



FCTUC FACULDADE DE CIÊNCIAS
E TECNOLOGIA
UNIVERSIDADE DE COIMBRA

DEPARTAMENTO DE
ENGENHARIA MECÂNICA

Simulação computacional em OpenFOAM® de um leito fluidizado

Dissertação apresentada para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia
Mecânica na Especialidade de Energia e Ambiente

Autor

Rui Manuel Vieira Correia

Orientadores

Almerindo Domingues Ferreira, DEM-UC

Ana Sílvia Prata Soares, UNICAMP

Júri

Presidente Professor Doutor **Luís Adriano Alves de Sousa Oliveira**
Professor Catedrático da Universidade de Coimbra

Vogais Professor Doutor **António Manuel Gameiro Lopes**
Professor Auxiliar da Universidade de Coimbra

Orientador Professor Doutor **Almerindo Domingues Ferreira**
Professor Auxiliar da Universidade de Coimbra

Colaboração Institucional



Universidade Estadual de Campinas

Coimbra, Julho, 2016

*Em última instância, engenharia é erro.
Tudo o que fazemos é errar cada vez menos.*

Agradecimentos

Ao Professor Almerindo Ferreira, pelo auxílio, entusiasmo e amizade com que me presenteou desde sempre, exprimo os meus sinceros e sentidos agradecimentos.

Agradeço à Professora Ana Prata, pela amabilidade e disponibilidade que demonstrou ao longo de todo o trabalho.

À minha colega Bruna Paulo, pela frequente ajuda e partilha de ideias.

Aos meus pais, pela confiança e apoio.

À Helena, pela companhia, apoio e compreensão.

Por último, mas não menos importante, aos meus amigos, pelos momentos eternos.

Resumo

O principal objetivo deste trabalho consiste no desenvolvimento de simulação computacional de um leito fluidizado do tipo “Wurster” utilizando o OpenFOAM®, para a avaliação do comportamento hidrodinâmico de um conjunto de partículas contidas no interior do reator.

As simulações computacionais produzidas têm uma importância fundamental na caracterização das condições de fluidização no interior do tubo de sucção, pois diminuem a instrumentação intrusiva, decorrente do processo experimental, assim como reduzem o trabalho laboratorial.

O estudo computacional da fluidização aqui apresentado recorre à Teoria Cinética de Escoamentos Granulares, alicerçada numa abordagem Euleriana, onde tanto a fase sólida como a fase fluida são tratadas como domínios contínuos.

Dois casos foram simulados: (i) escoamento sem partículas e (ii) escoamento com partículas. Das simulações sem partículas conclui-se que o escoamento é favorável ao movimento recirculatório das partículas, característico do equipamento “Wurster”.

Nas simulações envolvendo partículas, é estudado o efeito de três caudais volúmicos de ar insuflado, assim como do coeficiente de restituição das partículas. Conclui-se que o caudal mais elevado (300 m³/h) é aquele que promove melhores condições à fluidização e que o coeficiente de restituição afeta, de forma significativa, os resultados obtidos.

Palavras-chave: Fluidização, Wurster, OpenFOAM®, Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD), Teoria cinética de escoamentos granulares (TCEG).

Abstract

The main objective of this work is the development of computational simulations of a fluidized bed using OpenFOAM, aiming the evaluation of particles' behaviour contained inside of a Wurster reactor.

This type of computational simulations are of foremost importance for the characterization of the fluidization conditions, as such approach reduces the corresponding experimental work, frequently intrusive.

The kinetic theory of granular flows is applied for the computational study, and an Eulerian approach is adopted where both solid and fluid phases are treated as continua media.

Two cases are simulated: (i) flow without particles and (2) flow with particles.

From the simulations without particles it is concluded that the flow field is favourable for the recirculation movement of particles, a characteristic of Wurster reactors.

For the simulations where particles are taken into account, three flow rates were simulated, varying also the coefficient of restitution. Those results revealed that the best fluidization conditions are obtained for the higher flow rate (300 m³/h) tested. Additionally, it is observed that the coefficient of restitution affects significantly the results obtained.

Keywords Fluidization, Wurster, OpenFOAM®, Computational Fluid Dynamics (CFD), Kinetic theory of granular flow (KTGF).

Índice

Índice de Figuras	xi
Índice de Tabelas	xiii
Simbologia, Siglas e Definições	xv
Simbologia.....	xv
Letras em índice.....	xvii
Siglas	xvii
Definições.....	xvii
1. Introdução.....	1
1.1. Leito fluidizado “Wurster”	3
1.2. Modelação computacional da dinâmica de fluidos.....	4
1.3. OpenFOAM	4
1.4. Abordagem.....	6
1.5. Revisão bibliográfica	6
1.5.1. Desenvolvimento da teoria	6
1.5.2. Aplicação da teoria	9
2. Fundamentação teórica.....	13
2.1. Situação A – Escoamento sem partículas	13
2.1.1. Modelação da turbulência.....	14
2.2. Situação B – Escoamento com partículas	17
2.2.1. Conservação de massa e quantidade de movimento.....	17
2.2.2. Coeficiente de transferência de quantidade de movimento.....	18
2.2.3. Teoria cinética de escoamentos granulares	19
2.2.4. Condição de escorregamento parcial parietal para a fase sólida	23
3. Caso de estudo	25
3.1. Simplificação	26
3.2. Geometria.....	27
3.2.1. Reator	27
3.2.2. Placa de distribuição de ar	27
3.3. Malha de cálculo	29
3.4. Situação A – Escoamento sem partículas	31
3.5. Situação B – Escoamento com partículas	32
4. Apresentação e discussão de resultados	35
4.1. Situação A – Escoamento sem partículas	35
4.2. Situação B – Escoamento com partículas	38
4.2.1. Validação do solver <i>twoPhaseEulerFoam</i>	38
4.2.2. Caso de estudo	42
5. Conclusões.....	49
5.1. Propostas para trabalhos futuros	50

