Voidage Function for Fluid-Particle Interaction Systems”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 20, pp. 153–159.
- DREW, D., 1993, “Mathematical modeling of two-phase flow”, *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 15, pp. 261–291.
- E, M., 2006, *Particles, Bubbles And Drops: Their Motion, Heat And Mass Transfer*. World Scientific Publishing Company.

- ERGUN, S., 1952, “Fluid flow through packed columns”, *Chem. Eng. Prog.*, v. 48.
- FAN, L. S., ZHU, C., 1998, *Principles of Gas Solids Flows*. Cambridge, UK, Cambridge University Press. ISBN 978-0521021166.
- GELDART, D., 1972, “The Effect of Particle Size and Size Distribution on The Behaviour of Gas Fluidized Beds”, *Powder Technology*, v. 6, pp. 201–215.
- GERA, D., GAUTAM, M., TSUJI, Y., et al., 1998, “Computer simulation of bubbles in large-particle fluidized beds”, *Powder Technology*, v. 98, pp. 38–47.
- GIDASPOW, D., 1994, *Multiphase Flow and Fluidization*. San Diego, Academic Press.
- GIDASPOW, D., 2012, *Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions*. Elsevier Science. ISBN: 9780080512266.
- GOLDSCHMIDT, M., BEETSTRA, R., KUIPERS, J., 2002, “Hydrodynamic modelling of dense gas-fluidised beds: comparison of the kinetic theory of granular flow with 3D hard-sphere discrete particle simulations”, *Chemical Engineering Science*, v. 57, pp. 2059–2075.
- GOLDSCHMIDT, M., BEETSTRA, R., KUIPERS, J., 2004, “Hydrodynamic modelling of dense gas-fluidised beds: comparison and validation of 3D discrete particle and continuum models”, *Powder Technology*, v. 142, pp. 23–47.
- GUNN, D., 1978, “Transfer of heat or mass to particles in fixed and fluidised beds”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, v. 21, pp. 467–476.
- GUNN, D., DE SOUZA, J. F. C., 1974, “Heat transfer and axial dispersion in packed beds”, *Chemical Engineering Science*, v. 29, pp. 1363–1371.
- GUO, L., MORITA, K., TOBITA, Y., 2014, “Numerical simulation of gas–solid fluidized beds by coupling a fluid-dynamics model with the discrete element method”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 72, pp. 31–38.
- HAHN, D., ÖZISIK, M., 2012, *Heat Conduction*. Hoboken, NJ, USA, Wiley.
- HARMS, A. A., KINGDON, D. R., 1994, “A Gravity-Removable Suspended Fuel Core for Passive Coolability of a Reactor”, *ANS Transactions*, v. 74, pp. 329.
- HILTON, J. E., MASON, P. W., CLEARY, P. W., 2010, “Dynamics of gas-solid fluidised beds with non-spherical particle geometry”, *Chemical Engineering Science*, v. 65, pp. 1584–1596.

- HOOMANS, B., KUIPERS, J., BRIELS, W., et al., 1996, “Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas fluidised bed: a hard-sphere approach”, *Chemical Engineering Science*, v. 51, pp. 99–118.
- HOOMANS, B., KUIPERS, J., VAN SWAAIJ, W., 2000, “Granular dynamics simulation of segregation phenomena in bubbling gas-fluidised beds”, *Powder Technology*, v. 109, pp. 41–48.
- HOOMANS, B., KUIPERS, J., MOHD SALLEH, M., et al., 2001, “Experimental validation of granular dynamics simulations of gas-fluidised beds with homogenous in-flow conditions using positron emission particle tracking”, *Powder Technology*, v. 116, pp. 166–177.
- HOU, Q. F., ZHOU, Z. Y., YU, A. B., 2012, “Computational study of heat transfer in a bubbling fluidized bed with a horizontal tube”, *AIChE Journal*, v. 58, pp. 1422–1434.
- HUTCHINSON, B., RAITHBY, G., 1986, “A Multigrid Method Based on the Additive Correction Strategy”, *Numer. Heat Transfer*, v. 9, pp. 511–537.
- JAJCEVIC, D., SIEGMANN, E., RADEKE, C., et al., 2013, “Large-scale CFD–DEM simulations of fluidized granular systems”, *Chemical Engineering Science*, v. 98, pp. 298–310.
- KINGDON, D. R., 1998, *Safety Characteristics of a Suspended Pellet Fission Reactor System*. Tese de Doutorado, McMaster University, Hamilton, Ontario.
- KINGDON, D. R., HARMS, A. A., 1996, “Pellet power ratio in a pellet-suspension fission core”, *Nuclear Technology*, v. 116.
- KLOOSTERMAN, J. L., GOLOVKO, V. V., VAN DAM, H., et al., 2001, “Conceptual Design of a Fluidized Bed Nuclear Reactor”, *Nuclear Science and Engineering*, v. 139, pp. 118–137.
- KOCH, D., HILL, R., 2001, “Inertial effects in suspension and porous-media flows”, *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 33, pp. 619–647.
- KUNII, D., LEVENSPIEL, O., 1991, *Fluidization Engineering*. Butterworth-Heinemann. ISBN 0-409-90233-0.
- LATHOUWERS, D., AGUNG, A., , et al., 2003, “Dynamics modeling and stability analysis of a fluidized bed nuclear reactor”, *Progress in Nuclear Energy*, v. 43, pp. 437–443.

