



INSTITUTO FEDERAL DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE PERNAMBUCO

Campus Recife

Departamento Acadêmico de Cursos Superiores - DACS

Bacharelado em Engenharia Mecânica

MARIA FERNANDA BEZERRA DE MENDONÇA

**SIMULAÇÃO CFD DE UM REATOR DE LEITO FLUIDIZADO PARA CAPTURA DE
CO₂**

Recife

2026

MARIA FERNANDA BEZERRA DE MENDONÇA

**SIMULAÇÃO CFD DE UM REATOR DE LEITO FLUIDIZADO PARA CAPTURA DE
CO₂**

Trabalho de conclusão de curso apresentada ao Departamento em Bacharelado em Engenharia Mecânica do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia de Pernambuco, como requisito para obtenção do título de Bacharel em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. José Ângelo Peixoto da Costa

Recife

2026

**Ficha elaborada pela bibliotecária Maria do Perpétuo Socorro
Cavalcante Fernandes CRB4/1666**

M539s
2026

Mendonça, Maria Fernanda Bezerra de

Simulação CFD de um reator de leite fluidizado para captura de CO₂. / Maria
Fernanda Bezerra de Mendonça. --- Recife: A autora, 2026.
66f. il. Color.

TCC (Curso Superior de Bacharelado em Engenharia Mecânica) – Instituto Federal
de Pernambuco, Departamento Acadêmico de Cursos Superiores - DACS, 2026.
Inclui Referências e Anexos.

Orientador: Professor Dr. José Ângelo Peixoto da Costa.

1. Engenharia mecânica. 2. Fluidodinâmica computacional. 3. Captura de carbono.
4. Transição energética. 5. Reatores. I. Título. II. Costa, José Ângelo Peixoto da
(orientador). III. Instituto Federal de Pernambuco.

CDD620.1(21ed.)

SIMULAÇÃO CFD DE UM REATOR DE LEITO FLUIDIZADO PARA CAPTURA DE CO₂

Trabalho aprovado. Recife, 13 de março de 2026.

José Ângelo Peixoto da Costa

Frederico Duarte Menezes

Marcos Costa

Recife

2026

À minha mãe, por tudo.

AGRADECIMENTOS

À Deus por me permitir a minha primeira graduação e por estar comigo durante todo processo. À minha mãe, Rosane, por todo suor derramado para que eu pudesse me formar. À minha tia, Ivone, por ter me feito quem sou hoje. À minha irmã, Maria Eduarda, por me ajudar quando a sobrecarga vinha. À minha prima, Joana, por todas as cartolinas compradas para que eu pudesse apresentar meus trabalhos de escola e por ser uma ótima irmã mais velha. Ao meu pai, José Carlos, por todo incentivo e seu exemplo de força. À minha avó, Maria do Carmo, por ser o pilar da nossa família.

Aos meus familiares e amigos, por todo apoio, ajuda, parceria e torcida para que eu pudesse terminar minha graduação. Aos meus colegas de turma, por todos os momentos compartilhados, apoio durante as semanas mais corridas e momentos de descontração.

Ao meu orientador José Ângelo P. da Costa, pelos ensinamentos desde o início do curso e todo apoio para minha formação e dos docentes do IFPE.

A todos que, de alguma forma, estiveram comigo durante o curso e contribuirão com a minha formação, meus mais sinceros agradecimentos.

*O Senhor ia diante deles [...], a fim de que caminhassem dia e noite.
Nunca se apartou do povo a coluna de nuvem durante o dia, nem a coluna de fogo
durante a noite.*

Êxodo 13.21-22

RESUMO

Desde a década de 1970, o monitoramento e a mitigação da emissão de gases de efeito estufa (GEE) têm sido um tema de interesse global, sobretudo diante das crescentes mudanças climáticas e de suas consequências. Esse movimento se intensificou na sociedade contemporânea, especialmente com a assinatura do Acordo de Paris, durante a 21^a Conferência das Nações Unidas sobre as Mudanças Climáticas (COP21), em 2015. Nesse contexto, estabeleceu-se como meta a redução das emissões de GEE, com destaque para a neutralização do carbono até o ano de 2060. Agora, com a COP30 em Belém (PA), novas metas estão sendo elaboradas com base nos objetivos antes acordados. Diante disso, evidencia-se a necessidade de promover pesquisas e o desenvolvimento de tecnologias capazes de atenuar ou mitigar essas emissões, principalmente do dióxido de carbono (CO_2). Diante desse cenário, torna-se ainda mais urgente o avanço de tecnologias voltadas para o sequestro de carbono, como o Carbon Capture and Storage (CCS), cuja principal função é remover o CO_2 gerado em processos industriais e energéticos. Assim, um equipamento que pode atingir as exigências necessárias desses processos são os reatores multifásicos. Entretanto, um desafio apresentado na modelagem de novas tecnologias é o alto custo e o tempo inerentes ao processo. Assim, uma forma de contornar esses problemas é o uso de simulação computacional. Dessa forma, o presente trabalho tem como objetivo a simulação computacional de um reator de leito fluidizado, utilizando a modelagem CFD para a captura de CO_2 . Com o estudo foi possível realizar captura do gás carbônico a partir de uma reação de adsorção com carbonato de potássio variando a velocidade de entrada da mistura gasosa. Para as menores velocidades, foi possível ver uma maior redução do CO_2 em razão do maior tempo de residência da mistura.

Palavras-chave: captura de CO_2 ; leito fluidizado; fluidodinâmica computacional; carbonato de potássio; adsorção gás-sólido.

ABSTRACT

Since the 1970s, monitoring and mitigating greenhouse gas (GHG) emissions has been a topic of global interest, especially in light of increasing climate change and its consequences. This movement intensified in contemporary society, particularly with the signing of the Paris Agreement during the 21st United Nations Climate Change Conference (COP21) in 2015. In this context, the goal of reducing GHG emissions was established, with emphasis on carbon neutrality by 2060. Now, with COP30 in Belém (PA), new targets are being developed based on the previously agreed objectives. Therefore, the need to promote research and the development of technologies capable of attenuating or mitigating these emissions, especially carbon dioxide (CO₂), is evident. Given this scenario, the advancement of technologies focused on carbon sequestration, such as Carbon Capture and Storage (CCS), becomes even more urgent. CCS's main function is to remove CO₂ generated in industrial and energy processes. Multiphase reactors are a suitable piece of equipment to meet the necessary requirements of these processes. However, a challenge in modeling new technologies is the high cost and time inherent in the process. Therefore, one way to overcome these problems is through the use of computational simulation. Thus, this work aims to perform a computational simulation of a fluidized bed reactor using CFD modeling for CO₂ capture. The study made it possible to capture carbon dioxide through an adsorption reaction with potassium carbonate by varying the inlet velocity of the gas mixture. At lower velocities, a greater reduction in CO₂ was observed due to the longer residence time of the mixture.

Keywords: CO₂ capture; fluidized bed; computational fluid dynamics; potassium carbonate; gas-solid adsorption.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - emissões de Gases de Efeito estufa por setor ente 1970 e 2024.	20
Figura 2 - Esquema de processo de captura de CO ₂ por absorção química.	26
Figura 3 - Esquema de processo de captura de CO ₂ utilizando por membranas.	28
Figura 4 - Esquema de um processo Calcium looping.	29
Figura 5 - Diferentes regimes de fluidização.	32
Figura 6 - Mapa da classificação das partículas de Geldart.	34
Figura 7 - Modelagem computacional escoamentos multifásicos.	37
Figura 8 - Etapas da simulação computacional.	46
Figura 9 - Geometria.	47
Figura 10 - Condições de contorno e vista da simetria.	51
Figura 11 - concentração de CO ₂ ao longo da altura do reator para diferentes velocidades.	55
Figura 12 - Valores da fração mássica do gás carbônico em função da altura.	56
Figura 13 - Fração volumétrica de sólidos para as três velocidades.	56
Figura 14 - Perfil de velocidade ao longo do diâmetro.	57

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Constantes cinéticas utilizadas.	29
Tabela 2 - Condições de contorno.	52
Tabela 3 - Dados da solução numérica e modelos utilizados para o escoamento. ...	53
Tabela 4 - Valores utilizados no método GCI.	54

LISTA DE ABREVIATURAS

IFPE – Instituto Federal De Pernambuco

GEE – Gases De Efeito Estufa

MVF – Método Dos Volumes Finitos

CO₂ – Dióxido De Carbono

COP21 – 21ª Conferência Das Nações Unidas Sobre As Mudanças Climáticas

CFD – Fluidodinâmica Computacional

DDPM – Dense Discrete Phase Model

DEM – Discrete Element Method

DPM – Discrete Phase Model

KTGF– Kinetic Theory Of Granular Flow

K-E RNG – Re-Normalization Group K-E

MP-PIC – Multiphase - Particle In Cell

DNS– Direct Numerical Simulation

LES – Large Eddy Simulation

RMS – Reynolds Stress Model

SST K- Ω – Shear-Stress Transport K- Ω

IPCC – Painel Intergovernamental Sobre Mudanças Climáticas Das Nações Unidas

ODS – Objetivo De Desenvolvimento Sustentável

ONU – Organização Das Nações Unidas

BFB – Leito Fluidizado Borbulhante

CTM – Metodologia De Transferência De Massa Computacional

Fbcs – Leito Fluidizados Com Combustão

TET – Modelo Turbulento De Duas Equações

GCI – Grid Convergence Index

ASME – American Society Of Mechanical Engineers

MTO – Metanol-Para-Olefinas

CCS – Carbon Capture And Storage

CCU – Carbon Capture And Utilization

CFL – Número De Courant

PSA – Adsorção Por Oscilação De Pressão

PTSA – Adsorção Por Oscilação De Pressão-Temperatura

TSA – Adsorção Por Oscilação De Temperatura

VSA – Adsorção Por Oscilação De Vácuo

TFB – Leito Fluidizado Borbulhante

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	16
2 OBJETIVO GERAL.....	18
2.1 Objetivos específicos.....	18
3 JUSTIFICATIVA.....	19
4 REVISÃO DE LITERATURA	21
5 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	25
5.1 Métodos de captura de CO₂.....	25
5.1.1 Absorção física e química	26
5.1.3 Utilização de processos criogênicos.....	27
5.1.4 Membranas	27
5.1.5 Adsorção química e física	28
5.1.5 Processo de looping químico	29
5.2 Reator de Leito Fluidizado.....	30
5.2.1. Velocidade mínima de Fluidização (Umf).....	32
5.2.2 Classificação das partículas	33
5.2.2.1 Diâmetro das partículas e velocidade adimensional	34
5.3 Modelagem Numérica de sistemas multifásicos	13
5.3.1 Abordagem Euleriana - Euleriana	37
5.3.2 Abordagem Euleriana-Lagrangeana.....	38
5.4 Transferência de calor	39
5.5 Modelo de turbulência	40
5.6 Modelos de arraste.....	44
6 METODOLOGIA	46
6.1 Geometria.....	46
6.2 Malha computacional	47
6.3 Condições de contorno	50
7 RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	54
8 CONCLUSÃO	59
9 TRABALHOS FUTUROS.....	60

10 REFERÊNCIAS.....61

1 INTRODUÇÃO

Desde a década de 1970, o monitoramento e a mitigação da emissão de gases de efeito estufa (GEE) vêm sendo temas de interesse global, sobretudo diante das crescentes mudanças climáticas e de suas consequências. Esse movimento se intensificou na sociedade contemporânea, especialmente com a assinatura do Acordo de Paris, durante a 21ª Conferência das Nações Unidas sobre as Mudanças Climáticas (COP21), em 2015. Nesse contexto, estabeleceu-se como meta a redução das emissões de GEE, com destaque para a neutralização do carbono até o ano de 2060. Diante disso, evidencia-se a necessidade de promover pesquisas e o desenvolvimento de tecnologias capazes de atenuar ou até mesmo mitigar essas emissões, principalmente de dióxido de carbono (CO₂).

Entretanto, segundo dados da International Energy Agency (IEA, 2023), apesar dos investimentos em tecnologias de energia limpa, que têm avançado significativamente, as emissões de GEE aumentaram 1,1% em relação ao ano anterior, alcançando o recorde de 37,4 Gt em 2023. Diante desse cenário, torna-se ainda mais urgente o avanço de tecnologias voltadas para o sequestro de carbono, como o Carbon Capture and Storage (CCS), cuja principal função é remover o CO₂ gerado em processos industriais e energéticos. Tais tecnologias são particularmente importantes para setores industriais cuja mitigação das emissões é mais complexa, como nas indústrias de cimento e de produtos químicos (IPCC, 2023).

No que diz respeito às formas de captura, há quatro principais rotas tecnológicas: captura direta do ar, pré-combustão, pós-combustão e combustão com oxigênio (oxicombustível), conforme Orujov et al. (2023). Vale ressaltar, que quando falamos da remoção de CO₂ em processos industriais, temos uma grande variedade de desafios como por exemplo o alto volume de gases emitidos que exigem equipamentos com grande eficiência, onde, além disso, também possibilitem um bom controle térmico. Dessa forma, um equipamento que pode atingir a exigência desses processos industriais são os reatores multifásicos utilizados nas tecnologias pós combustão.

Esses reatores apresentam uma dinâmica de escoamento complexa, envolvendo múltiplas fases do fluido, e podem ser classificados em três tipos principais: leito fixo, leito móvel e leito fluidizado (DHOKE et al., 2021). No reator de leito fluidizado, por exemplo, um fluido é introduzido pela parte inferior do reator, onde estão alocadas partículas sólidas. Isso proporciona uma mistura intensa entre as fases, favorecendo a ocorrência de reações químicas resultando na adsorção do CO_2 .

Nesse tipo de sistema, as partículas se comportam como um fluido, apresentando alta taxa de mistura (DHOKE et al., 2021). Além disso, sua utilização tem se mostrado altamente eficiente na remoção de CO_2 . Uma abordagem promissora para o desenvolvimento e otimização desses reatores é a aplicação da fluidodinâmica computacional (CFD) que a análise detalhada da interação entre partículas sólidas e os meios líquido e gasoso.

