



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
Faculdade de Engenharia Química

RAFAEL SCATENA

**ANÁLISE DO CAOS EM FLUTUAÇÕES DE PRESSÃO ORIUNDAS DE
MODELAGEM CFD NA CONDIÇÃO DE MÍNIMA FLUIDIZAÇÃO EM LEITO
FLUIDIZADO**

**CHAOS ANALYSIS OF PRESSURE FLUCTUATIONS FROM CFD MODELLING
AT THE MINIMUM FLUIDIZATION CONDITION IN A FLUIDIZED BED**

CAMPINAS
2018

RAFAEL SCATENA

**ANÁLISE DO CAOS EM FLUTUAÇÕES DE PRESSÃO ORIUNDAS DE
SIMULAÇÃO CFD NA CONDIÇÃO DE MÍNIMA FLUIDIZAÇÃO EM LEITO
FLUIDIZADO**

*Dissertação apresentada à Faculdade de
Engenharia Química da Universidade
Estadual de Campinas como parte dos
requisitos exigidos para a obtenção do título
de Mestre em Engenharia Química.*

Dissertation presented to the School of
Chemical Engineering of the University of
Campinas in partial fulfillment of the
requirements for the degree of Master in
Chemical Engineering.

Orientador: Marco Aurélio Cremasco

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO
FINAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELO
ALUNO RAFAEL SCATENA E ORIENTADA PELO
PROF. DR. MARCO AURÉLIO CREMASCO

Prof. Dr. Marco Aurélio Cremasco

CAMPINAS
2018

Agência(s) de fomento e nº(s) de processo(s): CNPq, 152134/2015-8

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura
Luciana Pietrosanto Milla - CRB 8/8129

Scatena, Rafael, 1991-
Sca82a Análise do caos em flutuações de pressão oriundas de simulação CFD na condição de mínima fluidização em leito fluidizado / Rafael Scatena. – Campinas, SP : [s.n.], 2018.

Orientador: Marco Aurélio Cremasco.
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Leito fluidizado. 2. Caos determinístico. 3. Invariantes. 4. Fluidodinâmica computacional (CFD). 5. escoamento multifásico. I. Cremasco, Marco Aurélio, 1962-. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Chaos analysis of pressure fluctuations from CFD simulation at the minimum fluidization condition in a fluidized bed

Palavras-chave em inglês:

Fluid bed

Deterministic chaos

Invariants

Computational fluid dynamics (CFD)

Multiphase flow

Área de concentração: Engenharia Química

Titulação: Mestre em Engenharia Química

Banca examinadora:

Marco Aurélio Cremasco [Orientador]

Dyrney Araújo dos Santos

Guilherme José de Castilho

Data de defesa: 05-02-2018

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

Dissertação de Mestrado defendida por Rafael Scatena e aprovada em 05 de fevereiro de 2018 pela banca examinadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. Marco Aurélio Cremasco (Orientador)

Prof. Dr. Dyrney Araújo dos Santos

Prof. Dr. Guilherme José de Castilho

A Ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros da banca examinadora encontra-se no processo de vida acadêmica do aluno.

Aos meus pais, minha irmã, meus tios e meus avós, cujo apoio e afeto foram decisivos ao triunfo sob todos os obstáculos encontrados permitindo o avanço em direção a realização dos meus sonhos.

AGRADECIMENTOS

Assim como retratado pela celebre frase de Isaac Newton, “ se cheguei até aqui foi porque me apoiei no ombro de gigantes. ”, o êxito nesta Dissertação é fruto do apoio daqueles que vivenciaram, ao meu lado, momentos importantes ao decorrer deste percurso contribuindo de maneira decisiva ao meu crescimento pessoal e profissional.

Agradeço à minha mãe, *Maria*, e meu pai, *Júnior*, por acreditarem no meu potencial garantindo suporte financeiro e, principalmente, emocional durante estes anos. À minha irmã, *Bruna*, e *Jéssica*, pelo importantíssimo apoio incondicional, sempre repleto de muita alegria e afeto servindo de motivação à continuação da minha caminhada com o foco necessário ao meu trabalho.

Aos amigos *Victor*, *Murilo*, *Wesley*, *Lucas Vilas Boas*, *Lucas Dognani* e *Ivander* os quais eu tive o prazer de conhecer ao decorrer dos dias de trabalho no LPMP/FEQ-UNICAMP em que cada qual teve a sua parcela de auxílio na concretização desta Dissertação.

Aos *mestres* que, ao decorrer da longa jornada de aprendizado na escola de engenharia, me guiaram com excelência permitindo a construção de uma sólida base conceitual e garantindo o êxito no aprofundamento dos conhecimentos requeridos.

Ao admirado orientador *Prof. Dr. Marco Aurélio Cremasco*, que através de sua experiência e magnífica sabedoria me guiou por entre os caminhos da pesquisa possibilitando o exímio êxito nesta tarefa.

Ao estimado *Prof. Dr. José Roberto Nunhez* por todo o apoio concedido, bem como a disponibilização da estrutura computacional necessária para a realização das simulações presentes nesta Dissertação.

Agradeço à *Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas* pela oportunidade, a mim concedida, em que os conhecimentos aqui adquiridos serão recordados e aplicados em toda minha vida.

Ao *Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)* pelo apoio financeiro.

“A vida é muito curta para ser pequena”

Benjamin Disraeli

“A persistência é o menor caminho do êxito”

Charles Chaplin

RESUMO

Embora a modelagem matemática traga avanços significativos no entendimento de diversos fenômenos naturais, a solução advinda destes modelos deve ser devidamente validada por meio de dados experimentais confiáveis proporcionando a verificação da fidelidade com que tal modelo representa a realidade do sistema estudado. Uma etapa importante na validação de um modelo matemático é a verificação de sua capacidade em reproduzir o comportamento dinâmico do sistema evoluindo no tempo. Leitos fluidizados apresentam caos em sua dinâmica em que as não linearidades, inerentes às interações fluido-partícula, atribuem um comportamento aperiódico às séries temporais de algumas grandezas físicas obtidas no interior do leito, como é o caso de queda de pressão e da porosidade. Desta forma, o presente trabalho consiste na avaliação da dinâmica gerada por um modelo matemático de um leito fluidizado resolvido via técnicas de CFD por meio da aplicação da Teoria do Caos em séries temporais de queda de pressão em condições de mínima fluidização para partículas A, B e D da classificação de Geldart. A análise caótica foi aplicada nas séries temporais simuladas e naquelas experimentais, coletadas por Prieto (2014), através do pacote computacional *BRChaos*, cujos métodos e características serão elucidadas ao longo do trabalho. Para a modelagem matemática, utilizou-se a abordagem Euler-Euler, através do Modelo Euleriano Granular Multifásico (MEGM), que considera ambas as fases (gás e material particulado) como meios contínuos. Foram utilizados os *softwares* ANSYS-ICEM® e ANSYS-FLUENT®, na versão 17.2, para construção da malha computacional e solução do modelo, respectivamente. Foi possível, então, notar semelhanças qualitativas e quantitativas entre as características dinâmicas reveladas nos experimentos e aquelas reproduzidas pelo modelo indicando a sua capacidade em representar a complexidade da fluidodinâmica do leito fluidizado. Embora a análise visual comparativa entre as bacias de atração experimentais e simuladas seja limitada, observou-se a existência de núcleos centrais formados pelas trajetórias, nos espaços de fases, tanto para as séries temporais experimentais quanto para aquelas simuladas. Obteve-se, também para as séries temporais simuladas, valores próximos daqueles obtidos para as séries temporais experimentais dos invariantes caóticos maior expoente de Lyapunov (LLE), dimensão de correlação (D_2) e entropia de Kolmogorov (K) resultando em desvios mínimos de 0,00 % para o LLE , 0,46 % para D_2 e 7,18% para K_{ML} .

Palavras-chave: Abordagem Euleriana, leito fluidizado, modelagem multifásica, caos determinístico, invariantes caóticos.

ABSTRACT

Although mathematical modelling brings significant advantages to the understanding of several natural phenomena, it is required an appropriate validation of the model results, through a trustworthy set of experimental data, to ensure its reliability. An important step for the validation of a mathematical model is the verification whether the dynamic characteristics of the model are similar to those reflected by the experimental data. Fluidized beds present chaos in their dynamical characteristics where the non-linearity intrinsic to the fluid-particle interaction ensures aperiodicity and sensibility to initial conditions to some physical quantities such as the pressure drop and voidage inside the equipment. Thus, this work aims to evaluate the dynamical behavior generated by a fluidized bed CFD model by means of the application of the spectral analysis and the chaos theory to time series of pressure drop at the minimum fluidization condition using particles type A, B and D of Geldart classification. The analysis previous cited were applied to the simulated and experimental time series obtained by Prieto (2014). The Eulerian-Eulerian approach was used by solving the Eulerian Granular Multiphase Model (EGMM), which considers both the fluid and particulate phases as continuum domains. The mesh was built by the software ANSYS-ICEM[®] and the model was solved by the software ANSYS-FLUENT[®], both on the version 17.2. It was possible to observe qualitative and quantitative resemblance between dynamic characteristics revealed by experimental data and those generated by the model. The attractors obtained by the simulated time series could generate two central nuclei as well as observed into the attractors generated by experimental time series. The results generated by simulated data for the largest Lyapunov exponent (LLE), the correlation dimension (D_2) and the Kolmogorov entropy (K) were close to those obtained by the experimental time series providing minimum relative deviations of 0.00 % for the LLE, 0.46% for the D_2 and 7.18 % for the K_{ML} . The results obtained at this work show how important and useful the chaotic analysis is on the characterization of the dynamical behavior of complex and non-linear systems, which can provide the physical verification of the solution generated by complex mathematical models.

Keywords: Eulerian approach, fluidized beds, multiphase modelling, chaos theory, chaotic invariant.

LISTA DE FIGURAS

<i>Figura 2.1 - Abordagens na modelagem de escoamentos turbulentos (adaptado de Hodapp, 2009).....</i>	<i>41</i>
<i>Figura 2.2 – a) Malha estruturada constituída de células hexaédricas; b) malha não estruturada construída com elementos tetraédricos; c) Malha híbrida (DUARTE, 2006)......</i>	<i>51</i>
<i>Figura 2.3 - Regimes de fluidização gás-partícula (adaptado de Kunii e Levenspiel, 1991)..</i>	<i>52</i>
<i>Figura 2.4 - Classificações de Geldart (adaptado de Geldart, 1973).</i>	<i>53</i>
<i>Figura 2.5 - Série temporal de queda de pressão em um leito fluidizado em regime pistonado e seu respectivo espectro de potências (adaptado de Felipe e Rocha, 2004).</i>	<i>57</i>
<i>Figura 2.6 - Espectro de potências da série temporal de queda de pressão em um leito fluidizado em regime de borbulhamento (adaptado de Felipe e Rocha, 2004).</i>	<i>57</i>
<i>Figura 2.7 - Ilustração dos vórtices formados pela ação do gradiente de temperatura (adaptado de Gleick, 1987).....</i>	<i>60</i>
<i>Figura 2.8 – Bacia de atração de Lorenz.....</i>	<i>62</i>
<i>Figura 2.9 - (a) Exemplo de gráfico $\log(\delta)$ vs $\log C(\delta)$ para a determinação da dimensão de correlação (b) gráfico de convergência para D_2 (adaptado de Xu et al., 2009).</i>	<i>66</i>
<i>Figura 2.10- Comparação entre as frequências dominantes das séries de pressão simuladas e experimentais para diferentes velocidades superficiais de gás (Adaptado de Van Wachem et al., 1999).....</i>	<i>76</i>
<i>Figura 2.11 - a) comparação entre as entropias de Kolmogorov das séries de pressão simuladas e experimentais em diferentes diâmetros de coluna e diferentes pressões de operação; b) comparação entre os valores de entropia de Kolmogorov obtidos para as séries de pressão e porosidade simuladas e aqueles advindos da equação de Schouten et al. (1996) (Adaptado de Van Wachem et al., 1999).</i>	<i>76</i>
<i>Figura 2.12 - Caracterização dos regimes presentes no leito de jorro através da dimensão de correlação e entropia de Kolmogorov do sistema (adaptado de Salikov, 2015).</i>	<i>78</i>

<i>Figura 2.13. Comparação entre as séries temporais de pressão experimentais e simuladas para esferas de vidro, em diferentes posições axiais do leito (Adaptado de Utika e Renade, 2007).</i>	79
<i>Figura 2.14. Comparação entre os valores experimentais e simulados da entropia de Kolmogorov para esferas de vidro e polipropileno nas três diferentes posições axiais do leito (adaptado de Utika e Ranade, 2007).</i>	79
<i>Figura 3.1 - Fluxograma ilustrativo da análise caótica aplicada às séries temporais desta Dissertação.</i>	82
<i>Figura 3.2 - Representação do perfil de velocidade em uma camada limite turbulenta (adaptado de Wilcox, 1998).</i>	84
<i>Figura 3.3 - Malha computacional estruturada confeccionada no software ANSYS-ICEM 17.2.</i>	86
<i>Figura 3.4 - Pontos de coleta dos dados de pressão; a) experimentos realizados por Prieto (2014); b) simulações.</i>	87
<i>Figura 4.1 - Séries temporais de mínima fluidização ($U_{mf} = 0,24 \text{ m s}^{-1}$) para partículas A da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.</i>	90
<i>Figura 4.2 – Séries temporais de mínima fluidização ($U_{mf} = 0,26 \text{ m s}^{-1}$) para partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.</i>	90
<i>Figura 4.3 - Séries temporais de mínima fluidização ($U_{mf} = 0,28 \text{ m s}^{-1}$) para partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,8 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.</i>	91
<i>Figura 4.4 - Séries temporais de mínima fluidização ($U_{mf} = 0,65 \text{ m s}^{-1}$) para partículas D da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.</i>	91

<i>Figura 4.5 - Perfil de fração volumétrica da fase particulada para as partículas do tipo A da classificação de Geldart e 0,4kg de carregamento (perfil retirado no tempo de 10 s após o atingimento da condição de estado estacionário).....</i>	<i>94</i>
<i>Figura 4.6 - Espectros de potência para partículas A da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.</i>	<i>95</i>
<i>Figura 4.7 - Espectros de potência para partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.</i>	<i>96</i>
<i>Figura 4.8 - Espectros de potência para partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,8 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.</i>	<i>96</i>
<i>Figura 4.9 - Espectros de potência para partículas D da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.</i>	<i>97</i>
<i>Figura 4.10 - Determinação da mínima dimensão de imersão da bacia de atração via estagnação da dimensão de correlação: a) partículas A da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; b) partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; c) partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,8 kg; d) partículas D da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg.</i>	<i>98</i>
<i>Figura 4.11 – Bacias de atração das séries temporais para partículas A da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.</i>	<i>99</i>
<i>Figura 4.12 – Bacias de atração das séries temporais para partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.</i>	<i>100</i>
<i>Figura 4.13 – Bacias de atração das séries temporais para partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,8 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.</i>	<i>100</i>

Figura 4.14 – Bacias de atração das séries temporais para partículas D da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência. 101

Figura 4.15 – Resultado da simulação para partícula D da classificação de Geldart, carregamento de 0,4 kg, utilizando-se o modelo de turbulência. a) perfil de fração volumétrica da fase particulada; b) perfil de velocidade da fase gasosa. 106

Figura 7.1 - Comparação entre as bacias de atração reconstruídas pelos softwares BRChaos e RRChaos para as séries temporais experimentais. 125

LISTA DE TABELAS

<i>Tabela 3.1-Diferentes condições utilizadas nas simulações (PRIETO, 2014).</i>	81
<i>Tabela 3.2 - Configuração cluster.</i>	83
<i>Tabela 3.3 - Condições de contorno e modelos utilizados na simulação.</i>	88
<i>Tabela 4.1 - Comparação entre os valores médios de queda de pressão obtidos para as séries temporais experimentais e simuladas.</i>	92
<i>Tabela 4.2 - Comparação entre os valores de desvio padrão de queda de pressão obtidos para as séries temporais experimentais e simuladas.</i>	93
<i>Tabela 4.3 - Condições simuladas e suas respectivas dimensões de imersão.</i>	99
<i>Tabela 4.4 - Invariantes caóticos obtidos das séries temporais experimental e simuladas para partículas A da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg.</i>	102
<i>Tabela 4.5 - Invariantes caóticos obtidos das séries temporais experimental e simuladas para partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg.</i>	102
<i>Tabela 4.6 - Invariantes caóticos obtidos das séries temporais experimental e simuladas para partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,8 kg.</i>	103
<i>Tabela 4.7 - Invariantes caóticos obtidos das séries temporais experimental e simuladas para partículas D da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg.</i>	103
<i>Tabela 7.1 - Comparativo entre os tempos de processamento dos softwares BRChaos e RRChaos.</i>	123
<i>Tabela 7.2 - Resultados comparativos entre o BRChaos e RRChaos para as séries temporais experimentais.</i>	123
<i>Tabela 7.3 - Resultados comparativos entre o BRChaos e RRChaos para as séries temporais simuladas com o modelo de turbulência.</i>	124
<i>Tabela 7.4 - Resultados comparativos entre o BRChaos e RRChaos para as séries temporais simuladas sem o modelo de turbulência.</i>	124

NOMENCLATURA

$C(\delta)$	Função Integral de Correlação, $[M^0 L^0 T^0]$
C_D	Coefficiente de Arraste, $[M^0 L^0 T^0]$
C_s''	Flutuação da velocidade dos grãos, $[M^0 L^1 T^{-1}]$
$C_{1\varepsilon}, C_{2\varepsilon}, C_\mu$	Constantes empíricas para o modelo de turbulência <i>standart k-ε</i> $[M^0 L^0 T^0]$
$\overline{\overline{D}}$	Tensor taxa de deformação, $[M^0 L^1 T^{-1}]$
$\overline{\overline{D}}^{\circ}$	Parte esférica do tensor taxa de deformação, $[M^0 L^0 T^{-1}]$
$\overline{\overline{D}}^{\sim}$	Parte deviatórica do tensor taxa de deformação, $[M^0 L^0 T^{-1}]$
D_2	Dimensão de Correlação, $[M^0 L^0 T^0]$
E_θ	Energia de flutuação por unidade de massa, $[M^0 L^2 T^{-2}]$
$d_j(i)$	Distância do ponto vizinho mais próximo no <i>i-ésimo</i> tempo discreto, $[M^0 L^1 T^0]$
d_p	Diâmetro da partícula, $[M^0 L^1 T^0]$
e	Coefficiente de restituição, $[M^0 L^0 T^0]$
\vec{g}	Gravidade, $[M^0 L^1 T^{-2}]$
g_0	Função de distribuição radial da fase particulada, $[M^0 L^0 T^0]$
$G_{k,m}$	Taxa de produção de energia cinética turbulenta $[M^0 L^2 T^{-3}]$
p	Passo de reconstrução, $[M^0 L^0 T^0]$
H	Função de Heaviside, $[M^0 L^0 T^0]$
$\overline{\overline{I}}$	Tensor unitário, [-]
$I(\varepsilon)$	Informação inerente à trajetória da bacia de atração, $[\text{bits}^1 M^0 L^0 T^0]$
k	Energia cinética turbulenta, $[M^0 L^2 T^{-2}]$
K	Entropia de Kolmogorov, $[\text{bits}^1 M^0 L^0 T^{-1}]$
K_{ML}	Entropia de Kolmogorov obtida pelo princípio da Máxima Verossimilhança (<i>Maximum Likelihood</i> principle), $[\text{bits}^1 M^0 L^0 T^{-1}]$
$\vec{f}_{arraste}$	Força de interação entre as fases, $[M^1 L^1 T^{-2}]$
LLE	Maior expoente de Lyapunov, $[\text{bits}^1 M^0 L^0 T^{-1}]$
m	Dimensão de imersão, $[M^0 L^0 T^0]$
P	Pressão termodinâmica, $[M^1 L^{-1} T^{-2}]$
P_s	Pressão de sólidos, $[M^1 L^{-1} T^{-2}]$

P^f	Pressão friccional para a fase particulada, $[M^1 L^{-1} T^{-2}]$
$P^{K/C}$	Pressão cinética-colisional para a fase particulada, $[M^1 L^{-1} T^{-2}]$
Re_r	Número de Reynolds relative, $[M^0 L^0 T^0]$
S_{ij}	Tensor taxa de deformação média, $[M^0 L^0 T^{-1}]$
t_s	Tempo de aquisição, $[M^0 L^0 T^1]$
\vec{v}_g	Vetor velocidade para a fase fluida, $[M^0 L^1 T^{-1}]$
\vec{v}_s	Vetor velocidade para a fase particulada, $[M^0 L^1 T^{-1}]$
v_m	Velocidade da mistura, $[M^0 L^1 T^{-1}]$

Letras Gregas

β_{Ergun}	Coefficiente de troca de <i>momentum</i> pelo modelo de Ergun (1952), $[M^1 L^0 T^{-1}]$
β_{Wen_Yu}	Coefficiente de troca de <i>momentum</i> pelo modelo de Wen e Yu (1966), $[M^1 L^0 T^{-1}]$
ε_g	Fração volumétrica da fase fluida, $[M^0 L^0 T^0]$
ε_s	Fração volumétrica da fase particulada, $[M^0 L^0 T^0]$
$\varepsilon_{s, max}$	Limite de empacotamento da fase particulada, $[M^0 L^0 T^0]$
ε	Taxa de dissipação turbulenta, $[M^0 L^2 T^{-3}]$
ϕ	ângulo de fricção interna do material, [-]
γ_s	Termo dissipativo da equação de transporte de temperatura granular
δ	Lado do hipercubo de discretização da solução no atrator, $[M^0 L^1 T^0]$
μ_g	Viscosidade da fase fluida, $[M^1 L^{-1} T^{-1}]$
μ_{bulk}^f	Viscosidade friccional bulk da fase particulada, $[M^1 L^{-1} T^{-1}]$
$\mu_{bulk}^{K/C}$	Viscosidade cinética-colisional bulk da fase particulada, $[M^1 L^{-1} T^{-1}]$
μ^f	Viscosidade cisalhante friccional, $[M^1 L^{-1} T^{-1}]$
$\mu^{K/C}$	Viscosidade cisalhante cinética-colisional, $[M^1 L^{-1} T^{-1}]$
$\mu_{t,m}$	Viscosidade turbulenta da mistura, $[M^0 L^2 T^{-1}]$
μ_p	Proporção entre as viscosidades turbulenta e molecular, $[M^0 L^0 T^0]$
ρ_g	Massa específica da fase fluida, $[M^1 L^{-3} T^0]$
ρ_s	Massa específica da fase particulada, $[M^1 L^{-3} T^0]$

ρ_m	Concentração mássica da mistura, $[M^1 L^{-3} T^0]$
σ	Desvio padrão da série temporal, $[M^1 L^{-1} T^{-2}]$
$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$	Números de Prandtl turbulentos, $[M^0 L^0 T^0]$
$\overline{\tau}_g$	Tensor tensão da fase fluida, $[M^1 L^{-1} T^{-2}]$
$\overline{\tau}_s$	Tensor tensão total da fase particulada, $[M^1 L^{-1} T^{-2}]$
$\overline{\tau}^{-k/c}$	Tensor tensão cinético-colisional, $[M^1 L^{-1} T^{-2}]$
$\overline{\tau}^{-f}$	Tensor tensão friccional, $[M^1 L^{-1} T^{-2}]$
θ	Temperatura granular, $[M^0 L^2 T^{-2}]$
Ω_{ij}	Tensor taxa de rotação média, $[M^0 L^0 T^{-1}]$
ω_k	Velocidade angular, $[M^0 L^0 T^{-1}]$

SUMÁRIO

1. CAPÍTULO I.....	20
INTRODUÇÃO.....	20
1.1 OBJETIVOS.....	22
2 CAPÍTULO II.....	24
FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	24
2.1 ESCOAMENTO MULTIFÁSICO.....	24
2.1.1 CONSERVAÇÃO DAS PROPRIEDADES EM UM ESCOAMENTO MULTIFÁSICO	25
2.1.2 DISTRIBUIÇÃO DE TENSÃO NAS FASES FLUIDA E PARTICULADA	28
2.1.3 MODELAGEM DOS MECANISMOS FRICCIONAL E CINÉTICO- COLISIONAL EM UM ESCOAMENTO GRANULAR	31
2.2 MODELAGEM DA TURBULÊNCIA	40
2.2.1 MODELOS PARA O TENSOR DE REYNOLDS	42
2.2.2 MODELOS DE VISCOSIDADE TURBULENTA.....	43
2.3 MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS	49
2.3.1 MALHAS COMPUTACIONAIS.....	50
2.4 FLUIDIZAÇÃO	51
2.5 TEORIA DOS SISTEMAS DINÂMICOS	54
2.6 ANÁLISE TRADICIONAL DE SINAIS: ANÁLISE ESPECTRAL.....	55
2.7 INTRODUÇÃO À TEORIA DO CAOS.....	58
2.7.1 ESPAÇO DE FASES.....	61
2.7.2 BACIA DE ATRAÇÃO, ATRADORES E ATRADORES ESTRANHOS	61
2.7.3 DIMENSÕES DA BACIA DE ATRAÇÃO.....	64
2.7.4 ENTROPIA DE KOLMOGOROV.....	66
2.7.5 EXPOENTES DE LYAPUNOV	68
2.8 APLICAÇÕES DA SIMULAÇÃO CFD E DA TEORIA DO CAOS NA FLUIDIZAÇÃO	71

2.8.1	SIMULAÇÃO CFD EM LEITOS FLUIDIZADOS.....	71
2.8.2	ANÁLISE DO CAOS EM LEITOS FLUIDIZADOS.....	73
2.8.3	VERIFICAÇÃO FÍSICA DE MODELOS RESOLVIDOS VIA CFD ATRAVÉS DE INVARIANTES CAÓTICOS.....	75
3	CAPÍTULO III	81
	MATERIAIS E MÉTODOS.....	81
3.1	METODOLOGIA NUMÉRICA	83
3.1.1	CONFIGURAÇÃO DO <i>CLUSTER</i> UTILIZADO NAS SIMULAÇÕES	83
3.1.2	CONFECÇÃO DA MALHA COMPUTACIONAL	83
4	CAPÍTULO IV	89
	RESULTADOS E DISCUSSÃO	89
4.1	ANÁLISE COMPARATIVA ENTRE AS SÉRIES TEMPORAIS EXPERIMENTAIS E SIMULADAS	89
4.2	ANÁLISE ESPECTRAL.....	94
4.3	ANÁLISE DO CAOS.....	98
5	CAPÍTULO V	107
	CONCLUSÕES.....	107
	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	110
6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	111
7	APÊNDICE A – COMPARAÇÃO ENTRE OS PACOTES BRCHAOS E RRCHAOS	
	122	

1. CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

A modelagem matemática dos fenômenos naturais é uma ferramenta indispensável no controle de grandezas importantes em processos industriais sendo, também, via expressa para o desenvolvimento tecnológico e conseqüente melhoria da expectativa e qualidade de vida do ser humano. Na atualidade, com a evolução da capacidade computacional no que diz respeito, principalmente, à velocidade do processamento e armazenamento de dados, torna-se exequível a modelagem discreta para a solução numérica de equações diferenciais complexas. Assim, as técnicas de CFD (*Computational Fluid Dynamics*), que consistem na solução numérica das equações de transporte acopladas àquelas constitutivas, revelam-se ferramentas úteis para a modelagem de sistemas fluidodinâmicos presentes extensivamente em diversos processos industriais, inclusive aqueles onde haja a necessidade da consideração de fortes interações entre duas fases que apresentem diferentes características físicas, como é o caso da fluidização.

A fluidização é uma operação unitária fundamentada no contato fluido-partícula e possui uma gama imensa de aplicações presentes em processos como a secagem, recobrimento, granulação e, até mesmo, sínteses catalíticas (CREMASCO, 2012). Muito utilizada no processo de craqueamento catalítico do petróleo, esta operação consiste em um movimento vertical da fase particulada devido à força de arraste causada pelo fluxo ascendente do fluido injetado na base do distribuidor. Em baixas vazões, o fluido percola por entre os espaços vazios ocasionados pela porosidade do leito fixo e, à medida que a vazão de fluido é aumentada, o leito apresenta um caráter expandido até que a condição de mínima fluidização é atingida. Usualmente, caso o fluido utilizado seja um líquido, haverá uma expansão progressiva do leito após ultrapassada a condição de mínima fluidização caracterizando a, chamada, fluidização homogênea. Contudo, quando o fluido de trabalho é um gás, é comum que surjam instabilidades e a presença de bolhas caracterizando, então, uma fluidização heterogênea (KUNII e LEVENSPIEL, 1991). A vasta aplicação dos leitos fluidizados se justifica em decorrência das substanciais taxas de transferência de massa, *momentum* e energia observadas entre as fases envolvidas, sendo este um fator importante na maioria dos processos industriais e que faz com que a modelagem matemática do leito fluidizado, via técnicas de CFD, tenha sido um assunto atrativo por parte da comunidade

científica nas últimas cinco décadas (ANDERSON e JACKSON, 1967; ARASTOPOUR e GIDASPOW, 1990; GIDASPOW e ETTAHADIEH, 1983; DARTEVELLE, 2003; CHIESA et al., 2005; OZEL et al., 2013).

Em se tratando do projeto de sistemas fluidos, existem algumas vantagens inerentes a utilização das técnicas de CFD sobre a metodologia experimental, tais como a redução substancial dos custos de novos projetos, a capacidade do estudo de sistemas em que haja grande dificuldade na realização de experimentos e o detalhamento quase ilimitado dos resultados obtidos através das simulações (ROSA, 2002). Entretanto, embora a modelagem numérica estabeleça novos horizontes no estudo da fluidodinâmica em equipamentos importantes para a produção de bens de consumo, é vital que sejam utilizados dados experimentais na validação do modelo matemático adotado para garantir a confiabilidade de seus resultados.

Muitos trabalhos têm proposto a validação de modelos resolvidos via técnicas de CFD através da comparação entre valores os médios originados experimentalmente e através de simulações (GUIDASPOW e ETTEHADIE, 1983; VAN WACHEM et al., 1998; CAMMARATA et al. 2003; HULME et al., 2005; TAGHIPOUR et al., 2005). No entanto, para garantir a validade integral de um modelo matemático, é necessário a verificação de sua capacidade em reproduzir não somente os valores médios representativos dos fenômenos estudados, mas também, as características dinâmicas do sistema (UTIKAR e RANADE, 2007).

No que diz respeito ao estudo de sistemas dinâmicos, houve um gradativo incentivo ao estudo de modelos lineares e bem-comportados devido, principalmente, ao alto grau de complexidade inerente à abordagem não linear, bem como ao sucesso da mecânica linear em diversas áreas do conhecimento (SAVI, 2006). No entanto, o estudo dos fenômenos naturais por meio de modelos ou técnicas não lineares é mais adequado frente aqueles em que há simplificações que transformam a dinâmica do modelo em um comportamento linear restrito. Neste cenário, surge a Teoria do Caos como uma abordagem alternativa na análise da imprevisibilidade de sistemas dinâmicos cujas características fundamentais incorporem tanto sistemas determinísticos, com solução periódica e, conseqüentemente, previsível, quanto estocásticos, dos quais a solução possui natureza aleatória, exigindo, via de regra, uma abordagem puramente estatística. Assim, o estudo se baseia em uma série de ferramentas matemáticas, denominadas invariantes caóticos, as quais são fundamentadas, em sua maioria,

em abordagens geométricas e probabilísticas que são aplicáveis ao estudo de equações diferenciais não lineares e mapeamentos (HOLMES, 1989).

Stringer (1989) foi o pioneiro em afirmar que o comportamento dinâmico resultante da interação gás-partícula, intrinsecamente não linear, tratava-se de um fenômeno caótico regido por equações determinísticas. Desde então, o estudo do comportamento dinâmico em leitos fluidizados tem sido frequentemente abordado em diversos trabalhos que aplicam metodologias não lineares à análise de sinais experimentais (VAN DEN BLEEK e SCHOUTEN, 1993; SCHOUTEN et al., 1996; VAN DER STAPPEN, 1996; FELIPE e ROCHA, 2004; PRIETO, 2014) e de simulação (VAN WACHEM et al., 1999; UTIKAR e RANADE, 2007; SALIKOV et al., 2015).

1.1 OBJETIVOS

O objetivo geral desta Dissertação é avaliar a utilização da abordagem Euler-Euler na representação das características dinâmicas de um sistema de fluidização gás-partícula através da aplicação de técnicas de análises de sinais em séries temporais de queda de pressão na condição de mínima fluidização obtidas, tanto por meio da solução de um modelo matemático via técnicas de CFD, quanto através dos experimentos realizados por Prieto (2014).

Tal objetivo pôde ser concretizado graças à realização das seguintes etapas:

1. Construção de uma malha computacional estruturada seguindo os critérios das funções de parede detalhadas no capítulo 2 desta Dissertação;
2. Simulação das condições de mínima fluidização obtidas, experimentalmente, por Prieto (2014) para as partículas A, B e D da classificação de Geldart. Simultaneamente, obtenção das séries temporais de queda de pressão para cada condição simulada;
3. Organização de séries temporais com *10.000* pontos obtidos após o alcance da condição de estado estacionário das séries do item 2;
4. Aplicação da análise espectral em cada série temporal do item 3, por meio da obtenção de seus respectivos espectros de potência e comparação com aqueles obtidos para as séries experimentais geradas por Prieto (2014);

5. Reconstrução das bacias de atração de cada série temporal do item 4 em seu espaço de fases e cálculo dos invariantes caóticos Dimensão de Correlação (D_2), Entropia de Kolmogorov (K) e maior Expoente de Lyapunov (LLE) para cada bacia de atração reconstruída;
6. Avaliação da dinâmica gerada pelo modelo através da verificação das semelhanças e diferenças encontradas nas análises espectral e caótica aplicadas às séries temporais simuladas e experimentais;
7. Validação do *software BRChaos* para as condições de fluidização estudadas na presente dissertação;

2 CAPÍTULO II

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo serão descritos os conceitos necessários para o enriquecimento das discussões acerca desta Dissertação, bem como a elucidação de sua motivação. Inicia-se com a apresentação de alguns conceitos sobre a modelagem de escoamentos multifásicos com ênfase na representação da fase particulada como um meio contínuo pelo Modelo Euleriano Granular Multifásico (MEGM). Logo após, encontram-se fundamentos sobre a modelagem da turbulência seguida da descrição dos modelos $k-\varepsilon$, a discretização das equações de transporte e classificação de malhas computacionais. Em seguida, apresenta-se alguns fundamentos relacionados à teoria clássica da fluidização acompanhados dos principais aspectos relativos à teoria de sistemas dinâmicos juntamente à apresentação dos métodos de análise de sinais na forma de séries temporais como a análise espectral e a Teoria do Caos. Finalizando este capítulo, será apresentada uma revisão geral dos diversos trabalhos que abordam tanto a modelagem matemática de leitos fluidizados através do modelo MEGM quanto o estudo de suas características dinâmicas via Teoria do Caos.

2.1 ESCOAMENTO MULTIFÁSICO

Um escoamento multifásico ocorre quando há duas ou mais fases, que possuam diferentes características físicas, em contato em um escoamento. É de grande interesse o estudo deste tipo de situação uma vez que ela está presente na maioria dos processos industriais, tais como: secagem, extração, lixiviação, destilação, granulação, etc.

A modelagem matemática de um sistema multifásico exige que seja empregado um modelo que leve em consideração a conservação das propriedades de ambas as fases do sistema e contabilize os efeitos das interações de cada uma no comportamento do sistema como um todo. Desta forma, são encontradas na literatura, basicamente, duas abordagens para modelos multifásicos: Euler-Lagrange e Euler-Euler.