- LITTMAN, H., SILVA, D. E., 1970, “Gas-Particle Heat Transfer Coefficient in Packed Beds at Low Reynolds number”. In: *Proceeding of 4th International Heat Transfer Conference*, Versailles, France.
- LIU, D., BU, C., CHEN, X., 2013, “Development and test of CFD–DEM model for complex geometry: A coupling algorithm for Fluent and DEM”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 58, pp. 260–268.
- LU, Y., HUANG, J., ZHENG, P., 2015, “A CFD–DEM study of bubble dynamics in fluidized bed using flood fill method”, *Chemical Engineering Journal*, v. 274, pp. 123–131.
- LUO, K., WU, F., YANG, S., et al., 2015, “CFD–DEM study of mixing and dispersion behaviors of solid phase in a bubbling fluidized bed”, *Powder Technology*, v. 274, pp. 482–493.
- MENNIG, J., AUERBACH, T., HÄLG, W., 1983, “Two point Hermite approximations for the solution of linear initial value and boundary value problems”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 39, pp. 199–224.
- MILES, B., PAIN, C., GOMES, J., et al., 2010, “Simulation of a gas-cooled fluidized bed nuclear reactor. Part I: Mixed oxide fuels”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 37, pp. 999–1013.
- MIRINAVICIUS, A., MARKAUSKAS, D., KACIANAUSKAS, R., 2010, “Computational Performance of Contact Search during DEM Simulation of Hopper Filling”. In: *10th International Conference “Modern Building Materials, Structures and Techniques”*, pp. 974–979, Vilnius, Lithuania.
- MIYAUCHI, T., KIKUCHI, T., HSU, K.-H., 1976, “Limiting Sherwood number of sphere packed beds by electrical method”, *Chemical Engineering Science*, v. 31, pp. 493 – 498.
- MIZUNO, T., ITO, T., , et al., 1990, “The Inherently-Safe Fluidized Bed Boiling Water Reactor Concept”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 17, pp. 487–492.
- MOLERUS, O., 1997, “Heat transfer in moving beds with a stagnant interstitial gas”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 40, pp. 4151–4159.
- NETL SMALL SCALE PROBLEM I, 2018. “NETL Challenge Problem: Small Scale Problem I”. Disponível em: <<https://mfix.netl.doe>>.

gov/experimentation/challenge-problems/>. [Online; acessado por último em 05/04/2018].

- OSCHMANN, T., HOLD, J., KRUGGEL-EMDEN, H., 2014, “Numerical investigation of mixing and orientation of non-spherical particles in a model type fluidized bed”, *Powder Technol.*, v. 258, pp. 304–323.
- OSCHMANN, T., VOLLMARI, K., KRUGGEL-EMDEN, H., et al., 2015, “Numerical Investigation of the Mixing of Non-spherical Particles in Fluidized Beds and during Pneumatic Conveying”, *Procedia Eng.*, v. 102, pp. 976–985.
- OUYANG, J., LI, J., 2001, “Simulation of dynamic behavior in bubbling fluidization”, *Progress in Natural Science*, v. 11, pp. 772–778.
- PAIN, C., 2003, “An investigation of power stabilisation and space-dependent dynamics of a nuclear fluidized-bed reactor”, *Nuclear Science and Engineering*, v. 144, pp. 242–257.
- PAIN, C., 2005, “A model of heat transfer dynamics of coupled multiphase-flow and neutron-radiation: application to a nuclear fluidized bed reactor”, *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, v. 15, pp. 765–807.
- PAIN, C., GOMES, J. L. M. A., EATON, M. D., et al., 2002, “Space-dependent kinetics simulation of a gas-cooled fluidized bed nuclear reactor”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 219, pp. 225–245.
- PATANKAR, S., 1980, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Series in computational methods in mechanics and thermal sciences. Taylor & Francis. ISBN: 9780891165224.
- PATIL, A. V., PETERS, E., KOLKMAN, T., et al., 2014, “Modeling bubble heat transfer in gas–solid fluidized beds using DEM”, *Chemical Engineering Science*, v. 105, pp. 121–131.
- PEPIOT, P., DESJARDINS, O., 2012, “Numerical analysis of the dynamics of two- and three-dimensional fluidized bed reactors using an Euler–Lagrange approach”, *Powder Technology*, v. 220, pp. 104–121.
- PRITCHARD, P. J., 2010, *Fox and McDonald’s Introduction to Fluid Mechanics, 8th Edition*. John Wiley & Sons. ISBN: 9781118139455.