A integração dessas metodologias permite uma análise abrangente do comportamento do reator. Nesse sentido, Reyes-Urrutia et al. (2022) utilizaram a abordagem CFD com os softwares de código aberto OpenFOAM e MFIX para simular um leito fluidizado sob diferentes condições de temperatura e transferência de calor. O objetivo foi determinar a velocidade mínima de fluidização em função da temperatura do leito, bem como o coeficiente de transferência de calor a partir de uma parede lateral e de tubos internos. Os autores concluíram que os softwares foram eficazes na obtenção de padrões hidrodinâmicos globais do reator e na análise da influência dos efeitos térmicos.

Em suma, a abordagem CFD confere maior flexibilidade ao projeto de reatores de leito fluidizado, permitindo sua avaliação e otimização ainda na fase de simulação, antes dos testes experimentais. Dessa forma, o presente trabalho tem como objetivo a simulação computacional de um reator de leito fluidizado, utilizando a modelagem CFD para a captura de CO_2 . O fluido empregado será a água combinada com o CO_2 . Inicialmente, será realizada uma revisão detalhada sobre o tema, bem como o estudo da formulação do escoamento multifásico com base no CFD. As etapas seguintes envolvem a criação da geometria do reator e sua simulação numérica, utilizando os softwares computacionais Fluent. Dessa forma, até que ponto a modelagem computacional pode reproduzir o comportamento real de um reator e auxiliar seu projeto e otimização?

2 OBJETIVO GERAL

Simular um reator de leito fluidizado por meio de uma modelagem CFD para ser utilizado na descarbonização de processos.

2.1 Objetivos específicos

- Realizar uma revisão detalhada sobre aplicações de reatores de leito fluidizado
- Realizar o levantamento das formulações do CFD escoamento multifásico;
- Modelar reator de leito fluidizado;
- Realizar simulações CFD do reator;

3 JUSTIFICATIVA

De acordo com o Quinto Relatório de Avaliação do Painel Intergovernamental sobre Mudanças Climáticas das Nações Unidas (IPCC, 2014), as emissões dos gases de efeito estufa (GEE) gerados pela ação humana, apresentando um crescimento desde os anos de 1950, nunca foram tão altos do que entre os anos 2000 à 2010, o que vem se intensificando, como mostra a Figura 1. Isso reflete um dos maiores desafios técnico e humanitário do século XXI: A redução dos impactos causados por essas emissões na atmosfera. Dessa forma a redução dos impactos que essas emissões causam tem sua dificuldade pautada em remodelar um modelo de desenvolvimento social baseado na utilização de meios extremamente agressivos ao meio ambiente. A exemplo disso, o acordo de Paris (2015) traz consigo a necessidade de adoção de padrões sustentáveis de consumo e de produção, uma vez que busca manter o aumento da temperatura média global abaixo de 2° C.

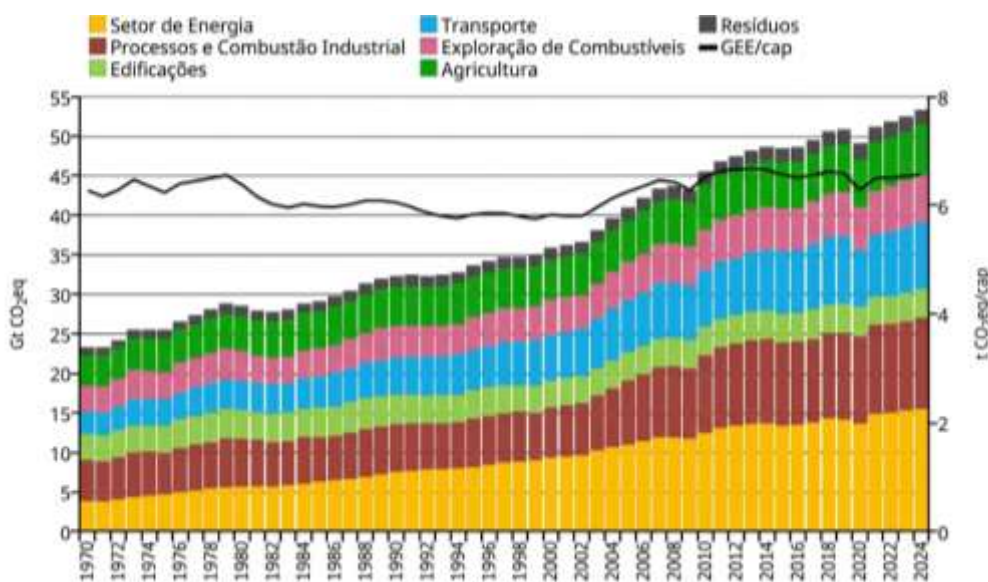
Outro ponto que mostra a relevância do tema a nível global, a agenda 2030 Organização das Nações Unidas (ONU), traz consigo o destaque para dois objetivos: o ODS 7, que diz respeito à energia limpa e acessível e ODS 13, sobre a ação contra a mudança global do clima. Nesse contexto, surgem as chamadas metas “net zero”, que se referem a compensação dos gases de efeito estufa emitidos na atmosfera, realizando a remoção deles para resultar em zero emissões líquidas. Dessa forma, a transição energética global se mostra um movimento indispensável para os sistemas de produção e consumo, que precisam operar de maneira mais limpa e focados na descarbonização de seus processos, realizando, por exemplo, a substituição de seus sistemas por aqueles como baixa emissão de gases de efeito estufa (GEE).

É nesse contexto que surge a necessidade do aprimoramento das tecnologias de captura, uso e armazenamento de carbono (CCUS), pois existem serviços que apresentam grande dificuldade para serem ofertados sem emissões de dióxido de carbono (CO₂). Um exemplo desses processos é a produção de cimento, que apresenta cerca de 40% de suas emissões vindas do uso de combustíveis fósseis e o restante da calcinação do calcário. Para sistemas desse tipo as concentrações de CO₂ nos gases de exaustão chegam a 30% do volume, necessitando assim de uma tecnologia de captura pós-combustão (DAVID, 2018). Assim, uma tecnologia que vem

sendo alvo de pesquisas acadêmicas e aplicações industriais são os reatores de leito fluidizado para a captura do gás carbônico.

Os sistemas de leito fluidizado datam os anos de 1920, quando o gaseificador Winkler, um primeiro modelo de leito fluidizado foi criado (LING *et al*, 2023). Esses sistemas têm a capacidade de reter o CO₂ utilizando partículas que são atravessadas por um gás ou líquido. Entretanto, esses sistemas apresentam certa complexidade, uma vez que é um típico sistema de reação multifásico denso. Dessa forma, a simulação computacional propicia ao estudo desses reatores a flexibilidade de conhecer o comportamento desses reatores de maneira mais rápida e menos onerosa. Por fim, esse estudo se faz necessário pois contribui para alcançar a neutralidade de carbono buscada a nível mundial, uma vez que para alcançar esse objetivo é necessário o investimento em tecnologias que visam a captura de gases de efeito estufa, principalmente o CO₂, nos mais diversos processos industriais. Nesse contexto os reatores de leito fluidizado se tornam uma opção estratégica em conjunto com a metodologia CFD, que surge como uma abordagem capaz de viabilizar projetos menos custosos.

Figura 1: emissões de Gases de Efeito estufa por setor ente 1970 e 2024.



Fonte: adaptado de JRC, 2025.

4 REVISÃO DE LITERATURA

Os reatores de leito fluidizado são uma alternativa tecnológica para a diminuição de emissões de gases de efeito estufa. Na literatura recente conseguimos ver várias utilizações para os reatores de leito fluidizado e alguns trabalhos já destacam a utilização de Simulação Computacional em seus estudos. A simulação computacional pode trazer a flexibilidade ao estudo dos reatores, uma vez que eles podem ser complexos do ponto de vista fluidodinâmico o que pode tornar seu projeto experimental caro. Nesse ínterim, alguns trabalhos trazem em sua temática a modelagem CFD quando se tem como objetivo a captura de CO₂.

Abanades et al (2005) apresentaram um dos primeiros trabalhos de captura de CO₂ com utilização de reatores de leito fluidizado. A combustão foi a ferramenta para conversão de CO₂ a partir da utilização de óxido de cálcio. Em seu estudo, os autores apresentaram sistemas de leito fluidizados com combustão (FBCs) com uma reação de carbonatação-calcinação trabalhando em altas temperaturas(>650°C) e apontaram a eficiência do óxido de cálcio como solvente em função da grande massa de CO₂ que o mesmo consegue capturar, uma vez que ele pode absorver até 0,786 Kg de CO₂ a cada 1 Kg de óxido de cálcio. Eles apresentaram 5 diferentes casos de operação desses reatores comparando entre si a sua eficiência.

Nam *et al* (2021) realizaram uma investigação da metanação de CO₂ em leito fluidizado borbulhante (BFB). No estudo foi possível ver que a composição do gás de entrada exerceu forte influência sobre a hidrodinâmica, expansão e transferência de calor do leito. A composição variou os teores de N₂ entre 77,5%, 50%, 25% e 0%, onde observou-se uma máxima expansão do leito para 50% de N₂, em razão do número de bolhas formadas, enquanto para 0% a expansão é a menor. Os perfis radiais da fração sólida confirmaram o comportamento típico de fluxo anular, com partículas ascendendo no centro e descendo próximas às paredes. A temperatura média do leito aumentou progressivamente de 348 °C (77,5% N₂) para 456 °C (0% N₂), evidenciando o efeito da reação exotérmica.

Ren *et al* (2022) utilizaram um modelo turbulento de duas equações (TET) baseado na metodologia de transferência de massa computacional (CTM) para simular um reator de leito fluidizado do tipo borbulhante (BFB) para realizar captura

de carbono. No estudo, os autores usaram um leito de carbonato de potássio por onde passava o CO_2 , sendo assim um leito gás-sólido. O reator possuía altura de 1000 mm e um raio interno de 31,5 mm. As partículas de K_2CO_3 possuíam diâmetro de 400 μm e foram alojadas no leito a uma altura de até 100 mm, sua fração volumétrica foi de 0,63. No trabalho foi feita uma comparação entre os dados obtidos na simulação e dados experimentais baseados na literatura que acabou mostrando uma boa concordância, apresentando um erro médio relativo de 2,47% em um caso e 8,45% em outro. No estudo também foi calculada a relação entre a difusão de massa e difusão de momento, o número de schmidt turbulento – razão entre a difusividade turbulenta de momento e a difusividade turbulenta de massa –, para o qual foi encontrado um valor médio de 0,32.

Yu *et al* (2023) apresentaram um modelo numérico – MP-PIC reativo – para representar o comportamento das partículas em um leito fluidizado borbulhante. Os autores reduziram custo computacional ao agrupar partículas com propriedades semelhantes. O reator utilizado no trabalho possuía 1 m de altura e 0,063 m de diâmetro interno, sua temperatura inicial foi de 673 K. Em seu leito dois tipos de partículas foram utilizadas, o catalisador CeO_2 e o sorvente Hidrotalcita a 0,1 m de altura com diâmetros entre 0,11 mm e 0,25 mm. A mistura gasosa utilizada foi vapor e etanol, que entrava no reator a 1 m/s. O modelo foi validado com dados experimentais, mostrando que ao longo da altura do leito a temperatura das partículas diminui, enquanto o coeficiente de transferência de calor aumenta. Eles verificaram que a maior parte da distribuição de H_2 e CO_2 tende a se concentrar na parte superior do reator, o que é favorecido pelo aumento da vazão de vapor na mistura gasosa.

Sornvichai *et al* (2024) estudaram a captura de CO_2 utilizando uma mistura gás-sólido com água, gás carbônico e solvente a base de potássio (K_2CO_3) em um riser de um reator do tipo circulante. No estudo foram investigados parâmetros como temperatura da água de resfriamento, vazão, diâmetro etc., para se otimizar o desempenho do reator. A geometria do leito possui uma seção transversal de 5x5 cm e 100 cm de altura. Tubos com água de resfriamento foram inseridos ao longo da altura da geometria o gás entra na parte inferior do leito onde atravessa as partículas sólidas que possuem diâmetro de 380 micrômetros e densidade de 3560 kg/m^3 . O estudo mostrou que com ajustes como a redução da temperatura e vazão da água de resfriamento podem resultar em melhor remoção do CO_2 . O estudo demonstrou por

fim que a remoção de CO_2 pode atingir eficiências superiores a 99% em condições reais de operação, reforçando o potencial da tecnologia.

Bai *et al* (2025) buscaram em seu trabalho a diminuição do esforço computacional para simular um reator de leito fluidizado tendo como objetivo a simulação de um sistema em escala industrial. Os autores propuseram uma maneira de contornar o alto custo computacional e o elevado tempo para atingir o estado estacionário utilizando um reator pequeno com características hidrodinâmicas e reativas idênticas às de um reator industrial. Para validar a sua hipótese, os autores utilizaram um regenerador de leito fluidizado de metanol-para-olefinas (MTO) e o software computacional Barracuda baseado no modelo MP-PIC. Dessa forma, três simulações foram realizadas: Uma simulação com o regenerador industrial, uma simulação com o regenerador menor e uma nova simulação com o regenerador industrial usando as condições iniciais baseado na distribuição de conversão de sólidos da simulação com o segundo equipamento, com o experimento foi possível reduzir em 50% no tempo total da simulação.

He *et al* (2026) empregaram em sus estudo o uso de partículas polidispersas à base de cálcio em leitos fluidizados borbulhantes a fim de avaliar os efeitos da distribuição do tamanho das partículas na hidrodinâmica do leito. Os autores utilizaram uma geometria em 2D a fim de diminuir o custo computacional. O modelo de leito fluidizado no trabalho possui uma altura de 1 m e uma largura de 0,08 m. No trabalho foi utilizada uma reação entre o óxido de cálcio e o CO_2 para formar o carbonato de cálcio. A vazão de entrada do gás foi de 0,3 a 0,5 m/s e as partículas tiveram uma variação de tamanho entre 75 μm a 136 μm . A temperatura de entrada do gás foi de 923 K. Os autores concluíram que o tamanho da partícula influencia na eficiência do reator em relação à captura do gás carbônico, uma vez que para uma mesma velocidade, a adsorção do gás diminui quando a partícula vai variando de 75 μm para 136 μm . Os resultados também mostraram que o uso de partículas mistas apresentou um pouco maior do que um leito com partículas de tamanho único.