Na abordagem Euler-Lagrange, resolve-se, primeiramente, as equações de transporte para a fase fluida considerando-a um meio contínuo separadamente daquela considerada uma fase dispersa (fase que ocupa menor fração volumétrica). Assim, a fase

dispersa é “lançada” no campo de velocidades calculado para que possa, então, ser contabilizado a sua interação com a fase contínua (SANTOS, 2011).

Já na abordagem Euler-Euler, as fases são tratadas como domínios contínuos em que é possível, então, o emprego das equações de conservação para a representação de transportes de massa, energia e *momentum* no escoamento. Dentre os modelos que utilizam a abordagem Euler-Euler, destacam-se o modelo VOF (“Volume of Fluid”), usualmente aplicado na descrição de escoamentos com fluidos imiscíveis como a dissolução de jatos e o movimento de bolhas de ar em um líquido, e o Modelo Euleriano Granular Multifásico (MEGM), utilizado no estudo da interação entre uma fase fluida e outra particulada como, por exemplo, em leitos de jorro e fluidizados (ANSYS, 2016). A descrição da fase particulada via abordagem Euler-Euler se destaca por apresentar um custo computacional relativamente baixo quando comparado à abordagem Euler-Lagrange principalmente devido à não necessidade da realização de uma análise individual de cada elemento discreto representante de cada partícula. Tal vantagem tem incentivado seu estudo na modelagem de sistemas particulados (LU et al., (2004); ZHONGHUA e MUJUMDAR (2008); DUARTE et al. (2009); SHUYAN et al. (2009); DAN et al.(2010) e WANG et al.(2010); SANTOS, 2011; SANTOS, 2015) favorecendo a implementação de melhorias em equipamentos de grande porte, onde o custo computacional inviabiliza a implementação da abordagem Euler-Lagrange. Desta forma, o modelo multifásico adotado nesta Dissertação será o MEGM e seu embasamento teórico está apresentado nos tópicos a seguir.

2.1.1 CONSERVAÇÃO DAS PROPRIEDADES EM UM ESCOAMENTO MULTIFÁSICO

A seguir encontra-se o desenvolvimento matemático e conceitual acerca dos fundamentos relativos ao modelo Euleriano Granular Multifásico. Os trabalhos de Dartevelle (2003), Santos (2015) e Martins (2015), foram utilizados como base para a apresentação dos conceitos a seguir.

A conservação da massa pode ser descrita pela Equação 2.1 e 2.2, para as fases fluida e particulada, respectivamente.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{v}_g) = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \vec{v}_s) = 0 \quad (2.2)$$

em que,

ρ_g, ρ_s = massa específica da fase fluida e particulada, respectivamente;

$\varepsilon_g, \varepsilon_s$ = fração volumétrica da fase fluida e particulada, respectivamente;

\vec{v}_g, \vec{v}_s = vetor velocidade para a fase fluida e particulada, respectivamente.

Analogamente, as equações que descrevem o transporte de *momentum* nas fase fluida e particulada encontram-se nas Equações 2.3 e 2.4, respectivamente.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g \vec{v}_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{v}_g \vec{v}_g) = -\varepsilon_g \nabla P + \nabla \cdot (\varepsilon_g \vec{\tau}_g) + \varepsilon_g \rho_g \vec{g} + \vec{f}_{arraste} \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s \vec{v}_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \vec{v}_s \vec{v}_s) = -\varepsilon_s \nabla P - \nabla P_s + \nabla \cdot (\varepsilon_s \vec{\tau}_s) + \varepsilon_s \rho_s \vec{g} + \vec{f}_{arraste} \quad (2.4)$$

em que,

P = pressão termodinâmica;

P_s = pressão de sólidos;

$\vec{f}_{arraste}$ = força de interação entre as fases;

\vec{g} = gravidade;

$\vec{\tau}_g, \vec{\tau}_s$ = tensor tensão na fase fluida e particulada, respectivamente;

A força de arraste, observada nas Equações 2.3 e 2.4, representam a troca de *momentum* entre as fases e modela a interação entre elas. Assim, podemos escrevê-la como na Equação 2.5:

$$\vec{f}_{arraste} = \frac{3}{4} C_D \frac{\varepsilon_s \rho_g}{d_p} |\vec{v}_g - \vec{v}_s| f(\varepsilon_g) (\vec{v}_g - \vec{v}_s) \quad (2.5)$$

sendo,

C_D = coeficiente de arraste;

$|\vec{v}_g - \vec{v}_s|$ = módulo da diferença entre os vetores velocidades das fases;

$f(\varepsilon_f)$ = função específica para cada modelo de arraste;

$(\vec{v}_g - \vec{v}_s)$ = diferença vetorial entre as velocidades das fases;

É comum que se incorpore a maioria dos termos da Equação 2.5 em um termo chamado de coeficiente de troca entre as fases (β), que é determinado pelo modelo de arraste escolhido para a simulação. Desta forma, a Equação 2.5 se restringe ao formato apresentado na Equação 2.6.

$$\vec{f}_{arraste} = \beta(\vec{v}_g - \vec{v}_s) \quad (2.6)$$

É possível observar que a força de arraste é uma importante grandeza no cálculo das variáveis constituintes do escoamento, já que ela propicia o acoplamento entre as duas fases. Loha et al. (2012) realizaram uma investigação sobre a influência de diversos modelos de arraste em um leito fluidizado borbulhante operando com partículas B da classificação de Geldart. Foram testados, dentre outros, os modelos desenvolvidos por Syamlal e O'Brien (1988) e Gidaspow et al. (1992), em que este apresentou resultados próximos aos dados experimentais.

Assim, o modelo de arraste escolhido para a realização das simulações desta Dissertação é aquele desenvolvido por Gidaspow et al. (1992) e consiste na união do modelo de Ergun (1952) e de Wen e Yu (1966), sendo a utilização de um ou outro na dependência da faixa de fração volumétrica de ar presente no escoamento, assim como nas Equações 2.7 e 2.8

Para $\varepsilon_g \leq 0,8$

$$\beta_{Ergun} = 150 \frac{\varepsilon_s (1 - \varepsilon_g) \mu_g}{\varepsilon_g d_p^2} + 1,75 \frac{\rho_g \varepsilon_s |\vec{v}_g - \vec{v}_p|}{d_p} \quad (2.7)$$

Para $\varepsilon_g > 0,8$

$$\beta_{Wen-Yu} = \frac{3}{4} C_D \frac{\varepsilon_s \varepsilon_g \rho_g |\vec{v}_g - \vec{v}_p| \varepsilon_g^{-2,65}}{d_p} \quad (2.8)$$

em que, os valores de C_D dependem do número de Reynolds como o exposto na Equação 2.9, sendo que, para números de Reynolds muito elevados, o valor de C_D permanece praticamente constante.

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{(Re_r \varepsilon_g)} \left[1,0 + 0,15 (Re_r \varepsilon_g)^{0,687} \right] & \text{para } Re_r \leq 1000 \\ 0,44 & \text{para } Re_r > 1000 \end{cases} \quad (2.9)$$

sendo,

$$Re_r = \frac{\rho_g |\vec{v}_g - \vec{v}_p| d_p}{\mu_g} \quad (2.10)$$

2.1.2 DISTRIBUIÇÃO DE TENSÃO NAS FASES FLUIDA E PARTICULADA

Fica claro, na Equação 2.3, que a representação da tensão viscosa é um fator essencial para que possamos obter o campo de velocidades em qualquer uma das fases em questão.

Para a fase fluida, há várias abordagens que buscam a modelagem do tensor viscoso, sendo a mais comum, aquela que dá origem às equações de Navier-Stokes considerando a tensão na fase fluida descrita pela Equação 2.11.

$$\tau_{zx} = -\mu \frac{dv_x}{dz} \quad (2.11)$$

em que,

τ_{zx} = tensor cisalhante ortogonal a z na direção x ;

μ = viscosidade dinâmica do fluido.

A Equação 2.11 é denominada Lei de Transporte de Newton e assume que a viscosidade dinâmica do fluido é apenas função do estado termodinâmico do material (i.e., temperatura, pressão e massa específica), mas não de seu estado dinâmico (i.e., estado de tensão e deformação) promovendo uma relação linear entre a tensão e a taxa de deformação do fluido (SANTOS, 2011). Fluidos que seguem esta relação são chamados de *fluidos*

newtonianos (BIRD et al., 2002). Embora existam vários modelos para representar diversos tipos de fluidos cujo coeficiente de transporte não seja função apenas de seu estado termodinâmico, mas também, de seu estado dinâmico, apresentá-los não faz parte do objetivo desta Dissertação.

A tensão descrita pela Lei de Transporte de Newton apresenta uma expressão diferente quando analisada em espaço tridimensional (BIRD et al., 2002; WELTY et al., 2007), tornando aquela apresentada na Equação 2.11 inadequada para o uso nesta Dissertação, uma vez que as simulações computacionais aqui realizadas foram tridimensionais. Portanto, a relação que representa a distribuição de tensões na fase fluida em um espaço tridimensional segue a Equação 2.12.

$$\bar{\tau}_{fluido} = -\mu_{bulk} \nabla \cdot \vec{v} \bar{I} + 2\mu^{cisalhante} \left[\bar{D} + \frac{1}{3} \nabla \cdot \vec{v} \bar{I} \right] \quad (2.12)$$

$$\bar{D} = -\frac{1}{2} \left[\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^{-T} \right] \quad (2.13)$$

sendo,

\bar{I} = tensor tensão unitário, [-];

$\nabla \cdot \vec{v}$ = divergente do vetor velocidade, [$M^0 L^0 T^{-1}$];

\bar{D} = tensor taxa de deformação, [$M^0 L^0 T^{-1}$];

μ_{bulk} = viscosidade *bulk*, [$M^1 L^{-1} T^{-1}$];

$\mu^{cisalhante}$ = viscosidade cisalhante, [$M^1 L^{-1} T^{-1}$];

A resistência ao movimento de torção na fase fluida, causado pela atuação das tensões cisalhantes, é representada pela viscosidade cisalhante ($\mu^{cisalhante}$), sendo esta, uma constante de proporcionalidade entre a tensão cisalhante e a taxa de deformação. Analogamente, sempre que houver uma taxa de deformação volumétrica na fase fluida, haverá uma tensão normal proporcional cuja constante de proporcionalidade é a viscosidade *bulk* (μ_{bulk}).

A descrição matemática do escoamento de uma fase particulada necessita de um modelo eficiente e representativo das tensões presentes na superfície dos sólidos envolvidos tanto em regiões com grandes aglomerados de partículas, onde o mecanismo dominante de troca de *momentum* é o friccional, quanto naquelas onde haja um escoamento diluído em que a distância entre as partículas torna-se maior, favorecendo, então, o mecanismo cinético-colisional.

O modelo Euleriano Granular Multifásico apresenta, portanto, diferentes abordagens para a representação destes dois tipos de mecanismos, dando origem a dois termos que compõem a tensão total na fase particulada: a tensão cinética-colisional ($\vec{\tau}^{k/c}$) e a tensão friccional ($\vec{\tau}^f$). Assim, uma forma proposta por Savage (1983), para englobar os dois tipos de mecanismo de transporte em uma expressão de tensão, está exposta na Equação 2.14.

$$\vec{\tau}_s = \vec{\tau}^{k/c} + \vec{\tau}^f \quad (2.14)$$

em que,

$\vec{\tau}_s$ = tensor tensão total na fase granular;

$\vec{\tau}^{k/c}$ = tensor tensão cinético-colisional;

$\vec{\tau}^f$ = tensor tensão friccional.

A modelagem do tensor tensão cinético-colisional foi iniciada por Bagnold (1954) e desenvolvida, posteriormente, por Savage e Jeffrey (1981), Jenkins e Savage (1983), Shahinpour e Ahmadi (1983) e Lun et al. (1984). Ela se utiliza da teoria cinética dos gases (CHAPMAN e COWLING, 1970) como base na descrição do mecanismo colisional à baixa concentração de partículas, possibilitando a criação da conhecida teoria cinética do escoamento granular. Já o mecanismo friccional é modelado através da teoria do estado crítico juntamente com a teoria do escoamento potencialmente plástico, que foram baseadas no estudo da mecânica dos solos (JOHNSON e JACKSON, 1987; SRIVASTAVA e SUNDARESAN, 2003). Dartevelle (2003) diz que o mecanismo friccional começa a se tornar importante a partir de uma concentração volumétrica da fase particulada superior à 50%, evidenciando a importância da consideração deste modelo no sistema de fluidização gás-partícula abordado nesta Dissertação.

2.1.3 MODELAGEM DOS MECANISMOS FRICCIONAL E CINÉTICO-COLISIONAL EM UM ESCOAMENTO GRANULAR

Neste tópicos encontra-se uma breve apresentação dos fundamentos do modelo Euleriano Granular Multifásico (MEGM) através da descrição conceitual e matemática dos tensores utilizados na representação da fase particulada abordada nesta Dissertação.

2.1.3.1 Tensão friccional

A representação de uma fase discreta por uma abordagem contínua faz com que o livre caminho médio entre as partículas seja representado pela concentração da fase particulada. Assim, em altas concentrações de sólidos, isto é, concentrações próximas ao limite máximo de empacotamento, espera-se que a distância entre as partículas se torne tão pequena ao ponto de diminuir drasticamente os choques instantâneos entre elas, de modo que o movimento dominante é aquele que apresenta um contato íntimo entre as partículas, as quais deslizam umas sobre as outras exigindo que o modelo compreenda a influência da fricção na distribuição de tensões na fase particulada.

Desenvolve-se, então, uma modelagem matemática baseada na lei da mecânica friccional em que, na Equação 2.15, pode-se obter expressões baseadas na Lei de Newton, para o tensor tensão friccional.

$$\begin{aligned} \bar{\tau}^f &= P^f \bar{I} - \mu_{bulk}^f \nabla \cdot \vec{v} \bar{I} + 2\mu^f \left[\bar{D} + \frac{1}{3} \nabla \cdot \vec{v} \bar{I} \right] \\ &\Leftrightarrow \\ \bar{\tau}^f &= P^f \bar{I} + 3\mu_{bulk}^f \bar{D} + 2\mu^f \bar{D} \end{aligned} \quad (2.15)$$

em que a taxa de deformação é dada pela Equação 2.16:

$$\bar{D} = -\frac{1}{2} \left[\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^{-T} \right] \quad (2.16)$$

sendo,

\bar{I} = tensor unitário, [-];

$\nabla \cdot \vec{v}$ = divergente do vetor velocidade, [M⁰L⁰T⁻¹];

P^f = pressão friccional, $[M^1L^{-1}T^{-2}]$;

$\overline{\overline{D}}$ = tensor taxa de deformação da fase particulada, $[M^0L^0T^{-1}]$;

$\overline{\overline{D}}^\circ$ = parte esférica do tensor taxa de deformação (representação das deformações associadas à mudança de volume), $[M^0L^0T^{-1}]$;

$\overline{\overline{D}}^\circ$ = parte deviatórica do tensor taxa de deformação (representa as deformações cisalhantes), $[M^0L^0T^{-1}]$;

μ_{bulk}^f = viscosidade *bulk* friccional, $[M^1L^{-1}T^{-2}]$;

μ^f = viscosidade cisalhante friccional, $[M^1L^{-1}T^{-2}]$;

Nota-se a necessidade da modelagem da pressão friccional, da viscosidade friccional *bulk* e da viscosidade cisalhante friccional, uma vez que os outros termos da equação são determinados pelo campo pressão-velocidade que entra no processo iterativo realizado na simulação. Assim, estarão expostos, a seguir, os modelos utilizados para a representação da viscosidade cisalhante friccional e da pressão friccional utilizados nesta Dissertação.

a) Viscosidade friccional

A viscosidade de um fluido pode ser definida como uma medida de sua resistência à sua taxa de deformação (WELTY et al., 2007). Analogamente, a viscosidade friccional está relacionada à contribuição do atrito, através de longos contatos partícula-partícula, ao movimento e deformação do domínio contínuo granular considerado no modelo pela viscosidade cisalhante total.

O conceito que fundamenta a viscosidade friccional, adotada na mecânica dos solos, combina uma função de rendimento (*yield function*), critério que garante o movimento do material caso a tensão cisalhante friccional exceda um valor crítico, às leis do escoamento, que são um conjunto de relações entre as componentes do tensor tensão e da taxa de deformação (SANTOS, 2011). Desta forma, encontra-se, na Equação 2.17, o modelo de Johnson e Jackson (1987) utilizado nesta Dissertação, que descreve a viscosidade cisalhante friccional relacionando as forças normais àquelas cisalhantes.

$$\mu^f = P^f \operatorname{sen}\phi \quad (2.17)$$

em que,

μ^f = viscosidade granular friccional, $[M^1L^{-1}T^{-1}]$;

P^f = pressão friccional, $[M^1L^{-1}T^{-2}]$;

ϕ = ângulo de fricção interna do material, [-];

O ângulo de fricção interna ϕ , ou ângulo de repouso, do material é o ângulo mínimo necessário para que as partículas comecem a deslizar em contato umas com as outras em um plano inclinado. Nota-se pela Equação 2.17 que, para valores muito pequenos de ϕ a viscosidade friccional é direcionada a um valor muito pequeno, evidenciando a clara relação deste parâmetro na quantificação do atrito partícula-partícula no leito.

b) Pressão friccional

De forma similar ao tratamento da pressão em gases e líquidos, um modelo matemático que considere a pressão em uma fase particulada deve retratá-la como uma força, exercida pelas partículas, por unidade de área, considerada no decorrer do escoamento granular. Isto posto, além da contribuição daquelas forças colisionais de curta duração presentes no movimento das partículas no interior do leito, deve-se considerar a influência da fricção como uma força de longa duração através de uma grandeza chamada pressão friccional. Desta forma, na Equação 2.18, encontra-se o modelo de Johnson et al. (1990) que foi utilizado na modelagem da pressão friccional para o escoamento abordado nesta Dissertação.

$$P^f = F \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_{s,\min})^n}{(\varepsilon_{s,\max} - \varepsilon_s)^p} \quad (2.18)$$

em que,

P^f = pressão friccional, $[M^1L^{-1}T^{-2}]$;

ε_s = fração volumétrica da fase particulada, [-];

$\varepsilon_{s,\min}$ = fração volumétrica crítica da fase particulada para dominância do mecanismo friccional, [-];

$\varepsilon_{s,\max}$ = limite máximo de empacotamento, [-].

sendo F , n e p parâmetros do modelo que podem tomar valores de 0,05, 2 e 5, respectivamente (OCONE et al., 1993).

Segundo Santos (2011), o parâmetro F pode ainda estar relacionado com a fração volumétrica da fase particulada e ser obtido como na Equação 2.19.

$$F = 0,1\varepsilon_s \quad (2.19)$$

2.1.3.2 Tensão cinética-colisional

Concluindo a apresentação da modelagem do tensor tensão total para a fase granular, expõe-se a abordagem do mecanismo cinético-colisional, o qual proporciona uma grande contribuição em condições de escoamentos diluídos em que há a possibilidade do movimento livre das partículas devido à baixa fração volumétrica da fase particulada.

Analogamente à teoria cinética dos gases, a modelagem matemática da contribuição do mecanismo cinético-colisional sobre a tensão da fase particulada baseia-se no movimento aleatório das partículas no escoamento, tal como no caso de moléculas presentes em um gás sofrendo flutuações em seu movimento (CHAPMAN e COWLING, 1970). Segundo Darteville (2003), as partículas podem apresentar movimento caótico tanto em baixas como em altas concentrações da fase particulada em que, para o primeiro caso, a turbulência do gás e a interação fluido-partícula são fatores determinantes para este movimento e, no segundo, ele é determinado pela interação partícula-partícula.

Desta forma, a correspondência realizada entre as moléculas do gás e as partículas no leito acarreta no desenvolvimento da teoria cinética do escoamento granular (LUN et al., 1984), possibilitando a definição de propriedades físicas comuns a um gás, mas agora, para um leito particulado, como: pressão, temperatura, viscosidade, entre outras.

Analogamente ao tensor friccional a descrição do tensor cinético-colisional é baseada na Lei de Newton como na Equação 2.20.

$$\begin{aligned}
\tau^{=K/C} &= P^{K/C} \bar{\bar{I}} - \mu_{bulk}^{K/C} \nabla \cdot \vec{\bar{u}} \bar{\bar{I}} + 2\mu^{K/C} \left[\bar{\bar{D}} + \frac{1}{3} \nabla \cdot \vec{\bar{u}} \bar{\bar{I}} \right] \\
&\Leftrightarrow \\
\tau^{=K/C} &= P^{K/C} \bar{\bar{I}} + 3\mu_{bulk}^{K/C} \bar{\bar{D}} + 2\mu^{K/C} \bar{\bar{D}}
\end{aligned} \tag{2.20}$$

em que o tensor taxa de deformação é descrito da mesma maneira que na Equação 2.16.

sendo,

$$P^{K/C} = \text{pressão cinética-colisional, [M}^1\text{L}^{-1}\text{T}^{-2}\text{]};$$

$$\mu_{bulk}^{K/C} = \text{viscosidade } bulk \text{ cinética-colisional, [M}^1\text{L}^{-1}\text{T}^{-1}\text{]};$$

$$\mu^{K/C} = \text{viscosidade cisalhante cinética-colisional, [M}^1\text{L}^{-1}\text{T}^{-1}\text{]};$$

Através da Equação 2.20, constata-se a necessidade da modelagem de algumas propriedades cinética-colisionais para a representação da distribuição de tensões pelo mecanismo cinético-colisional, como: a pressão cinética-colisional e as viscosidades *bulk* e cisalhante cinética-colisionais. No entanto, antes da apresentação da relação que possibilita a obtenção das viscosidades, deve-se fundamentar as propriedades básicas da teoria cinética do escoamento granular para um maior entendimento do que representa o mecanismo cinético-colisional no modelo utilizado nesta Dissertação.

a) Temperatura granular

Assim como no conceito de temperatura, abordado pela termodinâmica clássica, a temperatura granular está diretamente associada ao grau de agitação das partículas presentes no leito podendo ser introduzida através da constituição da velocidade da partícula (C_s) pela sua média (\bar{C}_s) somada à sua flutuação (C_s'') (LUN et al., 1984). Desta forma, os conceitos de temperatura granular (θ) e da energia de flutuação (E_θ) podem ser definidos, como em Dartevelle (2003), pelas Equações 2.21 e 2.22.

$$\theta = \frac{1}{3} \langle C_s'' \cdot C_s'' \rangle \tag{2.21}$$

$$E_{\theta} = \frac{1}{2} \langle C_s'' \cdot C_s'' \rangle = \frac{3}{2} \theta \quad (2.22)$$

em que,

θ = temperatura granular, $[M^0L^2T^{-2}]$;

C_s'' = flutuação da velocidade dos grãos, $[M^0L^1T^{-1}]$;

E_{θ} = energia de flutuação por unidade de massa, $[M^0L^2T^{-2}]$;

$\langle \dots \rangle$ = indica à média da flutuação de velocidade.

A temperatura granular, juntamente à energia de flutuação por unidade de massa, são parâmetros que podem ser usuais na quantificação da intensidade do movimento aleatório representando uma medida média do movimento caótico das partículas no interior do escoamento (BOYLE E MASSOUDI, 1989).

A determinação dos valores da temperatura granular é realizada através de uma análise da conservação da energia no escoamento em que, diferentemente da fase fluida onde a energia mecânica é transformada diretamente em energia interna pela dissipação viscosa, para a fase particulada, existe um processo intermediário de transformação da energia mecânica em energia de flutuação, produzindo a temperatura granular e, então, a consequente transformação da energia de flutuação em energia interna na qual a temperatura granular é dissipada graças aos choques inelásticos entre as partículas presentes no leito (DARTEVELLE, 2003). Isto posto, na Equação 2.23, encontra-se a relação fundamental da conservação da energia de flutuação que possibilita a obtenção dos valores de temperatura granular para o cálculo da viscosidade cinética-colisional no modelo aqui utilizado.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\hat{\rho}_s E_{\theta}) + \nabla \cdot (u \hat{\rho}_s E_{\theta}) = \Phi - \nabla \cdot q - \gamma_s + K \left[\langle C_s'' C_s'' \rangle - 3\theta \right] \quad (2.23)$$

sendo $\hat{\rho}_s$, dada pela Equação 2.24, a densidade *bulk* da fase particulada que é função da fração volumétrica da fase particulada (ε_s) e de sua massa específica (ρ_s).

$$\hat{\rho}_s = \varepsilon_s \rho_s \quad (2.24)$$

Em análise da Equação 2.23, nota-se a presença dos seguintes termos:

- Termo transiente: o primeiro termo do lado esquerdo da equação se refere à taxa de variação de energia de flutuação, no interior do volume de controle analisado, com a evolução do tempo (termo transiente) indicando, também, o perfil temporal da temperatura granular, já que a energia de flutuação está diretamente ligada a ela;
- Termo advectivo: o segundo termo do lado esquerdo da equação representa as transferências advectivas de energia de flutuação neste mesmo volume de controle;
- Termo de geração $\Phi = \left[\left(\begin{matrix} =K/C \\ -\tau \end{matrix} \right) : \nabla \vec{u} \right] - P^{K/C} \nabla \cdot \vec{u}$: o primeiro termo do lado direito da equação se refere à taxa de “criação” de energia de flutuação em que o termo $\left[\left(\begin{matrix} =K/C \\ -\tau \end{matrix} \right) : \nabla \vec{u} \right]$ representa a contribuição da geração de energia via tensões superficiais e o termo $P^{K/C} \nabla \cdot \vec{u}$ refere-se à “criação” de energia via trabalho realizado pela pressão cinética-colisional;
- Termo difusivo $\nabla \cdot q = \nabla \cdot [-k \nabla \theta]$: o segundo termo do lado direito da equação representa a condução da temperatura granular no volume de controle analisado. Há uma analogia à lei de Fourier para a condução de energia térmica em que o termo “ q ” representa o fluxo de energia de flutuação e tem o formato $q = -k \nabla \theta$ no qual o termo “ k ” representa a condutividade da temperatura granular no volume de controle;
- Termo dissipativo γ_s : o terceiro termo do lado direito da equação representa a taxa de dissipação de energia de flutuação devido aos choques inelásticos que as partículas sofrem durante o escoamento. Na realidade, é o termo que representa a transformação da energia de flutuação, quantificada pela temperatura granular, em energia interna propiciando, também, a transformação da temperatura granular em temperatura “convencional” ou termodinâmica.
- Termo de interação gás-partícula: o quarto e último termo do lado direito da equação se refere à taxa líquida de transferência de energia de flutuação entre as fases gás e particulada. Ele é constituído, basicamente, de um termo que representa o ganho, pela fase particulada, de energia de flutuação devido à energia de flutuação turbulenta das moléculas de gás e outro que representa a perda dessa energia devido ao atrito aerodinâmico, gás-partícula, presente no escoamento em que o parâmetro “ K ” depende diretamente do modelo de arraste utilizado na simulação. O termo C_g'' representa as flutuações de velocidade das moléculas de gás em que o termo $\langle C_g'' C_s'' \rangle$ se torna muito

difícil de se calcular devido a inexistência de um modelo completo de turbulência gás-partícula, podendo ser negligenciável, principalmente, em casos de partículas grandes e pesadas as quais não sejam largamente afetadas pelo movimento aleatório das moléculas do gás (DARTEVELLE, 2003).

b) Pressão cinética-colisional

A pressão cinética-colisional é fruto da representação da contribuição que os choques de curta duração ocasionam na força de contato partícula-partícula por unidade de área no escoamento. Assim, quanto maior a intensidade dos choques de curta duração, maior será a pressão cinética-colisional no modelo abordado, possibilitando uma analogia entre os choques de moléculas de um gás representado pela teoria cinética dos gases e aqueles presentes no escoamento de partículas, representado pela teoria cinética do escoamento granular.

Na teoria cinética dos gases, a temperatura termodinâmica quantifica a intensidade de choques entre as moléculas e tem uma relação de proporcionalidade com a pressão. No caso da teoria cinética do escoamento granular, a temperatura granular é a grandeza que quantifica os choques cinético-colisionais mantendo a proporcionalidade com a pressão cinética-colisional que, através do coeficiente de restituição, leva em consideração que os choques de curta duração sofridos pelas partículas sejam inelásticos. Assim, expõe-se a relação para o cálculo da pressão cinética-colisional na Equação 2.25.

$$P^{K/C} = \varepsilon_s \rho_s \theta + 2\varepsilon_s^2 \rho_s \theta (1+e) g_0 \quad (2.25)$$

em que,

g_0 = função de distribuição radial, [-];

e = coeficiente de restituição, [-].

O coeficiente de restituição presente na Equação 2.25 quantifica o quão inelástico é o choque das partículas do leito em que, para choques elásticos, seu valor seria unitário promovendo a não dissipação da temperatura granular em que é comum a adoção de valores para o coeficiente de restituição entre 0,9 e 0,99 para materiais granulares (DARTEVELLE, 2003). Desta forma, as simulações realizadas na presente dissertação utilizarão um coeficiente

de restituição de 0,9, uma vez que o estudo da influência deste parâmetro não seja o foco deste trabalho. Outra grandeza que se pode notar na Equação 2.25 é a função de distribuição radial que representa um fator de correção para a probabilidade de duas partículas estarem suficientemente próximas para colidirem (SANTOS, 2011). Isso indica que o segundo termo da equação é um termo colisional para a pressão cinética-colisional e quantifica a não elasticidade dos choques das partículas, bem como a probabilidade de estes ocorrerem. O modelo utilizado para a representação da função de distribuição radial no presente trabalho foi proposto por Lun et al. (1984) e encontra-se na Equação 2.26.

$$g_0 = \left[1 - \left(\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{s,\max}} \right)^{1/3} \right]^{-1} \quad (2.26)$$

É possível visualizar a dependência da função de distribuição radial à fração volumétrica da fase particulada. Em escoamentos extremamente diluídos, a função ilustrada pela Equação 2.26 tende a um valor unitário em que o mecanismo cinético-colisional tem um grande domínio sobre o escoamento. Para valores de fração volumétrica da fase particulada próximos ao limite máximo de empacotamento, g_0 resulta em valores altos em que a temperatura granular tende a zero, sinalizando a invalidez desta equação para descrever o escoamento e o predomínio do mecanismo friccional na modelagem do tensor tensão total para a fase particulada (SANTOS, 2011).

c) Viscosidades cisalhante e *bulk* cinética-colisional

Analogamente ao ponto de vista microscópico em que a viscosidade de um gás newtoniano se relaciona à sua temperatura por meio da estatística de Boltzmann (WELTY et al., 2007), do ponto de vista macroscópico, o mecanismo cinético-colisional inerente ao movimento das partículas deve ser considerado na distribuição das tensões da fase particulada por meio da contabilização da temperatura granular (θ), do coeficiente de restituição (e) e da função de distribuição radial (g_0) nas viscosidades *bulk* e cisalhante cinética-colisionais mostradas na Equação 2.20.

Assim, como exposto em Gidaspow (1994), a descrição da viscosidade cisalhante cinética-colisional encontra-se na Equação 2.27.

$$\mu^{K/C} = \frac{4}{5} \varepsilon_s \rho_s d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} + \frac{\varepsilon_s \rho_s d_p g_0 \sqrt{\theta \pi}}{6(3-e)} \left[1 + \frac{2}{5} (1+e)(3e-1) \varepsilon_s g_0 \right] \quad (2.27)$$

A viscosidade cisalhante cinética-colisional está intrinsecamente relacionada à tensão cisalhante da fase particulada quando em uma região diluída do escoamento. Ela contabiliza a contribuição da resistência ao movimento causado por uma tensão cisalhante sendo, também, dependente do diâmetro médio da partícula. Como dito anteriormente, para o caso de gases monoatômicos a viscosidade *bulk* cinética-colisional pode ser negligenciada tomando um valor nulo. Contudo, para a descrição da fase particulada através de um modelo que represente um “fluido granular”, tal parâmetro não pode ser negligenciado sendo este proporcional ao movimento randômico dos grãos, como exposto na Equação 2.28 (LUN et al., 1984)

$$\mu_{bulk}^{K/C} = \frac{4}{5} \varepsilon_s^2 \rho_s d_p g_0 (1+e) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} \quad (2.28)$$

Desta forma, após a apresentação de todas as grandezas necessárias à modelagem dos tensores friccional e cinético-colisional, é possível um maior entendimento do modelo Euler-Euler utilizado no presente trabalho. Os tópicos a seguir se referem aos fundamentos relativos à modelagem da turbulência, seguidos da apresentação dos métodos de discretização das equações diferenciais parciais, bem como os conceitos necessários sobre a confecção de malhas computacionais.

2.2 MODELAGEM DA TURBULÊNCIA

No que diz respeito à definição da turbulência, trata-se de um fenômeno convectivo, transiente, não linear e tridimensional em que suas características são funções não somente do estado do fluido, mas, do escoamento (HODAPP, 2009). Escoamentos turbulentos são caracterizados pela presença de flutuações instantâneas e irregulares em grandezas representativas do movimento do fluido, como a velocidade e a temperatura. Tais flutuações determinam o estado turbulento de um escoamento e contribuem de maneira significativa no transporte de massa, energia e *momentum* (DE SOUZA et al., 2011).

Diversos modelos foram publicados a partir do início da década de 1970, tornando o desafio da descrição da turbulência em escoamentos monofásicos uma tarefa acessível em grande parte dos casos (LAUNDER e SPALDING, 1972; YAKHOT e ORSZAG, 1986; MCCOMB, 1990; GARDE, 1994; SHIH et al., 1995; FERZIGER e PERIC, 2002). Entretanto, a modelagem da turbulência em escoamentos multifásicos é muito mais complexa, uma vez que as fases não se misturam uniformemente e a interação entre elas pode ocasionar efeitos profundos nas propriedades do escoamento (MARTINS, 2015).

As equações de conservação são capazes de descrever o escoamento tanto no regime laminar quanto no turbulento. O grande desafio é o fato de que ao passo que é aumentada a proporção entre as forças inerciais e viscosas atuantes no escoamento, aumenta-se o número de Reynolds tornando mais amplo o seu espectro de energia. Forma-se, então, estruturas viscosas cada vez menores, o que inviabiliza o cálculo direto de todas as escalas espaciais e temporais, mesmo via métodos numéricos, exigindo um refinamento demasiado às malhas computacionais utilizadas (FERREIRA, 2006).

Desta forma, estratégias foram criadas com o objetivo de possibilitar a resolução numérica de escoamentos turbulentos. A Figura 2.1 apresenta uma relação entre as três abordagens mais populares, criadas de acordo com a proporção de modelagem necessária e o custo computacional requerido.

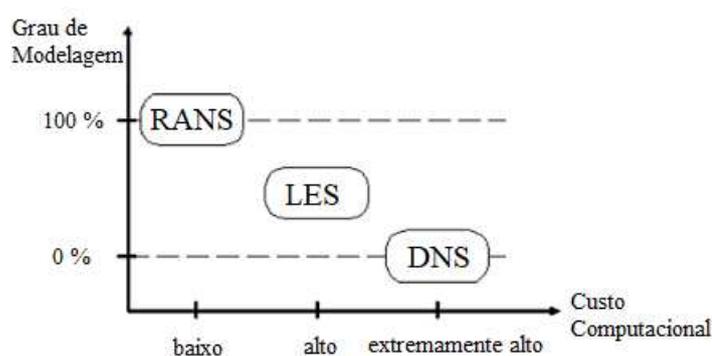


Figura 2.1 - Abordagens na modelagem de escoamentos turbulentos (adaptado de Hodapp, 2009)

No nível inferior da figura supracitada, encontra-se a abordagem DNS (*Direct Numerical Simulation*), a qual faz uso da capacidade das equações de conservação para descrever o escoamento turbulento, aliada ao intenso refino da malha computacional utilizada. Tal abordagem é a que apresenta uma base conceitual mais simples em que não se necessita

de nenhuma equação adicional para a descrição do escoamento turbulento. Embora haja a inviabilidade da aplicação desta abordagem em situações práticas na indústria devido à dimensão dos equipamentos lá utilizados, ela se torna uma ferramenta útil em pesquisas fundamentais sobre a turbulência, gerando informações confiáveis que podem, então, ser utilizadas no desenvolvimento de modelos (FERZIGER, 1996).