- REGIS, C., COTTA, R., SU, J., 2000a, “Improved lumped analysis of transient heat conduction in a nuclear fuel rod”, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, v. 27, pp. 357–366.
- REGIS, C., COTTA, R., SU, J., 2000b, “Improved lumped analysis of transient heat conduction in a nuclear fuel rod”, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, v. 27, pp. 357–366.
- REN, B., ZHONG, W., CHEN, Y., et al., 2012, “CFD-DEM simulation of spouting of corn-shaped particles”, *Particuology*, v. 10, pp. 562–572.
- REN, B., ZHONG, W., JIN, B., et al., 2014, “Numerical simulation of spouting of cylindroid particles in a spouted bed”, *Can. J. Chem. Eng.*, v. 92, pp. 928–934.
- ROTS, P., MUDDE, R., VAN DER AKKER, H., et al., 1996, “Fluidized bed nuclear fission reactor”, *Chemical Engineering Science*, v. 51, pp. 2763–2768.
- ROWE, PN, K. C., LEWIS, J., 1965, “Heat and mass transfer from a single sphere in an extensive flowing fluid”, *Trans. Inst. Chem. Engrs.*, v. 43, pp. 14–31.
- SAHIN, S., SEFIDVASH, F., 2008, “The fixed bed nuclear reactor concept”, *Energy Conversion and Management*, v. 49, pp. 1902–1909.
- SALEHI, M.-S., ASKARISHAHI, M., RADL, S., 2017, “Analytical solution for thermal transport in packed beds with volumetric heat source”, *Chemical Engineering Journal*, v. 316, pp. 131–136.
- SCHUMANN, T., 1929, “Heat transfer: a liquid flowing through a porous prism.” *Journal of the Franklin Institute*, v. 208, pp. 405–416.
- SCOFANO-NETO, F., COTTA, R., 1993, “Improved hybrid lumped-differential formation for double-pipe heat exchanger analysis”, *J. Heat Transf.*, v. 115, pp. 921–927.
- SEFIDVASH, F., 1980, “A Nuclear Reactor Concept for Brazil”, *Rev. Bras. Tecnol.*, v. 11, pp. 145.
- SEFIDVASH, F., 1985, “A fluidized bed nuclear reactor concept”, *Nuclear Technology*, v. 71, pp. 527–534.
- SEFIDVASH, F., 1996, “Status of the small modular fluidized bed light water nuclear reactor concept”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 167, pp. 203–214.

- STRECK, E. E., 1988, *Estudo de Transiente de Um Reator Nuclear a Leito Fluidizado*. Tese de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, RS.
- SU, G., ZENG, T., SU, J., 2009, “Improved lumped models for transient heat conduction in a slab with temperature-dependent thermal conductivity”, *Applied Mathematical Modelling*, v. 33, pp. 274–283.
- SU, J., 2001, “Improved lumped models for asymmetric cooling of a long slab by heat convection”, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, v. 28, pp. 973–983.
- SU, J., 2004, “Improved lumped models for transient radiative cooling of a spherical body”, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, v. 31, pp. 85–94.
- SU, J., COTTA, R., 2001, “Improved lumped parameter formulation for simplified LWR thermohydraulic analysis”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 28, pp. 1019–1031.
- TSUJI, Y., KAWAGUCHI, T., TANAKA, T., 1993, “Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed”, *Powder Technology*, v. 77, pp. 79–87.
- TURNER, G. A., OTTEN, L., 1973, “Values of Thermal (and other) Parameters in Packed Beds”, *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev.*, v. 12, pp. 417–424.
- VAN DER HOEF, M., YE, M., VAN SINT ANNALAND, M., et al., 2006, “Multi-scale modeling of gas fluidized beds”, *Advances in Chemical Engineering*, v. 31, pp. 65.
- VARGAS, W. L., MCCARTHY, J. J., 2002, “Stress effects on the conductivity of particulate beds”, *Chemical Engineering Science*, v. 57, pp. 3119–3131.
- VASQUEZ, S. A., IVANOV, V., 2000, “A Phase Coupled Method for Solving Multiphase Problems on Unstructured Meshes”. In: *Fluids Engineering Division Summer Meeting*, Boston, Massachusetts, jun. ASME.
- VILHENA, M., 2005, *Estudo da Difusão de Neutrons e Calor Dependente do Tempo Num Reator Nuclear a Leito Fluidizado*. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, RS.
- VOLLMARI, K., OSCHMANN, T., WIRTZ, S., et al., 2015, “Pressure drop investigations in packings of arbitrary shaped particles”, *Powder Technol.*, v. 271, pp. 109–124.