Em suma, a revisão bibliográfica mostra que tanto a modelagem computacional se mostra efetiva para simular e testar reatores de leito fluidizado em suas diversas aplicações uma vez que investiga os aspectos hidrodinâmicos e o comportamento das partículas presente nos reatores. Entretanto, no que tange à utilização desses

equipamentos para captura de CO₂, ainda se encontra uma lacuna a ser explorada no âmbito computacional. Dessa forma, o presente trabalho propõe a utilização da modelagem CFD para entender como a simulação computacional pode ser utilizada para o estudo do comportamento de um reator de leito fluidizado, quando ele tem sua aplicação na captura de CO₂, visando fornecer diretrizes a respeito de tema.

5 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

5.1 Métodos de captura de CO₂

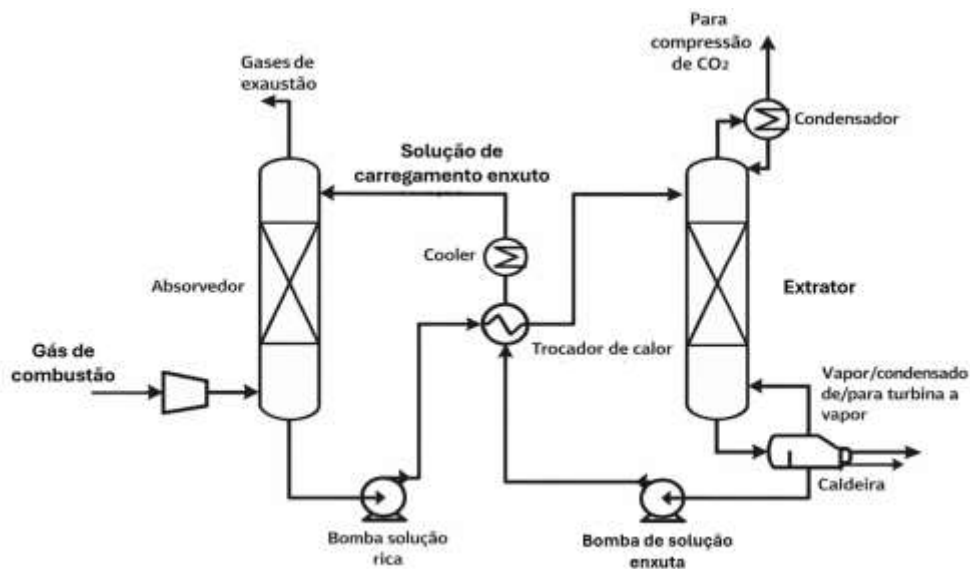
Um dos maiores desafios ambientais da sociedade atual são as mudanças climáticas relacionadas ao aumento da concentração de dióxido de carbono (CO₂) na atmosfera, sendo isso um dos principais fatores responsáveis pelo aquecimento global. De acordo com, Friedlingstein *et al.*, (2023), o Brasil é o sexto maior emissor de carbono no mundo, e essas emissões se originam, em sua maioria, da queima de combustíveis fósseis, processos industriais, desmatamento, geração de energia elétrica e transporte (ZHANG *et al.*, 2022). Entretanto é o setor de Energia que contribui mais significativamente para a liberação de CO₂ na atmosfera (HE *et al.*, 2024). Outro grande contribuinte para geração e emissão de CO₂ são os meios de transporte que dependem de combustíveis como gasolina e diesel (AKBARI *et al.*, 2025). Nesse contexto, estratégias como as tecnologias de captura de carbono e armazenamento do carbono (CCS) são uma saída para a descarbonização do planeta.

Em suma, essas tecnologias de captura de carbono têm como objetivo principal a redução da emissão de CO₂, realizando sua captura de processos industriais e de geração de energia (BRAUN, 2017). Assim, se tornam uma ferramenta poderosa quando aplicada em processos industriais, reduzindo o impacto ambiental dos mesmos. Além disso, o conceito de captura e utilização de carbono (CCU – Carbon Capture and Utilization) traz a possibilidade de transformar esse carbono capturado em produtos de valor agregado como plásticos, fertilizantes etc. Outro conceito importante é o de captura e armazenamento de carbono (CCS – Carbon Capture and Storage), que se ocupa de estudar e desenvolver métodos de armazenamento desse carbono capturado. Vale ressaltar, que cada tecnologia tem sua indicação de uso e sua aplicação e depende do processo e da concentração de CO₂ no fluido no qual será extraído. Madejski *et al.* (2022) descreveram alguns tipos de captura de carbono, são eles:

5.1.1 Absorção física e química

De acordo com o autor, o solvente químico mais indicado para utilização em captura de carbono quando em baixas pressões de CO_2 é a monoetanolamina. Esse tipo de solvente tem como vantagem a alta eficiência para baixas pressões parciais, alta taxa de absorção e boa capacidade cíclica, entretanto, apresenta desafios relacionados à alta necessidade de calor para sua regeneração, que pode se tornar um grande consumidor de energia em um processo, resultado em maiores custos operacionais (YANG et al, 2023). Eles possuem uma baixa polaridade e capacidade calorífica, assim como uma boa estabilidade térmica. Na figura (2) está um dos tipos de sistema utilizados para absorção de CO_2 .

Figura 2: Esquema de processo de captura de CO_2 por absorção química.



Fonte: Adaptado de Wang et al (2017a).

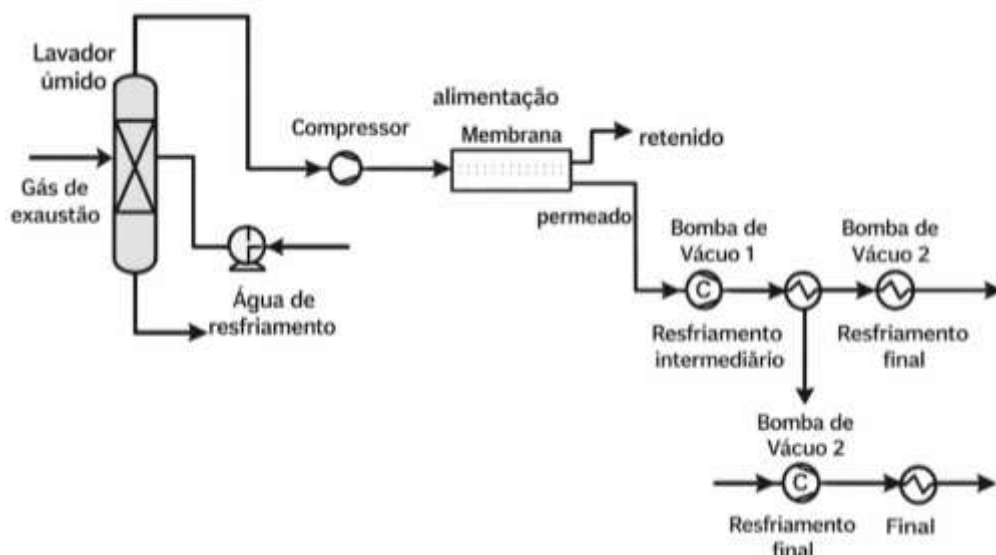
5.1.3 Utilização de processos criogênicos

Quando comparados com métodos como a absorção química, a captura de carbono por meio de processos criogênicos apresenta vantagens como a simplicidade do sistema, uma vez que consiste em processos como compressão, expansão, separação e resfriamento (KNAPIK; KOSOWSKI; STOPA, 2018). O processo também produz um CO₂ de alta pureza na separação (HE *et al*, 2025). Em geral, os processos criogênicos utilizam a liquefação ou dessublimação do CO₂, onde acontece o resfriamento dos gases de combustão em um processo até que se atinja a temperatura de dessublimação e em seguida o CO₂ é liquefeito para ser armazenado, após ser separados dos outros gases ao passar por um processo de filtragem (SAFDARNEJAD *et al*, 2018). Em alguns trabalhos esse método pode ser combinado com outros como em Zhang *et al* (2024), para reduzir os custos com seu funcionamento e Chunfeng *et al* (2024) para melhorar a eficiência do sistema.

5.1.4 Membranas

Esse processo pode ser dividido em dois tipos: membranas de separação de gases e de absorção de gases (MADEJSKI *et al*, 2022). Ele apresenta uma redução nos limites de transferência de massa, maior taxa de absorção e maior estabilidade operacional em alguns casos (RASOULI *et al*, 2022). Nesse método é criada uma barreira que separa o CO₂ de outros gases impulsionados por uma diferença de pressão parcial através da membrana, resultando em um CO₂ permeado de um lado e os outros gases do outro. Nesse caso, a separação seletiva ocorre em razão da diferença de potencial químico, uma vez que o CO₂ migra para a região de menor potencial químico. A figura (3), apresenta um esquema da captura de CO₂ utilizando o processo de separação por membranas:

Figura 3: Esquema de processo de captura de CO₂ utilizando por membranas.



Fonte: Adaptado, Wang et al (2017a).

5.1.5 Adsorção química e física

A adsorção se baseia na utilização de uma mistura onde um sólido realiza a remoção de CO₂. Os métodos de adsorções mais conhecidos são: adsorção por oscilação de pressão (PSA), adsorção por oscilação de temperatura (TSA), adsorção por oscilação de vácuo (VSA) e adsorção por oscilação de pressão-temperatura (PTSA). Uma abordagem utilizada para realizar essa adsorção é o uso do carbonato de potássio (K₂CO₃), utilizado em uma reação química junto com a água, apresenta uma boa condição termodinâmica (GAO *et al*, 2013). Esta reação foi utilizada nesse projeto para a captura do gás carbônico. Esta reação foi utilizada nesse projeto para a captura do gás carbônico, representada pela equação (5.1) e suas constantes cinéticas estão apresentadas na tabela 1:

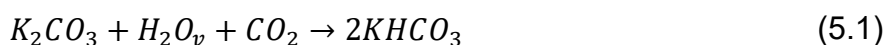


Tabela 1: Constantes cinéticas utilizadas.

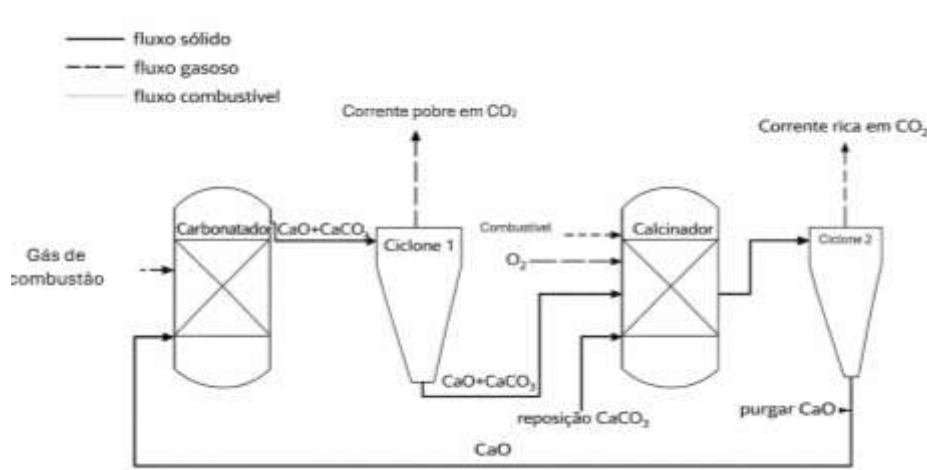
Parâmetro	Valor
Energia de ativação[J/kgmol]	$7,9 \times 10^7$
Fator Pré-exponencial [Kg]	55
Expoente de temperatura	0

Fonte: Autora (2026).

5.1.6 Processo de looping químico

Um outro processo de remoção é o processo de looping químico ou ciclagem química, nessa tecnologia dois reatores são utilizados, com ar e combustível, acoplados para realizar o transporte do oxigênio. No reator de ar se utiliza partículas de ferro, cobre ou manganês para que ocorra a formação de óxidos metálicos, que são transportados para reagir com combustível no segundo reator, onde esses óxidos são reduzidos produzindo energia e gases de exaustão (MADEJSKI, 2022). Um processo muito utilizado é o calcium looping(ciclo de cálcio) que consiste na reação entre o CO_2 e o óxido de cálcio. Na figura abaixo está um esquema típico de um processo calcium looping.

Figura 4:Esquema de um processo Calcium looping.



Fonte: TILAK, EL-HALWAGI (2018)

5.2 Reator de Leito Fluidizado

O conceito de leito fluidizado foi aplicado inicialmente para processos de combustão e craqueamento catalítico, sendo também utilizados para gaseificação do carvão, biomassa e pirólise, que se beneficiam da tecnologia por sua capacidade de movimentar sólidos continuamente. Essa configuração do reator favorece a eficiência da reação de absorção, uma vez que proporcionam uma boa mistura e transferência de calor e massa (CHEW *et al*, 2022).

Dessa forma, um reator de leito fluidizado é composto por um leito de partículas sólidas que, quando atravessado por um fluxo ascendente de gás, comporta-se de maneira semelhante a um fluido. Isso ocorre quando a velocidade do gás atinge a chamada velocidade mínima de fluidização (U_{mf}), suficiente para suspender as partículas sem arrastá-las completamente.

A U_{mf} é a menor velocidade que o gás precisa atingir para que as partículas do solvente comecem a se comportar como fluido em movimento. Abaixo dessa velocidade o leito está em regime fixo, acima, o leito entra em regime fluidizado, seu comportamento passa a ser de um fluido denso. Vale salientar que o comportamento da fluidização vai ser diferente a depender se o fluido empregado é líquido ou gás sendo o comportamento do líquido-partículas mais suave ao atingir a U_{mf} e o comportamento líquido-gás apresenta maior instabilidade (ALMEIDA, 2018).

Algumas literaturas trazem os tipos de tecnologias de fluidização e suas aplicações datam a década de 90 como em Kuni e Ikenberry (1991), de acordo com os autores, podemos dividir os reatores de leito fluidizado de acordo com seu regime a medida em que velocidade do fluido é alterada, em um Leito Fixo, o fluido atravessa o leito de partículas finas em uma baixa vazão, mantendo as mesmas estacionárias. Esse regime é mais antigo e possui uma eficiência menor que os outros. O leito pode ser classificado como suave ou particulado quando, tendo por agente fluidizante um líquido, a vazão é aumentada e o leito é expandido de maneira suave.