No nível intermediário da Figura 2.1, encontra-se o tipo de abordagem constituída da modelagem de uma parte do espectro de energia referente às pequenas escalas e o cálculo direto das grandes escalas turbulentas através das equações de conservação fazendo com que a abordagem LES (*Large Eddy Simulation*) apresente custo computacional significativamente reduzido, quando comparado com a abordagem DNS, mas necessita de uma malha refinada, principalmente, em situações onde há paredes limitando o escoamento (HODAPP, 2009).

Por fim, no topo do esquema exposto na Figura 2.1, apresenta-se a abordagem RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes*), cuja principal característica está na modelagem de todo o espectro de energia associado. Este tipo de abordagem propõe uma modificação das equações de Navier-Stokes, representando suas variáveis como sendo a soma de um termo médio e sua flutuação, originando os termos chamados “*tensores de Reynolds*” que precisam ser calculados para o fechamento do problema. Os dois grupos de modelos mais utilizados na abordagem RANS são os de Tensões de Reynolds (*Reynolds Stress*) e os de Viscosidade Turbulenta (*Eddy Viscosity*). A seguir, encontra-se o detalhamento destes dois grupos pertencentes a modelagem RANS, já que esta abordagem será utilizada nesta Dissertação.

2.2.1 MODELOS PARA O TENSOR DE REYNOLDS

Adequados para a descrição de escoamentos complexos, os modelos para o tensor de Reynolds utilizam equações de transporte, resolvidas para cada uma das componentes do tensor de Reynolds, para representar as taxas de dissipação de energia cinética turbulenta. Os modelos para o tensor de Reynolds podem ser subdividido em dois grupos, aqueles baseados em equações ε (dissipação turbulenta) ou em equações ω (frequência de turbulência).

Exemplos de modelos baseados em equações ε são o modelo *LRR* e o *SSG* em que este considera a relação entre pressão e tensão quadrática enquanto aquele a considera linear. Já, exemplos de modelos baseados em equações ω são o “*Tensor de Reynolds Omega*” e o “*Tensor de Reynolds Baseline*” em que a grande vantagem deste grupo é o tratamento da turbulência próxima as paredes com a mudança automática da função de parede para baixos números de Reynolds (HODAPP, 2009).

2.2.2 MODELOS DE VISCOSIDADE TURBULENTA

Os modelos de viscosidade turbulenta consideram a influência da formação e dissipação de turbilhões no escoamento em sua viscosidade efetiva. É o grupo de modelos mais utilizados em CFD, principalmente devido ao custo-benefício inerente à sua aplicação, que fornece bons resultados com custos computacionais relativamente baixos. É possível classificar, ainda, os modelos em três subgrupos:

- Modelos de zero equação – Caracterizado pela não adição de novas equações de transporte, este tipo de modelo é o mais simples dentre os subgrupos em que a viscosidade turbulenta é obtida por meio de relações algébricas empíricas ou semi-empíricas, que a relacionam com a velocidade média do escoamento e uma escala de comprimento característico (HODAPP, 2009);
- Modelos de uma equação – Este tipo é caracterizado pela adição de uma nova equação de transporte cuja variável é a energia cinética turbulenta (k), sendo esta levada em consideração no cálculo da viscosidade efetiva do escoamento;
- Modelos de duas equações – Por fim, há a classificação dos modelos que adicionam duas equações de transporte ao sistema para as variáveis energia cinética turbulenta (k) e dissipação turbulenta (ε), no caso do modelo k - ε , ou para as variáveis energia cinética turbulenta (k) e taxa de dissipação específica (ω), no caso do modelo k - ω .

Os modelos de duas equações têm vasta aplicação, até mesmo, na descrição de escoamentos gás-partícula em que se destaca a utilização dos modelos k - ε (BALZER et al., 1995; ROSA, 2002; SHENG et al., 2004; FILKOSKI et al., 2006; WEI et al., 2011; LIU et al., 2013), que oferecem bons resultados exigindo um custo computacional relativamente baixo. Tal vantagem serve de motivação para a sua utilização em que, a seguir, encontra-se a descrição dos três modelos k - ε existentes, inclusive aquele denominado *Realizable k- ε* , o qual será utilizado nesta Dissertação.

2.2.2.1 Modelo *standard k- ε*

Proposto por Launder e Spalding (1972), o modelo k - ε padrão contabiliza a conservação da energia cinética turbulenta (k) e a sua dissipação (ε) na viscosidade turbulenta do escoamento por meio da adição de duas equações de transporte no sistema de equações

resolvido durante a simulação. Ele se mostra um método robusto e que apresenta bons resultados para uma grande gama de escoamentos turbulentos, inclusive apresentando custo computacional relativamente baixo, o que garante sua popularidade em simulações realizadas na indústria (ANSYS, 2016).

Desta forma, as equações de conservação originadas deste modelo encontram-se nas Equações 2.29 e 2.30, como descrito em Hartge et al. (2009).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m k) + \nabla \cdot (\rho_m v_m k) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_{t,m}}{\sigma_k} \nabla k \right) + G_{k,m} - \rho_m \varepsilon \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \varepsilon) + \nabla \cdot (\rho_m v_m \varepsilon) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_{t,m}}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right) + \frac{\varepsilon}{k} (C_{1\varepsilon} G_{k,m} - C_{2\varepsilon} \rho_m \varepsilon) \quad (2.30)$$

sendo,

$\mu_{t,m}$ = viscosidade turbulenta da mistura, dada pela Equação 2.31;

ρ_m = concentração mássica da mistura, dada pela Equação 2.32;

v_m = velocidade da mistura, dada pela Equação 2.33;

$G_{k,m}$ = taxa de produção de energia cinética turbulenta, dada pela Equação 2.34;

σ_k , σ_ε , $C_{1\varepsilon}$ e $C_{2\varepsilon}$ são os números de Prandtl turbulentos e as constantes empíricas com valores de 1,0; 1,0; 1,44 e 1,92; respectivamente (HARTGE et al., 2009).

$$\mu_{t,m} = \rho_m C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.31)$$

$$\rho_m = \varepsilon_g \rho_g + \varepsilon_s \rho_s \quad (2.32)$$

$$v_m = \frac{\varepsilon_g \rho_g v_g + \varepsilon_s \rho_s v_s}{\varepsilon_g \rho_g + \varepsilon_s \rho_s} \quad (2.33)$$

$$G_{k,m} = \mu_{t,m} \left[\nabla v_m + \nabla (v_m)^T \right] : \nabla v_m \quad (2.34)$$

A constante C_μ é empírica e vale 0,09. Os valores das constantes empíricas encontradas nos modelos para tensores de Reynolds, incluindo os da família k - ε , foram determinados por meio de experimentos em escoamentos fundamentalmente turbulentos, como aqueles presentes em jatos ou fluxos isotrópicos através de peneiras e são amplamente aceitos em diversos escoamentos abordados na literatura (ANSYS, 2016).

2.2.2.2 Modelo RNG k - ε

O modelo RNG k - ε é gerado a partir da aplicação da teoria de renormalização de grupo “*Renormalization Group Theory*” (RNG) nas equações instantâneas de Navier-Stokes. O resultado é um modelo com equações de transporte que apresentam termos adicionais e constantes diferentes daquelas observadas no modelo k - ε padrão (ORSZAG et al., 1993). Alguns melhoramentos são observados em relação ao modelo k - ε padrão como a criação de uma expressão analítica para o cálculo dos números de Prandtl turbulentos e a utilização de uma relação para a obtenção da viscosidade turbulenta a baixos números de Reynolds. Tais características implicam em uma melhora significativa na precisão do modelo k - ε padrão em uma série de escoamentos turbulentos (ANSYS, 2016).

Isto posto, as equações de transporte do modelo RNG k - ε encontram-se nas Equações 2.35 e 2.36, como descrito em Hartge et al. (2009).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m k) + \nabla \cdot (\rho_m v_m k) = \nabla \cdot (\alpha_k \mu_{t,m} \nabla k) + G_{k,m} - \rho_m \varepsilon \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \varepsilon) + \nabla \cdot (\rho_m v_m \varepsilon) = \nabla \cdot (\alpha_\varepsilon \mu_{t,m} \nabla \varepsilon) + \frac{\varepsilon}{k} (C_{1\varepsilon} G_{k,m} - C_{2\varepsilon} \rho_m \varepsilon) - R_\varepsilon \quad (2.36)$$

em que, α_k e α_ε são os inversos dos números de Prandtl efetivos para k e ε , respectivamente. A contribuição turbilhonar na viscosidade turbulenta é obtida por meio da Equação 2.37 que foi desenvolvida através da teoria RNG.

$$d \left(\frac{\rho_m k}{\sqrt{\varepsilon \mu}} \right) = 1,72 \frac{\mu_p}{\sqrt{\mu_p^3 - 1 + C_v}} d \mu_p \quad (2.37)$$

sendo,

μ = viscosidade molecular;

μ_p = proporção entre as viscosidades turbulenta e molecular, dada pela Equação

2.38;

C_v = constante, cujo valor padrão é aproximado para 100 (ANSYS, 2016);

$$\mu_p = \frac{\mu_{t,m}}{\mu} \quad (2.38)$$

A Equação 2.37 se restringe à Equação 2.31 para altos valores de Reynolds, possibilitando ao modelo melhor descrição do escoamento turbulento à baixos números de Reynolds. A obtenção dos números de Prandtl turbulentos é realizada por meio de uma expressão analítica desenvolvida através da teoria RNG. Tal expressão encontra-se na Equação 2.39, sendo que, para altos números de Reynolds, $\left(\frac{\mu}{\mu_{t,m}} \ll 1\right)$; $\alpha_k = \alpha_\varepsilon$ e $\alpha_0 = 1,0$ (HARTGE et al., 2009).

$$\left| \frac{\alpha_k - 1,3929}{\alpha_0 - 1,3929} \right|^{0,6321} \left| \frac{\alpha_k + 2,3929}{\alpha_0 + 2,3929} \right|^{0,3679} = \frac{\mu}{\mu_{t,m}} \quad (2.39)$$

Outra vantagem do modelo RNG é a presença do termo R_ε na equação de transporte da dissipação da energia cinética turbulenta (ε) que pode ser obtido por meio da relação exposta na Equação 2.40 (ANSYS, 2016). Tal termo emprega ao modelo maior sensibilidade na resposta dos efeitos de tensões rápidas em escoamentos plenamente turbulentos.

$$R_\varepsilon = \frac{C_\mu \left(1 - \frac{\eta}{\eta_0}\right) \varepsilon^3}{1 + \beta \eta^3} \frac{1}{k} \quad (2.40)$$

em que,

$$\eta = S \frac{k}{\varepsilon} \quad (2.41)$$

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (2.42)$$

e S_{ij} é o tensor taxa de deformação média, dado pela Equação 2.43;

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_{m,j}}{\partial x_i} - \frac{\partial v_{m,i}}{\partial x_j} \right) \quad (2.43)$$

As constantes $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ e C_μ tiveram seus valores desenvolvidos analiticamente pela teoria RNG e valem 1,42; 1,68 e 0,0845; respectivamente. Nota-se que o valor empírico da constante C_μ utilizado no modelo standard $k-\varepsilon$ é muito próximo do analítico e apresenta o valor de 0,09.

2.2.2.3 Modelo realizable $k-\varepsilon$

Desenvolvido por Shih et al. (1995), o modelo *realizable* $k-\varepsilon$ se difere do modelo $k-\varepsilon$ padrão tanto na formulação da viscosidade turbulenta que, diferentemente do modelo RNG $k-\varepsilon$, apresenta uma expressão variável para o parâmetro C_μ , quanto na equação de transporte da dissipação de energia cinética turbulenta (ε), derivada da equação média quadrática para a flutuação da velocidade (SHIH et al., 1995). A descrição de escoamentos intensamente turbulentos com a presença de variações bruscas em suas condições de contorno tem apresentado melhores resultados quando realizada pelos modelos $k-\varepsilon$ realizable e RNG em relação ao modelo $k-\varepsilon$ padrão (ANSYS, 2016) sendo que, nos casos de estudo realizados por Shih et al. (1995), o modelo *realizable* $k-\varepsilon$ se mostrou superior a todos aqueles da família $k-\varepsilon$, principalmente devido às novas formulações, o que motivou a sua utilização deste modelo nesta Dissertação.

Desta forma, as equações de transporte para o modelo *realizable* $k-\varepsilon$ encontram-se nas Equações 2.44 e 2.45.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m k) + \nabla \cdot (\rho_m v_m k) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_{t,m}}{\sigma_k} \nabla k \right) + G_{k,m} - \rho_m \varepsilon \quad (2.44)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \varepsilon) + \nabla \cdot (\rho_m v_m \varepsilon) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_{t,m}}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right) + \rho_m C_1 S \varepsilon - \rho_m C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{v \varepsilon}} \quad (2.45)$$

Nota-se que a equação de transporte da energia cinética turbulenta (k) para o modelo *realizable* (Equação 2.44) é similar àquela que constitui o modelo padrão (Equação 2.29). Já a equação para ε apresenta termos diferentes em seu lado direito que levam em consideração não só a viscosidade turbulenta mas também, a cinemática (v).

A viscosidade turbulenta no modelo “realizable” segue a mesma equação que o modelo padrão, Equação 2.31, exceto pelo fato de que o termo C_μ é descrito pela relação exposta na Equação 2.46 (HARTGE et al., 2009).

$$C_\mu = \left(A_0 + A_s \frac{kU^*}{\varepsilon} \right)^{-1} \quad (2.46)$$

sendo,

$$A_0 = 4,04, \quad A_s = \sqrt{6} \cos(\phi)$$

$$\phi = \frac{1}{3} \cos^{-1}(\sqrt{6}W), \quad W = \frac{S_{ij}S_{jk}S_{ki}}{(\sqrt{S_{ij}S_{jk}})^3} \quad (2.47)$$

$$U^* = \sqrt{S_{ij}S_{ij} + \Omega_{ij}\Omega_{ij}} \quad (2.48)$$

$$\begin{cases} \Omega_{ij} = \bar{\Omega}_{ij} - 2\varepsilon_{ijk}\omega_k \\ \bar{\Omega}_{ij} = \overline{\Omega_{ij}} - \varepsilon_{ijk}\omega_k \end{cases} \quad (2.49)$$

$$\bar{\Omega}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.50)$$

em que,

Ω_{ij} = é o tensor taxa de rotação média, dado pela Equação 2.50;

$\bar{\Omega}_{ij}$ = é a média do tensor taxa de rotação média;

ω_k = é a velocidade angular;

ε_{ijk} = símbolo de permutação;

e a constante C_1 segue:

$$C_1 = \max \left[0,43; \frac{\eta}{\eta + 5} \right] \quad (2.51)$$

em que,

$$\eta = S \frac{k}{\varepsilon} \quad (2.52)$$

sendo, $G_{k,m}$ a taxa de produção de energia cinética turbulenta, dada pela Equação 2.34, sendo σ_k e σ_ε os números de Prandtl turbulentos com valores, nesta Dissertação, de 1,0 e 1,2 (HARTGE et al., 2009), respectivamente. A constante C_2 é empírica e, para este trabalho, teve o valor 1,9 como no trabalho de Hartge et al. (2009).

2.3 MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

A modelagem de sistemas complexos gera a necessidade da resolução de sistemas de equações diferenciais parciais, que não possuem solução analítica sem que haja uma série de simplificações a serem feitas no modelo. Desta forma, a alternativa é a discretização das equações aproximando o termo diferencial, referente a um domínio contínuo, por um termo algébrico em que se aceita a obtenção da solução do sistema para um número discreto de pontos com determinado erro em que, quanto maior for o número de pontos utilizados, mais perto da solução exata estará nossa solução aproximada (MALISKA, 2004). Assim, daquele sistema de equações diferenciais parciais, obtém-se um sistema de equações algébricas lineares passível de resolução numérica.

Existem vários métodos de discretização, os mais utilizados são:

- Diferenças finitas;
- Volumes finitos;
- Elementos finitos;
- Métodos híbridos (volumes finitos/elementos finitos).

Segundo Duarte (2006), a maioria dos métodos numéricos podem ser obtidos do método de resíduos ponderados, como é o caso de diferenças finitas, volumes finitos, elementos finitos etc. Porém, essa minimização dos resíduos, para o caso dos volumes finitos, equivale aos princípios de conservação sobre cada volume de controle empregando ao método um caráter fisicamente consistente. Desta forma, o que se destaca no método dos volumes finitos é o fato de a discretização das equações de transporte ser realizada com base em

balanço das grandezas em um volume de controle garantindo, desse modo, um caráter físico à metodologia.

2.3.1 MALHAS COMPUTACIONAIS

Existem diversos tipos de malhas que podem ser utilizadas em problemas como o abordado nesta Dissertação. As malhas são classificadas a depender da forma geométrica de seus volumes ou células (tetraedros, hexaedros, etc) e a organização com que estas células são dispostas por toda a extensão da geometria do problema podendo ser classificadas como malhas estruturadas, não estruturadas ou híbridas.

- **MALHAS ESTRUTURADAS**

Este tipo de malha recebe esta classificação devido à presença da disposição padronizada visível de seus elementos. É comum a utilização de células em um formato quadrilátero, quando em 2D e hexaédrico em 3D.

Malhas estruturadas apresentam vantagem em relação a outros métodos por propiciar ao usuário alto grau de controle em regiões de refinamento. A desvantagem intrínseca à utilização deste tipo de malha é a dificuldade de sua implementação em problemas com geometrias extremamente complexas como distribuidores e carenagens de automóveis.

- **MALHAS NÃO ESTRUTURADAS**

Malhas não estruturadas possuem distribuição não padronizada de suas células, o que garante sua classificação como não uniforme. É comum a construção deste tipo de malha com elementos no formato de triângulos, para malhas em 2D, e tetraedros, em 3D. A construção de malhas não estruturadas oferece vantagens na simulação de sistemas complexos que possuam mudanças bruscas em suas condições geométricas fazendo com que uma distribuição não uniforme se ajuste de maneira mais eficaz.

- **MALHAS HÍBRIDAS**

A união das duas metodologias de construção de malhas computacionais traz as vantagens dos dois métodos. A construção de malhas híbridas, apesar da grande exigência de prática e experiência do usuário (DUARTE, 2006), se ajustam de forma eficaz a problemas de caráter complexo e propiciam ótimo controle no refinamento em regiões específicas do problema. A Figura 2.2 traz exemplos das três classificações de malhas computacionais.

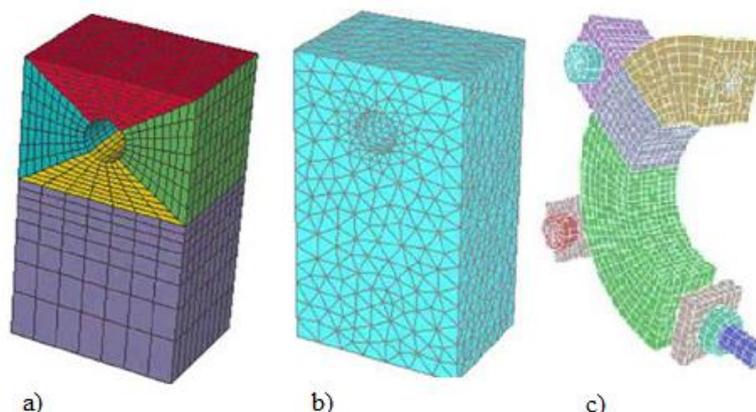


Figura 2.2 – a) Malha estruturada constituída de células hexaédricas; b) malha não estruturada construída com elementos tetraédricos; c) Malha híbrida (DUARTE, 2006).

2.4 FLUIDIZAÇÃO

Empregada em processos que necessitem de alto grau de contato fluido-partícula, a fluidização teve seu início no processo Winkler, de gaseificação de carvão, no início da década de 1930 apesar de que, sua difusão em outros processos tenha ganhado força apenas uma década adiante após seu emprego no processo catalítico de craqueamento do petróleo (YATES, 1983). Sua aplicação é vasta em diversos processos industriais como secagem, granulação e recobrimento de partículas (CREMASCO, 2014).

Segundo Kunii e Levenspiel (1991), a fluidização é a operação em que um leito de partículas sólidas é transformado em um estado que se assemelha a um fluido por meio da suspensão das partículas em um gás ou um líquido. As características inerentes as movimentações da fase particulada definem os regimes fluidodinâmicos presentes no interior do leito fluidizado e estão diretamente relacionadas às propriedades físicas, tanto das partículas quanto do fluido, e às condições operacionais do sistema. Em baixas vazões, o fluido apenas percola os espaços vazios localizados entre as partículas indicando a presença de um regime de leito fixo ao sistema. À medida que a vazão do fluido é acrescida, a matriz particulada se expande até o atingimento do ponto de mínima fluidização, onde o peso das partículas é contrabalanceado pela força friccional ocasionada pelo fluido.

Quando o fluido utilizado nesta operação é um líquido, é comum que, após a mínima fluidização, a fluidodinâmica do sistema se apresente homogênea e com a ausência de grandes instabilidades ocasionando uma suave expansão da matriz particulada. No entanto, a

fluidização gás-partícula apresenta uma fluidodinâmica heterogênea e muito mais complexa onde surgem instabilidades, bolhas e caminhos preferenciais exigindo um aprofundamento no estudo fundamental destes fenômenos que influem diretamente nas taxas de transferência de massa, energia e *momentum* no interior deste equipamento.

Assim, dependendo das características físicas das partículas e do diâmetro do leito, diversos regimes fluidodinâmicos podem ser observados no leito fluidizado ao passo que é acrescida a velocidade superficial do gás através do leito passando pela mínima fluidização, regime borbulhante, regime pistonado, fluidização turbulenta e, finalmente, o transporte pneumático das partículas como observado na Figura 2.3 (KUNII e LEVENSPIEL, 1991).

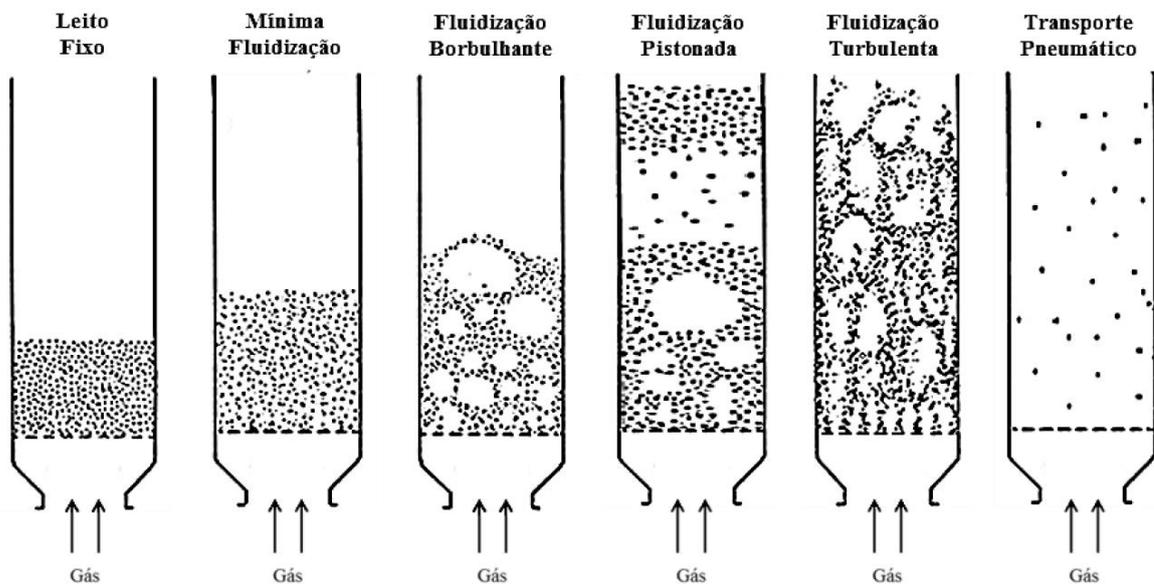


Figura 2.3 - Regimes de fluidização gás-partícula (adaptado de Kunii e Levenspiel, 1991).

A tendência é que as bolhas formadas no regime de fluidização borbulhante aumentem de tamanho com o aumento da velocidade superficial do gás até que grandes porções de partículas sejam suspensas tomando um movimento mais ordenado e oscilatório, presente na fluidização pistonada. Quando a velocidade do gás se torna maior que a velocidade terminal da partícula, o leito entra, então, em um regime de fluidização turbulenta em que as oscilações diminuem ao longo do leito tornando-se mais estáveis e, até mesmo, desaparecendo (BI et al., 2000). O regime após a fluidização turbulenta é o transporte pneumático em que as partículas começam a ser transportadas através do gás caracterizando um leito diluído.

Devido à dependência que a formação dos regimes apresentados na Figura 2.3 tem das características físicas das partículas utilizadas em leitos fluidizados, Geldart (1973) categorizou diferentes tipos de materiais particulados em classificações de acordo com seu diâmetro e massa específica. A Figura 2.4 apresenta as diferentes categorias de Geldart (1973).

As partículas da classificação A apresentam expansão homogênea do leito após a condição de mínima fluidização até o início da fluidização borbulhante. O exemplo mais comum deste tipo de partícula é o catalizador FCC (*fluidized catalytic cracking*) utilizado no processo de craqueamento catalítico do petróleo. Partículas da classificação B de Geldart apresentam a formação de bolhas já na mínima fluidização, uma expansão moderada do leito e mediana mistura gasosa (PRIETO, 2014). O exemplo mais comum deste tipo de partícula é a areia. As partículas da classificação C são sólidos finos e altamente coesivos cujas características dificultam a fluidização. Após a mínima fluidização, surgem caminhos preferenciais em que o leito apresenta altas taxas de expansão e uma migração rápida para a fluidização pistonada. Um exemplo conhecido deste tipo de partícula é a farinha de trigo.

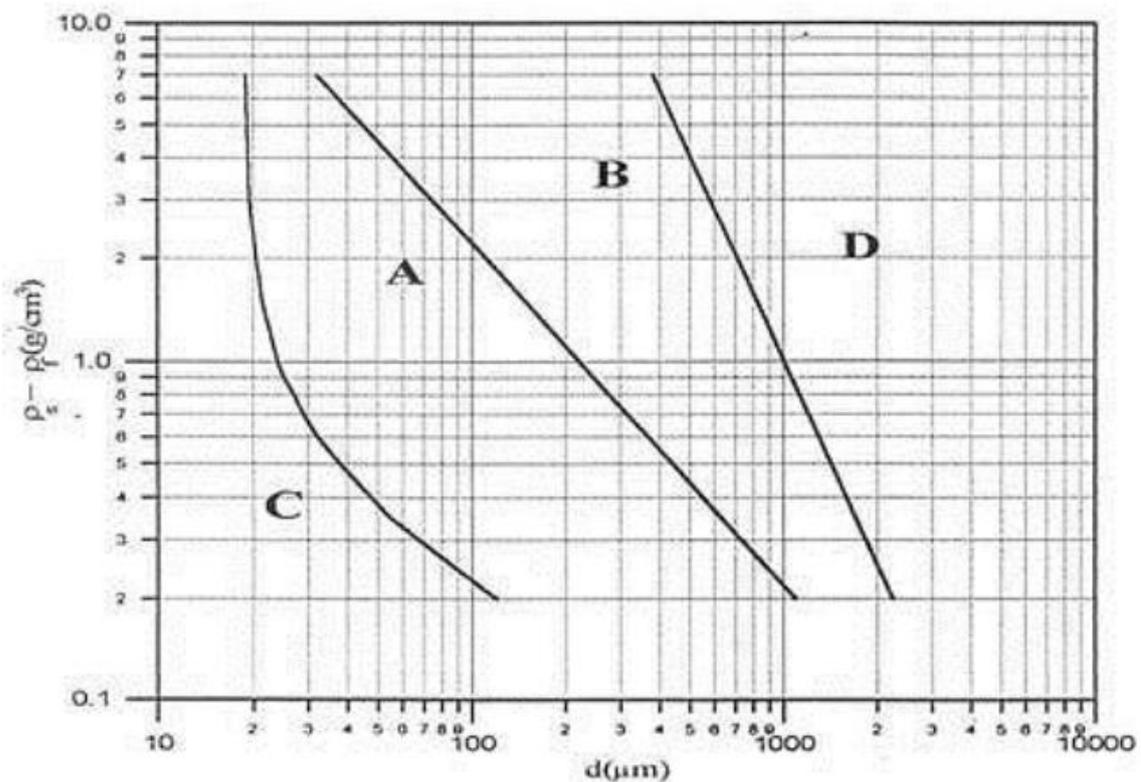


Figura 2.4 - Classificações de Geldart (adaptado de Geldart, 1973).

Por fim, as partículas da classificação D são sólidos com diâmetros e densidades maiores apresentando baixas expansões e recirculação de sólidos no leito, sendo mais indicado a utilização de um leito de jorro para seu tratamento. Grãos como soja, feijões, café e arroz são exemplos de partículas da classificação D (GELDART, 1973; FAN e ZHU, 1998).

A ampla utilização de leitos fluidizados na indústria incentiva a busca pelo melhoramento deste equipamento cuja eficiência está intrinsecamente atrelada ao contato fluido-partícula. Desta forma, é visível a importância do estudo das características dinâmicas resultantes de cada regime de fluidização, uma vez que elas podem influenciar de maneira significativa as taxas de transferência de massa, energia e *momentum* no interior do equipamento, além de se mostrarem de grande importância para a escolha das condições de operação do sistema propiciando maior estabilidade e controle (VAN WACHEM et al., 1999).

Desta forma, encontram-se, nos tópicos a seguir, os fundamentos relativos à teoria dos sistemas dinâmicos, bem como, a apresentação das técnicas de análise de sinais utilizadas nesta Dissertação.

2.5 TEORIA DOS SISTEMAS DINÂMICOS

Fundamentada nos estudos de Poincaré acerca da topologia das soluções de modelos originados da Mecânica Celeste (FERRARA e PRADO, 1994), a Teoria de Sistemas Dinâmicos busca a compreensão do comportamento de um sistema evoluindo no tempo através da utilização de ferramentas matemáticas que possibilitam a sua análise qualitativa e, em alguns casos, quantitativa.

Pode-se realizar a caracterização de sistemas dinâmicos através de diversos princípios, entre eles, quanto à sua natureza (linear ou não linear), quanto à qualidade de seus parâmetros (parâmetros fixos ou temporais) e quanto à sua memória (instantâneo ou dinâmico). É importante, no estudo de sistemas imprevisíveis a longo prazo, que haja a classificação quanto à sua natureza, uma vez que a alta sensibilidade às condições iniciais e a imprevisibilidade do sistema sejam frutos da natureza não linear do fenômeno analisado.

Isto posto, define-se um modelo linear como aquele em que são válidos os princípios da aditividade e proporcionalidade, pressupondo que um dado efeito pode ser avaliado através da superposição de efeitos decorrentes de várias causas (PRIETO, 2014). Tais princípios indicam que pequenas causas estão associadas a pequenos efeitos; o que não ocorre com sistemas não lineares. Modelos representativos de sistemas não lineares não

enquadram seu comportamento de acordo com os princípios supracitados, apresentando dinâmica irregular, aperiódica e, em muitos casos, imprevisível.

Desta forma, com o intuito de abranger problemas complexos, que apresentam características não lineares cujo comportamento é aperiódico e sensível às condições iniciais, incorporados à Teoria de Sistemas Dinâmicos, surge a Teoria do Caos, que lança mão de técnicas computacionais, em sua maioria fundadas em abordagens geométricas e probabilísticas, para caracterizar os chamados Sistemas Dinâmicos Caóticos Determinísticos. No entanto, a identificação de processos regulares, ou seja, aqueles de natureza distinta de sistemas caóticos e estocásticos, pode ser realizada através do uso de métodos tradicionais como a análise espectral, feita a partir da obtenção do espectro de potências de uma série temporal representativa do comportamento dinâmico de um sistema (FERRARA e PRADO, 1994). Logo, apresenta-se a fundamentação deste tipo de análise tradicional ao estudo de sinais para que se possa vislumbrar adiante a necessidade da elaboração de uma teoria alternativa que permite a caracterização de sistemas caóticos determinísticos via grau de imprevisibilidade do sistema (entropia de Kolmogorov), heterogeneidade da bacia de atração (dimensão de correlação) ou, até mesmo, via taxa de divergência de orbitas inicialmente muito próximas no espaço de fases (maior expoente de Lyapunov).

2.6 ANÁLISE TRADICIONAL DE SINAIS: ANÁLISE ESPECTRAL

O estudo de sistemas dinâmicos via análise espectral vem sendo largamente utilizado nas últimas três décadas (HONG et al., 1990; KAGE et al., 1991; BAI et al., 1999; SASIC et al., 2007; MARTÍN et al., 2011). Esta metodologia faz uso do conceito de que qualquer função $f(t)$ que descreva a evolução temporal de um sistema dinâmico pode ser representada pela superposição de um número (eventualmente infinito) de componentes periódicas sendo que a determinação do peso relativo de cada uma dessas componentes é chamada de análise espectral (FERRARA e PRADO, 1994). Assim, aplica-se a transformada de Fourier para a representação da função $f(t)$ no domínio da frequência obtendo-se, então, seu espectro como exposto na função $f(\omega)$:

$$f(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} f(t) dt \quad (2.53)$$

em que $f(\omega)$ indica o peso relativo com que a frequência ω comparece na composição de $f(t)$ (FERRARA e PRADO, 1994). Para o caso do estudo da dinâmica de um sistema via série temporal, utiliza-se a abordagem discreta e finita para a transformada de Fourier obtendo-se uma função discreta $\{x_k\}$, representativa do espectro de frequências de uma série temporal $\{x_j\} = x(t_j)$, como exposto na Equação 2.54 (FERRARA e PRADO, 1994).

$$x_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N x_j \exp\left[i \frac{2\pi k j}{N}\right], \quad k = 1, \dots, N. \quad (2.54)$$

em que x_j é o valor de cada um dos N pontos da série temporal analisada e i caracteriza um termo imaginário. Através do espectro de frequências da série temporal dado pela Equação 2.54, é possível a obtenção de seu espectro de potências por meio da Equação 2.55.

$$P(\omega) = |x_k|^2 \quad (2.55)$$

O espectro de potências torna-se uma ferramenta importante no estudo da dinâmica de sistemas uma vez que sinais que apresentem diferenças em suas evoluções temporais dispõem de diferentes espectros de potência. Para o caso de uma função $f(t)$ periódica, seu espectro de potência será bem definido com um pico na frequência correspondente a seu período. Entretanto, esta técnica mostra-se ineficiente na caracterização de sistemas aperiódicos visto que este tipo de sistema apresenta uma variedade infinita de períodos presentes em sua dinâmica, acarretando um espectro de potências contínuo e a ausência de uma frequência dominante característica em seu espectro. Portanto, encontra-se, na Figura 2.5, a série temporal de queda de pressão entre dois pontos presentes em um leito fluidizado operando com areia ($d_p = 725 \mu\text{m}$ e $\rho_p = 2,48 \text{ g/cm}^3$) em regime pistonado em uma coluna de 1,5 m de altura 11,12 cm de diâmetro (FELIPE e ROCHA, 2004). Observa-se claramente um caráter periódico na série temporal exposta no domínio do tempo em que seu espectro de potências revela uma frequência claramente dominante que é um aspecto primordial para o êxito da análise espectral.