- VOLLMARI, K., JASEVICIUS, R., KRUGGEL-EMDEN, H., 2016, “Experimental and numerical study of fluidization and pressure drop of spherical and non-spherical particles in a model scale fluidized bed”, *Powder Technol.*, v. 291, pp. 506–521.
- WALTON, O., 1993, “Numerical simulation of inelastic, frictional particle-particle interactions”. In: *Particulate Two-Phase Flow*, Butterworth-Heinemann.
- WANG, S., LI, X., LU, H., et al., 2009, “Simulations of flow behavior of fuel particles in a conceptual helium cooled spout fluidized bed nuclear reactor”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 239, pp. 106–115.
- WUA, C., BERROUKB, A., NANDAKUMAR, K., 2009, “Three-dimensional discrete particle model for gas–solid fluidized beds on unstructured mesh”, *Chemical Engineering Journal*, v. 152, pp. 514–529.
- XU, B., YU, A., 1997, “Numerical simulation of the gas-solid flow in a fluidized bed by combining discrete particle method with computational fluid dynamics”, *Chemical Engineering Science*, v. 52, pp. 2785–2809.
- XU, B., YU, A., CHEW, S., et al., 2000, “Numerical simulation of the gas-solid flow in a bed with lateral gas blasting”, *Powder Technology*, v. 109, pp. 13–26.
- YE, M., VAN DER HOEF, M., KUIPERS, J., 2004, “A numerical study of fluidization behavior of Geldart A particles using a discrete particle model”, *Powder Technology*, v. 139, pp. 129–139.
- YE, M., VAN DER HOEF, M., KUIPERS, J., 2005a, “From discrete particle model to a continuous model of Geldart A particles”, *Chemical Engineering Research and Design*, v. 83, pp. 833–843.
- YE, M., VAN DER HOEF, M., KUIPERS, J., 2005b, “The effects of particle and gas properties on the fluidization of Geldart A particles”, *Chemical Engineering Science*, v. 60, pp. 4567–4580.
- YUU, S., UMEKAGE, T., JOHNO, Y., 2000, “Numerical simulation of air and particle motions in bubbling fluidized bed of small particles”, *Powder Technology*, v. 110, pp. 158–168.
- ZABRODSKY, S. S., 1966, *Hydrodynamics and Heat Transfer in Fluidized Beds*. Cambridge, MA, MIT Press.
- ZHONG, W., ZHANG, Y., JIN, B., et al., 2009, “Discrete element method simulation of cylinder-shaped particle flow in a gas-solid fluidized bed”, *Chemical Engineering Technology*, v. 32, pp. 386–391.

- ZHONG, W., YU, A., LIU, X., et al., 2016, “DEM/CFD-DEM Modelling of Non-spherical Particulate Systems: Theoretical Developments and Applications”, *Powder Technology*, v. 302, pp. 108–152.
- ZHOU, Z., YU, A., ZULLI, P., 2010, “A new computational method for studying heat transfer in fluid bed reactors”, *Powder Technology*, v. 197, pp. 102–110.
- ZHOU, Z. Y., PINSON, D., ZOU, R. P., et al., 2011, “Discrete particle simulation of gas fluidization of ellipsoidal particles”, *Chemical Engineering Science*, v. 66, pp. 6128–6145.
- ZHOU, Z., YU, A., ZULLI, P., 2006, “Particle scale study of heat transfer in gas fluidization”. In: *13rd International Heat Transfer Conference*, Sydney, Australia.
- ZHOU, Z., YU, A., ZULLI, P., 2007, “Particle scale study of heat transfer in gas fluidization”. In: *Fourth International Conference of Discrete Element Method*, Brisbane, Australia.
- ZHU, H. P., ZHOU, Z. Y., YANG, R. Y., et al., 2007, “Discrete particle simulation of particulate systems: Theoretical developments”, *Chemical Engineering Science*, v. 62, pp. 3378–3396.