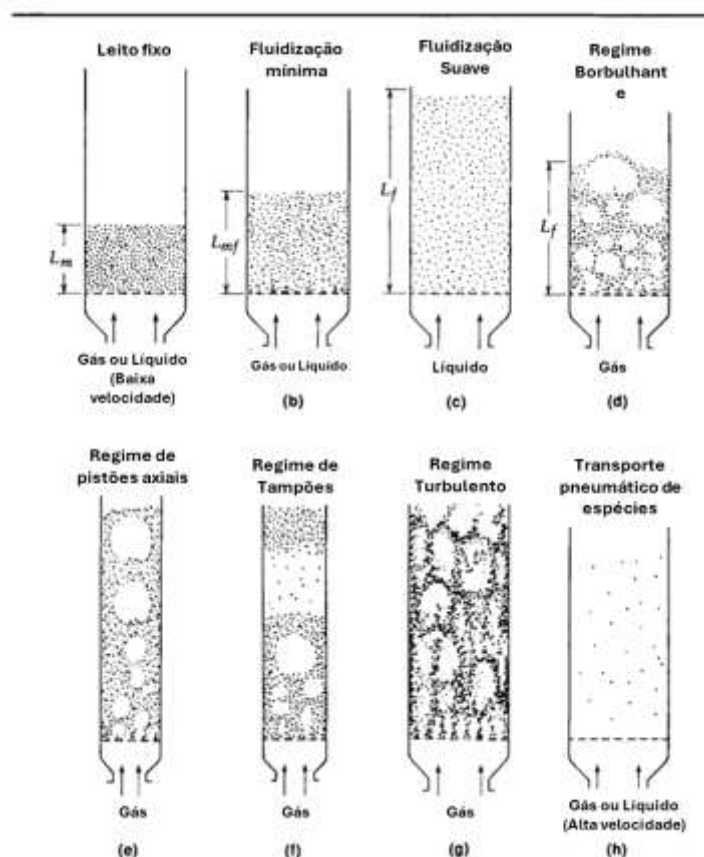
Entretanto, se temos como agente fluidizante um gás, o leito pode se comportar como um Leito Borbulhante (Bubbling Fluidized Bed, BFB), onde a velocidade do fluido fica logo acima da U_{mf} , atingindo a velocidade mínima de borbulhamento U_{mb} , gerando bolhas que sobem pelo leito e grande agitação das partículas, geralmente utilizado para leitos com partículas médias. Para esse regime são observadas grandes instabilidades em função do aumento da vazão.

O Leito em Regime de tampões ou pistões, ocorre quando a vazão aumenta de maneira em que as bolhas de gás crescem e ocupam toda a seção transversal do reator, formando uma espécie de pistão (*slug*) de gás que eleva as partículas sólidas, onde ao se romper as partículas caem novamente e outro *Slug* se forma, realizando um movimento de oscilação. Esse tipo de leito se divide entre *Slug Axial*, com partículas finas e *Flat slug*, com partículas grossas. Esses sistemas são instáveis e muitas vezes indesejados por sua ineficiência.

Em um Leito Fluidizado Circulante (*Circulating Fluidized Bed*, CFB), o gás entra em alta velocidade no leito e arrasta as partículas sólidas para cima. Um ciclone captura essas partículas e as retorna a base do reator e como resultado as partículas circulam sem parar. Muito utilizado na gaseificação de carvão e biomassa. Por fim, o Leito fluidizado turbulento (*Turbulent Fluidized Bed*, TFB), tem seu regime de fluidização operando com o fluido em alta velocidade e é mais denso e mais instável que outros regimes. As partículas sólidas são agitadas de forma violenta formando vazios no gás, apresentando bolhas em vários tamanhos. Caso a velocidade seja aumentada de maneira que as partículas sejam arrastadas para fora do leito, tornando-o disperso e é usado para o transporte pneumático de partículas (ALMEIDA, 2018b).

Na figura a seguir, podemos ver a representação dos tipos de leito visto em Kuni e lenvesnpel (1991):

Figura 5: Diferentes regimes de fluidização.



Fonte: Kuni e lenvesnpel (1991).

5.2.1. Velocidade mínima de Fluidização (U_{mf})

É denominada Velocidade mínima de fluidização (U_{mf}), dada pela equação (5.2), a velocidade superficial do fluido ascendente no leito, é a menor velocidade que o fluido precisa alcançar para que as partículas sólidas comecem a se movimentar. O leito passa do regime fixo para o regime fluidizado ao se atingir a U_{mf} . Isso ocorre quando a força de arrasto que o fluido exerce nas partículas se iguala ao peso aparente dessas partículas, o leito se expande e ocorre uma maior separação entre as partículas (PEDROSO, 2014).

$$Um_f = \frac{1,75}{\epsilon m_f \varphi} Re_{p,mf}^2 \frac{150(1 - mf)}{\epsilon m_f \varphi^2} Re_{p,mf} \quad (5.2)$$

Onde, $Re_{p,mf}$ é o número de reynolds da partícula na Um_f , ϵm_f é a porosidade do leito. Quanto maior a velocidade, se tem uma maior ordenação no regime de fluidização e caso ainda ocorra o aumento desse fluxo de gás ocorre o acúmulo de sólidos na parte inferior do reator, passando de leito fluidizado para a condição de transporte pneumático.

5.2.2 Classificação das partículas

Proposto por Geldart (1972), o principal meio de classificação de partículas divide as mesmas em quatro grupos, divididos em função do seu diâmetro (d_p) e da diferença de densidade entre as partículas e o gás ($\rho_s - \rho_f$).

As partículas do grupo A possuem diâmetros entre 30-100 μm e a velocidade mínima de fluidização nesse caso é menor do que a velocidade mínima de borbulhamento. As bolhas tendem a coalescer e se dividir e apresentam um tamanho máximo de 10 cm.

Para as partículas do grupo B os diâmetros variam de 150 a 1000 μm e a velocidade mínima de fluidização é aproximadamente igual a velocidade mínima de borbulhamento. A maioria das reações gás-sólido operam nesse regime, as bolhas se formam ao longo da coluna do leito e aumentam linearmente com a velocidade do gás. Não existe um tamanho certo de bolhas.

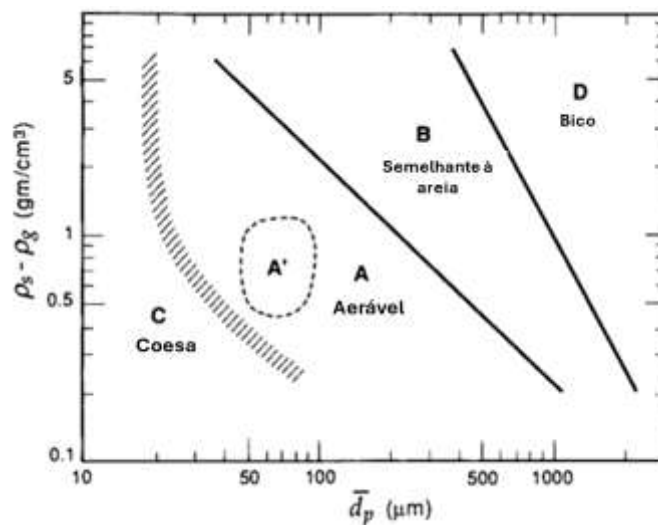
As partículas do tamanho C possuem diâmetro menor que 20 μm , esse tipo de partícula é muito coesivo, fazendo com que existam dificuldades em sua fluidização. Em leitos mais estreitos podemos observar os comportamentos de tampão (*plug*), já para leitos mais largos as partículas formam canalizações que vão do distribuidor até a superfície.

Por fim, as partículas do grupo D por ter grandes tamanhos, maiores que 1000 μm e por serem muito densas necessitam de uma elevada vazão de fluido, podendo

influenciar na densidade do leito tendendo a limitar a mistura. As bolhas coalescem rapidamente e podem atingir o diâmetro do leito, formando pistões (*slugs*).

Abaixo, é apresentado o mapa das classificações em função das densidades das partículas (ρ_s) e do gás (ρ_f) e do diâmetro médio das partículas (d_p):

Figura 6: Mapa da classificação das partículas de Geldart.



Fonte: Kuni e Levenspiel (1991).

5.2.2.1 Diâmetro das partículas e velocidade adimensional

O estudo sobre a classificação das partículas permitirá a adequação do leito ao melhor regime de fluidização. O diâmetro das partículas depende da velocidade adimensional do gás, que podem ser calculados respectivamente pelas equações (5.3) e (5.4) (Kuni e Levenspiel, 1991):

$$d_p = \left(\frac{Ar \mu^2}{g \rho_s (\rho_s - \rho_f)} \right)^{1/3} \quad (5.3)$$

Onde, d_p é o diâmetro da partícula, g a aceleração da gravidade, ρ_s e ρ_f as densidades das partículas e do fluido, respectivamente.

$$u_f = \left[\frac{\rho_f^2}{\mu g (\rho_s - \rho_f)} \right]^{1/3} \quad (5.4)$$

Onde, Ar é número de Arquimedes dado na equação (5.6), Re é o número de Reynolds da partícula dado por (5.5):

$$Re = \frac{\rho_g \mu_g d_p}{\mu_f} \quad (5.5)$$

$$Ar = \frac{g d_p^3 \rho_f (\rho_g - \rho_f)}{\mu^2} \quad (5.6)$$

Onde d_p o diâmetro da partícula, ρ_g a massa específica do gás, ρ_s a massa específica da partícula, g aceleração, μ viscosidade.

5.3 Modelagem Numérica de sistemas multifásicos

Um sistema é dito multifásico quando apresenta duas ou mais fases quimicamente distintas ou com diferentes estados da matéria que coexistem em equilíbrio (ÇENGEL E CIMBALA, 2015). Para estes sistemas, duas abordagens de simulação podem ser utilizadas: a abordagem contínua, com o modelo Euleriano-Euleriano e a abordagem discreta, onde pode-se utilizar o modelo Euleriano lagrangeano.

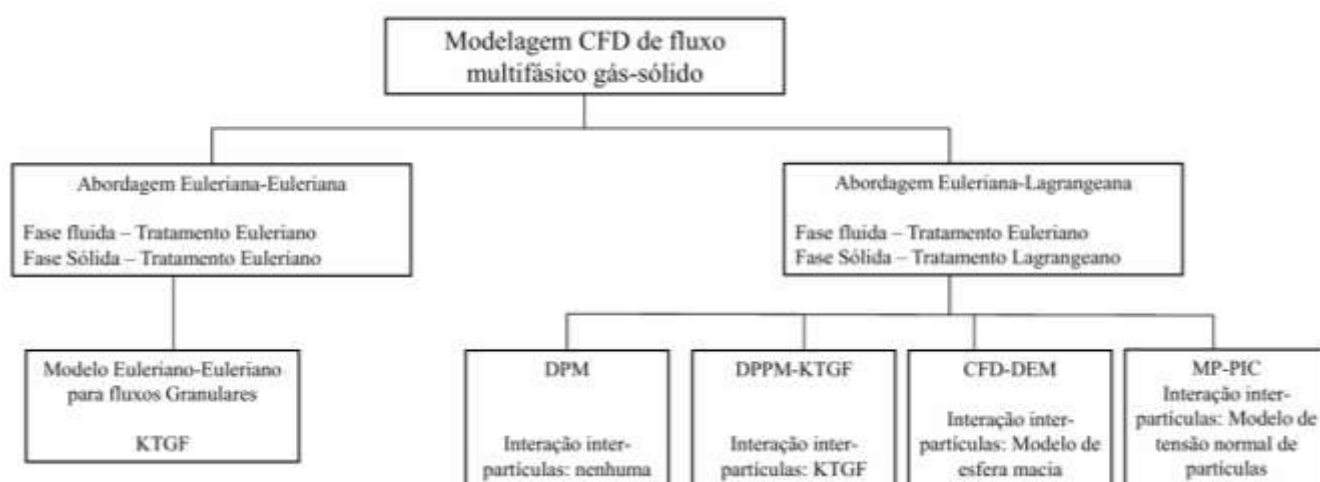
O modelo Euleriano-Euleriano considera as duas fases como fases contínuas interpenetráveis entre si. Já no modelo Euleriano- Lagrangeano as fases interagem entre si com a fase contínua por meio de forças de interação, como as de arraste. A fase gasosa é tratada como fluido euleriano e a abordagem lagrangeana é utilizada para modelar a fase sólida.

O modelo Euleriano-Euleriano para este tipo de aplicação é o *Two Fluid Model* (TFM) e o modelo Euleriano-Lagrangeano pode ser dividido em *Discrete Phase Model* (DPM), *Dense Discrete Phase Model* incorporado com *Kinetic Theory of Granular Flow* (DDPM-KTGF), *Computational Fluid Dynamics* acoplado ao *Discrete Element Method*

(CFD-DEM), esquema numérico de fluidodinâmica computacional incorporado a *Multiphase - Particle in Cell* (MP-PIC) (ALMEIDA, 2018).

Na figura abaixo, é possível ver um resumo com os modelos utilizados em escoamentos multifásico:

Figura 7: Modelagem computacional escoamentos multifásicos.



Fonte: Manjula, apud Almeida, 2018, adaptado.

5.3.1 Abordagem Euleriana - Euleriana

Na abordagem Euleriana-Euleriana as fases contínuas e dispersas são tratadas como fluidos interpenetrantes, onde se aplicam as equações de conservação de massa, momento e energia para cada fase por todo o domínio da simulação e a soma de suas frações volumétricas é igual a 1. O modelo utiliza o procedimento chamado de médias de Euler e dentre as diversas forças que podem ocorrer no modelo, apenas a força de arraste é considerada, uma vez que a diferença de densidade entre as fases é muito grande as outras forças interfaciais se tornam insignificantes (ALMEIDA, 2018).