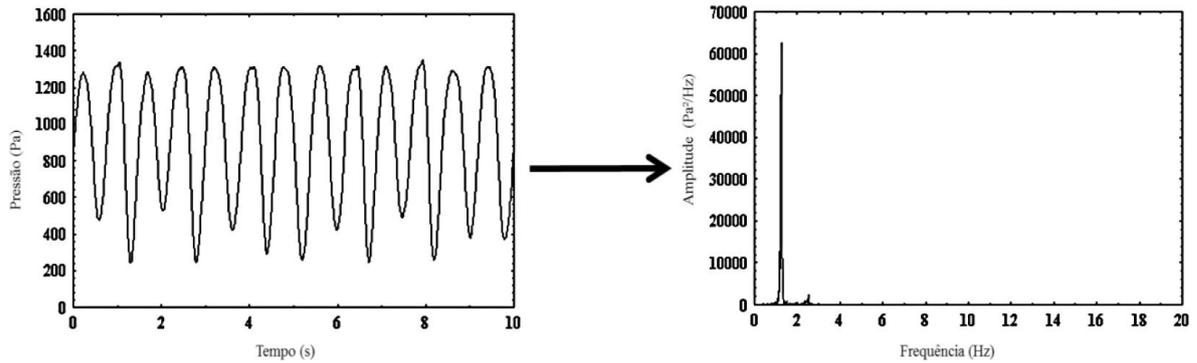


Figura 2.5 - Série temporal de queda de pressão em um leito fluidizado em regime pistonado e seu respectivo espectro de potências (adaptado de Felipe e Rocha, 2004).

Entretanto, nem sempre é possível a obtenção de uma frequência dominante no espectro de potências de um sistema natural. Na Figura 2.6 encontra-se o espectro de potências de uma série temporal de queda de pressão coletada de um leito fluidizado com uma coluna de 1,5 m de altura e 11,12 cm de diâmetro operando com areia ($d_p = 470 \mu\text{m}$ e $\rho_p = 2,48 \text{ g/cm}^3$) em um regime de borbulhamento, onde fica evidente a ausência de uma frequência dominante em seu espectro (FELIPE e ROCHA, 2004).

Nota-se, também, um espectro de potências contínuo que sinaliza a presença de aperiodicidade no sistema dinâmico analisado, evidenciando outra limitação da metodologia de análise espectral que não possibilita a quantificação do grau de aleatoriedade do fenômeno analisado.

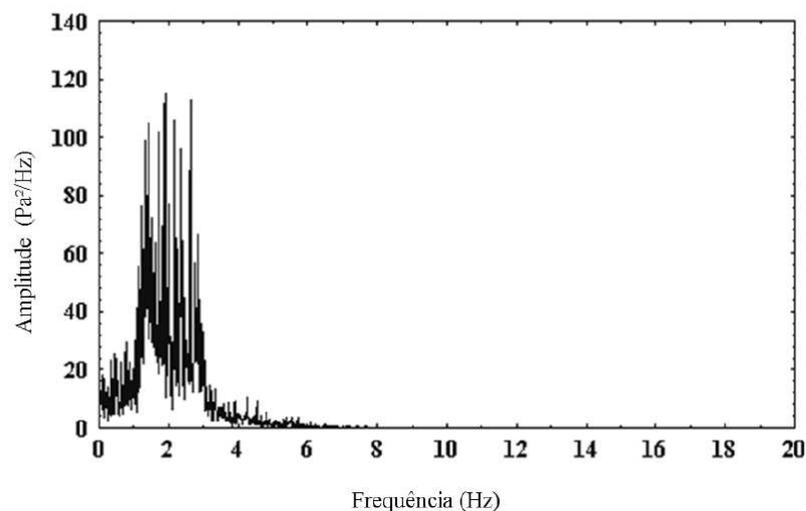


Figura 2.6 - Espectro de potências da série temporal de queda de pressão em um leito fluidizado em regime de borbulhamento (adaptado de Felipe e Rocha, 2004).

Desta forma, surge a teoria do caos como uma alternativa à análise espectral na caracterização de sistemas aperiódicos que imprimem um espectro de potências contínuo e não apresentam uma frequência dominante em sua dinâmica. Assim, os tópicos seguintes são dedicados a apresentar a técnica de análise do caos determinístico fornecendo uma perspectiva da aplicação desta técnica vinculada ao objetivo desta Dissertação.

2.7 INTRODUÇÃO À TEORIA DO CAOS

Com seu entendimento associado à desordem na maioria dos registros históricos, o termo caos faz parte do pensamento do ser humano desde a época da civilização grega. No entanto, o pioneiro a se valer deste termo ao se referir à sistemas dinâmicos foi o físico teórico James York, em 1975, que o utilizou para descrever os fenômenos aleatórios cuja dinâmica não linear pode ser explicada por leis deterministas criando assim a chamada “Teoria do Caos” (PRIETO, 2014).

Historicamente, o senso comum inclina-se a atribuir o nome caos ao comportamento estocástico de sistemas determinísticos (STEWART, 1991). Entretanto, ao contrário dos fenômenos estocásticos, que possuem respostas aleatórias como fruto de entradas aleatórias, os fenômenos caóticos determinísticos apresentam comportamento imprevisível como consequência de seu alto grau de não linearidade, mas são regidos por leis deterministas presentes na natureza que podem ser modeladas através de abordagens fenomenológicas.

Como na visão de Poincaré, em fins do século XIX, que se contrasta ao determinismo rígido de Laplace, o grande desafio no estudo de sistemas caóticos determinísticos é o conhecimento preciso das condições iniciais que perpetram o comportamento do sistema gerando um alto grau de imprevisibilidade. Desta forma, o caos determinístico não descarta de forma absoluta a visão determinista, cujo paradigma se faz sob a relação rígida de causa e efeito, mas reconhece que, na maioria dos casos, é improvável que se tenha previsão na solução de modelos representantes de dinâmicas altamente não lineares, cuja sensibilidade às condições iniciais atuam vigorosamente perante as imprecisões intrínsecas à análise científica, causando a imprevisibilidade do comportamento do sistema.

Segundo Devaney (2003), seja W um conjunto. Então, g , tal que $g: W \rightarrow W$, é dita caótica em W se:

- i)* “ g ” possuir dependência sensível às condições iniciais;
- ii)* “ g ” possuir transitividade topológica;

iii) as órbitas periódicas de “ g ” forem densas em W .

A propriedade *i*) implica que se “ g ” possui dependência sensível às condições iniciais, então existe um $\tau > 0$, tal que, para qualquer $x \in W$, em qualquer vizinhança N de x , existe um $y \in N$, sendo $n \geq 0$, tal que $|g^n(x) - g^n(y)| > \tau$; em que n representa a marcação para a n ésima iteração da função “ g ” (DEVANEY, 2003).

A definição de transitividade topológica presente na propriedade *ii*) diz que “ g ” é topologicamente transitiva se para qualquer par de conjuntos abertos $P, H \subset W$ existe $k > 0$, tal que $g^k(P) \cap H \neq \{\}$ (DEVANEY, 2003).

“Seja A um conjunto e B um subconjunto de A . Diz-se que B é denso em A se para qualquer ponto $a \in A$ e para qualquer $\epsilon > 0$ há um ponto $b \in B$ tal que $\|a-b\| < \epsilon$ ” (MONTEIRO, 2011).

Desta forma, é evidente o aparecimento de três características fundamentais de processos caóticos: a imprevisibilidade do sistema, sua indecomponibilidade e uma componente de regularidade.

A imprevisibilidade do sistema está diretamente relacionada à sua propriedade de sensibilidade às condições iniciais; sua indecomponibilidade é gerada pelo fato de o conjunto apresentar transitividade topológica e não poder ser decomposto em dois subconjuntos abertos invariantes sob a ação de g e, a última componente, desta vez de regularidade, surge através da densidade de suas órbitas no conjunto W , mesmo com a apresentação de um comportamento randômico por parte dos pontos periódicos (DEVANEY, 2003).

Embora o surgimento, na década de 1890, das bases do conceito filosófico e ferramental que deram origem ao caos determinístico seja atribuído à Poincaré, a popularidade inerente ao comportamento caótico é mérito do meteorologista estadunidense Edward Norton Lorenz que criou o conceito nomeado efeito borboleta ao se referir à grande sensibilidade às condições iniciais intrínseca à sistemas caóticos.

Lorenz fez uso do modelo, em sua forma simplificada, de Rayleigh-Bernard para a convecção natural com o intuito de entender os mecanismos regentes dos fenômenos atmosféricos. O modelo considera a movimentação de um fluido presente entre duas placas horizontais, em que a placa superior encontra-se à uma temperatura menor frente à inferior. De forma simples, o gradiente de temperatura provoca a ascensão do fluido que, por ação da gravidade, retorna à região inferior. À medida que a diferença das temperaturas entre as placas é intensificada, o mecanismo dominante de transferência de energia térmica transita da condução à convecção propiciando a formação de vórtices, como ilustrado na Figura 2.7, até

que haja o aparecimento de instabilidades caracterizando a presença de turbulência no escoamento em questão e, conseqüentemente, o comportamento caótico.

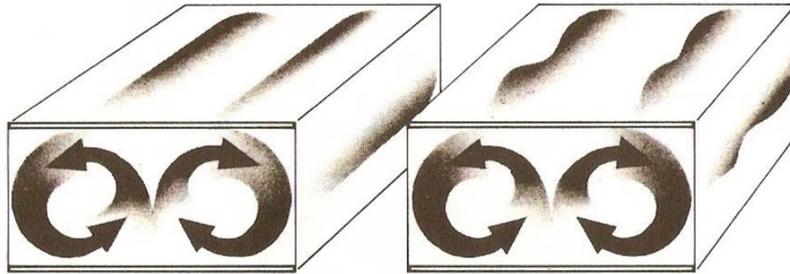


Figura 2.7 - Ilustração dos vórtices formados pela ação do gradiente de temperatura (adaptado de Gleick, 1987)

O referido modelo é proveniente da análise fluidodinâmica do sistema a partir da equação de Navier-Stokes, juntamente à equação da continuidade e conservação da energia para a condução de calor em que, através de algumas simplificações feitas por Saltzman e, posteriormente, por Lorenz, remonta ao seguinte sistema de equações diferenciais (FERRARA e PRADO, 1994):

$$\begin{cases} \dot{x} = -\delta(x - y) \\ \dot{y} = \alpha x - y - xz \\ \dot{z} = xy - \gamma z \end{cases} \quad (2.56)$$

Relaciona-se a evolução temporal das variáveis: $x(t)$, que representa a influência da intensidade da convecção no sistema; $y(t)$, proporcional à diferença de temperatura entre as correntes de fluido ascendente e descendente e $z(t)$, representante do afastamento que o perfil de temperaturas entre as placas do sistema tem em relação a um perfil linear. Para a simulação de Lorenz, os parâmetros δ e α , que representam os números de Prandtl e de Rayleigh relativo, respectivamente, apresentam valores de 10 e 8/3, nesta ordem; sendo $\gamma = 4 / (1 + \epsilon^2)$ em que ϵ é a razão da distância entre as placas e a largura do vórtice gerado pelo mecanismo de convecção.

A dinâmica resultante da solução do modelo mostrou-se intrigante. Mínimas diferenças presentes nas condições iniciais surtiram efeito grandioso em trajetórias temporais altamente discrepantes, o que levou Lorenz a concluir que existem sistemas que apresentam

uma complexidade tamanha que seria impossível a previsão de seu comportamento em um longo período de tempo.

Assim, devido a esta dificuldade na caracterização e estudo de sistemas caóticos determinísticos, dispõe-se de ferramentas matemáticas, denominadas invariantes caóticas, para a sua caracterização a partir da análise probabilística da disposição topológica de sua solução no espaço de fases (entropia de Kolmogorov e dimensão de correlação); do grau de divergência ou distanciamento, ponto a ponto, de seu conjunto de estados (Exponentes de Lyapunov) e, até mesmo, dos limites estabelecidos por suas trajetórias temporais na análise topológica de sua bacia de atração (análise da solução do sistema no espaço de fases). Tais objetos de estudo deste tipo de sistema serão apresentados de maneira clara para que possamos utiliza-los na verificação física do modelo matemático abordado nesta Dissertação.

2.7.1 ESPAÇO DE FASES

O espaço de fases ou espaço de estados de um sistema dinâmico é definido pela evolução temporal de suas variáveis dependentes. Assim, o espaço de estados N -dimensional de um sistema é obtido traçando-se todas as N variáveis dependentes do sistema cada qual em seus respectivos eixos ortogonais (VANDER STAPPEN, 1996). Desta forma, um sistema em que é observada uma partícula que possui movimento uniforme em um meio unidimensional dará origem a um espaço de estados bidimensional em que serão relacionadas suas variáveis posição e velocidade, sendo que, neste mesmo caso, um movimento uniforme em um meio tridimensional dará origem a um espaço de estados hexadimensional (SAVI, 2006).

2.7.2 BACIA DE ATRAÇÃO, ATRADORES E ATRADORES ESTRANHOS

A complexidade presente em diversos sistemas dinâmicos gera a necessidade da realização, em grande parte dos casos, de sua representação em um espaço de fases em prol de uma análise topológica de sua solução. Assim, a bacia de atração é a representação da evolução temporal da solução de um sistema dissipativo em seu espaço de fases retratada por um conjunto de pontos cujas órbitas convergem para um atrator (SAVI, 2006). Tal representação permite a obtenção de informações importantes acerca do comportamento e destino da trajetória de suas variáveis ao decorrer do tempo e atribui à bacia de atração a denominação de impressão digital do comportamento dinâmico do sistema permitindo a obtenção da resposta, em muitos casos, do questionamento sobre em qual situação o sistema se encontrará ao decorrer de um determinado intervalo de tempo (CASTILHO, 2011).

Sistemas que possuem características específicas em sua dinâmica retratam tal aspecto no formato de sua bacia de atração. Assim, em sistemas estáveis em que sua solução conflua para um ponto, observa-se um ponto fixo em seu espaço de fases, como na situação de um pêndulo simples sujeito ao atrito; no caso de um sistema periódico, seu atrator será representado por uma trajetória fechada chamada de ciclo limite, como no sistema de Van der Pol (FERRARA e PRADO, 1994); e, no caso de sistemas caóticos determinísticos, suas trajetórias nunca coincidirão e estarão sempre confinadas em uma região limitada do espaço de estados (MOURA, 2013).

Atratores originados de dinâmicas caóticas determinísticas são chamados de *atratores estranhos* devido à sua complexidade, apresentando trajetórias aperiódicas de comprimentos infinitos, o que elucida sua dimensão fractal por, obrigatoriamente, fazer parte de uma região finita imersa no espaço de fases. Desta forma, a bacia de atração de um atrator estranho não se restringe a um único estado possível no espaço de fases, mas à uma região preferencial do espaço de fases que atrai os estados do sistema dinâmico (SAVI, 2006). Um exemplo clássico de atrator estranho é aquele obtido no trabalho de Lorenz através da solução do modelo, simplificado, de Rayleigh-Bernard para a convecção natural (Equações 2.56). O atrator de Lorenz, apresentado na Figura 2.8, foi obtido através da solução do sistema de Equações 2.56 com os valores de 10, 28 e $8/3$ para δ , γ e α , respectivamente. Ele apresenta um formato que se assemelha às asas de uma borboleta popularizando a “impressão digital” deste sistema que ilustra a comparação, feita pelo autor, entre a sensibilidade às condições iniciais presente em sua dinâmica e a possibilidade de o bater das asas de uma borboleta em um extremo do globo provocar uma tormenta no outro extremo no espaço de tempo de algumas semanas.

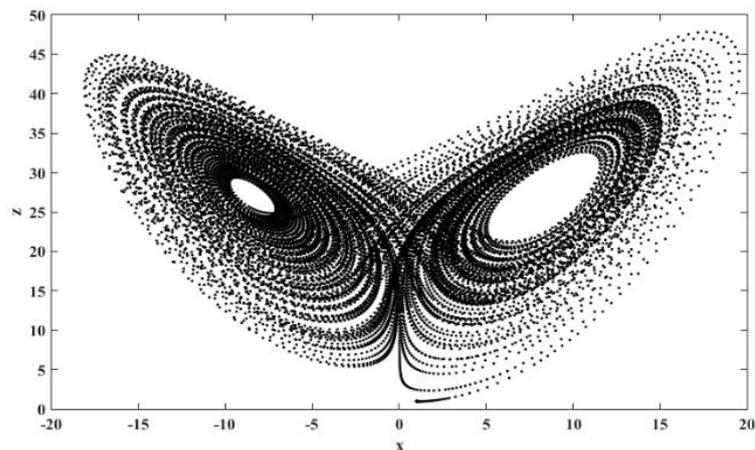


Figura 2.8 – Bacia de atração de Lorenz

A bacia de atração apresentada na Figura 2.8 foi obtida para um tempo de simulação de 150 segundos. A bacia de atração de Lorenz pode ser obtida através da disposição da solução do modelo obtendo-se as variáveis que podem ser dispostas nos eixos ortogonais do espaço de fases. No entanto, há sistemas cuja complexidade impossibilita a obtenção do perfil temporal de todas as variáveis do sistema, seja experimentalmente ou via modelagem matemática devido ao alto número de variáveis e equações a serem resolvidas. Desta forma, a alternativa é o estudo de sua dinâmica através da reconstrução da bacia de atração via série temporal obtida do sistema através de uma simulação computacional por uma abordagem numérica ou via procedimentos experimentais.

A técnica clássica utilizada na execução desta tarefa é a chamada “*reconstrução de Takens*” que se apropria da ideia apresentada, primeiramente, por Packard (1980) em que é mostrado que para o atrator do modelo de Rossler, as derivadas sucessivas de uma variável, dx^m/dt^m , contém informações sobre a evolução temporal das outras variáveis do sistema.

Assim, Takens postulou, em 1981, uma metodologia simples para a reconstrução da bacia de atração. O método de Takens, ou *método dos atrasos temporais*, consiste na reconstrução de vetores ξ_i , com m dimensões, obtidos de uma série temporal em que o vetor é representado por:

$$\xi_i = \{x(t_i), x(t_i + p), \dots, x(t_i + (m-1)p)\} \quad (2.57)$$

em que m é a dimensão de imersão da bacia de atração e p é o passo de reconstrução.

O método proposto por Takens permite a reconstrução da bacia de atração mantendo-se suas características topológicas, apesar desta não ser idêntica à original. O grande desafio do método é a obtenção de uma série temporal contínua e livre de ruídos. Para dados experimentais, esta exigência é improvável, já que existem tipos de ruídos intrínsecos ao processo. Para transpor este desafio, Broomhead e King (1986) deram origem ao método de *decomposição em valores singulares (SVD)* aplicando as propriedades da matriz de covariância para esboçar o grau de independência de cada variável, obtendo, assim, variáveis não relacionadas e permitindo a reconstrução do atrator representando a dinâmica real do fenômeno.

2.7.3 DIMENSÕES DA BACIA DE ATRAÇÃO

A complexidade de informações intrínsecas à topologia de um atrator estranho faz do estudo de sua dimensão uma tarefa não trivial em que a sua característica fractal não se enquadra naqueles conceitos apresentados no estudo da clássica geometria euclidiana.

A dimensão de um conjunto de pontos é o número mínimo de coordenadas necessárias para localizar cada ponto do conjunto (MONTEIRO, 2011). Para Farmer et al. (1983), as dimensões da bacia de atração podem ser caracterizadas a partir de, basicamente, dois grupos. Um grupo engloba suas características geométricas e é chamado de dimensão métrica ou fractal, no qual a dimensão de *Hausdorff-Besicovitch* ou, mais comumente conhecida, de capacidade, é um exemplo clássico deste grupo; o outro é aquele que abrange características não somente geométricas, mas probabilísticas, que é o caso da dimensão de informação e de correlação. Serão definidas nesta seção, as *dimensões de capacidade* (D_0), *informação* (D_1) e *correlação* (D_2) com o intuito de oferecer embasamento teórico na caracterização das bacias de atração que serão obtidas nesta Dissertação.

Assim, a definição matemática da dimensão de capacidade D_0 encontra-se na Equação 2.58.

$$D_0 = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\log[N(\delta)]}{\log(1/\delta)} \quad (2.58)$$

Em que $N(\delta)$ é o número mínimo de hipercubos iguais de lado δ necessários para cobrir um conjunto de pontos A em seu espaço de estados (SAVI, 2006).

Devido a não homogeneidade presente em atratores estranhos, Beloti e Rényi propuseram, em 1957, as relações conhecidas como *dimensões generalizadas de Rényi* (MONTEIRO, 2011), que deram origem às dimensões de informação (D_1) e correlação (D_2) como estão expostas nas Equações 2.59 e 2.60.

$$D_1 = -\lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_{j=1}^{N(\delta)} \frac{f_j \log f_j}{\log(1/\delta)} \quad (2.59)$$

$$D_2 = -\lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_{j=1}^{N(\delta)} \frac{f_j^2}{\log(\delta)} \quad (2.60)$$

A dimensão de correlação (D_2) é a mais usual dentre as três correlações apresentadas devido à grande dificuldade na resolução numérica inerente ao algoritmo de contagem de caixas necessárias para a obtenção de D_0 . Segundo Vander Stappen (1996), a dimensão de correlação é uma medida da complexidade global ou do número de graus de liberdade do sistema, representando, até mesmo, seu grau de homogeneidade. Sua estimativa é possível graças ao algoritmo criado por Grassberger e Procaccia (1983) e consiste na aproximação do termo f_j^2 pela frequência relativa que dois pontos estejam separados por uma distância menor que ε , resultando na Equação 2.61

$$D_2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\log[C(\delta)]}{\log(\delta)} \right] \quad (2.61)$$

Em que $C(\varepsilon)$ é definida como função de correlação e calculada a partir da função degrau de Heaviside, como exposta na Equação 2.62.

$$C(\delta) = \frac{1}{N^2} \sum_{j=1}^N \sum_{k \neq j}^N H\left(\delta - \|\vec{x}_j - \vec{x}_k\|\right) \quad (2.62)$$

Assim, uma estimativa da dimensão de correlação pode ser determinada através da inclinação da região linear da curva no gráfico $\log C(\delta)$ em função de $\log(\delta)$, como ilustrado na letra “a” da Figura 2.9. A dependência da dimensão de correlação com as características topológicas da bacia de atração permite a obtenção da mínima dimensão de imersão. Reconstruções sucessivas para diferentes valores de m são realizadas até que D_2 atinja um valor crítico de estagnação identificando a ausência de dobras e cruzamentos indevidos de trajetórias na bacia de atração. Um gráfico ilustrativo do método de determinação de m encontra-se na letra “b” da Figura 2.9.

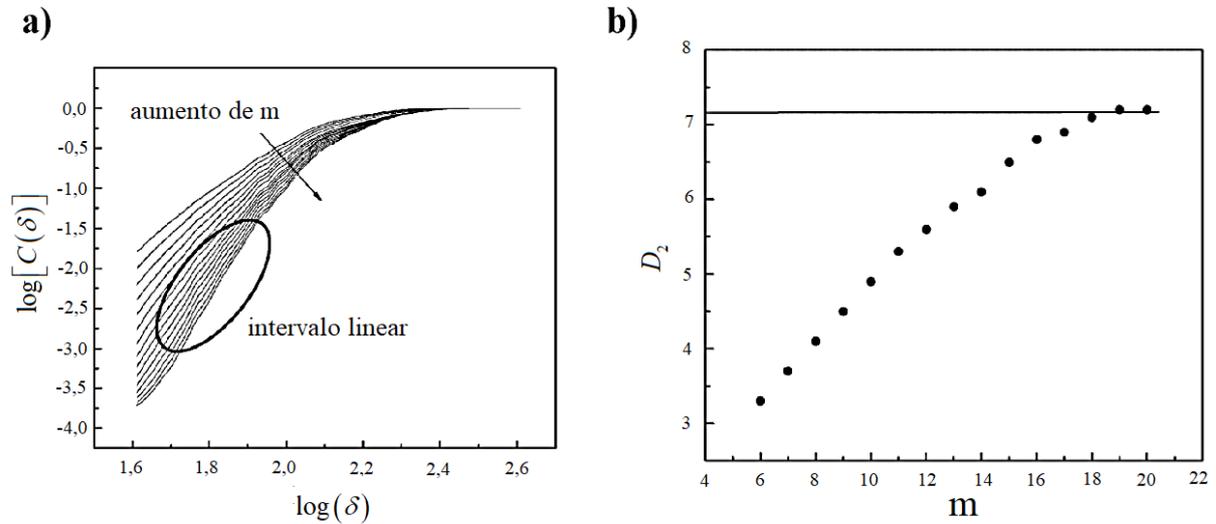


Figura 2.9 - (a) Exemplo de gráfico $\log(\delta)$ vs $\log C(\delta)$ para a determinação da dimensão de correlação (b) gráfico de convergência para D_2 (adaptado de Xu et al., 2009).

2.7.4 ENTROPIA DE KOLMOGOROV

O conceito termodinâmico clássico de entropia está ligado ao grau de desordem através da contabilização do número de microestados presentes em cada possível macroestado termodinâmico de um sistema. Assim como tal, a entropia de Kolmogorov (K) é um parâmetro intrinsecamente ligado à taxa de criação de informação de um sistema em um intervalo de tempo $[t_1, t_2]$ e apresenta-se como um ótimo parâmetro avaliador de seu grau de imprevisibilidade no qual, para sistemas determinísticos periódicos e totalmente previsíveis, seu valor é zero; para aqueles estocásticos, $K \rightarrow \infty$, e, para sistemas caóticos determinísticos, $K > 0$.

Desta forma, seja uma bacia de atração recoberta por uma sequência de n cubos (i_1, i_2, \dots, i_n) de lado δ , define-se que a informação adjunta à sua trajetória é (FERRARA e PRADO, 1994):

$$I_n^1(\varepsilon) = - \sum_{i_1, \dots, i_n} p(i_1, i_2, i_3, \dots, i_n) \ln [p(i_1, i_2, i_3, \dots, i_n)] \quad (2.63)$$

Assim, é possível obter a quantidade de informação adicional necessária para prever em qual cubo i_{n+1} o sistema visitará sabendo-se que ele esteve em sua condição inicial anterior. Logo, a operação $I_{n+1}^{(1)}(\delta) - I_n^{(1)}(\delta)$ mede a perda de informação do sistema

entre o tempo $n\tau$ e $(n+1)\tau$ e podemos definir a entropia de *Kolmogorov-Sinai* (K) como a taxa média de criação de informação no sistema e expô-la na Equação 2.64.

$$K = \lim_{\tau \rightarrow 0} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n\tau} I_n^{(1)}(\varepsilon) = - \lim_{\tau \rightarrow 0} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n\tau} \sum_{i_1, \dots, i_n} p(i_1, i_2, i_3, \dots, i_n) \ln [p(i_1, i_2, i_3, \dots, i_n)] \quad (2.64)$$

A estimativa da entropia de Kolmogorov para séries temporais pode ser realizada através de vários métodos encontrados na literatura (GRASSBERGER e PROCACCIA, 1983; SCHOUTEN et. al., 1994). No presente trabalho, será utilizado o método da *Máxima Verossimilhança* (K_{ML}), proposto por Schouten et al. (1994), devido a baixa influência que tal método apresenta em relação à presença de ruídos, principalmente, frente às características não determinísticas dos sinais coletados da fluidodinâmica de leitos fluidizados. Desta forma, o método de *Máxima Verossimilhança* encontra-se descrito a seguir, como desenvolvido por Schouten et al. (1994).

A divergência de pontos próximos em órbitas diferentes é exponencial (TAKENS, 1981; GRASSBERGUER e PROCACCIA, 1983). Assim, o intervalo de tempo t_0 para que dois pontos, inicialmente muito próximos, se distanciem a uma distância maior que l_0 será exponencialmente distribuído, como na Equação 2.65.

$$C(t_0) \propto e^{-Kt_0} \quad (2.65)$$

A coleta de dados que constitui uma série temporal experimental é discreta e, na maioria dos casos, apresenta frequência e passo de coleta fixos. Assim, a distribuição apresentada continuamente na Equação 2.65, para uma série discreta de frequência f_s e passo de tempo $\tau_s = 1/f_s$, encontra-se na Equação 2.66.

$$C(b) \propto e^{-Kb\tau_s}, \text{ em que } b = 1, 2, 3 \dots \quad (2.66)$$

A distribuição cumulativa exposta na Equação 2.66 representa uma convergência exponencial em função da variável b . Tal variável é a contagem de pares de pontos sequenciais no atrator até que a distância entre eles seja maior que a distância l_0 estipulada, ou seja, a variável b é obtida a partir do número de vezes em que:

$$\|X_{i+b-1} - X_{j+b-1}\| \leq l_0, \text{ em que } b=1,2,3, \dots \quad (2.67)$$

Dado que $\|X_i - X_j\| \leq l_0$, até que $\|X_{i+b} - X_{j+b}\| > l_0$

Assim, o valor de b é obtido através do teste para cada par sequencial i,j propiciando o cálculo de \bar{b} , que é a média dos valores de b como exposto na Equação 2.68.

$$\bar{b} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M b_i \quad (2.68)$$

Desta forma, através da função de distribuição $C(b)$, exposta na Equação 2.66, obtém-se uma função que descreva a probabilidade de se encontrar um par sequencial de pontos com uma distância maior que l_0 . Schouten et al. (1994) aplicaram a função de *Verossimilhança* com o intuito de encontrar um valor de *Entropia de Kolmogorov (K)* que maximizasse tal função obtendo, então, a Equação 2.69:

$$K = K_{ML} = \frac{1}{\tau_s} \ln \left(1 - \frac{1}{\bar{b}} \right) \quad (2.69)$$

em que τ_s é o inverso da frequência de amostragem da série temporal e \bar{b} é o valor médio do número de pares sequenciais contados até que se encontre algum com uma distância entre eles maior que l_0 . O método da máxima verossimilhança é largamente utilizado para o cálculo da entropia de Kolmogorov (VAN DER STAPPEN, 1996; CASTILHO, 2011; PRIETO, 2014) devido à sua capacidade em lidar com ruídos intrínsecos à obtenção de sinais experimentais e por isso, será utilizado nesta Dissertação.

2.7.5 EXPOENTES DE LYAPUNOV

Como consequência do *Teorema Ergódico Multiplicativo (TEM)*, demonstrado por Oseledec (1968), os *expoentes de Lyapunov* representam a taxa exponencial média de divergência ou convergência de órbitas próximas no espaço de fases, auxiliando diretamente na identificação e quantificação do caos em sistemas dinâmicos dissipativos (WOLF et al., 1985). Estão diretamente ligados à taxa de criação de informação no sistema expondo o modo

com que a informação contida em um conjunto de pontos, inicialmente muito próximos, se perde devido ao alongamento e dobra da trajetória presente no atrator caótico (CASTILHO, 2011). Sua obtenção é realizada considerando-se que haja divergência exponencial entre trajetórias geradas por condições iniciais muito próximas em que uma característica importante de sistemas caóticos determinísticos é a presença de pelo menos um expoente de Lyapunov positivo, o que caracteriza a sensibilidade às condições iniciais presente no sistema (MONTEIRO, 2011).

Seja uma hiper-esfera de condições iniciais centralizada em $\vec{\xi}(t_0)$, cuja dimensão esteja associada à dimensão do sistema dinâmico. Há a deformação de seu volume, ao decorrer da evolução temporal do sistema, de tal forma que seu raio, na i -ésima dimensão, $r_i(t_0)$ sofra uma divergência exponencial concedendo ao sistema a relação exposta na Equação 2.70, como descrito em Monteiro (2011):

$$r_i(t) = r_i(t_0) e^{\lambda_i(t-t_0)} \quad (2.70)$$

Pode-se reescrever a Equação 2.70 explicitando-se o termo λ_i como o expoente de Lyapunov da i -ésima dimensão do espaço de fases do sistema.

$$\lambda_i = \frac{1}{(t-t_0)} \ln \left[\frac{r_i(t)}{r_i(t_0)} \right] \quad (2.71)$$

Obtém-se, então, uma relação entre o volume da hiper-esfera aceitando-se sua proporcionalidade à multiplicação dos raios em suas n diferentes dimensões:

$$V(t) \propto \prod_{i=1}^n r_i(t) \quad (2.72)$$

Substituindo a Equação 2.70 na 2.72, resulta em:

$$V(t) \propto V(t_0) e^{(t-t_0) \sum_i^n \lambda_i} \quad (2.73)$$

Pela Equação 2.73, é visível que a expansão, estagnação ou contração do volume compreendido pela solução do sistema em seu espaço de fases dependa diretamente da somatória de todos os n -dimensionais expoentes de Lyapunov. Em sistemas conservativos, há a preservação de tal volume, implicando em valor nulo à soma dos expoentes anteriormente citados. Por outro lado, em sistemas dissipativos, há a contração do volume em questão, o que exige que a somatória dos expoentes de Lyapunov seja negativa.

Sistemas caóticos determinísticos são, necessariamente, dissipativos em que sua solução se restringe a um volume finito do espaço de fases. Isto posto, conclui-se que a soma total dos expoentes de Lyapunov, cada um referente a uma dimensão do sistema, deve ser negativa para todo sistema dissipativo, inclusive, aqueles caóticos determinísticos.

Pode-se esperar, com base no Teorema Ergódico Multiplicativo de Oseledec, que duas condições iniciais escolhidas aleatoriamente divergirão exponencialmente à uma taxa dada pelo maior expoente de Lyapunov (ECKMANN E RUELLE, 1992). Desta forma, o método utilizado para a obtenção do maior expoente nesta Dissertação é aquele originado no trabalho de Rosenstein (1993) e implementado no pacote computacional *BRChaos*.

O método de Rosenstein (1993) fornece uma metodologia que não oferece um alto custo computacional para a obtenção do maior expoente de Lyapunov de uma série temporal representativa da dinâmica do sistema. Assim, é necessário, a princípio, que se reconstrua o atrator em seu espaço de fases para uma posterior aplicação do método.

Após a reconstrução do atrator em seu espaço de fases, o método realiza uma varredura topológica na solução do sistema identificando os pontos que minimizem a distância entre o ponto de referência e seu vizinho mais próximo; relação que pode ser compreendida através da Equação 2.74.

$$d_j(0) = \min_{X_j} \|X_j - X_j\| \quad (2.74)$$

Em que $d_j(0)$ é a distância inicial do j -ésimo ponto para o seu vizinho mais próximo e $\|\dots\|$ é a norma euclidiana entre o j -ésimo ponto de referência e aquele mais próximo (ROSENSTEIN, 1993).

É imposto uma restrição de que os vizinhos mais próximos têm uma separação temporal maior que o período dominante da série temporal permitindo que se possa considerar

cada par de vizinhos como duas condições iniciais muito próximas para diferentes trajetórias (ROSENSTEIN, 1993).

Desta forma, é possível a utilização da definição de expoente de Lyapunov indicada na Equação 2.70 para se obter a relação utilizada por Rosenstein (1993) e exposta na Equação 2.75:

$$d_j(i) \approx C_j e^{\lambda_1(i\Delta t)} \quad (2.75)$$

Pode-se aplicar, então, o logaritmo natural obtendo-se a Equação 2.76:

$$\ln[d_j(i)] \approx \ln C_j + \lambda_1(i\Delta t) \quad (2.76)$$

Assim, o maior expoente de Lyapunov pode ser obtido através de um ajuste, via método dos mínimos quadrados, obtendo-se a média temporal do termo que representa o logaritmo da distância entre cada par de vizinhos próximos, como ilustrado na Equação 2.77:

$$LLE = \frac{1}{\Delta t} \langle \ln[d_j(i)] \rangle \quad (2.77)$$

Em que $\langle \dots \rangle$ representa o valor médio sobre todos os valores j . Segundo Rosenstein (1993), o processo que considera o valor médio, anteriormente citado, é a chave para a obtenção de valores precisos do maior expoente de Lyapunov utilizando-se, até mesmo, de séries temporais curtas e contaminadas de ruídos sendo esta uma característica motivadora à utilização deste método nas séries temporais experimentais de fluidização utilizadas nesta Dissertação.