Dessa forma, a equação de Navier-Stokes de conservação de massa para ambas as fases pode ser dada por:

$$\frac{\partial f_f \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (f_f \rho_f v_f) = 0 \quad (5.7)$$

Onde, ρ_s é a densidade de cada fase, f_f a fração volumétrica de cada fase em kg.m⁻³ e v_s é a velocidade média de cada fase dada em m/s. Já a conservação de momento é dada pela equação:

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_f \rho_f v_g) + \nabla \cdot (f_g \rho_g v_g) = \sigma_g + f_g \rho_g g - F^{g-p} \quad (5.8)$$

Onde, σ_g é o tensor de tensões de cada fase, g a aceleração da gravidade em m/s² e F^{g-p} é a força de interação entre as fases sólida e gasosa em N.m⁻³.

$$\sigma_g = -P_g U + \tau_g \quad (5.9)$$

Onde, P_g é a pressão hidrostática da fase gasosa [Pa], U é o tensor unitário; τ_g é o tensor das tensões viscosas da fase fluida, dado por:

$$\tau_g = 2f_g \mu_g D_g + f_g \lambda_g \text{tr}(D_g) Q \quad (5.10)$$

Onde, μ_g é a viscosidade dinâmica da fase gasosa em Kg.m⁻¹. s⁻¹, D_g é o tensor da taxa de deformação [s⁻¹] e λ_g é a viscosidade volumétrica do gás [Kg.m⁻¹. s⁻¹].

O principal método utilizado é o de volumes finitos. A premissa do Método dos Volumes Finitos (MVF) consiste na integração das leis de conservação sobre volumes de controle discretizados, em que o balanço de propriedades físicas (ϕ), a exemplo da massa e da quantidade de movimento, é determinado através do cálculo dos fluxos que atravessam as fronteiras de cada célula (MALISKA, 2004). Dessa forma, o domínio se divide em vários volumes de controle chamados de células onde as equações governantes são discretizadas e é realizado o cálculo das propriedades médias do fluido, sendo assim, a equação que descreve o fluxo pode ser dada por:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_k \phi)}{\partial X_k} = \frac{\partial}{\partial X_k} \left(\tau_{\phi k} \frac{\partial \phi}{\partial X_k} \right) + s_\phi \quad (5.11)$$

Onde, ρ é a densidade do gás, U são os componentes da velocidade média de Reynolds, $\tau_{\phi k}$ é um tensor de transporte efetivo e s_ϕ o resumo dos termos fontes utilizados nas equações de fase contínua. O primeiro termo da equação representa o acúmulo, o segundo a advecção seguidos dos termos de difusão e geração.

5.3.2 Abordagem Euleriana-Lagrangeana

A abordagem Euleriana-lagrangeana permite uma descrição muito detalhada do comportamento discreto das partículas. O fluido é calculado baseado na abordagem Euleriana, resolvendo as equações de conservação com a média de Reynolds (*Reynolds-averaged Navier–Stokes equations* - RANS) em conjunto com um modelo de turbulência padrão (CROEW et al, 2015). e as partículas são definidas discretizadas e rastreadas através do domínio resolvendo das equações de movimento que tem como base a segunda lei de newton.

Nessa abordagem as partículas são tratadas como massas pontuais ou “parcelas” e as equações de movimento são resolvidas para cada partícula, sendo considera as forças de inércia das partículas, arrasto, empuxo, força de sustentação por deslizamento-cisalhamento (*slip–shear lift*) e força de sustentação por deslizamento-rotação (*slip-rotational lift*) (CROEW et al, 2015). Dessa forma, duas equações governam o movimento translacional e rotacional das partículas, vistas abaixo:

$$m_p \frac{dw_p}{dt} = F_c + F_{f \rightarrow p} + m_p g \quad (5.12)$$

$$J_p \frac{dw}{dt} = M_c \quad (5.13)$$

Onde, m_p é a massa da partícula, g é a aceleração da gravidade, w_p é a velocidade angular da partícula F_c é a força de contato devido às colisões entre partículas e entre partículas e paredes, J_p é seu momento de inércia, M_c é o torque aplicado pelas forças de contato e $F_{f \rightarrow p}$ representado na equação:

$$F_{f \rightarrow p} = FD + FN - D = FD + F\nabla p + FL + FVM + Foutras \quad (5.14)$$

onde é FD força de arrasto, $F\nabla p$ é a força de gradiente de pressão, FVM é a força da massa vital e FL a força de sustentação. Já para o fluido, são resolvidas as equações de Navier-stokes(Equação 5.11) utilizando dois termos fontes $s_{\phi p}$ e s_{ϕ} , onde s_{ϕ} é o termo fonte adicional devido a influência das partículas no escoamento (CROEW et al, 2015).

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_k \phi)}{\partial X_k} = \frac{\partial}{\partial X_k} (\tau_{\phi k} \frac{\partial \phi}{\partial X_k}) + s_{\phi p} + s_{\phi} \quad (5.15)$$

5.4 Transferência de calor

A eficácia das reações químicas em leitos fluidizados está intrinsecamente ligada ao regime térmico imposto ao reator e aos seus reagentes, uma vez que o calor é o principal catalisador do processo de conversão. O aquecimento em reatores de leito fluidizado pode acontecer de duas maneiras: aquecimento a gás ou aquecimento elétrico. No aquecimento a gás são utilizados gases combustíveis para aquecer a parede do leito e no aquecimento elétrico, aquecedores são alocados na lateral do leito, transferindo calor para a parede do mesmo ou resistências e induções podem ser utilizadas para aquecer o gás que adentrará o leito (BAI et al, 2021).

O aquecimento a gás traz a vantagem de utilização dos subprodutos de reações químicas como combustível, entretanto, não proporcionam um bom controle das faixas de temperatura. O uso de aquecedores elétricos, entretanto, proporciona esse bom controle, porém apresenta como desvantagem o alto consumo de energia

elétrica (BAI *et al*, 2021). O calor nesses equipamentos pode ser transferido através da condução, convecção e radiação, além de uma quarta forma de transferência: a reação (XIE e ZHANG, 2023).

5.5 Modelo de turbulência

Todo escoamento de um fluido pode ser classificado de duas maneiras: Laminar ou turbulento. No escoamento laminar o fluido se move formando um movimento translacional, que é suave e ordenado e a turbulência ocorre quando um gradiente de pressão atua sobre o escoamento fazendo com que o fluido deixe de realizar esse movimento translacional. Dessa forma, para o escoamento o número adimensional de Reynolds é definido de acordo com a sua classificação. Ele caracteriza um escoamento Laminar de $Re < 2100$ e turbulento de $Re > 4000$. Assim, algumas abordagens foram desenvolvidas a fim de gerarem modelos de turbulência para resolução numérica.

O Modelo *Direct Numerical Simulation* (DNS) apresenta uma alta exatidão para a modelagem de escoamentos turbulentos, uma vez que o mesmo resolve todos os movimentos contidos no fluxo. O modelo resolve as equações de Navier-stokes com médias ou aproximações e é o mais conceitualmente simples. Entretanto, ele exige um grande número de pontos na malha, que pode ser limitado pela velocidade de processo e memória, tornando o projeto muitas vezes mais caro (FERZIGER, 1997).

Outro modelo utilizado é o *Large Eddy Simulation* (LES), ele é preferido para geometria mais complexas e escoamentos com maiores números de Reynolds (FERZIGER, 1997). Esse modelo pode ser considerado como um intermediário entre a modelagem DNS e RANS. Ele atua como um filtro espacial, resolvendo grandes escalas e modelando as menores, uma vez que as pequenas escalas exigem menos ajustes aplicados em diferentes fluxos.

Outra classe de modelo é o *Reynolds Averaged Navier Stokes* (RANS), ele decompõe as propriedades do fluido em duas partes: um valor médio, que apresenta o comportamento principal do fluxo e um valor de flutuação turbulento que acontece em torno da média, e apresenta um elemento crítico da sua modelagem que é a representação das tensões de Reynolds ou tensões turbulentas, dado pelo termo

$(u'_i u'_j)$ da equação (5.19). Esse modelo utiliza as equações de Navier Stokes mas aplica a decomposição de Reynolds, separando cada varável em uma parte média e uma parte variante (equação 5.16), e o operador média é dado pela equação (5.17) (REZENDE, 2009):

$$\phi_i = \overline{\phi_j} + \phi'_i \quad (5.16)$$

$$\overline{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} \phi dt \quad (5.17)$$

E pela definição da decomposição de Reynolds o valor da média das flutuações $\overline{(\phi')}$ é zero. Dessa forma, as principais equações que descrevem o modelo RANS são a equação da continuidade e a equação de momento, obtidas com a substituição dos valores instantâneos das variáveis pelos valores médios com suas flutuações dadas por:

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (5.18)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i^2} - \frac{\partial}{\partial x_j} (u'_i u'_j) \quad (5.19)$$

Existem também na literatura algumas derivações do modelo RANS: Spalart-allmaras, SST $k - \omega$ (Shear-Stress Transport $k-\omega$) e RMS (Reynolds Stress Model) (REZENDE, 2009), $k - \varepsilon$ e modelo de comprimento de mistura (MALALASEKERA, 1995). Para este trabalho, foi utilizado o modelo $k - \varepsilon$ padrão, desenvolvido por Jones & Launder(1972), dado pelas equações de viscosidade turbulenta (Equação 5.19), de energia cinética turbulenta em regime permanente (Equação 5.20) e pela equação da

taxa de dissipação da energia cinética turbulenta em regime permanente (Equação 5.22). Nessa abordagem mais duas equações, uma de balanço para energia cinética turbulenta(k) e outra para a transformação de energia cinética turbulenta (ε). Essas duas equações possibilitam a modelagem das variações temporais dos escoamentos, a advecção e a difusão do transporte turbulento de energia. Algumas variações dessa abordagem foram propostas ao longo do tempo: o modelo Yakhot et al (1992), o modelo Re-normalization Group $k - \varepsilon$ ($k - \varepsilon RNG$) e o modelo $k - \varepsilon$ de Shih et al (1995). (MAGALHÃES, 2022).

$$\bar{u}_t = \frac{C_\mu \rho k^2}{\varepsilon} \quad (5.20)$$

Em que, C_μ é a constante empírica do modelo, ρ a densidade do fluido, k a energia cinética turbulenta e ε a taxa de dissipação da energia turbulenta.

$$\bar{u}_t \frac{\partial k}{\partial x_j} = \tau_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(v + \frac{v_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (5.21)$$

Onde, $\bar{u}_t$ é a velocidade média do fluido, x_j são as coordenadas espaciais e $\bar{u}_t \frac{\partial k}{\partial x_j}$ o termo de convecção. O τ_{ij} o tensor de Reynolds, $\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}$ o gradiente de velocidade média e $\tau_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}$ representa a produção de turbulência. Também, ε é a taxa de dissipação da turbulência. Por fim o termo $\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(v + \frac{v_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right]$ representa a difusão de energia turbulenta.

$$\bar{u}_t \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \tau_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(v + \frac{v_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] \quad (5.22)$$

Onde, $\bar{u}_t \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}$ representa a convecção da dissipação, $C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \tau_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}$ é o termo de produção de dissipação, $C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k}$ o termo de destruição da dissipação e $\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right]$ o termo de difusão de ε . E também, os coeficientes de fechamento, as relações das equações, experimentalmente determinados, juntos com o tensor de Reynolds (τ_{ij}), são dados por (MALALASEKERA, 1995):

$$C_\mu = 0,09; C_{\varepsilon 1} = 1,44; C_{\varepsilon 2} = 1,92; \sigma_k = 1,0; \sigma_\varepsilon = 1,3$$

$$\tau_{ij} = 2\nu_t S_{ij} - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \quad (5.23)$$

Onde, ν_t é a viscosidade turbulenta, S_{ij} é o tensor taxa de deformação do escoamento médio, k é a energia cinética turbulenta e δ_{ij} é o delta de Kronecker. Para o modelo $k - \varepsilon$ também, existe a variação do modelo $k - \varepsilon$ com tratamento de parede, proposto por Launder & Spalding (1974). Essa abordagem é utilizada quando o escoamento apresenta características ideais para o modelo, pois caso ao contrário que pode apresentar baixa eficiência nos resultados. Em suma, para o modelo os termos G_k (Equação 5.24), representando a produção de energia cinética e ε a taxa de dissipação da energia cinética (Equação 5.25), são iguais para o volume de controle e as paredes adjacentes a ele (ARAUJO, 2017).

$$G_k \approx t_w \frac{\partial U}{\partial y} = t_w \frac{t_w}{k \rho C_\mu^{1/4} k_p^{1/2} y_p} \quad (5.24)$$

$$\varepsilon = \frac{C_\mu^{3/4} k_p^{3/2}}{k y_p} \quad (5.25)$$

Onde, τ_w é a tensão de cisalhamento na parede, U a velocidade média, k_p é a energia cinética turbulenta no primeiro ponto da malha adjacente à parede, y_p é a distância desse ponto à parede e κ é a constante de von Kármán.

5.6 Modelos de arraste

Já para os modelos de arrasto, na literatura quatro modelos são amplamente utilizados para simulação de leitos fluidizados e adequados para a modelagem de sistemas gás-sólido: Wen e Yu, Syamlal-O'brien, Gidaspow e Beetstra (BISOGNIN et al, 2016). Outros modelos também são estudados para escoamentos gás-sólido como Di Felice, Rong et al, Koch and Hill e Tenneti et al (MARCHELLI et al, 2020). O modelo Wen e Yu é o modelo clássico para sistemas diluídos, ele se baseia em correlações experimentais para partículas individuais que se ajustam a força de arraste conforme aumenta-se a porosidade do leito.

O modelo Syamlal-O'brien (1989) é baseado na velocidade terminal das partículas, ele utiliza uma correlação para o coeficiente de arraste que se ajusta para que a velocidade terminal calculada se torne parecida com a encontrada experimentalmente. Já o modelo Gidaspow(1986) combina a equação de Ergun(1952) para regiões onde a fração de sólidos é alta com o modelo Wen & Yu(1966), garantindo uma descrição precisa da queda de pressão em meios porosos.

Os modelos Di Felice(1994) e Beetstra(2005) tem como base as simulações de Lattice-Boltzmann. O primeiro considera um coeficiente de arrasto que varia em função do número de Reynolds da partícula. O modelo de Rong por sua vez, leva em consideração também a porosidade do escoamento para determinar o coeficiente. Por fim, o modelo de Beetstra acopla as equações governantes utilizando um coeficiente de quantidade de movimento entre as fases (BISOGNIN, 2015).

O modelo utilizado neste trabalho foi o modelo Gidaspow. Seu coeficiente de transferência é dado por:

$$\beta = \frac{3}{4} C_D \frac{\varepsilon_s \varepsilon_g \rho_g |\vec{v}_s - \vec{v}_g|}{d_p} \varepsilon_g^{-2,65} \quad (5.26)$$

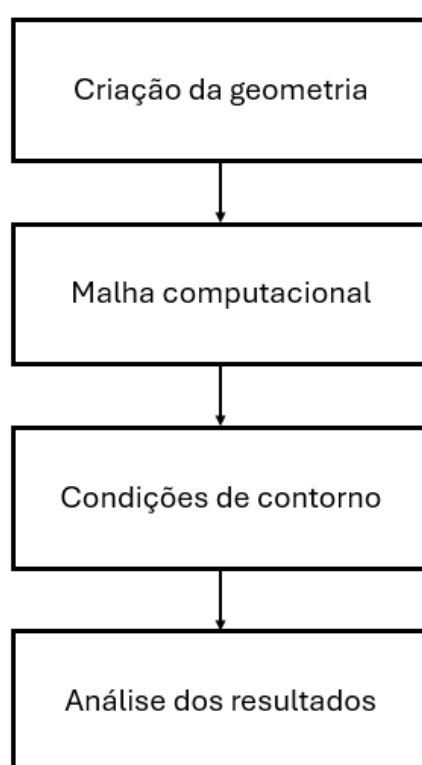
Onde, d_p é o diâmetro da partícula, ε_s fração volumétrica do gás, ε_s a fração volumétrica do sólido, ρ_g a densidade do gás, $\vec{v}_s$ a velocidade do sólido, $\vec{v}_g$ a velocidade do gás e C_D o coeficiente de arraste calculado por:

$$C_D = \frac{24}{\varepsilon_g Re_p} [1 + 0,15(\varepsilon_g Re_p)^{0,687}] \quad (5.27)$$

6 METODOLOGIA

Na imagem a seguir, está contida o passo a passo para a simulação CFD utilizada neste projeto, as etapas consistem em: criação da geometria, condições de contorno, construção da malha computacional, setup e análise de resultados.

Figura 8: Etapas da simulação computacional.



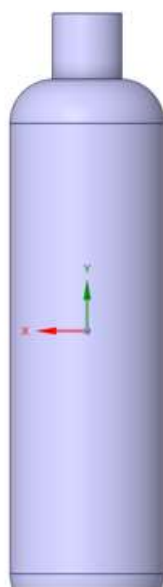
Fonte: Autora, 2026.

6.1 Geometria

A primeira parte do projeto consistiu na criação de uma geometria 3D de um reator em software de CAD, capaz de replicar os fenômenos ligados a fluidização. A geometria foi em seguida exportada para o Ansys Fluent, onde foi extraído seu volume e ocorreu a simulação CFD do mesmo. Na imagem abaixo, está a geometria criada

para o estudo, que conta com uma entrada na parte inferior e uma saída na parte superior. Na figura abaixo está um esquema na geometria:

Figura 9: Geometria.



Fonte: Autora, 2026

A geometria tem a altura de 0,3 m e um diâmetro interno de 0,1 m. Na parte superior a geometria possui uma saída para exaustão. Para a simulação a geometria foi seccionada de maneira que fosse possível observar o seu funcionamento e reduzir os esforços computacionais ligados a criação da malha computacional. Foram criados também alguns *names selections*, para a entrada, a simetria e a saída, o resto da geometria foi definida como *Wall*.

6.2 Malha computacional

Para a escolha da malha computacional foi utilizado o critério de convergência de malha *Grid Convergence Index* (GCI), indicado pela *American Society of Mechanical Engineers* (ASME). O método GCI (Roche, 1994) faz uma comparação entre diferentes malhas utilizando 7 etapas diferentes, onde após essas etapas o valor

o GCI calculado entre duas malhas precisa ser aproximadamente 5% para que o erro de discretização esteja dentro de um limite aceitável. Neste projeto três malhas foram geradas (fina, média e grossa). Dessa forma, as etapas para determinação do GCI consistem em:

Etapa 1: Determinação do tamanho característico (h) para cada malha, com base no volume de cada célula gerada nas malhas, pela equação (6.26):

$$h = \left[\frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N \Delta V_i \right) \right]^{1/3} \quad (6.27)$$

Onde, N é o número total de elementos na malha fina da malha e, uma vez que a análise é feita em três, ΔV_i é o volume do i -ésimo elemento de volume. Para o projeto os valores de N para as malhas fina, média e grossa são, respectivamente, $N1 = 58.833$ mil elementos, $N2 = 23.441$ mil elementos e $N3 = 16.505$ mil elementos.

Etapa 2: o próximo passo consiste em calcular um fator de refinamento (r) entre as malhas, sendo o valor ideal de $r \geq 1,3$, e o mesmo pode ser definido pela equação abaixo:

$$r = \frac{h_{\text{mais grosseiro}}}{h_{\text{mais refinado}}} \geq 1,3 \quad (6.28)$$

Etapa 3: esta etapa consiste na determinação da variável Φ , que neste trabalho foi a fração mássica do CO_2 para as alturas de 0,1 m; 0,15 m; 0,2 m; 0,28, coletados após 70 s de injeção.

Etapa 4: neste passo as malhas são comparadas entre si por meio da utilização da ordem aparente de convergência (p), dado pela equação (6.29).

$$p = \frac{1}{\ln(r_{23})} \left| \ln \left| \frac{\varepsilon_{12}}{\varepsilon_{23}} \right| + q(p) \right| \quad (6.29)$$

Onde, r_{23} é a taxa de refinamento entre as malhas 02 e 03, ε_{12} a diferença entre as soluções das malhas 01 e 02, ε_{23} a diferença entre as soluções das malhas 02 e 03 e $q(p)$ o Termo de correção iterativo para o cálculo de p , dado pela equação a seguir:

$$q(p) = \ln \left(\frac{r_{23}^p - s}{r_{12}^p - s} \right) \quad (6.30)$$

E r_{12} é a Taxa de refinamento entre as malhas 01 e 02 e s o sinal relativo entre os erros, dado por:

$$s = \operatorname{sgn} \left(\frac{\varepsilon_{12}}{\varepsilon_{23}} \right) \quad (6.31)$$

Etapa 5: assim, a extrapolação de Richarlison (BREZINSKI, 2000) é utilizada para se obter os valores extrapolados de Φ para os pares de malha:

$$\Phi_{ext}^{12} = \frac{r_{12}^p \Phi_2 - \Phi_1}{r_{12}^p - 1} \quad (6.32)$$

$$\Phi_{ext}^{23} = \frac{r_{23}^p \Phi_3 - \Phi_2}{r_{23}^p - 1} \quad (6.33)$$

Etapa 6: os erros relativos aproximados são calculados para cada par de malha (Equação 6.33 e Equação 6.34). Também devem ser calculados os erros extrapolados com relação ao valor limite (Equação 6.36 e Equação 6.37).

$$e_a^{12} = \frac{\phi_2 - \phi_1}{\phi_2} \quad (6.34)$$

$$e_a^{23} = \frac{\phi_3 - \phi_2}{\phi_3} \quad (6.35)$$

$$\phi_{ext}^{12} = \frac{\phi_{ext}^{12} - \phi_2}{\phi_{ext}^{12}} \quad (6.36)$$

$$\phi_{ext}^{23} = \frac{\phi_{ext}^{23} - \phi_3}{\phi_{ext}^{23}} \quad (6.37)$$

Etapa 7: a última etapa diz respeito ao cálculo do índice de Convergência de Malha (GCI) (Equação 6.38 e Equação 6.39), que calcula qual a influência do refinamento adicional nos resultados da simulação numérica.

$$GCI_{12} = \frac{1,25e_a^{12}}{r_{12}^p - 1} \quad (6.38)$$

$$GCI_{23} = \frac{1,25e_a^{23}}{r_{23}^p - 1} \quad (6.39)$$

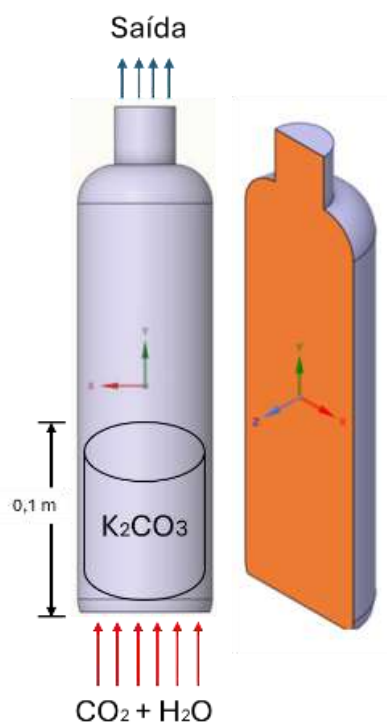
Dessa forma, quando comparadas duas malhas onde uma apresenta um refinamento melhor, se o valor do GCI calculado for aproximadamente inferior a 5% isso significa que a malha menos refinada apresenta condições suficientes para expressar de maneira precisa os resultados, ou seja, o erro de discretização se mantém dentro do aceitável.

6.3 Condições de contorno

A reação utilizada no estudo para captura de carbono é representada pela equação (3.1), utilizada para adsorção do CO₂. Ela utiliza o carbonato de potássio (K₂CO₃) junto com água e o CO₂ para obter o bicarbonato de potássio (KHCO₃), vista em trabalhos como Zeng *et al*(2023), Ren *et al*(2022) e Jo *et al*(2023). Essa reação

apresenta a vantagem de ocorrer em baixas temperaturas quando comparados com outros métodos de captura de gás carbônico, operando em uma faixa de temperatura entre 300K à 400K. Dessa forma, o sistema, carregado com o ($KHCO_3$), foi alimentado pela mistura gasosa de CO_2 e H_2O_v , a uma temperatura de 300K. O reator opera em uma faixa de pressão próxima a pressão atmosférica. A geometria foi preenchida na sua parte interna com o carbonato de potássio até a altura de 0,1 m, visto na figura 10. O tamanho da partícula (100 μm) foi escolhida a partir de testes com diferentes tamanhos. Foi visto que para este leito, com partículas de tamanhos maiores o fenômeno da fluidização não acontecia, ocorrendo somente para o tamanho de partícula escolhido. O reator opera em uma faixa de pressão próxima a pressão atmosférica. Em alguns trabalhos, como em Yi et al (2007) Ju et al(2021), a velocidade de fluidização dos leitos varia entre 1 m/s e 3 m/s. Após a aplicação de diferentes velocidades, para este leito foi visto que a velocidade de fluidização era acima de 1 m/s, por isso foram escolhidas as velocidades de 1 m/s e 1,2 m/s. A velocidade de 3 m/s foi escolhida por ser mais alta que as outras, dessa forma poderia exemplificar o comportamento do reator para uma velocidade mais acima da velocidade de fluidização.

Figura 10: Condições de contorno e vista da simetria.



Fonte: Autora (2026).

Nas paredes foram adicionadas a condição de não deslizamento para a fase gasosa. A concentração de CO₂ para ambas as velocidades foi de 0,2% e de água foi de 0,18%. A densidade da partícula utilizada foi de 1123 kg/m³ e nas paredes foi adotada a condição de velocidade zero.

Na tabela abaixo está um resumo dos parâmetros utilizados na simulação como condições de contorno:

Tabela 2: Condições de contorno.

Parâmetro	Valor
Velocidade de entrada do gás [m/s]	1; 1,2 e 3
Diâmetro da partícula [µm]	100
Densidade da partícula [kg/m ³]	1123
Diâmetro do reator [m]	0,1
Altura do reator [m]	0,3
Fração mássica do CO ₂ na entrada	0,2
Saída do leito	Pressão atmosférica
Condições nas paredes	<i>No slip</i> (velocidade igual a zero)

Fonte: Autora, (2026).

Para determinar o time step, foi utilizada o número de Courant (CFL) (ANSYS, 2024), definido pela equação (6.31), onde Δt é o passo de tempo, V a velocidade e Δx o tamanho da célula. Para se garantir uma estabilidade numérica, o CFL dever ser igual a 1.

$$\Delta t = \frac{CFL \cdot V}{\Delta x} \quad (6.31)$$

Dessa forma, o passo de tempo adotado foi de $4,17 \cdot 10^{-4}$. Quanto aos parâmetros da solução numérica e os modelos utilizados no escoamento, foram adotados os seguintes parâmetros:

Tabela 3: ados da solução numérica e modelos utilizados para o escoamento.

Parâmetro	Valor
Acoplamento pressão-velocidade	SIMPLE
Método de discretização no espaço	Up-Wind de 1ª ordem
Formulação transiente	Implícita de 1º ordem
Modelo de mistura	Euleriano Granular Multifásico
Viscosidade granular Bulk	Lun et al (1984)
Função de distribuição radial	Lun et al (1984)
Pressão de sólidos	Lun et al (1984)
Modelo de arraste	Gidaspow(1992)
Modelo de turbulência	$k - \varepsilon$

Fonte: Autora, (2026).

7 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Para o critério de convergência de malha os valores dos números de células (N), o fator de refinamento (r_{12}), os valores médios da fração mássica de CO_2 (Φ) e os parâmetros calculados estão dispostos na tabela (4). Pelo método GCI ambas as malhas apresentaram valores aceitáveis (inferior a 5%), uma vez que a análise da malha fina para média obteve um resultado de 3,62% e para da malha média para grossa foi onde ocorreu a maior variação, apresentando o GCI_{23} de 4,26%. Para ambas as malhas o tempo de geração não foi elevado, levando no máximo 40 minutos para gerar a malha mais fina. Dessa forma, apesar da malha média apresentar resultados satisfatório, por não gerar um grande esforço computacional o projeto seguiu utilizando a malha mais fina para a geração dos resultados.