2.8 APLICAÇÕES DA SIMULAÇÃO CFD E DA TEORIA DO CAOS NA FLUIDIZAÇÃO

2.8.1 SIMULAÇÃO CFD EM LEITOS FLUIDIZADOS

Muito embora o primórdio da modelagem matemática em leitos fluidizados é atribuído ao trabalho de Davidson (1961), que se utilizou, no estudo do movimento de uma

bolha no interior de um leito fluidizado, da equação da continuidade acoplada à uma expressão para o cálculo das velocidades relativas em função da lei de Darcy (MARTINS, 2015), a representação da complexidade inerente às interações gás-partícula por modelos fluidodinâmicos despontara a partir do fim da década de 1960, quando Anderson e Jackson (1967) desenvolveram um modelo para um sistema de partículas fluidizadas por meio das equações do movimento de uma única partícula acopladas àquelas de Navier-Stokes representantes do movimento do fluido. Desde então, principalmente devido à grande aplicabilidade industrial desta operação, a modelagem matemática do leito fluidizado tem atraído o interesse de pesquisas em diversos locais no mundo garantindo uma maior compreensão dos fenômenos ocorrentes no interior deste equipamento nas diversas aplicações em que este pode ser utilizado, tais como: secagem, gaseificação e pirólise de biomassa, craqueamento catalítico, entre outras.

Desta maneira, é de grande importância o estudo da fluidodinâmica presente neste equipamento em busca de geometrias, tamanhos e formatos que otimizem as condições de processo para que se obtenha, gradativamente, melhores taxas de transferência de massa, *momentum* e energia. Ettehadieh et al. (1984) utilizaram de um modelo bidimensional, validado experimentalmente por Gidaspow e Ettehadieh (1983), no estudo da gaseificação do carvão em que o modelo se mostrou representativo da fluidodinâmica do leito fluidizado apresentando bons resultados.

Van Wachem et al. (1998) realizaram o estudo do comportamento das bolhas presentes em um leito fluidizado gás-partícula proporcionando a validação numérica de um modelo matemático Euleriano Granular Multifásico bidimensional através de correlações semi-empíricas que determinam o tamanho e a velocidade das bolhas presentes no leito. A correlação de Darton et al. (1977) fornece valores do diâmetro da bolha em função da velocidade superficial do gás e da altura que a bolha esteja em relação ao distribuidor enquanto que a correlação utilizada para a velocidade da bolha no interior do leito foi a de Hillgardt e Werther (1987) corrigida para um caso bidimensional através da equação de Pyle e Harrison (1967). Pôde ser verificado que houve uma boa concordância entre os valores de tamanho das bolhas apresentados pelo modelo Euler-Euler testado e a correlação de Darton et al. (1977). Por outro lado, houve um desvio significativo dos valores de velocidade para bolhas menores, cujo motivo, segundo os autores, se deu pela falta de contabilização da

interação direta das bolhas com a parede e da quebra e coalescência das bolhas na correlação proposta por Hillgardt e Werther (1987).

Chiesa et al. (2005) realizaram um estudo do comportamento das bolhas em um leito fluidizado gás-partícula comparando simulações realizadas em modelos bidimensionais constituídos pelas abordagens Euler-Lagrange (EL) e Euler-Euler (EE) aos dados experimentais retirados de um leito fluidizado em escala de bancada. Os dois modelos apresentaram, macroscopicamente, bons resultados do formato e posição das bolhas com a evolução do tempo, em que, a abordagem Euler-Lagrange apresentou resultados mais próximos da realidade efetivando a vantagem desta abordagem sobre a Euler-Euler. Entretanto, o autor ressalta a desvantagem da utilização da abordagem EL com relação ao custo computacional requerido para a sua implementação, de forma que, as simulações realizadas para a abordagem Lagrangeana custaram um tempo de simulação, em média, quatro vezes maior que aquelas realizadas para a abordagem Euler-Euler devido às interações contabilizadas de cada partícula considerada no escoamento em questão evidenciando a dificuldade da utilização da abordagem Lagrangeana em equipamentos com escalas industriais.

Liu et al. (2013) estudaram a reação de gaseificação de biomassa em leito fluidizado circulante através de um modelo matemático tridimensional resolvido via técnicas CFD. Foi utilizada a abordagem Euler-Euler em que os dados obtidos através da simulação foram comparados com dados experimentais. Foram testadas três diferentes variações de modelos de turbulência $k-\varepsilon$, duas variações de modelos de radiação, dois modelos de taxa de reação e três diferentes razões de equivalência (razão entre a vazão de gás na alimentação do reator e a vazão estequiométrica deste gás necessária para a sua combustão). Os resultados simulados mostraram-se em concordância com os experimentos em que não se captou diferenças significativas nos resultados para os diferentes modelos de turbulência. Os testes com e sem o modelo de radiação indicaram a importância de sua utilização para este caso de estudo.

2.8.2 ANÁLISE DO CAOS EM LEITOS FLUIDIZADOS

O início da aplicação da teoria do caos no estudo dos processos de engenharia se deu com o trabalho de Stringer (1989). Com o advento de tal método de análise, diversos

pesquisadores iniciaram sua elaboração em diferentes setores da engenharia, inclusive na engenharia química.

Daw et al. (1990) avaliaram a dinâmica de um leito fluidizado gás-partícula através da reconstrução dos atratores em seus espaços de fases e do cálculo de suas dimensões topológicas. Foram estudadas partículas do tipo A, B e D da classificação de Geldart com o intuito de detectar as transições de regimes presentes no equipamento com o acréscimo da velocidade superficial de gás em seu interior.

Vander Stappen (1996) utilizou a teoria do caos na caracterização de regimes de fluidização através da reconstrução dos atratores em seus espaços de fases e cálculo dos invariantes caóticos em diferentes condições de operação. Foi realizada a caracterização dos regimes de fluidização para partículas B e D da classificação de Geldart e a criação de uma relação que calcula a entropia de Kolmogorov de posse do diâmetro da coluna e altura do leito para velocidades superficiais de gás acima daquela de mínima fluidização. Segundo Vander Stappen (1996), a entropia de Kolmogorov é uma ótima ferramenta de caracterização de regimes de fluidização, além de constituir um método robusto e reproduzível, por ser sensível às variações das condições de operação do sistema.

Outros autores utilizaram a teoria do caos para estudo de sistemas diversos presentes na engenharia química. Lee e Chang (1996) realizaram um trabalho que apresenta uma perspectiva histórica da aplicação da teoria do caos, de fractais e do controle de sistemas caóticos-determinísticos, exemplificando o controle do comportamento caótico presente em um reator *CSTR*.

Abashar e Elnashai (2010) estudaram a resposta, em concentração de etanol, à uma perturbação periódica senoidal de substrato na alimentação de um fermentador através de um modelo matemático. Foi realizada a análise de bifurcação aliada ao cálculo do espectro de Lyapunov, via metodologia descrita por Wolf et al. (1985), na identificação do comportamento caótico determinístico presente no modelo em diferentes condições paramétricas. Os autores concluíram que há uma grande riqueza e complexidade inerente à solução do sistema ao decorrer da mudança da amplitude da perturbação senoidal considerada na alimentação de substrato do fermentador. Foram identificadas regiões periódicas, bi-periódicas, quase-periódicas e caóticas na solução em que as regiões que apresentaram caos foram identificadas através da presença de um expoente de Lyapunov positivo, que retrata a

alta sensibilidade do sistema às condições iniciais, e da dimensão fractal intrínseca à solução. Foi monitorado o rendimento do sistema em que se concluiu que a melhor faixa de operação foi aquela em que houve uma solução periódica com pequenas amplitudes na perturbação de substrato, expondo a grande importância do trabalho no estudo e controle de fermentadores produtores de etanol.

2.8.3 VERIFICAÇÃO FÍSICA DE MODELOS RESOLVIDOS VIA CFD ATRAVÉS DE INVARIANTES CAÓTICOS

Embora a solução de modelos matemáticos via técnicas de CFD esteja garantindo bons resultados na representação física de diferentes sistemas presentes na natureza, é essencial que seus resultados sejam devidamente comparados com dados experimentais para uma possível validação do modelo matemático adotado.

Van Wachem et al. (1999) realizaram a validação do comportamento dinâmico de um modelo matemático resolvido via técnicas CFD de um leito fluidizado gás-partícula cujas características do sistema particulado foram aquelas das esferas de vidro B da classificação de Geldart com massa específica de 2600 kg/m^3 e diâmetro de partícula de $500 \text{ }\mu\text{m}$. Ao decorrer da simulação foram obtidas séries temporais de queda de pressão e da porosidade do leito para diferentes condições de velocidade superficial do gás com o objetivo de comparar as características dinâmicas do modelo com os dados experimentais.

O trabalho foi dividido em, basicamente, três etapas em que a primeira consistiu na comparação das frequências dominantes das séries temporais obtidas através da simulação com aquelas experimentalmente geradas no trabalho de Baskakov et al. (1986) (Figura 2.10). A segunda etapa consistiu na comparação da entropia de Kolmogorov, em bits/ciclo, obtida através das séries temporais simuladas com aquelas geradas pelo trabalho de Van den Bleek e Schouten (1993) e, a terceira etapa, na obtenção de valores da entropia de Kolmogorov das séries temporais simuladas, em bits/segundo, para sua posterior comparação com os valores gerados pela relação que calcula a entropia de Kolmogorov para pontos acima da mínima fluidização, desenvolvida no trabalho de Schouten et al. (1996) (Figura 2.11).

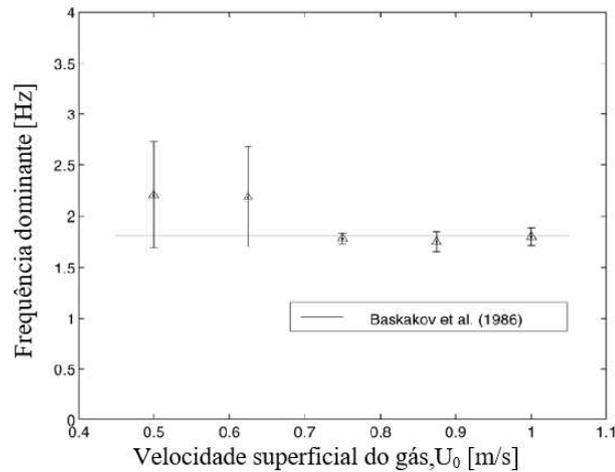


Figura 2.10- Comparação entre as frequências dominantes das séries de pressão simuladas e experimentais para diferentes velocidades superficiais de gás (Adaptado de Van Wachem et al., 1999).

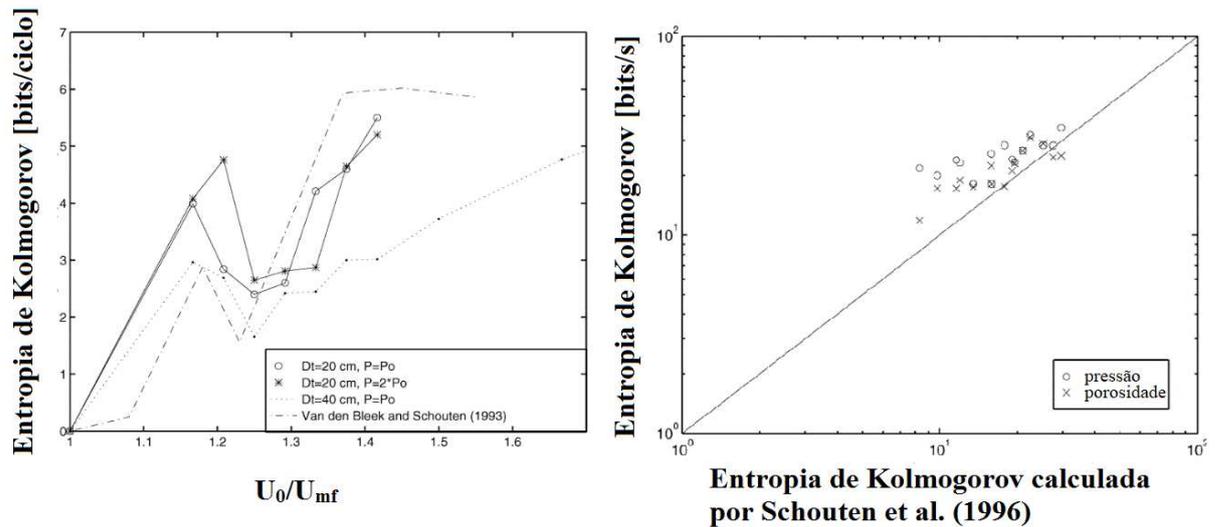


Figura 2.11 - a) comparação entre as entropias de Kolmogorov das séries de pressão simuladas e experimentais em diferentes diâmetros de coluna e diferentes pressões de operação; b) comparação entre os valores de entropia de Kolmogorov obtidos para as séries de pressão e porosidade simuladas e aqueles advindos da equação de Schouten et al. (1996) (Adaptado de Van Wachem et al., 1999).

A Figura 2.10 e a Figura 2.11 mostram que houve concordância entre os dados experimentais e simulados em que, na Figura 2.10, os valores das frequências dominantes não mostraram uma tendência sistemática, segundo os autores, com o aumento da velocidade superficial de gás. A Figura 2.11a) mostra que o modelo conseguiu representar a tendência da curva experimental de entropia de Kolmogorov do regime intermediário, entre a mínima fluidização e o regime de borbulhamento, em que há um máximo e um mínimo local claramente expostos. Foi possível constatar também, segundo os autores, que o modelo Euler-

Euler tem a capacidade de retratar a influência do aumento da pressão no grau de imprevisibilidade do sistema, evidenciando boa representatividade dos fenômenos naturais presentes na fluidização pelo modelo. Isto possibilita sua aplicação no estudo da influência do diâmetro da coluna e da altura do leito na fluidodinâmica presente no equipamento garantindo uma boa aplicabilidade como ferramenta de scale-up. A Figura 2.11b apenas ressalta a capacidade do modelo em gerar resultados representativos e bem próximos daqueles calculados pela relação de Schouten et al. (1996).

Salikov et al. (2015) realizaram um estudo experimental e de simulação da dinâmica presente em um leito de jorro prismático. Na parte numérica, aplicou-se a teoria do caos nos resultados oriundos de um acoplamento CFD-DEM cuja abordagem multifásica é a Euler-Lagrange. Nos experimentos, foi realizada a coleta de imagens do movimento das partículas através de uma câmera de alta velocidade para a comparação qualitativa das imagens com os perfis de jorro resultantes das simulações. Foi realizada, também, a coleta de séries temporais de queda de pressão em relação ao aumento da vazão de ar na alimentação do equipamento para a aplicação da análise espectral e da teoria do caos, através do pacote computacional *RRChaos*, possibilitando a obtenção das dimensões dos atratores relacionados à dinâmica do sistema bem como o cálculo da entropia de Kolmogorov de *Máxima Verossimilhança* proposta por Schouten et al. (1994). O sistema particulado utilizado foi a alumina, $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$, de diâmetro médio igual a 1,8 mm e massa específica de 1040 kg/m^3 . Para as simulações, foram utilizados, simultaneamente, os *softwares* ANSYS-FLUENT, versão 12.0.16, e EDEM, versão 2.3.1, na solução do modelo matemático e o *software* GAMBIT, versão 2.3.16, para a construção da malha computacional. Foram realizadas doze diferentes condições experimentais em que três destas condições foram utilizadas para as simulações. Os resultados comparativos entre a simulação e os experimentos da dimensão de correlação e entropia de Kolmogorov para as diversas condições de vazão de ar na alimentação do equipamento encontra-se na Figura 2.12.

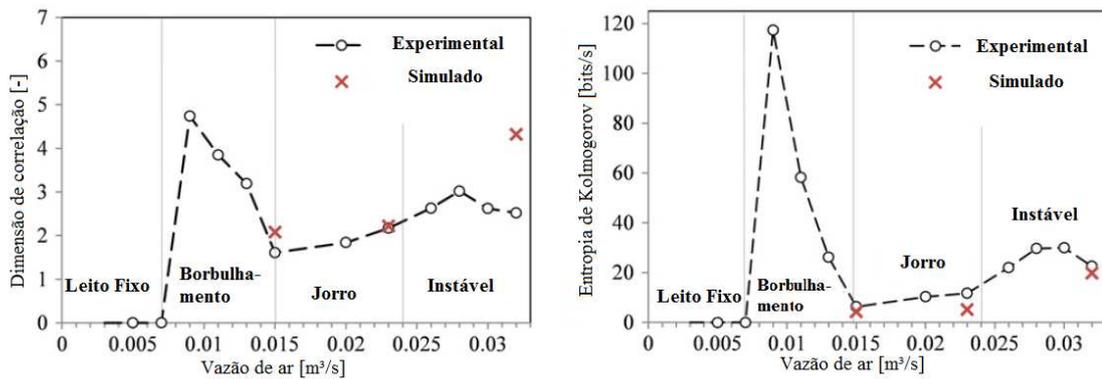


Figura 2.12 - Caracterização dos regimes presentes no leito de jorro através da dimensão de correlação e entropia de Kolmogorov do sistema (adaptado de Salikov, 2015).

Os autores concluíram que houve uma boa concordância entre os dados experimentais e aqueles gerados pelas simulações em que, além da comparação das imagens experimentais com os perfis oriundos das simulações e a análise espectral das séries temporais, verificou-se a capacidade dos invariantes caóticos dimensão de correlação e entropia de Kolmogorov, na caracterização dos regimes de jorro, como é possível a visualização na Figura 2.12.

Utikar e Ranade (2007) realizaram um estudo experimental e de simulação da dinâmica presente em um leito fluidizado gás-partícula operando em regime de borbulhamento. Os experimentos foram realizados em uma unidade experimental retangular de acrílico com alimentação de ar dupla no distribuidor para melhor homogeneidade da entrada de ar no leito e dois diferentes tipos de partículas, vidro e polipropileno, cuja classificação de Geldart é a B. Foram utilizados transdutores de pressão para a coleta de séries temporais, em três diferentes posições axiais do leito, e uma câmera de altas velocidades para a captação do perfil de sólidos no leito através da coleta das imagens das bolhas ao decorrer do tempo. A simulação foi realizada por meio de um modelo Euler-Euler bidimensional em que foram exportadas séries temporais de pressão e perfis de concentração da fase particulada ao longo do tempo para a comparação dos resultados simulados com os experimentais. Foi realizada a análise espectral assim como o cálculo da entropia de Kolmogorov, via pacote computacional “AnTS” que, segundo Sunthakar e Ranade (1997), utiliza a metodologia de *Máxima Verossimilhança* para a obtenção da entropia de Kolmogorov das séries temporais experimentais e simuladas para a comparação entre elas. A Figura 2.13 e a Figura 2.14 mostram, respectivamente, a comparação entre as entropias de Kolmogorov obtidas pelas séries experimentais e simuladas e a sobreposição das flutuações de pressão normalizadas nas três diferentes posições axiais do leito.

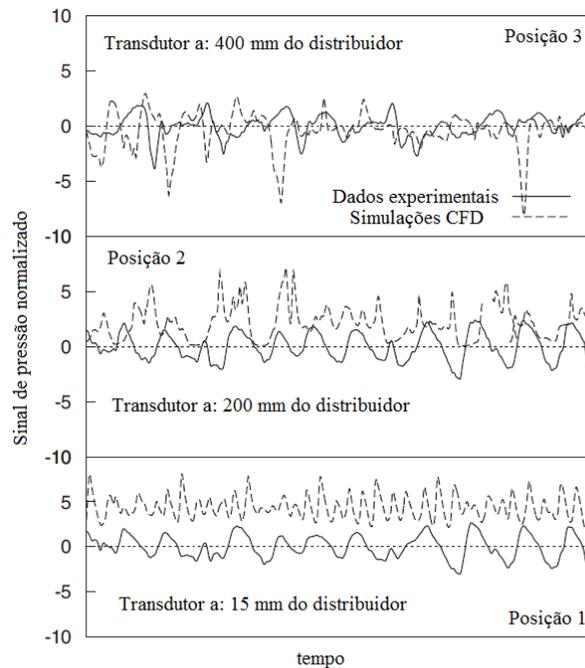


Figura 2.13. Comparação entre as séries temporais de pressão experimentais e simuladas para esferas de vidro, em diferentes posições axiais do leito (Adaptado de Utika e Renade, 2007).

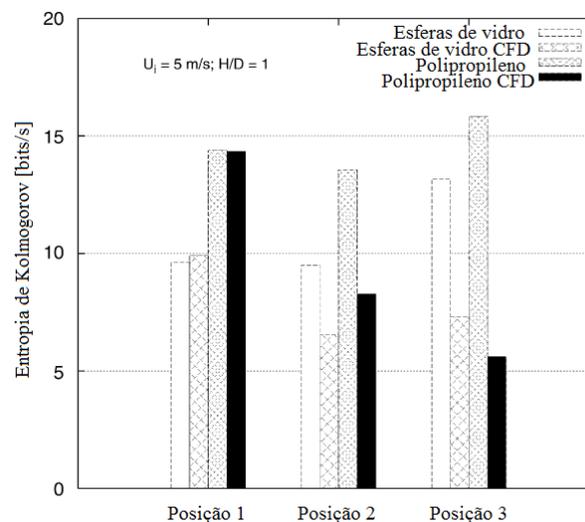


Figura 2.14. Comparação entre os valores experimentais e simulados da entropia de Kolmogorov para esferas de vidro e polipropileno nas três diferentes posições axiais do leito (adaptado de Utika e Ranade, 2007).

Os autores concluíram que, apesar de haver grande semelhança entre os perfis de concentração volumétrica da fase particulada gerados pelas simulações e as imagens obtidas através da câmera de alta velocidade, as entropias de Kolmogorov calculadas por meio das séries simuladas mostraram uma queda com o aumento da distância entre a coleta de pressão e

o distribuidor, mostrando a deficiência do modelo na fidelidade da predição real da dinâmica observada nos dados experimentais.

3 CAPÍTULO III

MATERIAIS E MÉTODOS

Este trabalho busca a reprodução, via simulação CFD, dos resultados obtidos por Prieto (2014), que realizou experimentos coletando séries temporais de queda de pressão em um leito fluidizado gás-partícula utilizando microesferas de vidro A, B e D, da classificação de Geldart, como material particulado, cuja densidade é de 2500 kg/m³. A unidade experimental utilizada em seu trabalho foi confeccionada em acrílico possuindo uma altura e diâmetro de coluna iguais a 1 e 0,1 m, respectivamente. Na presente Dissertação, as séries temporais obtidas através do modelo foram coletadas nas condições de mínima fluidização à uma frequência de 1000 Hz e possuem 10000 pontos cada possibilitando a comparação do comportamento dinâmico do sistema originado pelo modelo com aquele revelado através das séries temporais experimentais. Encontra-se, na Tabela 3.1, a organização das condições simuladas nesta Dissertação para as diferentes classificações de partículas.

Tabela 3.1-Diferentes condições utilizadas nas simulações (PRIETO, 2014).

Material	Diâmetro (μm)	Massa Carregada (kg)	U_{mf} (m s^{-1})	Classificação de Geldart
Microesferas de vidro	64	0,4	0,24	A
Microesferas de vidro	128	0,4	0,26	B
Microesferas de vidro	128	0,8	0,28	B
Microesferas de vidro	1200	0,4	0,65	D

Assim, foi possível a obtenção de séries temporais para as condições expostas na Tabela 3.1, sendo que, para cada condição, foram realizadas uma simulação adotando-se o modelo de turbulência RANS, *Realizable k- ϵ* , e outra sem considerar o modelo de turbulência. De posse das séries temporais, foi realizada a comparação entre os espectros de densidade de potência das séries experimentais e simuladas, para cada condição, obtidos através de um código confeccionado no *software* comercial Matlab, versão 12.0b. Em seguida, foi aplicada a análise do caos através da reconstrução dos atratores em seus espaços de fases, possibilitando os cálculos do maior expoente de Lyapunov, da dimensão de correlação e da entropia de Kolmogorov com o intuito de comparar tais resultados com aqueles obtidos através das séries temporais experimentais e, desta forma, avaliar a capacidade do modelo em representar a complexidade da dinâmica envolvida na interação gás-partícula presente no interior de um

leito fluidizado. A análise do caos foi realizada via *BRChaos*, que é um pacote computacional desenvolvido no Laboratório de Processos em Meios Porosos (LPMP) da Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas.

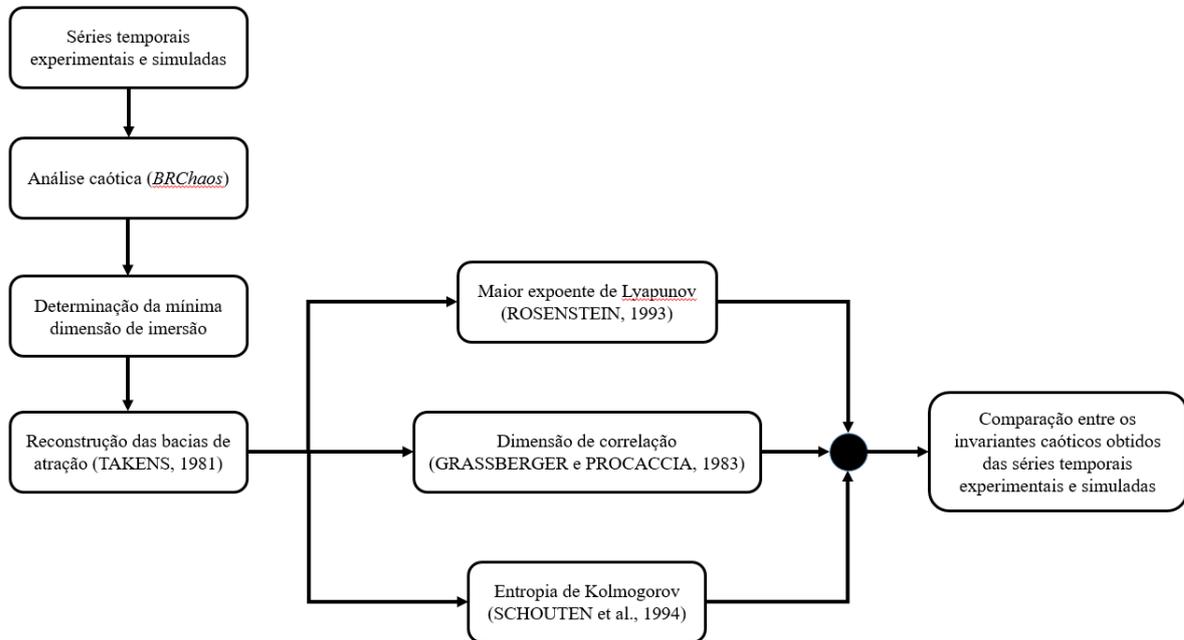


Figura 3.1 - Fluxograma ilustrativo da análise caótica aplicada às séries temporais desta Dissertação.

O *BRChaos*, como ilustrado na Figura 3.1, faz uso do método de reconstrução de Takens (1981), aliado ao método de decomposição em valores singulares, na reconstrução das bacias de atração; do método de Grassberger e Procraccia (1983), na obtenção da dimensão de correlação do sistema; do princípio de máxima verossimilhança, na obtenção da entropia de Kolmogorov; e do método de Rosenstein (1993), para o cálculo do maior expoente de Lyapunov do sistema. Tal pacote computacional foi numericamente validado comparando-se seus resultados com um pacote computacional consagrado na literatura, o *RRChaos* (Scatena et al., 2016). Além disso, apresenta-se uma comparação entre os pacotes *BRChaos* e *RRChaos*, cujos valores podem ser encontrados no Apêndice A desta Dissertação. Desta forma, dando continuidade à exposição da metodologia desta Dissertação, encontram-se, nos tópicos seguintes, informações relativas, tanto do aparato computacional utilizado para a solução do modelo matemático via técnicas de CFD, quanto da construção da malha computacional, dos modelos e das condições de contorno utilizadas.

3.1 METODOLOGIA NUMÉRICA

Este tópico objetiva a apresentação da configuração utilizada no processamento paralelo que viabilizou a realização do conjunto de simulações presentes nesta Dissertação bem como a metodologia numérica aplicada.

3.1.1 CONFIGURAÇÃO DO *CLUSTER* UTILIZADO NAS SIMULAÇÕES

O aparato computacional utilizado na realização desta Dissertação pertence ao Laboratório de Fluidodinâmica Computacional – (L-CFD) da Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas. Foi utilizado um *cluster*, que consiste em um conjunto de núcleos de processamento interligados paralelamente, cujas especificações estão descritas na Tabela 3.2.

Tabela 3.2 - Configuração *cluster*.

Sistema operacional	Tipo de processador	Memória RAM/nó de processamento	Nº de núcleos de processamento	Interface de comunicação
Linux Suse Enterprise 12	Intel Xeon Six Core	6 nós de processamento com 64 GB/nó	72	SSH

Foram utilizados 12 dos 72 núcleos de processamento que compõem o *cluster* para que se tornasse viável a realização do trabalho dentro do cronograma estipulado.

3.1.2 CONFECÇÃO DA MALHA COMPUTACIONAL

As características da malha computacional têm influência direta na precisão do modelo. Simulações de escoamentos turbulentos exigem cuidado quanto ao tamanho da malha computacional, sendo que, os modelos RANS, como é o caso do *Realizable k- ϵ* , determinam as propriedades médias do escoamento em que os tamanhos dos volumes de controle devem ser apropriados para este tipo de abordagem (ROSA, 2002).

Além do refinamento da malha, deve-se ter, ainda, preocupação com relação à espessura da primeira camada de volumes de controle junto à parede, uma vez que, além da presença dos maiores gradientes das variáveis envolvidas na descrição do escoamento, a condição de contorno nela fixada será a fonte principal da vorticidade e da turbulência envolvida (ANSYS, 2016).

O contato gerado pela interação de um fluido escoando em regime turbulento com uma superfície sólida gera uma região que pode ser dividida em três camadas: a subcamada viscosa, a camada logarítmica e a camada turbulenta (WILCOX, 1998), como observado na Figura 3.2.

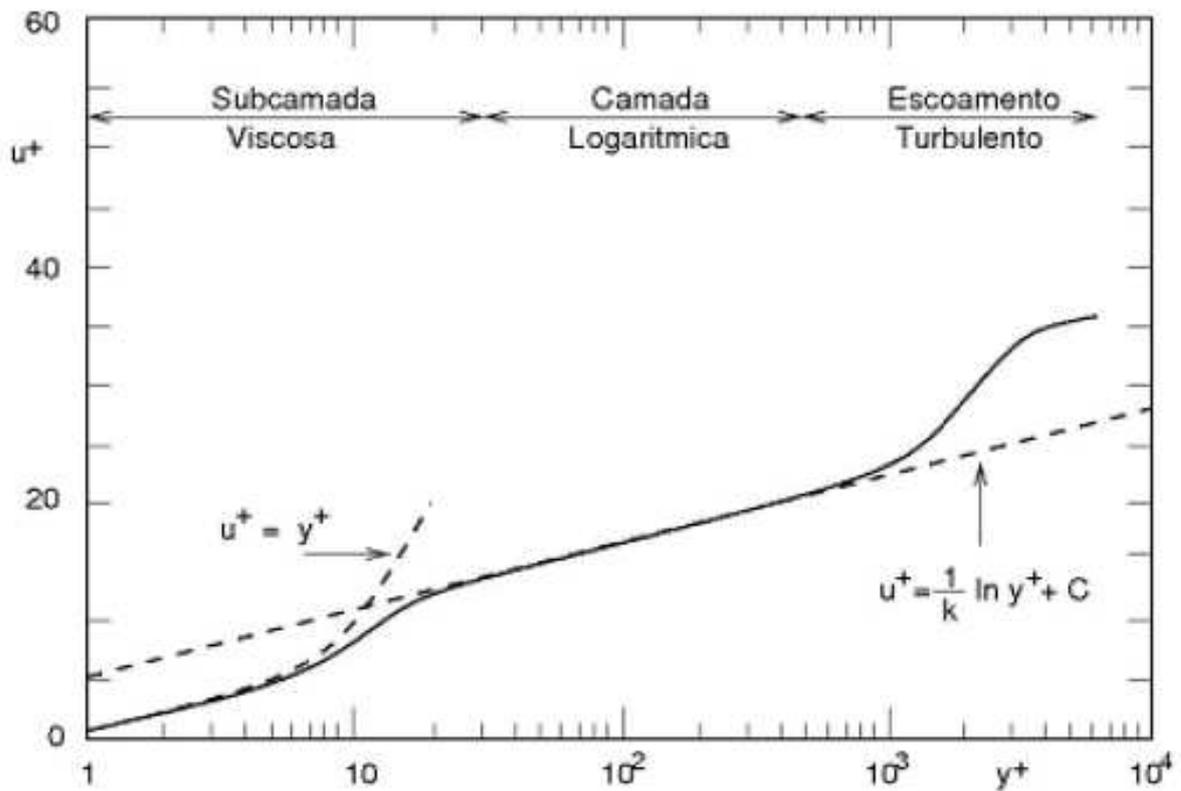


Figura 3.2 - Representação do perfil de velocidade em uma camada limite turbulenta (adaptado de Wilcox, 1998)

Desta forma, a função logarítmica da camada turbulenta é representada pela Equação 3.1.

$$u^+ = \frac{u_t}{u_\tau} = \frac{1}{k} \ln(y^+) + C \quad (3.1)$$

sendo,

$$y^+ = \frac{\rho u_\tau \Delta y}{\mu} \quad (3.2)$$

$$u_\tau = \left(\frac{\tau_w}{\rho} \right)^{1/2} \quad (3.3)$$

em que, u^+ é a velocidade adimensional próxima à parede, u_τ é a velocidade de fricção, u_t é a velocidade tangencial à uma distância Δy da parede, y^+ é a distância adimensional da parede, τ_w é a tensão de cisalhamento na parede, k é a constante de Von Kármán e C é a constante da camada logarítmica que depende da rugosidade da parede.

O cálculo de τ_w pode ser realizado por meio das Equações 3.4 e 3.5 (Equação de Blasius para o coeficiente de atrito em um tubo liso) e, de posse de valores de u_τ , ajusta-se o valor de Δy para se obter um valor de y^+ desejável.

$$\tau_w = \frac{1}{2} C_f \rho u^2 \quad (3.4)$$

$$C_f = 0,079 Re^{-0,2} \quad (3.5)$$

Em situações em que não é necessária alta precisão nos resultados simulados, o objetivo geral é que a camada limite englobe um número suficiente de células da malha computacional. No entanto, para situações que exijam altas precisões, como é o caso de escoamentos turbulentos, recomenda-se que o valor de y^+ seja próximo a 1. A grande adversidade encontrada é que números baixos de y^+ carecem de malhas extremamente refinadas, o que gera altos custos computacionais (MARTINS, 2015). A solução é a utilização de funções de parede que permitam a utilização de valores significativamente maiores de y^+ em que, no caso do emprego de funções de parede escaláveis, o y^+ deve ser aproximadamente 11 e, no caso das funções padrão, ele deve estar no intervalo de 15 à 100 (ANSYS, 2016). Martins (2015) realizou estudos para determinar a malha que fornece os melhores resultados para suas simulações de um leito fluidizado circulante em que as funções de parede padrão forneceram os melhores resultados em um tempo de simulação menor. Isto posto, optou-se por utilizar funções de parede padrão, também, nas simulações realizadas nesta Dissertação em que o valor da distância da parede foi de 3 mm apresentando uma taxa de crescimento radial de 1,1 e axial de 1,05, resultando em um y^+ de, aproximadamente, 34.