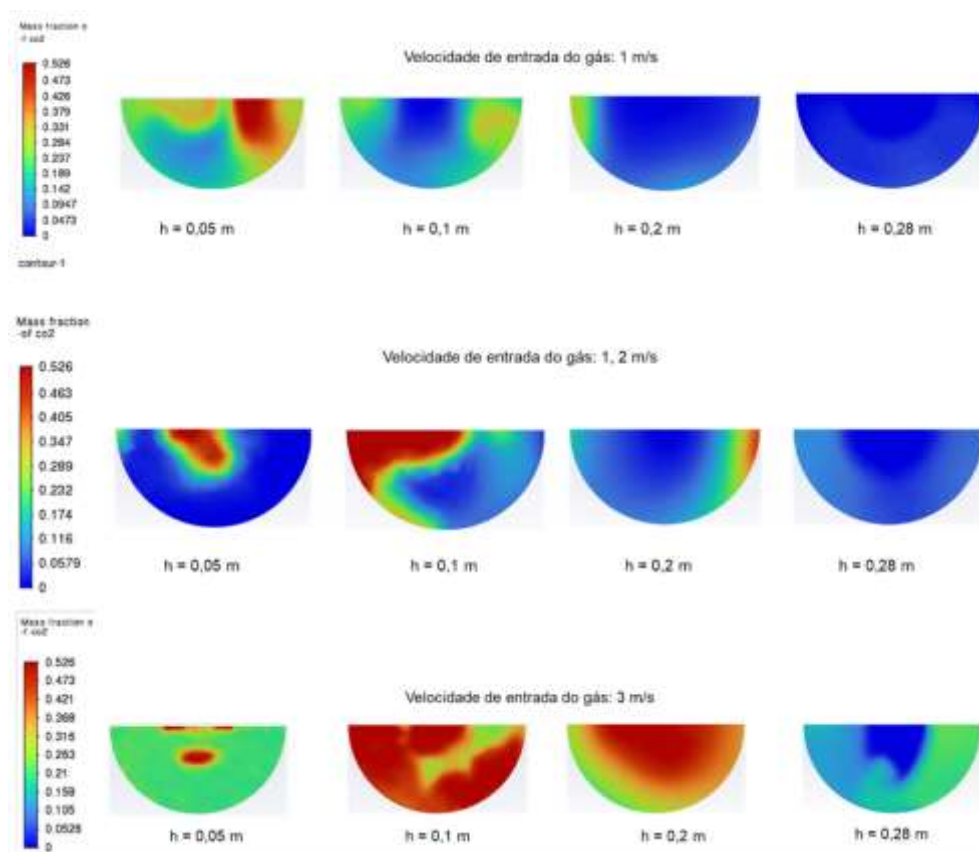
Tabela 4: Valores utilizados no método GCI.

Parâmetro	Valor	Descrição
N_1	58.833	Número de células da malha fina
N_2	23.441	Número de células da malha média
N_3	16.505	Número de células da malha grossa
r_{12}	1,35	Fator de refinamento da malha média para fina
r_{23}	1,369	Fator de refinamento da malha grossa para média
Φ_1	0,1378	Solução numérica da malha fina
Φ_2	0,1123	Solução numérica da malha média
Φ_3	0,1655	Solução numérica da malha grossa
p	0,1655	Ordem aparente
Φ_{ext}	2,2394	Solução extrapolada
e_a^{12} (%)	1,114	Erro relativo aproximado da malha média para fina
e_a^{12} (%)	1,142	Erro relativo aproximado da malha média para grossa
e_{ext}^{12} (%)	6,70	Erro extrapolado da malha média para fina
e_{ext}^{23} (%)	8,55	Erro extrapolado da malha grossa para média
GCI_{12} (%)	3,62	Índice de convergência da malha fina
GCI_{23} (%)	4,26	Índice de convergência da malha média

Fonte: Autora (2026).

Na figura 11, podemos observar os valores de concentração de CO_2 , para as alturas de 0,05 m; 0,1 m; 0,2 m; e 0,28 m, plano mais próximo à saída. É possível ver que ao longo a altura do reator, a concentração de CO_2 diminui continuamente, em função da sua adsorção pela fase sólida. Para a velocidade de 1 m/s, a concentração de CO_2 próximo à saída foi de 0,037. Para a velocidade de 1, 2 m/s e 3 m/s o CO_2 também apresenta uma diminuição contínua da sua concentração ao longo da altura do reator, entretanto sua adsorção diminui, sendo o menor valor para a velocidade de 3 m/s. Isso ocorre pois o tempo de residência do fluido dentro do reator é mais curto.

Figura 11: concentração de CO_2 ao longo da altura do reator para diferentes velocidades.

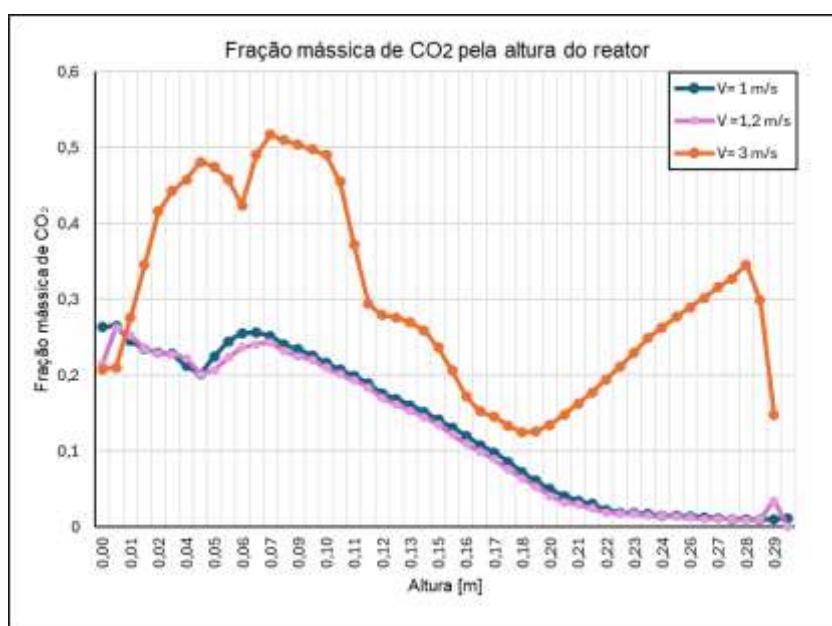


Fonte: Autora (2026).

Dessa forma, os valores de CO_2 na saída do reator para a velocidade de 1,2 m/s e 3 m/s se mantiveram entre 0,059 e 0,206, respectivamente, isso mostrou a efetividade na reação usada para adsorção, uma vez que uma parte do CO_2 é capturado para todas as velocidades. Entretanto, se torna um ponto de atenção uma

vez que para velocidades mais altas, o CO_2 será capturado em menores quantidades em função do seu tempo de residência. Na figura 12, podemos ver os valores da fração mássica ao longo da altura do reator. Como esperado, para velocidade de 3 m/s a fração mássica se mantém mais altas do que para as outras velocidades.

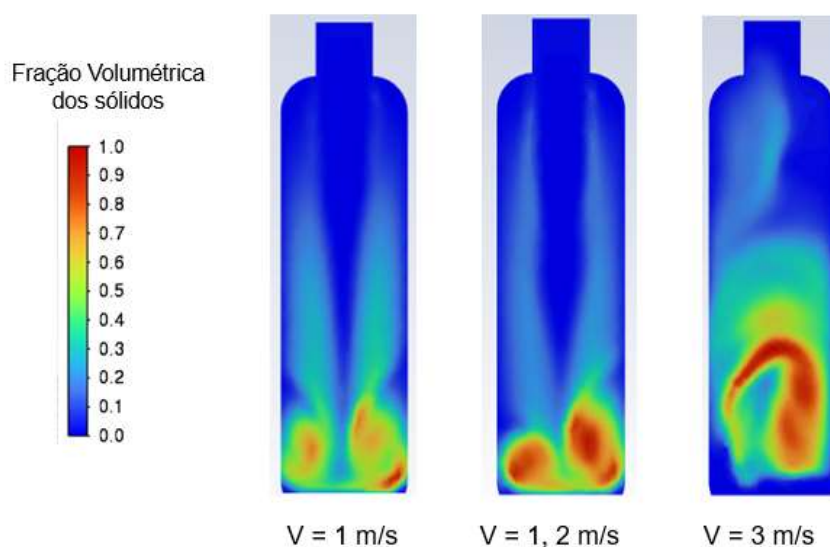
Figura 12: Valores da fração mássica do gás carbônico em função da altura.



Fonte: Autora (2026).

Na figura 13 está o perfil da fração volumétrica de sólidos pelo reator. Logo na entrada, vórtices se formam com os sólidos. Isso acontece, pois, as partículas têm a tendência de se concentrar em locais próximos a parede, uma vez que as velocidades são menores (Figura 14). Para a geometria, a maior parte dos sólidos também se concentrou na parte mais baixa. Para velocidade de 3 m/s, o comportamento apresentado é mais atípico, uma vez que apresenta maiores concentrações no centro do reator.

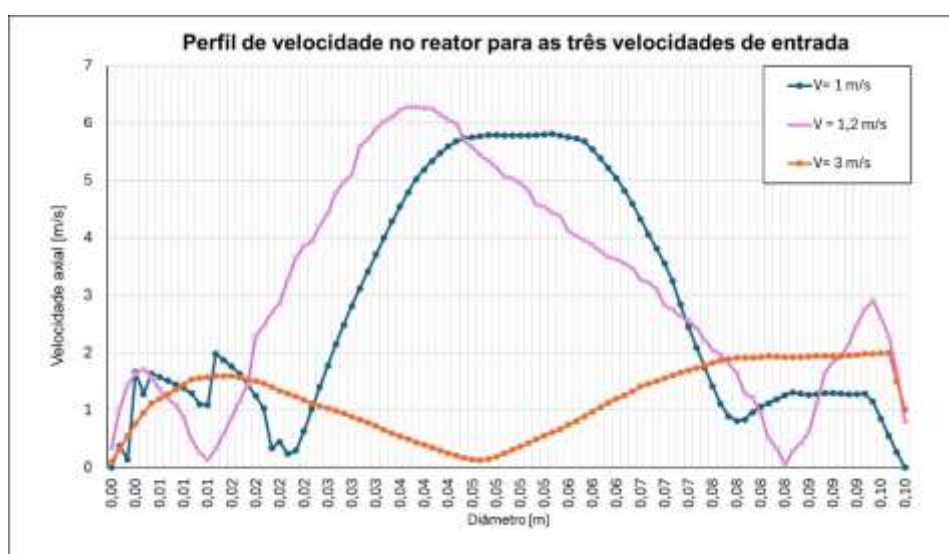
Figura 13: Fração volumétrica de sólidos para as três velocidades.



Fonte: Autora (2026).

O perfil de velocidade dentro do reator explica o fenômeno anterior, pela figura 14, podemos ver que a velocidade se torna maior no centro da geometria e menor nas paredes. Isso explica a formação de pequenos vórtices, pois a velocidade nas paredes é muito próxima de zero enquanto no centro o reator atinge suas maiores velocidades. Entretanto, para a geometria, a velocidade de 3 m/s mais uma vez mostra um comportamento atípico, apresentando uma menor velocidade nos centros e maior próximo às paredes.

Figura 14: Perfil de velocidade ao longo do diâmetro.



Fonte: Autora (2026)

8 CONCLUSÃO

Existe uma ampla gama de reatores, com diferentes modos de funcionamentos e em diferentes aplicações no meio industrial e acadêmico. O presente trabalho se ocupou de simular um reator de leito fluidizado para a captura de CO_2 , utilizando diferentes entradas de velocidade do gás. A captura por meio de uma reação química com carbonato de potássio foi viabilizada utilizando a ferramenta Ansys Fluent®. A análise de malha realizada pelo método Grid Convergence Index (GCI) contribuiu para escolha de uma malha que apresentou um equilíbrio entre a efetividade dos resultados e o consumo computacional. Para todas as velocidades de entrada a reação se mostrou efetiva, realizado a captura do CO_2 . Para a injeção de 0,2% de CO_2 , o reator apresentou na entrada valores máximos de fração mássica do gás de 0,526 para as velocidades de entrada de 1 m/s e 1,2 m/s e na saída os valores máximos foram de 0,037 e 0,057, respectivamente, apresentando uma diminuição em consequência da adsorção. Para a velocidade de 3 m/s essa diferença foi menor, indo de 0,526 na entrada para 0,206 na saída. Foi possível observar também que sua maior adsorção acontece na altura de 0,1 m. O perfil de velocidade e distribuição de sólidos se mostram em concordância com a física do reator, entretanto, para a velocidade de 3 m/s o escoamento se torna mais caótico e apresenta características diferentes das demais velocidades. Apesar da simplicidade do sistema, o mesmo atingiu seu objetivo ao realizar a adsorção do gás carbônico em um regime de fluidização.

9 TRABALHOS FUTUROS

- Realizar estudo das influências geométricas do reator;
- Realizar simulações com outras variações da concentração do gás de entrada;
- Viabilizar a construção de um modelo experimental para efeitos de comparação com a simulação computacional.

REFERÊNCIAS

- AKBARI, A.; SARVI, H.; MALEKI, M.; BAHREYNI, S.; AZIMI, R.; RADPOUR, A. Characteristics, emissions, capture, storage, and utilization of carbon dioxide: A comprehensive review of challenges and technologies for greenhouse gas mitigation. *Petroleum Research*, 2025. Disponível online em: 10 jul. 2025.
- ALMEIDA, Eduardo de. Estudo exploratório do acoplamento dos softwares ROCKY/FLUENT – caso: separação pneumática de frações de bagaço de cana. 2018. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2018.
- ALMEIDA, Lucilla Coelho de. Simulação acoplada CFD-DEM de reatores nucleares de leito fluidizado. 2018. Tese (Doutorado em Engenharia Nuclear) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Nuclear, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2018b.
- ANDREWS, H. M.; KRICHELS, A. H.; HOMYAK, P. M.; PIPER, S.; ARONSON, E. L.; BOTTHOFF, J.; GREENE, A. C.; JENERETTE, G. Darrel. Wetting-induced soil CO₂ emission pulses are driven by interactions among soil temperature, carbon, and nitrogen limitation in the Colorado Desert. [S. I.], 2023. (Informação de periódico pendente na fonte original).
- ANSYS. Fluent Theory Guide. [S.I.], 2024. Fluent 2024 R2. Acesso em: 09 nov. 2024
- ARAUJO, Priscila Pires. **Simulação numérica do escoamento turbulento sobre um degrau descendente**. 2017. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, 2017.
- BAI, D.; KATO, K.; NAKAGAWA, M. Heat Transfer between Fluidized Beds and Heating Surfaces. **Journal of Chemical Engineering of Japan**, v. 3, n. 1, p. 44-50, 1996.
- BEETSTRA, Renske. Drag force in random arrays of mono- and bidisperse spheres. Tese (Doutorado) — Universiteit Twente, Holanda, 2005.