Desta forma, malha computacional utilizada nesta Dissertação foi confeccionada no *software* ANSYS-ICEM[®], versão 17.2, e consiste de, aproximadamente, 350.000 células hexaédricas e se encaixa na classificação de malhas estruturadas. Na Figura 3.3, encontram-se as imagens da malha utilizada em diferentes posições.

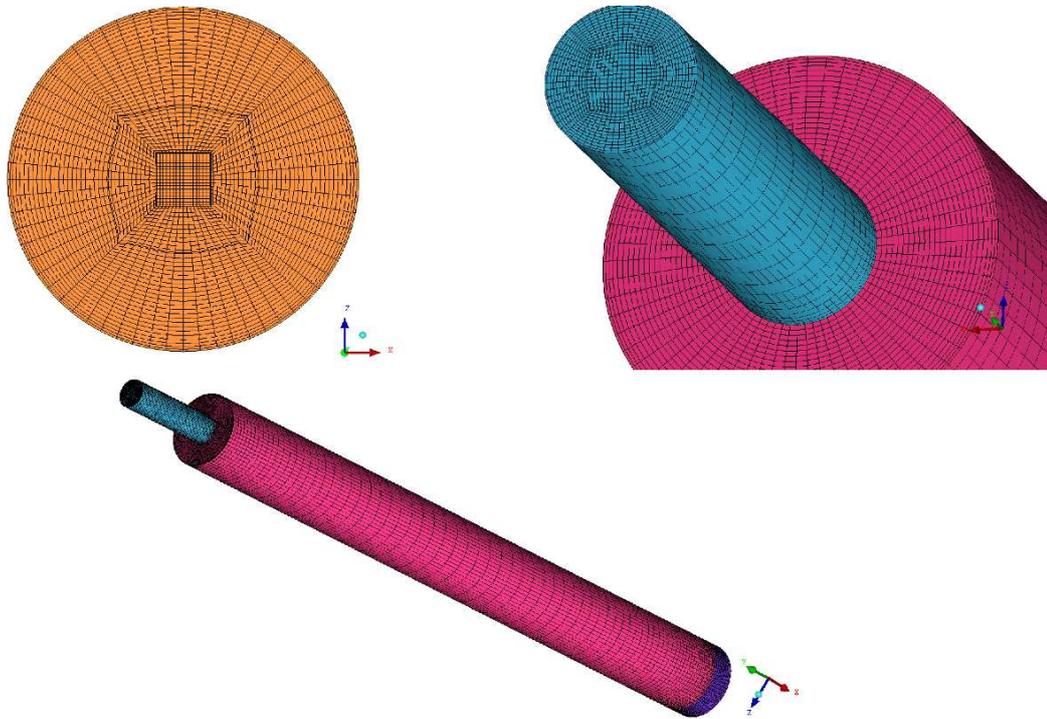


Figura 3.3 - Malha computacional estruturada confeccionada no software ANSYS-ICEM 17.2.

Após a confecção da malha computacional, foram realizadas simulações numéricas, com o *software* resolvidor numérico ANSYS-FLUENT[®] na versão 17.2, resultando em séries temporais de queda de pressão respectivas à cada condição estipulada na Tabela 3.1. Tal gerador de malhas, bem como o resolvidor numérico, ambos do pacote ANSYS, são ferramentas consagradas na construção de malhas computacionais e simulações de sistemas complexos em todo o mundo, em que o *software* ANSYS-FLUENT[®] mostra-se eficiente no estudo de sistemas particulados através da abordagem Euler-Euler, como mostrado em Santos (2011), Duarte (2006) e Xue et al. (2011), evidenciando o interesse de sua utilização nesta Dissertação. Os dados de pressão para a construção das séries temporais simuladas foram obtidos nos pontos ilustrados na Figura 3.4.

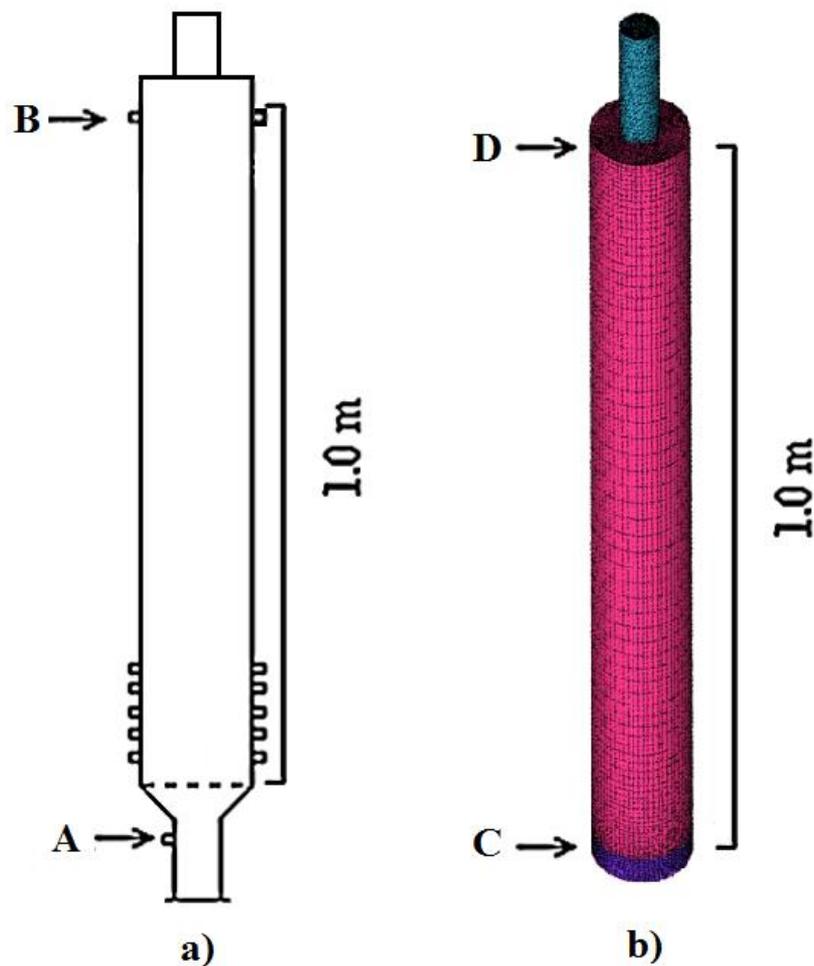


Figura 3.4 - Pontos de coleta dos dados de pressão; a) experimentos realizados por Prieto (2014); b) simulações.

Sendo o ponto C localizado, na direção axial, à 0,5 cm da entrada de ar (base da coluna) e, na direção radial, à 0,5 cm da parede e o ponto D localizado, assim como no ponto B, na direção axial à 3,65 cm abaixo da restrição de transição da coluna para o duto de saída e, na direção radial, também à 0,5 cm da parede da coluna. Assim, com a evolução da simulação no tempo, foram exportados dados pontuais de pressão nos pontos supracitados possibilitando, através da subtração, obter os dados de queda de pressão no leito em uma série temporal.

Desta forma, as condições de contorno, bem como os modelos utilizados nas simulações realizadas nesta Dissertação, estão apresentadas na Tabela 3.3.

Tabela 3.3 - Condições de contorno e modelos utilizados na simulação.

Condições de contorno	Entrada do leito:	Velocidade do ar Intensidade turbulenta: 5% Razão de viscosidade turbulenta: 10
	Saída do leito:	Pressão atmosférica Intensidade turbulenta (backflow): 5% Razão de viscosidade turbulenta (backflow): 10
		Parede: condição de não deslizamento
Métodos de solução		Esquema de acoplamento pressão velocidade: SIMPLE
		<u>Discretização no espaço:</u> <i>Momentum</i> : up-wind de 2ª ordem Energia cinética turbulenta: MUSCL de 3ª ordem Dissipação turbulenta: MUSCL de 3ª ordem
		Formulação transiente: implícita de 2ª ordem
Critério de convergência		1.10^{-3} (CHIESA et al., 2005; UTIKAR e RANADE, 2007; SANTOS, 2011)
Modelo multifásico		Euleriano Granular
Viscosidade granular		SYAMLAL e O'BRIEN (1993)
Viscosidade granular bulk		LUN et al. (1984)
Viscosidade friccional		Johnson e Jackson (1987)
Ângulo de fricção interna		25° (VAN WACHEM et al., 1999)
Pressão de sólidos		LUN et al. (1984)
Função de distribuição radial		LUN et al. (1984)
Modelo de arraste		Gidaspow et. al. (1992)
Modelo de turbulência		<i>Realizable k-ε</i>
Limite máximo de empacotamento		Partícula A de Geldart: 0,63 Partícula B de Geldart: 0,61 Partícula D de Geldart: 0,60
Passo de tempo		1.10^{-4} s
Coefficiente de restituição		0,9
Tempo de simulação		10 s após o a condição de estado estacionário

4 CAPÍTULO IV

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Este capítulo tem como objetivo central apresentar os resultados comparativos entre as simulações CFD, realizadas nesta Dissertação, e os resultados experimentais oriundos de Prieto (2014), com o intuito de avaliar a representatividade da dinâmica não linear, intrínseca ao contato gás-partícula, gerada pelo modelo. Primeiramente, apresentam-se as análises das séries temporais de queda de pressão comparando-se qualitativamente seus formatos e, quantitativamente, suas médias e desvios padrão. Logo após, encontra-se o conjunto de análises referente ao domínio da frequência através da obtenção dos espectros de densidade de potência de cada série temporal (simulada e experimental) e uma discussão das limitações apresentadas por tal análise quando a natureza do fenômeno estudado exibe um caráter aperiódico. A análise caótica é aplicada e, em seu início, é apresentado os resultados gerados no processo de obtenção da mínima dimensão de imersão para a reconstrução das bacias de atração pelo método da estagnação da dimensão de correlação possibilitando o cálculo do maior expoente de Lyapunov, da dimensão de correlação e da entropia de Kolmogorov para cada série temporal analisada.

4.1 ANÁLISE COMPARATIVA ENTRE AS SÉRIES TEMPORAIS EXPERIMENTAIS E SIMULADAS

Encontram-se, da Figura 4.1 à Figura 4.4, as comparações entre as séries temporais de mínima fluidização, experimentais e simuladas, para as condições relacionadas na Tabela 3.1, sendo os valores médios de queda de pressão e os desvios padrão de cada série, encontrados nas Tabelas 4.1 e 4.2, respectivamente.

Obteve-se séries temporais, cuja homogeneidade em torno de uma média, se assemelha àquelas apresentadas nas séries experimentais, que é uma característica comum às séries temporais de queda de pressão coletadas no interior de leitos fluidizados (VAN DEN BLEEK e SCHOUTEN, 1993; VANDER STAPPEN, 1996; PRIETO, 2014).

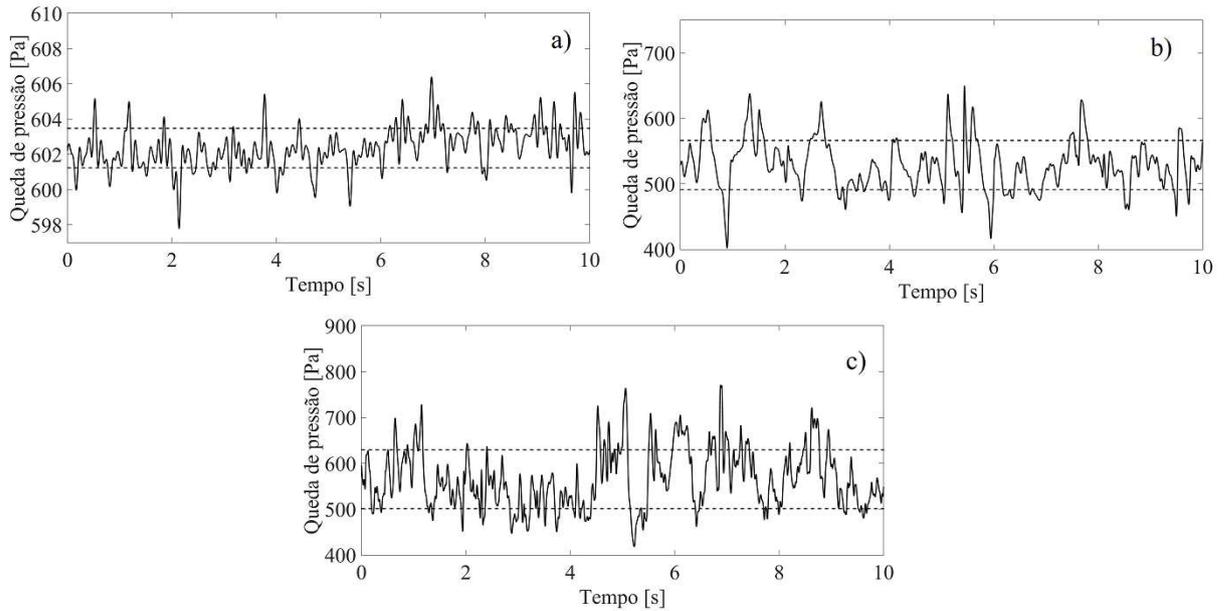


Figura 4.1 - Séries temporais de mínima fluidização ($U_{mf} = 0,24 \text{ m s}^{-1}$) para partículas A da classificação de Geldart e carregamento de $0,4 \text{ kg}$; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.

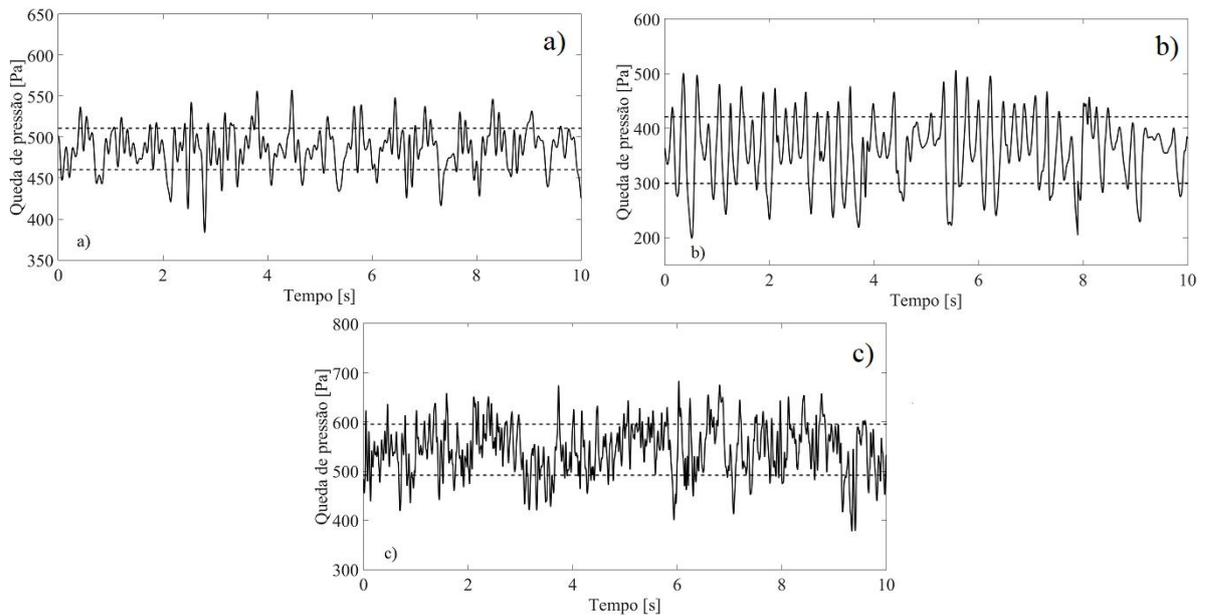


Figura 4.2 – Séries temporais de mínima fluidização ($U_{mf} = 0,26 \text{ m s}^{-1}$) para partículas B da classificação de Geldart e carregamento de $0,4 \text{ kg}$; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.

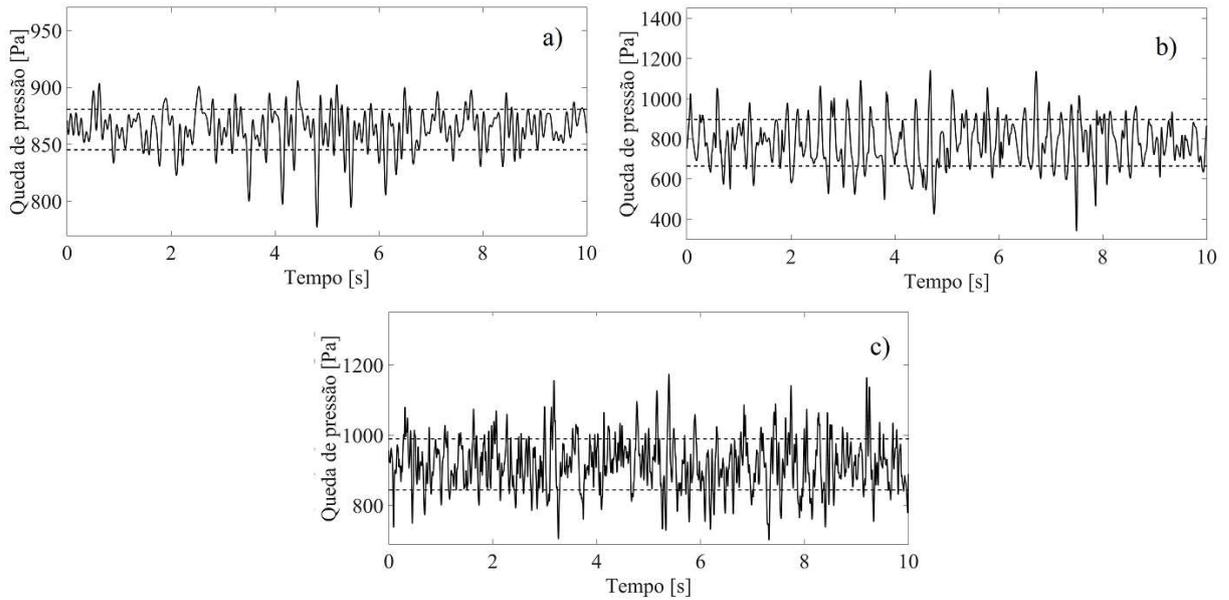


Figura 4.3 - Séries temporais de mínima fluidização ($U_{mf} = 0,28 \text{ m s}^{-1}$) para partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,8 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.

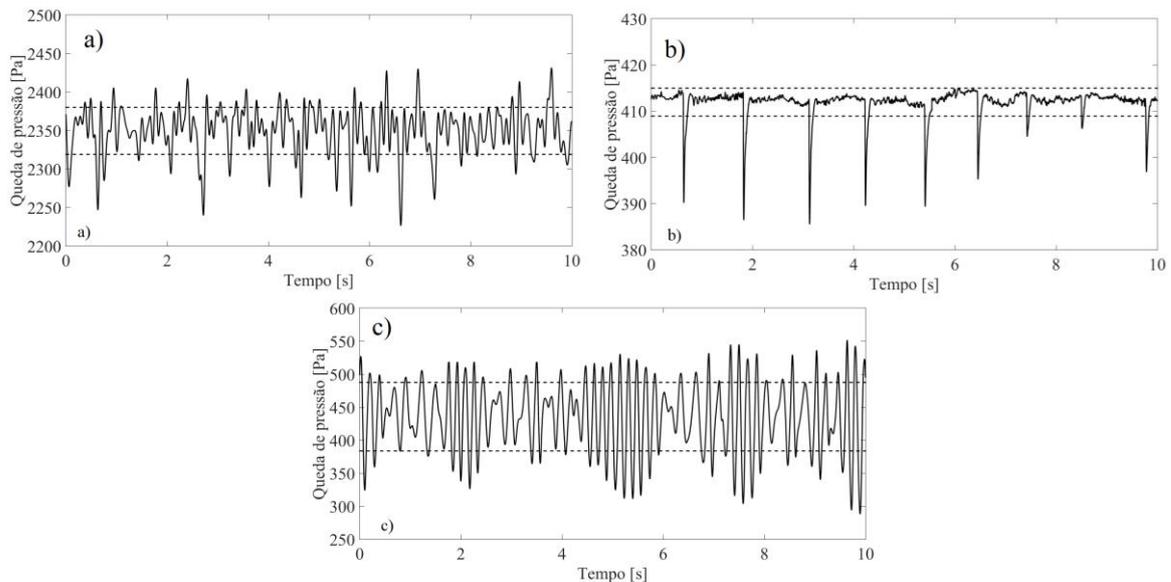


Figura 4.4 - Séries temporais de mínima fluidização ($U_{mf} = 0,65 \text{ m s}^{-1}$) para partículas D da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.

Nota-se, de maneira geral, que o modelo conseguiu gerar valores médios próximos àqueles obtidos experimentalmente, destacando-se a condição para as partículas A com carregamento de 0,4 kg, que forneceu um desvio de 6,15 % em relação ao valor experimental, e a condição para partículas B com carregamento de 0,8 kg, a qual gerou o desvio de 6,25 %, ambas as condições sem a utilização da modelagem da turbulência.

Tabela 4.1 - Comparação entre os valores médios de queda de pressão obtidos para as séries temporais experimentais e simuladas.

Partícula - Carregamento (kg)	- ΔP (Pa) Experimental	- ΔP (Pa) CFD sem $k-\varepsilon$	Desvio Relativo (%)	- ΔP (Pa) CFD com $k-\varepsilon$	Desvio Relativo (%)
A - 0,4	602,36	565,30	6,15	528,86	12,20
B - 0,4	485,56	543,67	11,97	359,93	25,87
B - 0,8	863,01	916,95	6,25	781,02	9,50
D - 0,4	2349,48	435,63	81,46	411,96	82,47

No caso das microesferas de vidro do tipo D da classificação de Geldart, o modelo apresentou dificuldades na representação de valores médios de queda de pressão do leito para ambas as simulações (com e sem o modelo de turbulência), em que a queda de pressão média de mínima fluidização para a série temporal experimental foi da ordem de 2340 Pa, enquanto que, para os dados simulados, foram obtidos valores em torno de 412 Pa, no caso da simulação com o modelo de turbulência, e 436 Pa para o caso da simulação sem o modelo de turbulência.

Comparando-se a capacidade de previsão do modelo, a depender do diâmetro de partícula, nota-se que, para partículas menores (caso das partículas A e B) o modelo consegue gerar valores médios próximos aos experimentais, diferentemente da situação em que se utiliza partículas maiores (caso das partículas D). Tal dificuldade do modelo pode estar relacionada à consideração da fase particulada como um domínio contínuo pela abordagem Euler-Euler em que, à medida que o diâmetro de partícula do material diminui, mais adequada se torna a consideração de que aquela fase possa se comportar como um “fluido granular” que possibilita a aplicação de leis de conservação de massa, energia e *momentum*.

Simulações com sistemas particulados que apresentem partículas com diâmetros maiores podem ser realizadas através da abordagem Euler-Lagrange, a qual considera a fase fluida como domínio contínuo e a fase particulada como domínio discreto, em que é possível a aplicação de um balanço de forças em cada elemento discreto representante de cada partícula no leito estabelecendo a comunicação entre as duas fases através da força de arraste que entra no balanço de *momentum* da fase fluida. A grande desvantagem deste método é a alta capacidade computacional requerida que chega a ser, segundo Chiesa et al. (2005), quatro vezes maior que aquela demandada pela abordagem Euler-Euler, tornando tal abordagem

restrita, na maioria dos casos, a pequenos números de partículas e equipamentos de pequena escala.

Tabela 4.2 - Comparação entre os valores de desvio padrão de queda de pressão obtidos para as séries temporais experimentais e simuladas.

Partícula - Carregamento (kg)	σ (Pa) Experimental	σ (Pa) CFD sem $k-\varepsilon$	Desvio Relativo (%)	σ (Pa) CFD com $k-\varepsilon$	Desvio Relativo (%)
A - 0,4	1,12	64,15	5627,68	37,67	3263,39
B - 0,4	25,31	51,92	105,14	60,94	140,77
B - 0,8	17,77	72,89	310,19	115,83	551,83
D - 0,4	30,58	51,95	69,88	3,02	90,12

Observa-se na Tabela 4.2, que o modelo apresentou grande dificuldade em gerar valores de desvio padrão próximos daqueles obtidos nas séries temporais experimentais, resultando em números superestimados desta grandeza para todas as condições. Destaca-se como maior desvio, aquele relativo à simulação com a partícula A da classificação de Geldart. Partículas da classificação A apresentam expansão homogênea do leito após a condição de mínima fluidização, resultando em valores pequenos de desvio padrão para séries temporais experimentais (KUNII e LEVENSPIEL, 1991). A expansão homogênea do leito está relacionada à força coesiva que se torna mais efetiva em leitos com partículas de diâmetros menores, dificultando desta forma, a transição da condição de mínima fluidização para o regime de borbulhamento. As partículas que apresentam maior caráter coesivo são aquelas do tipo C da classificação de Geldart, em que a contribuição deste caráter diminui à medida que se aumenta o diâmetro da partícula (tipos A, B e D).

Desta forma, é possível que o modelo apresente dificuldades na representação do caráter coesivo entre as partículas, sendo que, ao considerar a fase particulada como um domínio contínuo, o modelo concede a contribuição coesiva da fase particulada ao acoplamento entre as equações de conservação da massa e de *momentum*, tornando menos efetiva a representação do aumento da força coesiva entre as partículas à medida que o diâmetro da partícula diminui. Dito isto, o modelo parece não gerar um leito homogêneo na condição de mínima fluidização, resultando em bolhas que aumentam a amplitude do sinal de queda de pressão retratado na série temporal, como pode ser observado na Figura 4.5.

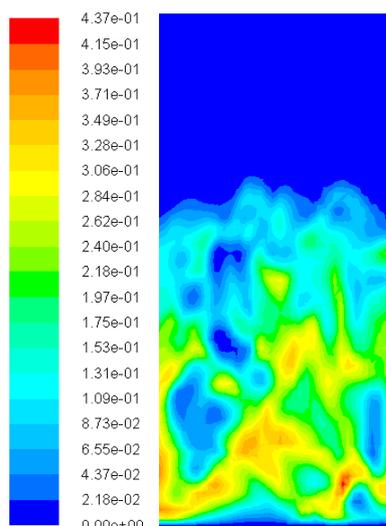


Figura 4.5 - Perfil de fração volumétrica da fase particulada para as partículas do tipo A da classificação de Geldart e 0,4kg de carregamento (perfil retirado no tempo de 10 s após o atingimento da condição de estado estacionário)

Outro aspecto importante adjacente à eficácia do modelo matemático em gerar valores médios semelhantes à realidade retratada experimentalmente, é a certificação de sua capacidade para reproduzir as características dinâmicas reais dos fenômenos que ocorrem no interior do leito fluidizado. Embora seja possível a comparação qualitativa das séries temporais observadas, sua análise visual torna-se limitada e inconclusiva. Desta forma, segue, nos tópicos adiante, as análises espectrais através da obtenção dos espectros de potência de cada série exposta anteriormente, seguidas da análise topológica de suas bacias de atração reconstruídas em seus espaços de fases, possibilitando o cálculo dos invariantes caóticos: dimensão de correlação, maior expoente de Lyapunov e entropia de Kolmogorov, afim de fornecer parâmetros qualitativos e quantitativos para a comparação entre as dinâmicas experimental e simulada, permitindo uma melhor avaliação das características dinâmicas geradas pelo modelo matemático utilizado.

4.2 ANÁLISE ESPECTRAL

Da Figura 4.6 à Figura 4.9, encontram-se os espectros de potências referentes à cada série temporal exposta anteriormente. Uma análise global permite a identificação de uma afinidade entre os valores de desvio padrão e a ordem de grandeza dos espectros de potência das séries temporais. Os dados experimentais para as partículas A, com carregamento de 0,4 kg, e B, com carregamento de 0,8 kg, apresentaram valores menores de desvio padrão (1,12 Pa e 17,77 Pa, respectivamente) que foram refletidos em baixas amplitudes ocasionadas nos

espectros Figura 4.6a e da Figura 4.8a. Os demais espectros (Figura 4.7 e Figura 4.9), resultantes das séries temporais para as condições utilizando as partículas B e D com carregamento de 0,4 kg, geraram diferenças menores entre os valores de desvio padrão das séries temporais experimentais e simuladas, ocasionando, também, amplitudes da mesma ordem de grandeza.

Uma característica que pode ser observada é o decréscimo das densidades de frequência no intervalo de 10 a 20 Hz para a maioria dos espectros oriundos de séries simuladas. Isto ilustra uma característica presente na dinâmica de leitos fluidizados (JOHNSSON et al., 2000), como retratado, também, nos espectros experimentais (Figura 4.6 à Figura 4.9).

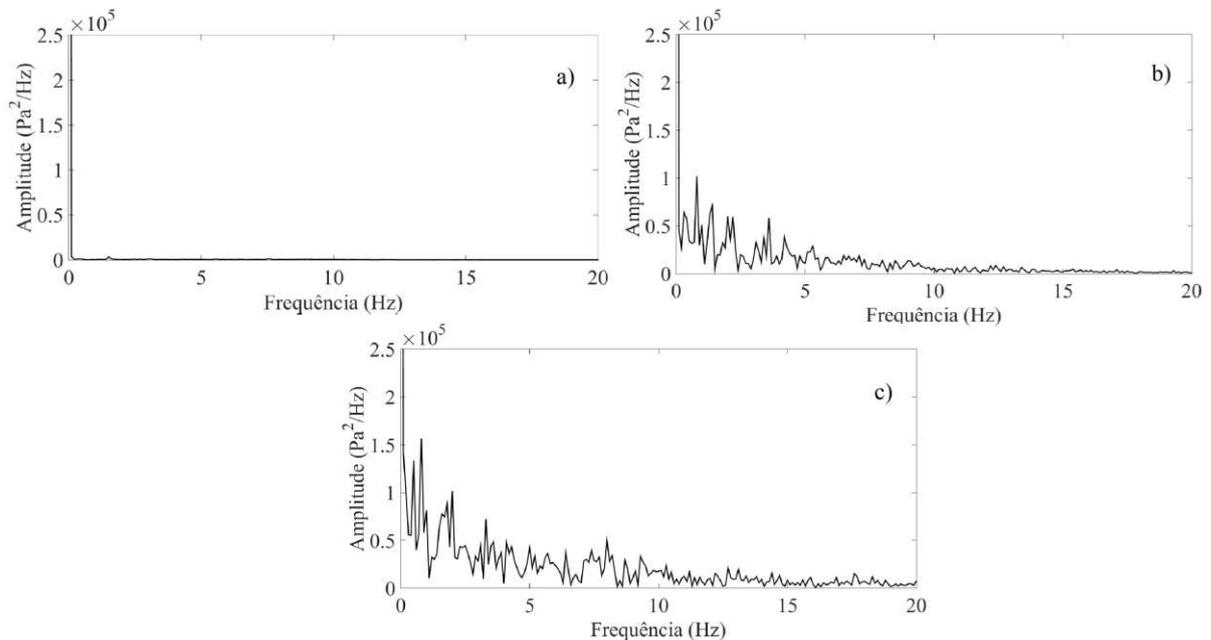


Figura 4.6 - Espectros de potência para partículas A da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.

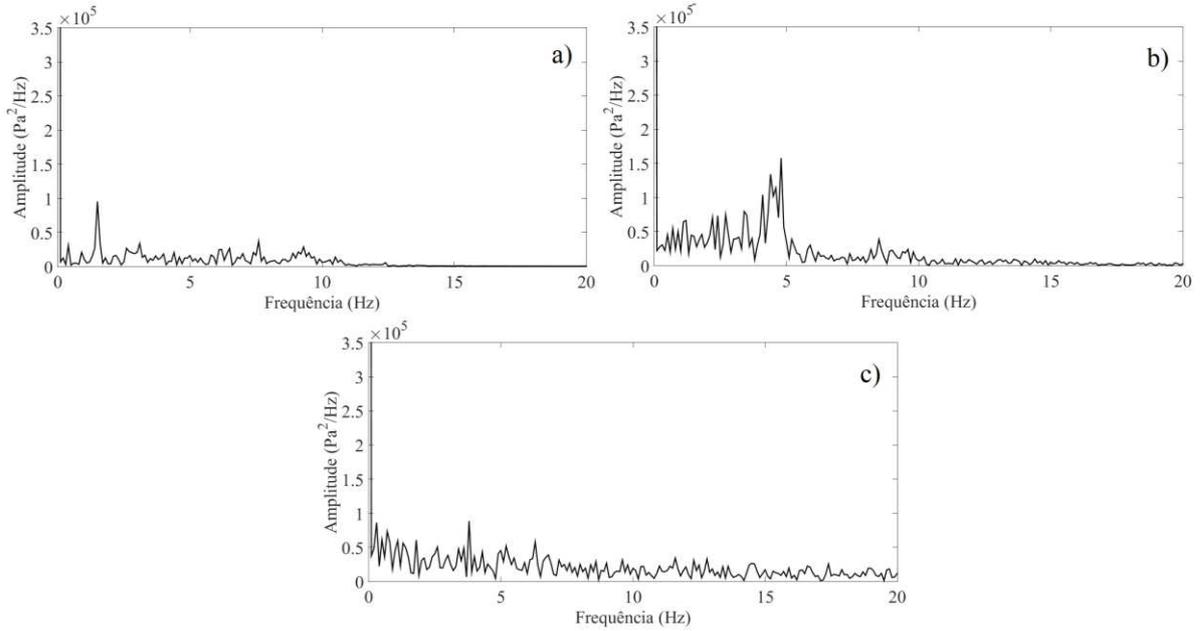


Figura 4.7 - Espectros de potência para partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.

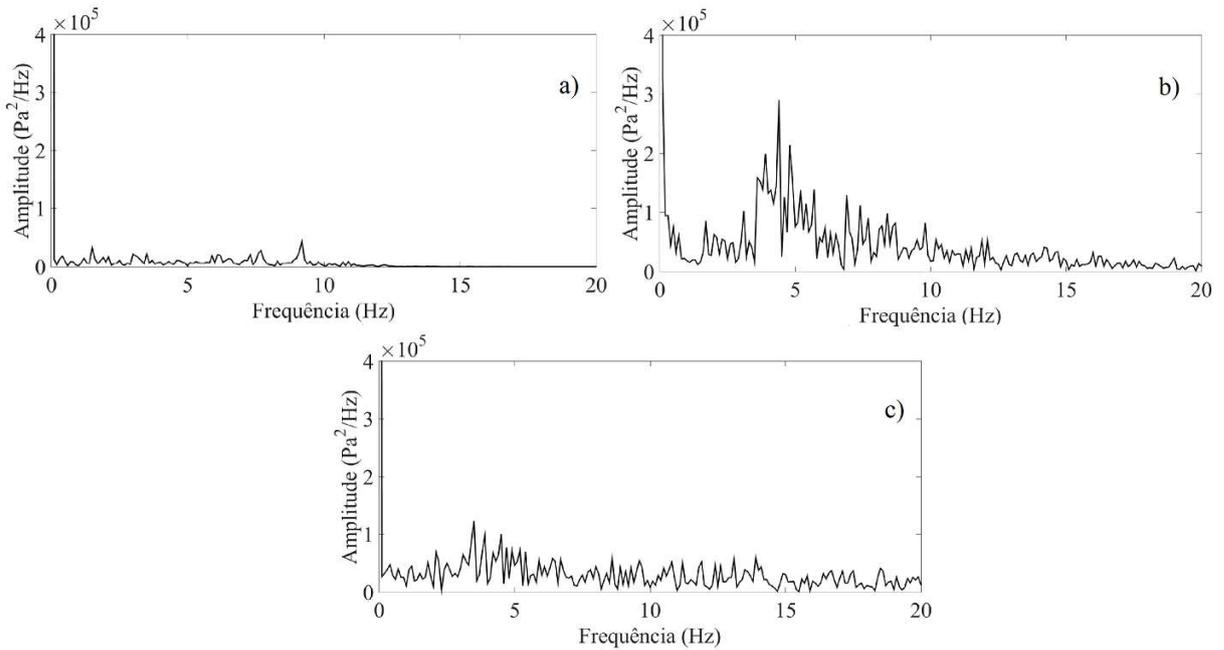


Figura 4.8 - Espectros de potência para partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,8 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.

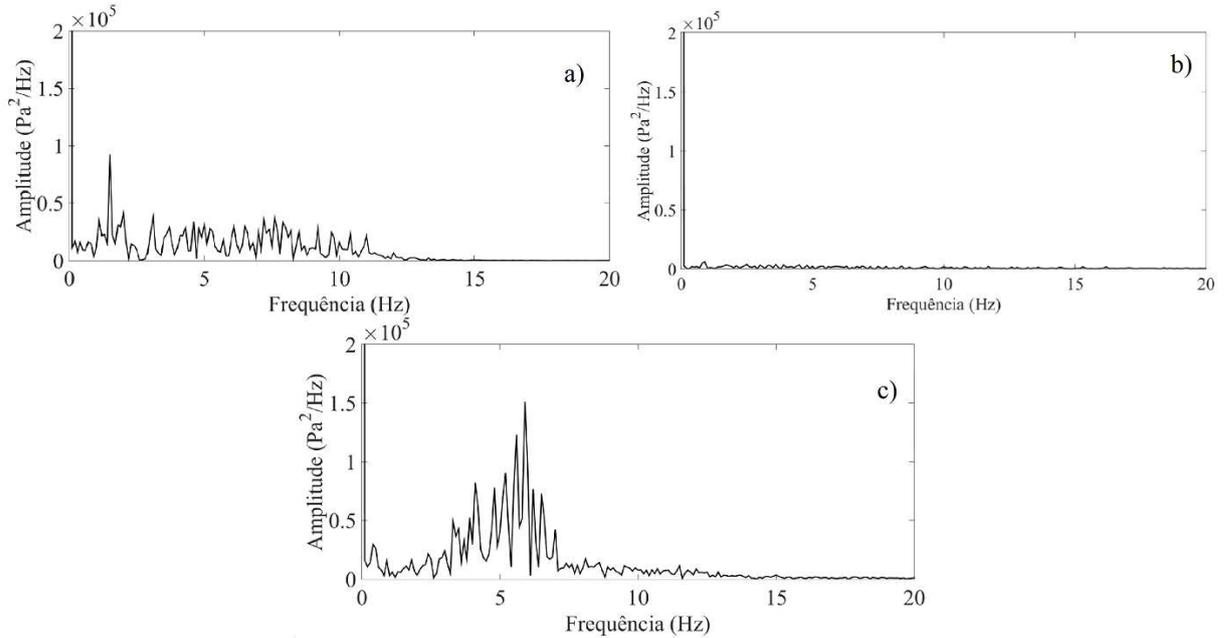


Figura 4.9 - Espectros de potência para partículas D da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.

É possível observar, também, a presença de espectros contínuos para todas as séries temporais analisadas inclusive aquelas originadas das simulações, indicando a presença de um comportamento não periódico nos resultados obtidos pelo modelo. Fenômenos caóticos determinísticos apresentam espectros de potência contínuos devido à infinidade de frequências intrínsecas à sua dinâmica. Leitos fluidizados operando em regime de mínima fluidização apresentam comportamento caótico ocasionado pela forte não linearidade inerente à interação gás-partícula, aliada aos movimentos oscilatórios com padrões alternados das partículas no interior do leito (PRIETO, 2014). Tal característica propicia limitações ao método de análise espectral. Apesar da capacidade do método em garantir a diferenciação entre fenômenos periódicos e aperiódicos, ele não fornece informações a respeito do grau de aleatoriedade do sistema, dificultando a caracterização quantitativa de sua condição de operação e incapacitando o método no que diz respeito à prover uma validação da dinâmica caótica originada por um modelo matemático. Desta forma, surge a análise do caos, que proporciona ferramentas obtidas através da análise topológica e probabilística da solução do sistema em seu espaço de fases, propiciando a caracterização quantitativa de sistemas caóticos determinísticos, que é o caso da fluidodinâmica no interior de leitos fluidizados.

4.3 ANÁLISE DO CAOS

É importante a realização de uma análise para determinar o valor da mínima dimensão de imersão necessária para que não haja indevidas dobras e cruzamentos de órbitas durante a reconstrução da bacia de atração em seu espaço de fases. Takens (1981) demonstrou que uma bacia de atração pode ser apropriadamente reconstruída em uma dimensão de imersão duas vezes maior que sua dimensão de correlação ($m > 2D_2$). No entanto, não é possível, na prática, saber o valor da dimensão de correlação de antemão (CASTILHO, 2011).

A dependência que a dimensão de correlação exibe em relação às características topológicas da bacia de atração possibilita a obtenção do valor da mínima dimensão de imersão por meio de seu monitoramento.

Realizam-se várias reconstruções da bacia de atração do sistema em diferentes dimensões de imersão, obtendo-se valores de dimensão de correlação até que estes não apresentem mudanças significativas. O ponto em que ocorre a estagnação da dimensão de correlação indica que, a partir daquela dimensão de imersão, a bacia de atração não sofrerá deformidades em seu formato e pode-se usar tal valor para se obter os demais invariantes caóticos que caracterizarão o comportamento dinâmico do sistema. Desta forma, esta análise foi realizada para as séries temporais experimentais e simuladas com o intuito de encontrar as dimensões de imersão para cada condição, cujos gráficos estão expostos na Figura 4.10.

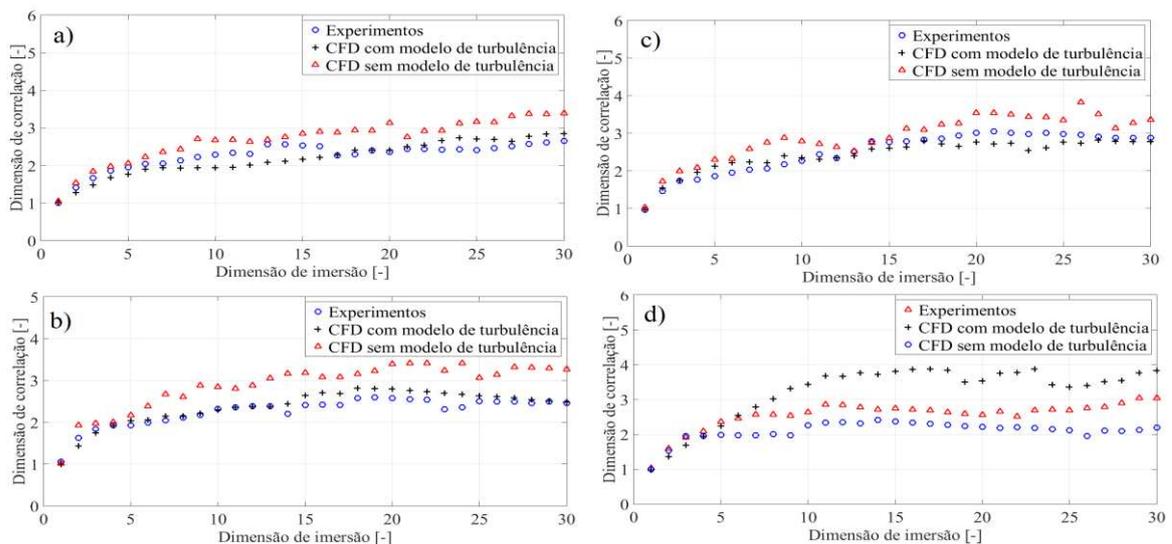


Figura 4.10 - Determinação da mínima dimensão de imersão da bacia de atração via estagnação da dimensão de correlação: a) partículas A da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; b) partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; c) partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,8 kg; d) partículas D da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg.

As curvas expostas na Figura 4.10 mostram que houve a estagnação da dimensão de correlação para todas as condições resultando em dimensões de imersão cujos valores encontram-se na Tabela 4.3.

Tabela 4.3 - Condições simuladas e suas respectivas dimensões de imersão.

Classificação de Geldart	Massa carregada (kg)	Dimensão de imersão [-]
A	0,4	13
B	0,4	13
B	0,8	16
D	0,4	10

As curvas para as séries experimentais e simuladas apresentaram tendências próximas, traduzindo a semelhança ocasionada na heterogeneidade das dimensões das bacias de atração, para cada condição. Os valores de dimensão de imersão revelam o número de eixos ortogonais necessários para expor a complexidade da bacia de atração sem que haja deformações que prejudiquem sua análise topológica. Desta forma, após a obtenção da mínima dimensão de imersão, reconstruiu-se as bacias de atração para cada série temporal das condições expostas na Tabela 3.1, afim de propiciar uma análise qualitativa, através da Figura 4.11 à Figura 4.14, possibilitando, também, o cálculo dos invariantes caóticos: maior expoente de Lyapunov e a entropia de Kolmogorov.

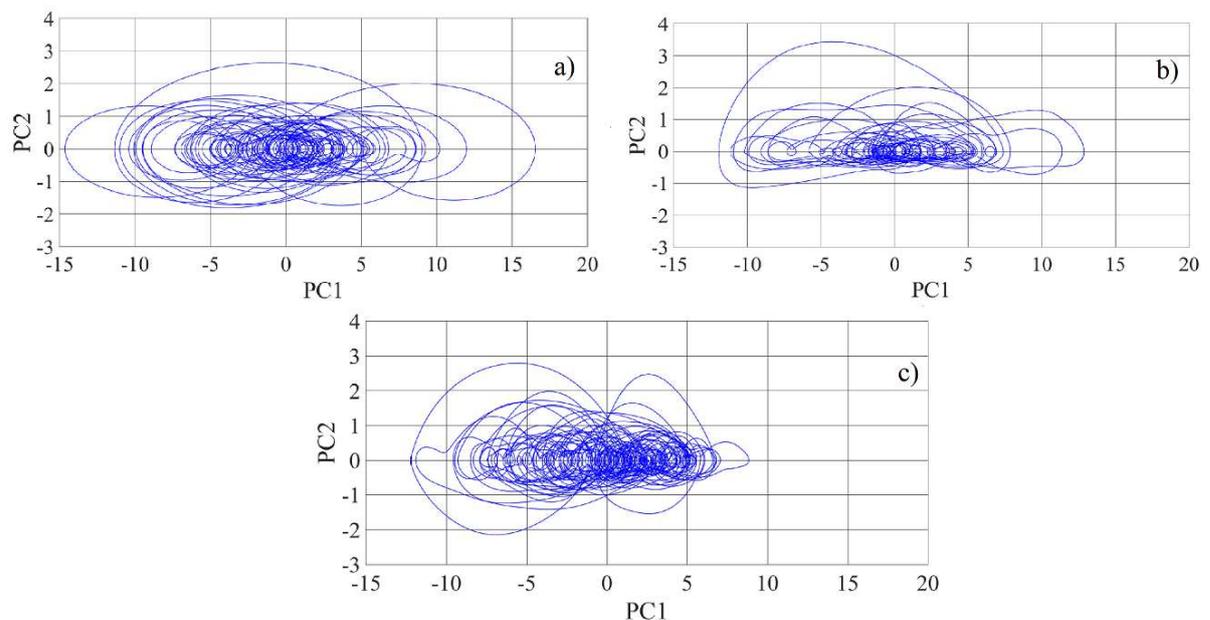


Figura 4.11 – Bacias de atração das séries temporais para partículas A da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.

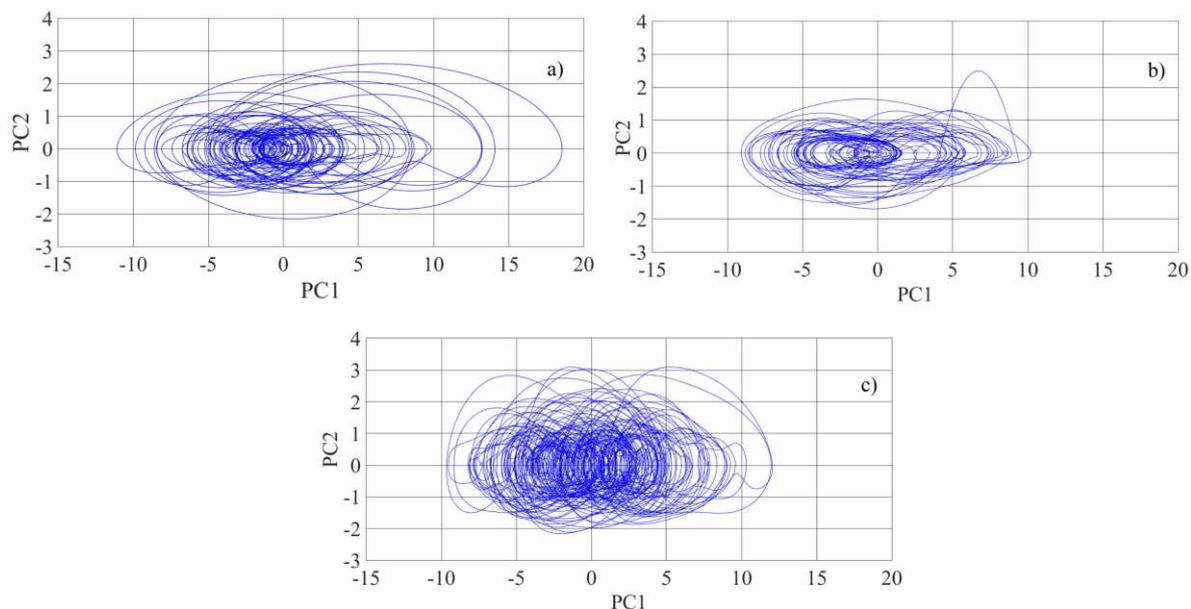


Figura 4.12 – Bacias de atração das séries temporais para partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.

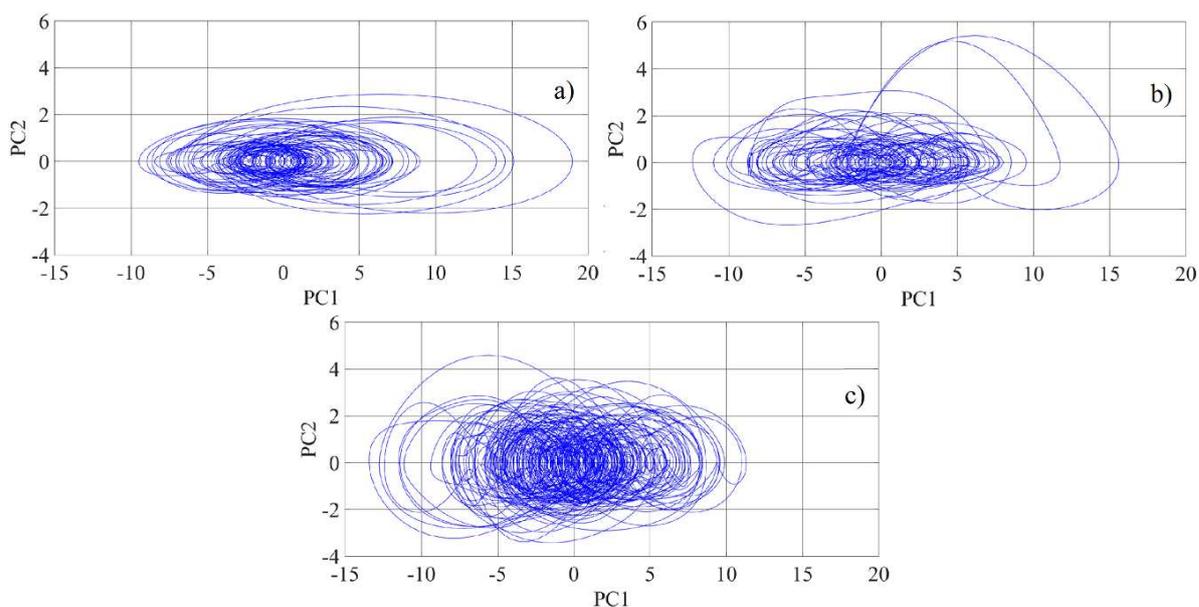


Figura 4.13 – Bacias de atração das séries temporais para partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,8 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.

Nota-se que, os núcleos centrais formados pelas trajetórias da bacia de atração experimental, bem como seu formato, podem ser observados naquelas originadas das simulações CFD, mostrando, qualitativamente, que o modelo é capaz de reproduzir a distribuição de estados dinâmicos dos fenômenos detectados via série temporal experimental uma vez que a disposição topológica inerente à bacia de atração de um determinado sistema seja a sua “impressão digital”.

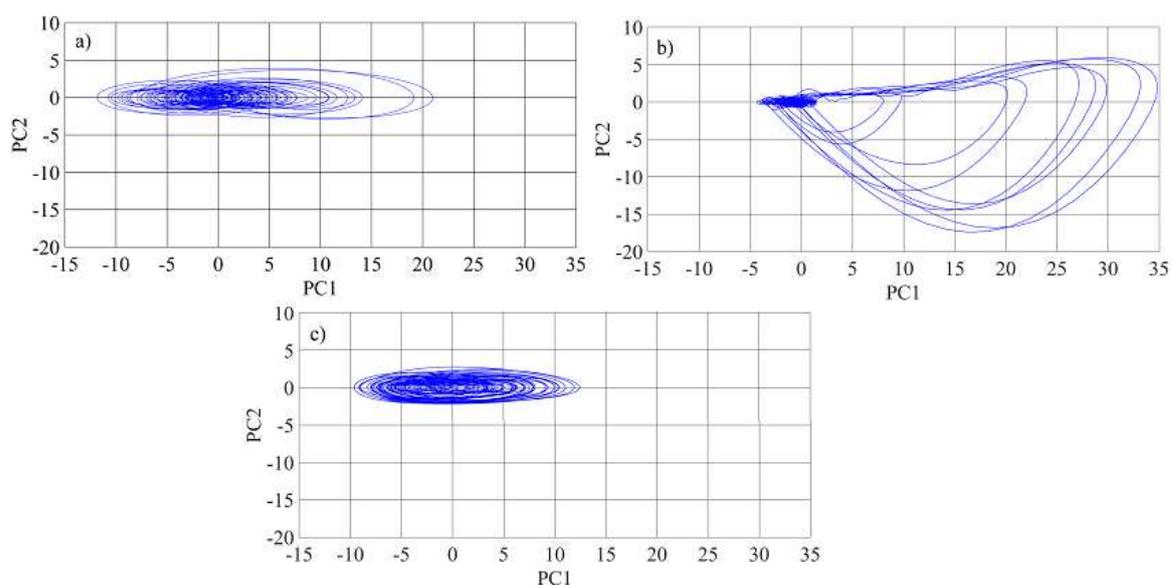


Figura 4.14 – Bacias de atração das séries temporais para partículas D da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg; a) experimental; b) CFD com modelo de turbulência; c) CFD sem modelo de turbulência.

A Figura 4.14b reflete a dinâmica da série temporal exposta na Figura 4.4b que segue um padrão qualitativo diferente daquele apresentado na série experimental (Figura 4.4a). É visível na Figura 4.14b, uma região com baixa dispersão da qual nascem nove trajetórias de grande alcance no espaço de fases. Tal comportamento é relacionado aos nove picos inferiores presentes na série temporal da Figura 4.4b que apresenta, também, uma região homogênea de baixa dispersão (desvio padrão de 3,02 Pa). Ainda, através da análise da Figura 4.14, nota-se a presença de dois núcleos centrais na bacia de atração originada da série temporal experimental que podem, também, ser observados naquela originada pela simulação sem o modelo de turbulência. Desta forma, semelhanças qualitativas entre estas duas dinâmicas são observadas, embora exposta a dificuldade do modelo em representar, na sua totalidade, a dispersão das trajetórias constituídas pela série experimental no espaço de fases.

Ainda que a bacia de atração seja considerada uma “impressão digital” apresentando formato específico para a dinâmica do sistema em diferentes condições de operação, sua análise qualitativa torna-se limitada, surgindo a necessidade da obtenção de alguns parâmetros que possam quantificar suas qualidades topológicas ocasionando a possibilidade da caracterização da dinâmica geradora de suas trajetórias. Assim, os valores dos invariantes caóticos, dimensão de correlação, maior expoente de Lyapunov e entropia de Kolmogorov para as séries experimentais e simuladas obtidas nas condições contidas na Tabela 3.1, encontram-se expostos na Tabela 4.4 à Tabela 4.7.

Da Figura 4.11 à Figura 4.14 é mostrado que as bacias de atração reconstruídas nesta Dissertação estão contidas em volumes finitos em seus espaços de fases. Sistemas dissipativos apresentam contração do volume compreendido pela sua solução no espaço de fases e, aqueles que forneçam um valor positivo para o maior expoente de Lyapunov (*LLE*) exibem caos em sua dinâmica, sendo, segundo Eckmann e Ruelle (1992), a sensibilidade às condições iniciais do sistema dada pelo maior expoente de Lyapunov (*LLE*). Tal característica pode ser observada nos resultados de *LLE* para todas as condições mostradas da Tabela 4.4 à Tabela 4.7, tanto para as séries temporais experimentais, quanto para aquelas obtidas nas simulações com a presença ou ausência do modelo de turbulência.

A obtenção do maior expoente de Lyapunov apresenta-se como uma ferramenta simples na identificação do caos no comportamento dinâmico de sistemas complexos e os resultados obtidos mostram a capacidade do modelo Euleriano Granular Multifásico (MEGM) em gerar uma dinâmica caótica tal qual aquela observada experimentalmente (VAN DEN BLEEK e SCHOUTEN, 1993; VANDER STAPPEN, 1996; PRIETO, 2014).

Tabela 4.4 - Invariantes caóticos obtidos das séries temporais experimental e simuladas para partículas A da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg.

	Experimental	CFD com $k-\varepsilon$	Desvio (%)	CFD sem $k-\varepsilon$	Desvio (%)
<i>LLE</i> [bits/s]	0,027	0,027	0,00	0,019	29,63
D_2 [-]	2,558	2,087	18,41	2,683	4,89
K_{ML} [bits/s]	30,438	27,222	10,57	32,700	7,43

Tabela 4.5 - Invariantes caóticos obtidos das séries temporais experimental e simuladas para partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg.

	Experimental	CFD com $k-\varepsilon$	Desvio (%)	CFD sem $k-\varepsilon$	Desvio (%)
<i>LLE</i> [bits/s]	0,028	0,029	3,57	0,013	53,57
D_2 [-]	2,387	2,376	0,46	3,053	27,90
K_{ML} [bits/s]	42,801	39,566	7,56	52,131	21,80

Tabela 4.6 - Invariantes caóticos obtidos das séries temporais experimental e simuladas para partículas B da classificação de Geldart e carregamento de 0,8 kg.

	Experimental	CFD com $k-\varepsilon$	Desvio (%)	CFD sem $k-\varepsilon$	Desvio (%)
LLE [bits/s]	0,029	0,022	24,14	0,011	62,07
D_2 [-]	2,489	2,633	5,79	3,119	25,31
K_{ML} [bits/s]	63,945	43,309	32,27	72,176	12,87

Tabela 4.7 - Invariantes caóticos obtidos das séries temporais experimental e simuladas para partículas D da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg.

	Experimental	CFD com $k-\varepsilon$	Desvio (%)	CFD sem $k-\varepsilon$	Desvio (%)
LLE [bits/s]	0,028	0,008	71,43	0,027	3,57
D_2 [-]	2,634	3,529	33,98	2,259	14,24
K_{ML} [bits/s]	37,110	2,877	92,25	34,448	7,17

Tão importante quanto a identificação do caos em sistemas dinâmicos é a quantificação do grau de imprevisibilidade inerente ao sistema. Outro parâmetro importante, que possibilita a caracterização de sistemas caóticos determinísticos através da quantificação da taxa média de perda de informação do sistema com a evolução do tempo, é a entropia de Kolmogorov, que resulta em valores nulos para sistemas periódicos e valores positivos para sistemas caóticos determinísticos.

Experimentalmente, Prieto (2014) obteve valores expressivos para a entropia de Kolmogorov ao longo da construção de diferentes curvas características da fluidização, em que os pontos de mínima fluidização apresentaram os maiores valores deste invariante, manifestando a alta complexidade inerente a esta condição. Nota-se que as simulações, de forma geral, resultaram em valores também expressivos de entropia de Kolmogorov para a condição de mínima fluidização, gerando, na maioria dos casos, valores próximos daqueles obtidos das séries temporais experimentais. Isso mostra a capacidade do modelo em representar a complexidade inerente à interação gás-partícula proporcionando a verificação física do comportamento dinâmico resultante do modelo matemático resolvido para condição de mínima fluidização.

O cálculo da dimensão de correlação (D_2) para as séries temporais simuladas também gerou valores próximos aos experimentais com desvios que variam entre 0,46 % e

33,98 %, indicando a semelhança nas características dimensionais entre a maioria das bacias de atração simuladas e experimentais, o que acompanha o aspecto retratado pela entropia de Kolmogorov ao caracterizar a complexidade global do modelo e compara-la àquela mostrada pelas séries temporais experimentais.

Na Tabela 4.7, encontram-se expostos os resultados dos invariantes caóticos obtidos para partículas D da classificação de Geldart e carregamento de 0,4 kg. É possível visualizar, tanto por meio das análises qualitativas da série temporal da Figura 4.4b, quanto por meio da bacia de atração reconstruída (Figura 4.14b) em seu espaço de fases, que a dinâmica gerada pelo modelo, quando utilizado o modelo de turbulência, para as partículas D da classificação de Geldart não representou de forma satisfatória a mínima fluidização experimental, resultando em valores muito baixos de LLE e K_{ML} devido, principalmente, ao caráter periódico dos picos inferiores gerados na série temporal. É possível que o modelo, para esta condição, esteja representando outro regime fluidodinâmico de fluidização, como aquele presente em um leito expandido e que forneça valores de entropia de Kolmogorov mais baixos.

Entretanto, através da análise aplicada, mais uma vez, à Tabela 4.7, nota-se que a simulação sem o modelo de turbulência obteve valores de LLE , D_2 e K_{ML} próximos daqueles obtidos via série temporal experimental, complementando a análise qualitativa de sua bacia de atração (Figura 4.14c) que conseguiu representar o comportamento central gerado pelas trajetórias da bacia de atração experimental (Figura 4.14a), embora não tenha sido capaz de captar toda a sua diversidade de trajetórias.

Em uma análise no que diz respeito ao efeito da utilização do modelo de turbulência nos valores de entropia de Kolmogorov, observa-se que, para a grande maioria dos casos, a presença do modelo de turbulência provocou a suavização do comportamento dinâmico das séries temporais simuladas, implicando em uma diminuição dos valores de entropia de Kolmogorov. Embora o senso comum atribua o aumento da complexidade da solução advinda do modelo à consideração da modelagem da turbulência, a utilização de um modelo RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes*) para tal descrição acaba por suavizar o comportamento dinâmico do sistema, principalmente, por considerar os valores médios das propriedades do escoamento no cálculo do campo pressão-velocidade no interior do leito. O modelo *realizable k-ε* é baseado nas leis de conservação da energia cinética turbulenta (k) e sua dissipação (ϵ), sendo tais grandezas atuantes no campo pressão-velocidade do escoamento. As leis de conservação, retratadas nesta Dissertação pelas Equações 2.44 e 2.45,

relacionam k e ε com grandezas constituídas por propriedades médias das duas fases envolvidas (ρ_m e v_m) assegurando valores médios de k e ε à determinação do campo de pressão em cada fase. Tal característica pode ser a causa da suavização do comportamento dinâmico da solução do modelo em que, para todos os casos, a entropia de Kolmogorov resultou em valores menores quando utilizado o modelo *realizable k- ε* .

Observa-se, por análise aos dados de entropia de Kolmogorov da Tabela 4.4 à Tabela 4.7, que as condições para partículas A, B e D com carregamento de 0,4 kg forneceram os valores mais próximos dos experimentais em que a ausência do modelo de turbulência beneficiou as simulações para as partículas A e D enquanto sua presença garantiu um melhor resultado para a partícula B da classificação de Geldart.

Assim, de forma geral, houve uma piora da previsão dos valores da entropia de Kolmogorov devido a utilização do modelo de turbulência que, para todos os casos, forneceu valores subestimados deste invariante caótico. As simulações para as condições de partículas A e B com carregamento de 0,4 kg forneceram os melhores resultados indicando que o modelo fornece melhor descrição da dinâmica do sistema para partículas menores, como é o caso daquelas do tipo A e B da classificação de Geldart.

O maior desvio relativo foi aquele da condição para partículas D e carregamento de 0,4 kg utilizando-se o modelo de turbulência. Tal simulação gerou uma série temporal com padrão periódico visível acarretando na queda dos valores de entropia de Kolmogorov, o que não foi observado na série temporal experimental. Assim, buscando melhor análise do motivo pelo qual o modelo gerou um padrão periódico na série temporal originada da simulação para partículas D com modelo de turbulência, obteve-se o perfil de fração volumétrica da fase particulada e o perfil de velocidades da fase gasosa para um tempo de 12 segundos de simulação, após o atingimento da condição de estado estacionário. Os perfis estão apresentados na Figura 4.15.

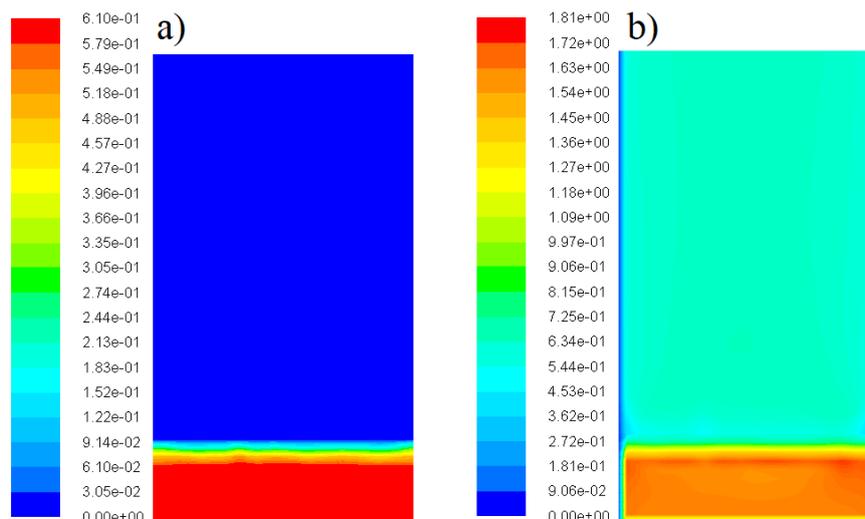


Figura 4.15 – Resultado da simulação para partícula D da classificação de Geldart, carregamento de 0,4 kg, utilizando-se o modelo de turbulência. a) perfil de fração volumétrica da fase particulada; b) perfil de velocidade da fase gasosa.

Observa-se, na Figura 4.15, que não há a presença de bolhas e instabilidades, que estejam retratadas no perfil de fração volumétrica da fase particulada, ocasionadas pelo movimento ascendente do gás na base da coluna. Aliado a isto, é nítido através do perfil de velocidade da fase gasosa que o gás percola o interior do leito indicando um regime de leito expandido para a condição simulada. Nota-se, então, que o modelo de turbulência fez com que o modelo Euleriano Granular Multifásico (MEGM) não fosse capaz de representar a mínima fluidização do sistema, acarretando um caráter periódico ao comportamento dinâmico da solução e, conseqüentemente, o desvio relativo de 92,25 % para a entropia de Kolmogorov.

Com exceção à condição supracitada, o maior desvio foi para a simulação para a partícula B com carregamento de 0,8 kg utilizando-se o modelo de turbulência e resultando em um desvio de 32,28 %. A análise dos resultados expostos entre a Tabela 4.4 e Tabela 4.7 revela que o estudo do comportamento dinâmico do modelo abordado nesta Dissertação resolvido para a condição de mínima fluidização não carece da utilização de um modelo de turbulência para a representação da complexidade gás-partícula, uma vez que os desvios das predições do modelo em relação aos dados experimentais estão em torno de 7,18 à 21,8 % sendo o modelo de turbulência, na maioria dos casos, prejudicial à predição gerada pelo MEGM.

5 CAPÍTULO V

CONCLUSÕES

O estudo da fluidodinâmica de um leito fluidizado gás-partícula operando na condição de mínima fluidização para as partículas A, B e D da classificação de Geldart, foi realizado por meio da solução, via técnicas de CFD, de um modelo matemático multifásico que utilizou a abordagem Euler-Euler para a descrição das fases fluida e particulada. Foi realizada a verificação física do modelo, comparando-se não somente propriedades médias do escoamento, mas, também como foco principal, grandezas características da dinâmica do sistema obtidas por meio da análise de flutuações de pressão via metodologia tradicional (análise espectral) e alternativa (Teoria do Caos) para condições considerando-se a presença e ausência do modelo de turbulência *realizable k- ϵ* .

Inicialmente, o modelo apresentou resultados médios de queda de pressão próximos daqueles obtidos nas séries temporais experimentais, destacando-se a grande proximidade dos resultados para as condições que utilizaram partículas A e B da classificação de Geldart e com carregamento de 0,4 kg e 0,8 kg (desvios relativos entre 6 e 12 %). O modelo apresentou dificuldades em fornecer valores médios de queda de pressão próximos aos experimentais para a condição que utilizou partículas maiores (tipo D da classificação de Geldart); situação na qual se pressupõe que o tamanho da partícula prejudicou a aproximação realizada pelo Modelo Euleriano Granular Multifásico (MEGM) ao considerar um meio discreto, como é o caso de um sistema particulado, em um domínio contínuo.

Foi realizada a análise da dinâmica experimental e simulada no domínio da frequência por meio da aplicação da análise espectral, originando os espectros de densidade de potência de cada série temporal. Observou-se uma afinidade entre os valores de desvio padrão das séries temporais e as ordens de grandeza dos espectros de potência de cada série sendo, as séries com menor desvio padrão aquelas que originaram espectros com menor ordem de grandeza. Detectou-se, também, uma característica comum a espectros de potência originados de flutuações de pressão em leitos fluidizados. Houve decréscimo significativo das amplitudes exibidas para a maioria dos espectros no intervalo de 10 à 20 Hz, característica que pôde, também, ser observada em outros trabalhos presentes na literatura (JOHNSSON et

al., 2000; FELIPE e ROCHA, 2004). A análise espectral mostrou-se limitada por apresentar um espectro contínuo e ausência de frequências dominantes para a grande maioria das condições analisadas, indicando a presença de aperiodicidade às dinâmicas exibidas pelas séries temporais estudadas e a necessidade de uma análise que propiciasse não somente a identificação do comportamento aperiódico nas séries temporais, mas, também, o grau de aleatoriedade pertencente aquele sistema.

Desta forma, aplicou-se a análise da solução do modelo no espaço de fases (ou espaço de estados) para a sua comparação com os resultados da mesma análise aplicada às séries temporais experimentais. No início, realizou-se um estudo que possibilita a determinação da mínima dimensão de imersão para a reconstrução adequada de cada bacia de atração por meio do método da estagnação da dimensão de correlação. Para todas as condições simuladas, as curvas de dimensão de correlação apresentaram comportamentos semelhantes aos dados experimentais.

Reconstruiu-se as bacias de atração com as dimensões de imersão estipuladas para cada condição em que foi notado a presença de núcleos formados nas regiões centrais de cada bacia de atração experimentais que foram reproduzidos em todas as condições simuladas.