BIN, L.; XU, J.; LU, S.; LIU, Y. CFD-DEM-BIM approach for hydrogen-based direct reduction of iron ore in fluidized beds. *Journal of Cleaner Production*, v. 413, p. 137607, 2023.

BISOGNIN, Priscilla Corrêa. **Transferência de calor em leitos fluidizados: influência dos parâmetros da superfície de troca térmica**. 2015. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Florianópolis, 2015

BRAUN, Carola. Not in my backyard: CCS sites and public perception of CCS. *Risk Analysis*, v. 37, n. 12, p. 2264–2275, 2017.

BREZINSKI, Claude. Convergence acceleration during the 20th century. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Elsevier, v. 122, p. 1–21, 2000.

ÇENGEL, Yunus. A.; CIMBALA, Jonh. M. *Mecânica dos Fluidos: Fundamentos e Aplicações*. 3. ed. Porto Alegre: AMGH, 2015.

CHEW, J. W.; LAMARCHE, W.; COCCO, R. 100 YEARS of scaling up fluidized bed and circulating fluidized bed reactors. *Powder Technology*, v. 405, p. 117445, 2022.

CHUNFENG, C., RUN, L., LIU, Q., DENG, S., LI, H., SUN, J. CO₂ híbrido membrana-criogênico captura — Uma análise. **Ciência e Tecnologia da Captura de Carbono**, [s. l.], v. 13, 100249, dez. 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ccst.2024.100249>. Acesso em: 23 mar. 2026

Crippa, M., Guizzardi, D., Pagani, F., Banja, M., Muntean, M. et al., *Emissões de GEE de todos os países do mundo - Relatório 2025*, Serviço de Publicações da União Europeia, Luxemburgo, 2025, <https://data.europa.eu/doi/10.2760/9816914>, JRC143227.

CROWE, C. T.; SCHWARZKOPF, J. D.; SOMMERFELD, M.; TSUJI, Y. *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. 2. ed. Boca Raton: CRC Press, 2012. ISBN 978-1-4398-4050-4.

DHOKE, Chaitanya; ZAABOUT, Abdelghafour; CLOETE, Schalk; AMINI, Shahriar. Review on Reactor Configurations for Adsorption-Based CO₂ Capture. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [S. l.], v. 60, n. 10, p. 3779–3798, 5 mar. 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c04547>. Acesso em: 10 jun. 2025.

DI FELICE, R., 1994, “The Voidage Function for Fluid-Particle Interaction Systems”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 20, pp. 153–159.

DOU, Binlin; SONG, Yongchen; LIU, Yingguang; FENG, Cong. High temperature CO₂ capture using calcium oxide sorbent in a fixed-bed reactor. *Journal of Hazardous Materials*, v. 183, n. 1–3, p. 759–765, 2010. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2010.07.091.

ERGUN, S. Flow through packed columns. *Chemical Engineering Progress*, v. 48, p. 89– 94, 1952.

FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. (“Ferziger, J. H.; Perić, M.: Computational Methods for Fluid Dynamics ...”) 2. ed. Berlin: Springer, 1997.

FRIEDLINGSTEIN, P. et al. Global carbon budget 2023. *Earth System Science Data*, v. 15, p. 5301–5369, 2023. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.5194/essd-15-5301-2023>.

GAO, Hongwei; PISHNEY, Stephen; JANIK, Michael J. First principles study on the adsorption of CO₂ and H₂O on the K₂CO₃ (001) surface. (“Gao, Hongwei, Pishney, Stephen, Janik, Michael J. (2013) First ...”) *Surface Science*, v. 609, p. 140–146, 2013.

GELDART, D., 1972, “The Effect of Particle Size and Size Distribution on The Behaviour of Gas Fluidized Beds”, *Powder Technology*, v. 6, pp. 201–215.

GIDASPOW, D. Hydrodynamics of fluidization and heat transfer: supercomputer modeling. *Applied Mechanics Reviews*, v. 39, p. 1– 23, 1986.

HE, Liangsheng; YAN, Shengnan; LI, Zhenggui; CHEN, Fang; ZHAO, Qin; WU, Hongteng; BAI, Yawei; YANG, Xiaolin. Parametric study of CO₂ capture and thermal energy storage in a CaO/CaCO₃ bubbling fluidized bed with polydisperse particles. *Journal of CO2 Utilization*, v. 105, 103342, 2026.

HE, Ting; ZHANG, Kai; XU, Duo; YANG, Song; CHEN, Liqiong; REN, Siyue. Thermodynamic optimization and exergy analysis of a combined cryogenic CO₂ capture process for hydrogen production via steam methane reforming. *Fuel*, v. 400, 135750, 2025. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2025.135750>.

INTERGOVERNMENTAL PANEL ON CLIMATE CHANGE (IPCC). AR6 Climate Change 2023: Mitigation of Climate Change. Geneva: IPCC, 2023.

INTERNATIONAL ENERGY AGENCY (IEA). Global Energy and CO₂ Status Report 2023. Paris: IEA, 2023.

JO, Seongbin et al. Ru/K₂CO₃–MgO catalytic sorbent for integrated CO₂ capture and methanation at low temperatures. *Chemical Engineering Journal*, v. 469, p. 143772, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.143772>.

JU, Youngsan; OH, Hyun-Taek; LEE, Jae-Cheol; LEE, Chang-Ha. Performance and dynamic behavior of sorption-enhanced water-gas shift reaction in a fluidized bed reactor for H₂ production and CO₂ capture. *Chemical Engineering Journal*, v. 410, 127414, 2021.

KNAPIK, Ewa; KOSOWSKI, Piotr; STOPA, Jerzy. Cryogenic liquefaction and separation of CO₂ using nitrogen removal unit cold energy. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 131, p. 66–79, 2018.

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

LIANG, H.; CAI, M.; LIANG, F.; ZHANG, S.; MIN, Y. Simultaneously enhanced gas perm-selectivity of carbon molecular sieve membranes via silicon-based molecular cross-linking for efficient gas separation. *Journal of Membrane Science*, v. 736, art. 124709, 2025. DOI: 10.1016/j.memsci.2025.124709. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2025.124709>. Acesso em: 09 jun. 2025. LING, Jester Lih Jie; YANG, Won; PARK, Han Saem; LEE, Ha Eun; LEE, See Hoon. A comparative review on advanced biomass oxy-fuel combustion technologies for carbon capture and storage. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2020.

MADEJSKI, Paweł; CHMIEL, Karolina; SUBRAMANIAN, Navaneethan; KUŚ, Tomasz. Methods and Techniques for CO₂ Capture: Review of Potential Solutions and Applications in Modern Energy Technologies. *Energies*, v. 15, n. 3, p. 887, 2022. DOI: <https://doi.org/10.3390/en15030887>.

MAGALHÃES, Gabriel Marcos. *Modelagem matemática e computacional de escoamentos turbulentos multifásicos em malha adaptativa bloco estruturada utilizando método Multi Direct Forcing*. 2022. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2022.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional: Fundamentos e Coordenadas Generalizadas**. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004

MARCHELLI, Filippo; HOU, Qinfu; BOSIO, Barbara; ARATO, Elisabetta; YU, Aibing. Comparison of different drag models in CFD-DEM simulations of spouted beds. *Powder Technology*, v. 360, p. 1253–1270, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.10.058>

MICHAELIDES, Efstathios E.; CROWE, Clayton T.; SCHWARZKOPF, John D. (ed.). *Multiphase flow handbook*. 2. ed. Boca Raton: CRC Press, 2015.

Nam, Hyungseok & Kim, Jung Hwan & Kim, Hana & Kim, Min Jae & Jeon, Sang-Goo & Jin, Gyoung-Tae & Won, Yooseob & Hwang, Byung Wook & Lee, Seung-Yong & Baek, Jeom-In & Lee, Doyeon & Seo, Myung Won & Ryu, 2021. "CO₂ methanation in a bench-scale bubbling fluidized bed reactor using Ni-based catalyst and its exothermic heat transfer analysis," *Energy*, Elsevier, vol. 214(C).

ORUJOV, Alirza; CODDINGTON, Kipp; ARYANA, Saman A. A review of CCUS in the context of foams, regulatory frameworks and monitoring. *Energies*, v. 16, n. 7, art. 3284, 2023. DOI: 10.3390/en16073284. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/en16073284>. Acesso em: 10 maio 2025.

PEDROSO, M. R. *Fundamentos de fluidização e aplicações industriais*. São Paulo: Edgard Blücher, 2014.

RASOULI, Hannaneh; ILIUTA, Ion; BOUGIE, Francis; GARNIER, Alain; ILIUTA, Maria C. Hybrid enzymatic CO₂ capture process in intensified flat sheet membrane contactors with immobilized carbonic anhydrase. *Separation and Purification Technology*, v. 287, art. 120505, 2022. DOI: 10.1016/j.seppur.2022.120505. Acesso em: 10 jun.

2026 REN, H.; ZHANG, H.; LI, W.; TANG, Z. Simulation of CO₂ capture process in gas-solid bubbling fluidized bed by computational mass transfer. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 2020.

REYES-URRUTIA, A.; VENIER, C.M.; MARIANI, N. J.; NIGRO, N.A CFD Comparative Study of Bubbling Fluidized Bed Behavior with Thermal Effects Using the Open-Source Platforms MFIX and OpenFOAM. *Chemical Engineering Science*, v. 259, p. 117743, 2022.

REZENDE, André Luiz Tenório. *Análise numérica da bolha de separação do escoamento turbulento sobre placa plana fina inclinada*. 2009. Tese (Doutorado em

Engenharia Mecânica) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2009

ROACHE, P. J. Perspective: A method for uniform reporting of grid refinement studies. *Journal of Fluids Engineering*, v. 116, n. 3, p. 405–413, 1994.

SAFDARNEJAD, S. M.; HEDENGREN, J. D.; POWELL, K. M. Performance comparison of low temperature and chemical absorption carbon capture processes in response to dynamic electricity demand and price profiles. [S. l.], [s.d.].

SORNVICHAI, Amolwan et al. CFD modeling of CO₂ capture in a non-isothermal circulating fluidized bed riser using K₂CO₃ solid sorbent. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, v. 12, n. 6, p. 114247, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jece.2024.114247>.

SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T. Computer simulation of bubbles in a fluidized bed. *AIChE Symp. Ser.*, v. 85, p. 22–31, 1989.

TILAK, Pooja; EL-HALWAGI, Mahmoud M. Process integration of calcium looping with industrial plants for monetizing CO₂ into value-added products. *Carbon Resources Conversion*, v. 1, p. 191–199, 2018.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method. Harlow: Longman Scientific & Technical, 1995.

WANG, Y. Hydrodynamics of fluidized beds: revisiting Ergun's equation. *Powder Technology*, v. 424, p. 118513, 2024b.

WANG, Yuan et al. A review of post-combustion CO₂ capture technologies from coal-fired power plants. *Energy Procedia*, v. 114, p. 650–665, 2017a.

WEN, C. Y.; YU, Y. H. A generalized method for predicting the minimum fluidization velocity. *AIChE Journal*, v. 12, n. 3, p. 610–612, 1966.

XIE, J.; ZHANG, H. Particle scale study of heat transfer in the fluidized bed combustion process. **Powder Technology**, v. 416, p. 118241, 2023

XU, C. et al. Probing the differences in CO₂ adsorption/desorption behaviors of solid amine sorbents in fixed and fluidized beds. [S. l.], [s.d.].

XU, H. C.; GE, L. Progress on the catalytic hydrogenation of CO₂ via reverse water gas shift reaction. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 35, p. 3180–3189, 2016.

YANG, C.; TIANCI, L.; TANTIKHAJORNOSOL, P.; SEMA, T.; XIAO, M.; TONTIWACHWUTHIKUL, P.; Evaluation of novel aqueous piperazine-based physical-chemical solutions as biphasic solvents for CO₂ capture: Initial absorption rate, equilibrium solubility, phase separation and desorption rate. [S. l.], [s.d.].

YI, Chang-Keun; JO, Sung-Ho; SEO, Yongwon; LEE, Joong-Beom; RYU, Chong-Kul. Continuous operation of the potassium-based dry sorbent CO₂ capture process with two fluidized-bed reactors. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, v. 1, p. 31–36, 2007.

YU, J.; WANG, S.; LUO, K.; LI, D.; FAN, J. Study of biomass gasification in an industrial-scale dual circulating fluidized bed (DCFB) using the Eulerian-Lagrangian method. *Particuology*, v. 83, p. 156–168, 2023.
<https://doi.org/10.1016/j.partic.2023.02.018>

ZENG, P.; ZHAO, C.; LIANG, C.; LI, P. Comparative study on low-temperature CO₂ adsorption performance of metal oxide-supported, graphite-casted K₂CO₃ pellets. *Separation and Purification Technology*, v. 306, p. 122608, 2023.

ZHANG, L. Ye. K., Wang, Y., Han, W., XIE, M., CHEN, L. Análise de desempenho de um sistema híbrido que combina separação criogênica, captura de carbono e armazenamento de energia líquida no ar (CS-LAES). **Energia**, [s. l.], v. 290, 129867, 1 mar. 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2023.129867>. Acesso em: 23 mar. 2026

ZHANG, X.; WANG, W.; GUO, R.T.; PAN, W. G.; LI, X. J. Study on the effect of pyrolysis conditions on the combustion behavior and char structure evolution. *ACS Omega*, 2022.

ZHU, M.; GE, Q.; ZHU, X. Catalytic reduction of CO₂ to CO via reverse water gas shift reaction: recent advances in the design of active and selective supported metal catalysts. *Transactions of Tianjin University*, v. 26, n. 3, p. 172–187, 2020. DOI: 10.1007/s12209-020-00246-8. Acesso em: 18 jul. 2024.