Além da análise qualitativa, foi realizada a análise topológica das bacias de atração gerando valores representantes de suas dinâmicas. O cálculo dos invariantes caóticos, maior expoente de Lyapunov (LLE), dimensão de Correlação (D_2) e entropia de Kolmogorov (K), propiciam uma análise quantitativa da dinâmica exibida pelas bacias de atração para cada condição. Os valores de maior expoente de Lyapunov resultaram em valores positivos para todas as condições, indicando a presença de um comportamento caótico em todas as séries temporais analisadas, o que certifica que o modelo consegue gerar um comportamento caótico em sua solução tal qual aquele observado no comportamento das séries temporais experimentais.

Os valores de dimensão de correlação e entropia de Kolmogorov obtidos para as séries temporais simuladas mostraram proximidade daqueles obtidos para as séries experimentais para todas as condições, resultando em valores expressivos destes invariantes na condição de mínima fluidização, assim como observado por diversos autores (VAN DEN BLEEK e SCHOUTEN, 1993; VANDER STAPPEN, 1996; PRIETO, 2014). Tal

característica mostra a capacidade do modelo em gerar um comportamento dinâmico semelhante àquele observado experimentalmente propiciando a verificação física do modelo matemático estudado.

Foi observado, também, que a utilização de um modelo RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes*) para a descrição da turbulência no escoamento ocasionou a suavização do comportamento dinâmico da solução do sistema gerando valores de entropia de Kolmogorov menores em relação aos resultados obtidos para as séries simuladas sem a descrição da turbulência. Tal aspecto foi relacionado, nesta Dissertação, ao fato de este tipo de modelagem considerar os valores médios das propriedades do escoamento nas simulações ocasionando, então, a característica anteriormente citada. Além disso, foram analisados os perfis de fração volumétrica da fase particulada e de velocidade da fase gasosa para a simulação da partícula D com o modelo de turbulência. Os perfis mostraram que o modelo de turbulência ocasionou um regime de leito expandido à predição do MEGM, assegurando o caráter periódico observado na série temporal obtida pelo modelo para esta condição e acarretando o baixo valor de entropia de Kolmogorov obtido.

Os valores de entropia de Kolmogorov resultantes do modelo considerando a descrição da turbulência forneceu, também, desvios relativos maiores em relação aos dados experimentais, indicando uma piora na representação da realidade quando considerado o modelo *realizable k- ϵ* , sendo os desvios relativos obtidos para as simulações sem o modelo de turbulência indicadores de que é possível que o MEGM não careça de um modelo de turbulência para a representação do comportamento dinâmico deste sistema na condição de mínima fluidização.

SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

- Estender o estudo realizado no presente trabalho aos regimes de fluidização pistonado e turbulento, resultando em curvas de dimensão de correlação (D_2) e entropia de Kolmogorov (K_{ML}) que possam realizar a caracterização dos regimes de fluidização através da simulação computacional;
- Realizar a verificação física das características dinâmicas da solução de um modelo que utilize a abordagem Euler – Lagrange por meio da aplicação da análise caótica em séries temporais, comparando os invariantes caóticos obtidos através da solução do modelo com aqueles originados de séries temporais geradas por experimentos realizados nas mesmas condições;
- Realizar um estudo aprofundado relacionando as diferentes estratégias para a modelagem da turbulência (DNS, LES e RANS) às características dinâmicas geradas pelo modelo caracterizadas por meio do cálculo dos invariantes caóticos abordados nesta Dissertação.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABASHAR, M.E.E.; ELNASSHAIE, S.S.E.H. Dynamic and chaotic behavior of periodically forced fermentors for bioethanol production. *Chemical Engineering Science*, v.65, pp. 4894–4905, 2010.

ANDERSON, T. B.; JACKSON, R. Fluid mechanical description of fluidized beds. Equation of motion. *Indust. Engng. Chem. Fundam.*, v. 6, pp. 527-239, 1967.

ANSYS Inc. (diversos autores). *Manuais do Ansys Fluent 17.0*, 2016.

ARASTOPOUR, H.; PAKDEL, P.; ADEWUMI, M. Hydrodynamic analysis of dilute gas–solids flow in a vertical pipe, *Powder Technology*, v. 62 (2), pp. 163-170, 1990.

BAGNOLD, R. A. Experiments on a gravity-free dispersion of large solid spheres in a newtonian fluid under shear. *Proc. Roy. Soc. Lond.*, A 255, pp. 49-63, 1954.

BAI, D.; GRACE, J.R.; ZHU, J.X. Characterization of gas fluidized beds of group C, A and B particles based on pressure fluctuations. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 77, pp. 319, 1999.

BALZER, G.; BOELLE, A.; SIMONIN, O. Eulerian gas-solid flow modelling of dense fluidized bed. Fluidization VIII, *Int. Symp. of the Engineering Foundation*, Tours, 14-19 May, pp. 1125-1134, 1995.

BASKAKOV, A. P.; TUPONOGOV, V. G.; FILIPPOVSKY, N.F. A study of pressure fluctuations in a bubbling fluidized bed. *Powder Technol.*, v. 45, pp. 113-117, 1986.

BI, H. T.; ELLIS, N.; ABBAS, I. A.; GRACE, J. R. A state of the art review of gas-solid turbulent fluidization. *Chemical Engineering Science*, v. 55, pp. 4789 - 4825, 2000.

BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E.N. Fenômenos de Transporte, 2ª Edição, Rio de Janeiro: LTC/gen, 2002.

BOYLE, E.; MASSOUDI, M. Kinetic theories of granular materials with applications to fluidized beds, Relatório Técnico, *US Dept. of Energy*, DOE/METC—89/4088, DE89

000977, pp. 66, 1989.

BROOMHEAD, D. S.; KING, G. PP. Extracting qualitative dynamics from experimental data. *Physica D*, v. 20, pp. 217-236, 1986.

CAMMARATA, L., LETTIERI, PP., MICALE, G.D.M., COLMAN, D. 2D and 3D CFD simulations of bubbling fluidized beds using Eulerian–Eulerian models. *International Journal of Chemical Reaction Engineering*, v. 1, artigo A48, pp. 1-17, 2003.

CASTILHO, G. J. Análise de caos em leito fluidizado circulante. Tese (Doutorado), Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, 2011.

CHAPMAN, S.; COWLING, T. G., The mathematical theory of non-uniform gases, *Cambridge University Press*, Cambridge, England, 1970.

CHIESA, M.; MATHIESEN, V.; MELHEIM, J. A.; HALVORSEN, B. Numerical simulation of particle flow by the Eulerian-Lagregian and the Eulerian-Eulerian approach with application to a fluidized bed. *Computers and Chemical Engineering*, v. 29, pp. 291 – 304, 2005.

CREMASCO, M. A. Operações unitárias em sistemas particulados e fluidomecânicos, São Paulo, Edgar Blucher, 2012.

CREMASCO, M. A. Operações unitárias em sistemas particulados e fluidomecânicos, São Paulo, Edgar Blucher, 2012.

DAN, S.; SHUYAN, W.; GOUGDONG, L.; SHUAI W.; YONGJIAN, L.; LIXIN, W., Simulations of flow behavior of gas and particles in a spouted bed using a second order moment method-frictional stresses model, *Chemical Engineering Science*, vol. 65, p. 2635–2648, 2010.

DARTEVELLE, S., Numerical and granulometric approaches to geophysical granular flows, Ph.D. thesis, Michigan Technological University, Department of Geological and Mining Engineering, Houghton, Michigan, 2003.

DARTON, R.C., LA NAUZE R.D., DAVIDSON, J.F. AND HARRISON, D. Bubble growth due to coalescence in fluidised beds. *Trans I Chem E*, v. 55, pp. 274 – 280, 1977.

DAVIDSON, J. R. Symposium on fluidization. Transaction Institution of Chemical Engineering, v. 39, pp. 230-232, 1961.

DAW, C. S.; LAWKINS, W. F.; DOWNING, D. J.; CLAAP, JR., N. E. Chaotic characteristics of a complex gas-solids flow. *Phys. Rev. A*, v.41, n.2, pp. 1179 - 1181, 1990.

DE SOUZA, J. F. A.; DE OLIVEIRA, L. R.; DE AZEVEDO, J. L. L.; SOARES, I. D.; MATA, M. M.; Uma revisão sobre a turbulência e sua modelagem. *Revista Brasileira de Geofísica*, v. 29(1), p. 21-41, 2011.

DEVANEY, R. L. An Introduction to Chaotic Dynamical Systems. 2^a ed. Boston: *Westview Press*, 2003.

DUARTE, C. R. Estudo experimental e de simulação da fluidodinâmica e recobrimento em leito de jorro, Tese de Doutorado, PPGEQ/UFU - Uberlândia/MG, pp. 194, 2006.

DUARTE, C. R.; OLAZAR, M.; MURATA, V.V.; BARROZO, M. A. S., Numerical simulation and experimental study of fluid-particle flows in a spouted bed, *Powder Technology*, vol. 188, p. 195–205, 2009.

ECKMANN, J.P.; RUELLE, D. Fundamental limitations for estimating dimensions and Lyapunov exponents in dynamical systems, *Physica D*, v. 56, pp. 185-187, 1992.

ERGUN, S. "Fluid flow through packed columns", *Chemical Engineering Progress*, v. 48, pp. 89–94, 1952.

ETTEHADIEH, B., GIDASPOW, D., LYCZKOWSKI, R. W. Hydrodynamics of fluidization in a semicircular bed with a jet. *AIChE Journal*, v. 30, pp. 529 – 536, 1984.

FAN, L. S.; ZHU, C. Principles of Gas-Solid Flows. 1st ed. Cambridge: *Cambridge University Press*, 1998.

FARMER, J.D.; OTT, E. & YORKE, J.A. The Dimension of Chaotic Attractors. *Physical 7D*, v. 7, pp. 153-180, 1983.

FELIPE, C. A. S.; ROCHA, S. C. S. Time series analysis of pressure fluctuation in gas-solid fluidized beds. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 21, p. 497 - 507, 2004.

FERRARA, N. F.; PRADO, C. P. C. Caos uma introdução. São Paulo: *Edgard Blücher*

LTDA, 1994.

FERREIRA, R. L. Simulação de grandes escalas de escoamentos turbulentos usando modelagem dinâmica. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual Paulista, Ilha Solteira-SP, 2006.

FERZIGER, J. H.; PERIC, M. Computational Methods for Fluid Dynamics. 3^a ed. Berlin, Germany: *Springer*, pp. 583, 2002.

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

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

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

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

GIDASPOW, D., Multiphase flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions, California: *Academic Press, INC.*, 1994.

GIDASPOW, D.; BEZBURUAH, R.; DING, J., Hydrodynamics of circulating fluidized beds: Kinetic theory approach, In Fluidization VII, ed. O. E. Potter & D.J. Nicklin, *Engineering Foundation*, pp. 75-82, 1992.

GIDASPOW, D.; ETTAHADIEH, B. Fluidization in two-dimensional beds with a jet. *I&EC Fundam.*, v.22, pp. 193-201, 1983.

GLEICK, J. Chaos: Making a new science. New York: *Viking*, 1987.

GRASSBERGER, P.; PROCACCIA, I. Measuring the strangeness of strange attractors. In *Physica D*, v. 9, pp. 189-208, 1983.

HARTGE, E. U.; RATSCHOW, L.; WISCHNEWSKI, R.; WERTHER J. CFD-simulation of a circulating fluidized bed riser. *Particuology*, v. 7, pp. 283 – 296, 2009.

HILLIGARDT, K.; WERTHER, J. Influence of the temperature and properties of solids on the size and growth of bubbles in gas fluidized beds. *Chem. Eng. Technol.*, v. 10, pp. 272 – 280, 1987.

HODAPP, M. J. Modelagem e simulação de um leito fluidizado: um estudo comparativo. Dissertação de Mestrado. Universidade Estadual de Campinas - Faculdade de Engenharia Química. 112pp., 2009.

HOLMES, PP. Nonlinear dynamics, chaos and mechanics. *Applied Mechanics Review*, v. 43, n.2-5, pp.23-29, 1989.

HONG, S.C.; JO, B.R.; DOH, D.S.; CHOI, C.S. Determination of minimum fluidization velocity by the statistical analysis of pressure fluctuations in a gas-solid fluidized bed, *Powder Technology*, v. 60, pp. 215, 1990.

HULME, I., CLAVELLE, E., VAN DER LEE, L., KANTZAS, A. CFD modeling and validation of bubble properties for a bubbling fluidized bed. *Industrial Engineering Chemistry Research*, v. 44, pp. 4254–4266, 2005.

JENKINS, J. T., SAVAGE, S. B., A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic sphere particles, *J. Fluid Mech.*, v. 130, pp. 187 - 202, 1983.

JOHNSON, PP. C., JACKSON, R., Frictional-collisional constitutive relations for granular materials with application to plane shearing, *J. Fluid Mech.*, v. 176, pp. 67 - 93, 1987.

JOHNSON, PP. C.; NOTT, PP.; JACKSON R., Frictional-collisional equations of motion for particulate Flows and their application to chutes, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 210, pp. 501-535, 1990.

JOHNSSON, F.; ZIJERVELD, R.C.; SCHOUTEN, J.C.;VAN DER BEEK, C.M., LECKNER, B. Characterization of fluidization regimes by time-series analysis of pressure fluctuations. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 26, pp. 663-715, 2000.

KAGE, H.; IWASAKI, N.; YAMAGUCHI, H.; MATSUNO, Y. Frequency analysis of pressure fluctuation in fluidized bed plenum. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, v. 24, pp. 76 – 81, 1991.

KUNII, D.; LEVENSPIEL, O. *Fluidization Engineering*. 2nd ed. Stoneham: *Butterworth-Heinemann*, 1991.

LAUNDER, B. E.; SPALDING D. B. Lectures in mathematical models of turbulence. *Academic Press*, London, England. 1972.

LEE, J. S.; CHANG, K. S. Applications of chaos and fractals in process systems engineering. *J. Proc. Cont.*, v. 6, pp. 71-87, 1996.

LIU, H.; ELKAMEL, A.; LOHI, A.; BIGLARI, M. Computational fluid dynamics modeling of biomass gasification in circulating fluidized-bed reactor using Eulerian-Eulerian approach. *I&EC research*, v. 52, pp. 18162 – 18174, 2013.

LOHA, C.; CHATTOPADHYAY, H.; CHATTERJEE, PP. K. Assessment of drag models in simulating bubbling fluidized bed hydrodynamics. *Chemical Engineering Science*, v. 75, pp. 400-407, 2012.

LORENZ, E. N. Deterministic non-periodic flow. *J. Atmos. Sci.*, v. 20, pp. 130-141, 1963.

LU, H.-L.; HE, Y.-R.; LIU, W.-T.; DING, J.-M.; GIDASPOW, D.; BOUILLARD, J., Computer simulations of gas-solid flow in spouted beds using kinetic-frictional stress model of granular flow, *Chem. Eng. Sci.*, vol. 59(4), p. 865-878, 2004.

LUN, C. K. K., SAVAGE, S. B.; JEFFREY, D. J.; CHEPURNIY, N., Kinetic theories for granular flow: Inelastic particles in coquette flow and singly inelastic particles in a general flow field, *J. Fluid Mech.*, v. 140, pp. 223 - 256, 1984.

MALISKA, C.R. Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional, 2^a Edição, LTC/gen, 2004.

MARTÍN, L.; BRIONGOS, J. V.; HERNANDO, G. N.; ARAGÓN, J. M. Detecting regime transitions in gas-solid fluidized beds from low frequency accelerometry signals, *Powder Technology*, v. 207, pp. 104 - 112, 2011.

MARTINS, A. C. Simulação do perfil axial de pressão na coluna riser de um leito fluidizado circulante. Dissertação de mestrado, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Ponta Grossa – PR, 2015.

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

MONTEIRO, L. H. A. Sistemas dinâmicos. 3ª ed. São Paulo: *Livraria da Física*, 2011.

MOURA, L. M. Análise da influência do ruído na obtenção de atratores e parâmetros determinísticos da teoria do caos aplicada em uma seção de riser de um leito fluidizado circulante, Dissertação de mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, 2013.

OCONE R., SUNDARESAN S.; JACKSON R., Gas-particle flow in a duct of arbitrary inclination with particle-particle interaction, *AIChE J.*, v. 39, pp. 1261-1271, 1993.

ORSZAG, S. A.; YAKHOT, V.; FLANNERY, W. S.; BOYSAN, F.; CHOUDHURY, D.; "Renormalization group modeling and turbulence simulations". *In International Conference on Near-Wall Turbulent Flows*, Tempe, Arizona, 1993.

OSELEDEC, V.I., "The Multiplicative ergodic theorem: The Lyapunov characteristic numbers of dynamical systems", *Trans. Moscow. Math.Soc.* v. 19, pp. 197 - 231, 1968.

OZEL, A.; FEDE, P.; SIMONIN O. Development of filtered Euler-Euler two-phase model for circulating fluidized bed: High resolution simulation, formulation and priori analyses. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 55, p. 43 - 63, 2013.

PACKARD, N.H.; CRUTCHFIELD, J.PP.; FARMER, J.D.; SHAW, R.S. Geometry from a time series. *Phys. Rev. Lett.*, v. 45, pp. 712 - 716, 1980.

PRIETO, W. H. Aplicação da teoria do caos em um leito fluidizado utilizando-se partículas a, b e d da classificação geldart, Dissertação de Mestrado. Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, 2014.

PYLE, D. L.; HARRISON, D. The rising velocity of bubbles in two-dimensional fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, v. 22, pp. 531 – 535, 1967.

ROSA, L. M., MORI, M., Simulação de reações químicas e consumo de calor em reatores riser. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2002.

ROSENSTEIN, M. T., COLLINS, J. J., e DE LUCA, C. J. A practical method for calculating

largest lyapunov exponents from small data sets. *Phys. D*, v. 65, pp. 117–134, 1993.

SALIKOV, V.; ANTONYUK, S.; HEINRICH, S.; SUTKAR, V. S.; DEEN, N. G.; KUIPERS, J. A. M. Characterization and CFD-DEM modelling of a prismatic spouted bed. *Powder Technology*, v. 270, pp. 622 – 636, 2015.

SANTOS, D. A. Contribuições ao estudo da fluidodinâmica em leito de jorro - estudos experimentais e de simulação via CFD, Dissertação de mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia-MG, 2011.

SANTOS, D. A. Estudo experimental e numérico da dinâmica de partículas granulares em um tambor rotatório, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia-MG, 2015.

SASIC, S.; LECKNER, B.; JOHNSON, F. Characterization of fluid dynamics of fluidized beds by analysis of pressure fluctuations, *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 33, pp. 453 – 496, 2007.

SAVAGE, S. B., Granular flows down rough inclines - review and extension. In *Mechanics of Granular Materials: New Models and Constitutive Relations* (ed. J. T. Jenkins & M. Satake), *Elsevier Science Publishers*, pp. 261 - 82, 1983.

SAVAGE, S. B., JEFFREY, D. J., The stress tensor in a granular flow at high shear rates, *J. Fluid Mech.*, v. 110, pp. 255 - 272, 1981.

SAVI, M. A. Dinâmica Não-linear e Caos, 1^a ed. Rio de Janeiro: *E-papers*, 2006.

SCATENA, R.; PRIETO, W. H.; CREMASCO, M. A. Avaliação da ferramenta BRChaos para a análise de caos na identificação da fluidodinâmica de leito de jorro, XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química, Associação Brasileira de Engenharia Química, Fortaleza, 25 – 29 Setembro, 2016.

SCHILLER, L.; NAUMANN, Z., A drag coefficient correlation, *Ver. Deutsch. Ing.*, v. 77, pp. 318 - 320, 1935.

SCHOUTEN, J. C.; TAKENS, F.; VAN DEN BLEEK, C. M. Maximum-likelihood estimation of the entropy of an attractor. *In Physical Review E*, v. 49, pp. 126-129, 1994.

SCHOUTEN, J. C.; VAN DER STAPPEN, M. L. M.; VAN DEN BLEEK, C. M. Scale-up of chaotic fluidized bed hydrodynamics. *Chem. Engng Sci.*, v. 51, pp. 1991 – 2000, 1996.

SHAHINPOUR, M., AHMADI, G., A kinetic theory for the rapid flow of rough identical spherical particles and the evolution of fluctuation: Advances in the mechanics and the flow of granular materials II, Ed. Trans. Tech. Pub. Switzerland: Andermannsdorf, in M. Shahipoor, pp. 641 - 667, 1983.

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

SHIH T.-H.; LIOU W.W.; SHABBIR A.; YAN Z.; ZHU J. "A New-Eddy-Viscosity Model for High Reynolds Number Turbulent Flows - Model Development and Validation". *Computers Fluids.*, v. 24 (3), pp. 227 – 238, 1995.

SHUYAN, W., XIANG L., HUILIN L., LONG Y., DAN S., YURONG H., YONGLONG D., Numerical simulations of flow behavior of gas and particles in spouted beds using frictional-kinetic stresses model, *Powder Technology*, vol. 196, p. 184–193, 2009.

SRIVASTAVA, A.; SUNDARESAN, S., Analysis of a frictional–kinetic model for gasparticle flow, *Powder Technology*, v. 129, pp. 72-85, 2003.

STEWART, I. Será que Deus joga dados? A nova matemática do Caos, Edição brasileira, Rio de Janeiro – RJ: *Zahar*, 1991.

STRINGER, J. Is a fluidized bed a chaotic dynamic system, *Proceedings of the 10th International Conference on Fluidized Bed Combustion*, San Francisco, CA, v.1, pp. 265 - 272, 1989.

SUNTHANKAR, A.A., RANADE, V.V. Dynamics of gas–liquid flow. *NCL Internal Project Report*, 1997.

SYAMLAL, M., O'BRIEN, T.J., Simulation of granular layer inversion in liquid fluidized beds, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 14 (4), pp. 473-481, 1988.

SYAMLAL, M.; ROGERS, W.; O'BRIEN, T. J., MFIX Documentation: Volume 1, Theory Guide. *National Technical Information Service*, Springfield, VA, 1993.

TAGHIPOUR, F.; NAKO, E.; WONG, C. Experimental and computational study of gas-solid fluidized bed hydrodynamics, *Chemical Engineering Science*, v. 60, pp. 6857-6867, 2005.

TAKENS, F. Detecting strange attractors in turbulence, In: *Dynamical systems and turbulence, Lecture Notes in Mathematics*, Eds. D.A. Rand e L-S. Young, Springer Verlag, v. 898, pp.366-381, 1981.

UTIKAR, R. PP.; RANADE, V. V. Single jet fluidized beds: experiments and CFD simulations with glass and polypropylene particles. *Chemical Engineering Science*. v. 62, pp. 167 – 183, 2007.

VAN DEN BLEEK, C. M.; SCHOUTEN, J. C. Deterministic chaos: a new tool in fluidized bed design and operation. *Chem. Engng J.*, v. 53, pp. 75 – 87. 1993.

VAN WACHEM, B.G.M., SCHOUTEN, J.C., KRISHNA, R., VAN DEN BLEEK, C. M. Eulerian simulations of bubbling behavior in gas-solid fluidized beds. *Computers chem. Engng*, v. 22, pp. 299 – 306, 1998.

VAN WACHEM, B.G.M., SCHOUTEN, J.C., KRISHNA, R., VAN DEN BLEEK, C. M. Validation of the eulerian simulated dynamic behavior of gas-solid fluidized beds. *Chemical Engeneering Science*, v. 54, pp. 2141 – 2149, 1999.

VANDER STAPPEN, M. L. M. Chaotic hydrodynamics of fluidized beds, Delft: University of Technology, Delft - NL, 236 pp, PhD. Thesis, 1996.

WANG, Z.; BI, H. T.; LIM, C. J., CFD Simulation of Spouted Beds Using a Pressure Source Term, *Ind. Eng. Chem.*, vol. 49,p. 5053–5060, Res. 2010.

WEI, L. H.; YAN, W. C.; LUO, Z. H. A preliminary CFD study of the gas-solid flow fields in multizone circulating polymerization reactors. *Powder Technology*, v. 214, pp. 143 – 154, 2011.

WELTY, J. M. R., WICKS, C. E., WILSON, R. E., RORRER, G. L. Fundamentals of momentum, heat and mass transfer. 5° Edição. Óregon – USA: *John Wiley and Sons, Inc*, 2007.

WEN, C.Y. AND YU, Y.H. “Mechanics of Fluidization”. *The Chemical Engineering*

Progress Symposium Séries, v. 162, pp. 100-111, 1966.

WINCOX, D. C. Turbulence Modeling for CFD – 2nd. Edition California: *DCW Industries, Inc.*, pp. 537, 1998.

WOLF, A.; SWIFT, J. B.; SWINNEY, H. L.; VASTANO, J. Determining Lyapunov exponents from a time séries. *Physica D*, v. 16, pp. 285 - 317, 1985.

XU, J.; BAO, X.; WEI, W.; BI, H.T.; GRACE, J.R.; LIM, C.J. Chaotic characteristics of pressure fluctuations in a gas spouted bed, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v.87, pp.252-263, 2009.

XUE, Q.; HEINDEL, T. J.; FOX, R. O. A CFD model for biomass fast pyrolysis in fluidized-bed reactors. *Chemical Engineering Science*, v. 66, pp. 2440 – 2452, 2011.

YAKHOT V.; ORSZAG S. A. "Renormalization Group Analysis of Turbulence I Basic Theory". *Journal of Scientific Computing.*, v. 1(1), pp. 1 – 51. 1986.

YATES, J. G. Fundamentals of fluidized-bed chemical processes. 1st ed. Thetford: *The Thetford Press*, 1983.

ZHONGHUA, W.; MUJUMDAR, A. S., CFD modeling of the gas–particle flow behavior in spouted beds, *Powder Technology*, vol. 183, p. 260–272, 2008.

7 APÊNDICE A – COMPARAÇÃO ENTRE OS PACOTES BRCHAOS E RRCHAOS

O estudo de sistemas dinâmicos tem sido incentivado, nos últimos anos, pela necessidade da resolução de problemas complexos. Desta forma, diversos *softwares* foram desenvolvidos com o intuito de auxiliar a análise e interpretação das características dinâmicas manifestadas em diferentes tipos de sistemas dinâmicos. No que diz respeito ao estudo de sistemas dinâmicos via análise de séries temporais por meio da teoria do caos, destacam-se alguns dos principais pacotes, tais como: *Chaos Data Analyser*, *Dataplore*, *Chaotic Systems Toolbox*, *TSTOOL* e o *RRChaos* (MOURA, 2013).

O *software RRChaos* (SCHOUTEN et al., 1992) é o mais utilizado para a análise não linear de séries temporais advindas de processos relacionados à engenharia química permitindo a reconstrução das bacias de atração pelo método da reconstrução de Takens (1981) aliado às rotinas SVD (*Singular Values Decomposition*), o cálculo da dimensão de correlação pelo método de Grassberger e Procaccia (1983) e da entropia de Kolmogorov, pelo princípio da máxima verossimilhança (SCHOUTEN et al., 1994), para séries temporais caóticas com ruídos (PRIETO, 2014).

No entanto, algumas limitações inerentes ao *RRChaos*, como o número de pontos apresentados na reconstrução das bacias de atração e o tempo computacional exigido para a execução de suas rotinas, incentivaram pesquisadores do Departamento de Engenharia de Processos da Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas a desenvolver um pacote computacional alternativo, o *BRChaos*.

O *BRChaos* foi desenvolvido em linguagem *MATLAB R2012a 64 bits* e promove a reconstrução das bacias de atração pelo método da decomposição em valores singulares, calcula a dimensão de correlação pelo método de Grassberger e Procaccia (1983) e a entropia de Kolmogorov pelo princípio da máxima verossimilhança (SCHOUTEN et al., 1994). Além disso, o *BRChaos* apresenta um algoritmo para o cálculo do maior expoente de Lyapunov pelo método de Rosenstein (1993), implicando em uma maneira simples e rápida para a identificação do comportamento caótico em séries temporais.

A falta de atualização da plataforma do *RRChaos*, faz com que ele possa ser executado apenas no *Windows XP* ou em alguma versão inferior. Tal obstáculo se coloca como uma das principais limitações do *RRChaos* impondo que o usuário emule um sistema operacional adequado de forma que o processamento das séries temporais se torna extremamente lento (PRIETO, 2014). Na Tabela 7.1 encontra-se um comparativo dos valores médios de tempo de processamento requerido para as séries temporais experimentais utilizadas nesta Dissertação por meio do *BRChaos* e do *RRChaos*.

Tabela 7.1 - Comparativo entre os tempos de processamento dos *softwares BRChaos* e *RRChaos*.

Métodos - BRChaos			Métodos - RRChaos			
Bacia de Atração	K	D_2	Bacia de Atração	K	D_2	
SVD	ML	GP	SVD	ML	GP	
Tempo médio de processamento	0,71 s	0,13 s	0,92 s	180 s	3600 s	5400 s

SVD: Decomposição em valores singulares.

ML: Máxima verossimilhança.

GP: Algoritmo de Grassberger e Procaccia (1983).

Afim de avaliar os dados obtidos pelo pacote *BRChaos*, apresenta-se a comparação entre os valores gerados pelo *BRChaos* e *RRChaos* em cada série temporal estudada nesta Dissertação, sendo os resultados para as séries temporais experimentais expostas na Tabela 7.2, para as séries simuladas com o modelo de turbulência na Tabela 7.3 e para as séries simuladas sem o modelo de turbulência na Tabela 7.4.

Tabela 7.2 - Resultados comparativos entre o *BRChaos* e *RRChaos* para as séries temporais experimentais.

Partícula - Carregamento (kg)	BRChaos		RRChaos		Desvios Relativos	
	D_2 (-)	K_{ML} (bits/s)	D_2 (-)	K_{ML} (bits/s)	D_2 (%)	K_{ML} (%)
A - 0,4	2,558	30,438	2,610	29,609	1,99	2,80
B - 0,4	2,387	42,801	2,443	43,874	2,29	2,45
B - 0,8	2,489	63,945	2,461	62,670	1,13	2,03
D - 0,4	2,634	37,110	2,554	35,595	3,13	4,26

Tabela 7.3 - Resultados comparativos entre o BRChaos e RRChaos para as séries temporais simuladas com o modelo de turbulência.

Partícula - Carregamento (kg)	BRChaos		RRChaos		Desvios Relativos	
	D ₂	K _{ML}	D ₂	K _{ML}	D ₂ (%)	K _{ML} (%)
	(-)	(bits/s)	(-)	(bits/s)		
A - 0,4	2,087	27,222	2,125	28,617	1,79	4,88
B - 0,4	2,376	39,566	2,408	41,040	1,33	3,60
B - 0,8	2,633	43,309	2,562	43,225	2,77	0,19
D - 0,4	3,529	2,877	3,462	2,755	1,94	4,43

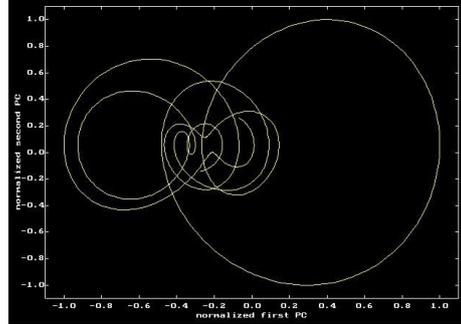
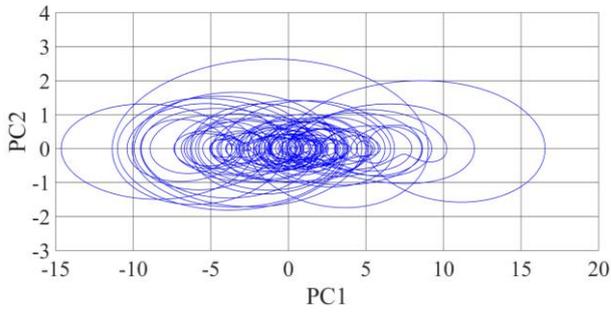
Tabela 7.4 - Resultados comparativos entre o BRChaos e RRChaos para as séries temporais simuladas sem o modelo de turbulência.

Partícula - Carregamento (kg)	BRChaos		RRChaos		Desvios Relativos	
	D ₂	K _{ML}	D ₂	K _{ML}	D ₂ (%)	K _{ML} (%)
	(-)	(bits/s)	(-)	(bits/s)		
A - 0,4	2,683	32,700	2,672	31,140	0,41	5,01
B - 0,4	3,053	52,131	3,024	50,704	0,96	2,81
B - 0,8	3,119	72,176	3,154	72,605	1,11	0,59
D - 0,4	2,259	34,448	2,234	33,056	1,12	4,21

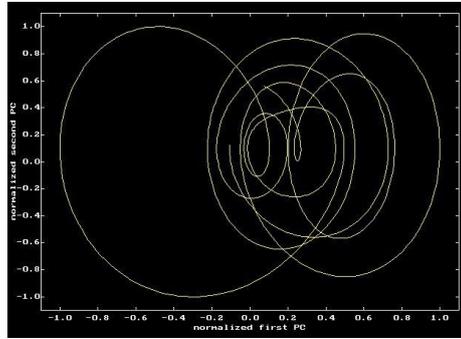
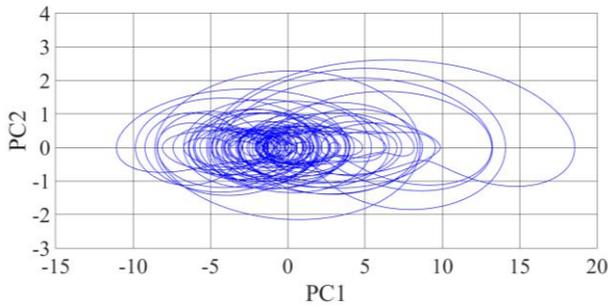
Verifica-se que, em média, os desvios relativos para a entropia de Kolmogorov e a dimensão de correlação flutuam em torno de 1,66 e 3,11 %, respectivamente, indicando que o pacote *BRChaos* consegue fornecer resultados próximos de um *software* consagrado na análise das características dinâmicas de sistemas não lineares. Desta forma, apresenta-se a seguir na Figura 7.1, a comparação entre as bacias de atração reconstruídas das séries experimentais com o BRChaos e o RRChaos.

Figura 7.1 - Comparação entre as bacias de atração reconstruídas pelos softwares BRChaos e RRChaos para as séries temporais experimentais.

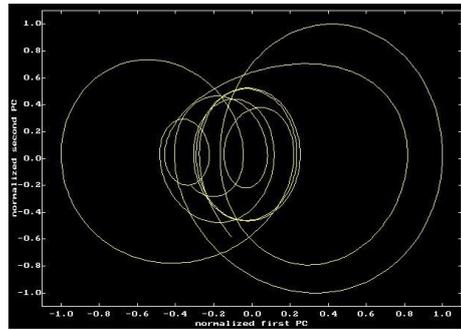
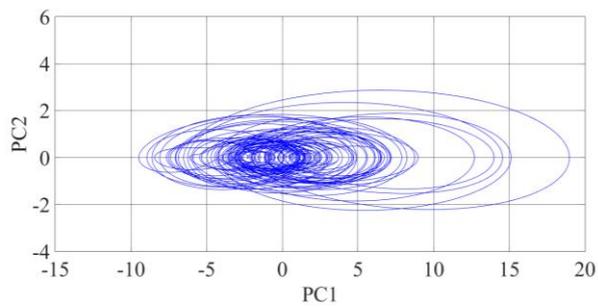
Partícula A – Carregamento 0,4 kg



Partícula B – Carregamento 0,4 kg



Partícula B – Carregamento 0,8 kg



Partícula D – Carregamento 0,4 kg