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	51
APÊNDICE A – Efeito do coeficiente de restituição	55
APÊNDICE B – Desvio padrão	59
Índice remissivo	69

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1. Propriedades típicas de um leito fluidizado (Kunii & Levenspiel, 1991).....	1
Figura 1.2. Desenho esquemático do leito fluidizado do tipo “Wurster” em corte.....	3
Figura 1.3. Desenho esquemático do movimento recirculatório das partículas num leito fluidizado do tipo “Wurster”.....	3
Figura 1.4. Estrutura organizacional básica de um caso em OpenFOAM®.....	5
Figura 1.5. Classificação de Geldart para partículas fluidizadas. (Geldart, 1973) adaptado por Gidaspow (1994).....	7
Figura 1.6. Fluxograma de energia em escoamentos granulares. Adaptado de Ogawa et al. (1980).	8
Figura 2.1. Evolução da função de distribuição radial em função da percentagem de sólido.	21
Figura 3.1. Fotografias do reator de leito fluidizado (instalado na UNICAMP).....	25
Figura 3.2. Representação esquemática do domínio de cálculo considerado.....	26
Figura 3.3. Desenho esquemático da geometria do reator: a) Dimensões; b) Alteração da geometria da entrada do reator.	27
Figura 3.4. a) Fotografia da placa de distribuição de ar; b) Zoneamento.....	28
Figura 3.5. Representação adotada para os furos do distribuidor (bidimensional).	29
Figura 3.6. Construção da malha com a ferramenta <i>blockMesh</i>	29
Figura 3.7. Pormenor das malhas consideradas nos testes de independência de malha.....	30
Figura 3.8. Visão geral do tipo de fronteira do domínio.	31
Figura 3.9. Representação esquemática do teste de queda livre.....	33
Figura 3.10. Representação da concentração inicial de partículas no reator.	34
Figura 4.1. Posição das linhas de amostragem – situação A.	35
Figura 4.2. Distribuição da componente vertical do campo de velocidade (m/s) no interior do reator sem partículas.....	36
Figura 4.3. Perfis de velocidade obtidos, a diversas alturas (y), para três malhas testadas e vários caudais.	37
Figura 4.4. Desenho esquemático do leito fluidizado (bidimensional) (Taghipour et al., 2005).....	38
Figura 4.5. a) Representação das dimensões do domínio de cálculo; b) condições de fronteira; c) malha utilizada na simulação; d) pormenor da malha.	39

Figura 4.6. Resultados numéricos: a) Média temporal da fração volúmica de fase sólida ($U = 0,38 \text{ m/s}$; $y = 0,2 \text{ m}$); b) Média temporal da fração volúmica de fase sólida ($U = 0,46 \text{ m/s}$; $y = 0,2 \text{ m}$); c) Razão de expansão média do leito (H/H_0); d) Queda de pressão no leito, para $y = 0 \text{ m}$ e $y = 0,6 \text{ m}$	40
Figura 4.7. Comparação da fração de fase sólida ($U=0,38 \text{ m/s}$): a) Fotografia (Taghipour et al., 2005); b) Simulação ($t=5 \text{ s}$).....	41
Figura 4.8. Evolução da fração volumétrica das partículas no interior do reator – $Q = 136 \text{ m}^3/\text{h}$	42
Figura 4.9. Evolução da fração volumétrica das partículas no interior do reator – $Q = 200 \text{ m}^3/\text{h}$	43
Figura 4.10. Evolução da fração volumétrica das partículas no interior do reator – $Q = 300 \text{ m}^3/\text{h}$	43
Figura 4.11. Concentração de partículas no interior do tubo de sucção – $t = 10 \text{ s}$	44
Figura 4.12. Vetores da velocidade das partículas no interior do tubo de sucção – $t = 10 \text{ s}$	44
Figura 4.13. Posição das linhas de amostragem – situação B.	45
Figura 4.14. Concentração volumétrica média (entre $t = 2 \text{ s}$ a $t = 10 \text{ s}$) de partículas no interior do tubo de sucção, para as duas malhas testadas e os três caudais volúmicos.	46
Figura 4.15. Concentração volumétrica média (entre $t = 2 \text{ s}$ a $t = 10 \text{ s}$) de partículas no eixo do reator ($r = 0 \text{ m}$), para as duas malhas testadas e os três caudais volúmicos.	46
Figura 4.16. Evolução da altura (y) do repuxo em função do caudal volúmico de ar insuflado (Q).	47
Figura 4.17. Componente vertical média da velocidade das partículas no interior do tubo de sucção, para duas malhas testadas e três caudais volúmicos.	47
Figura A.1. Concentração volumétrica média de partículas no interior do tubo de sucção, para duas malhas testadas e três caudais volúmicos – $es = 0,8$	55
Figura A.2. Concentração volumétrica média de partículas no eixo do reator, para duas malhas testadas e três caudais volúmicos – $es = 0,8$	56
Figura A.3. Evolução da altura (y) do repuxo em função do caudal volúmico de ar insuflado – $es = 0,8$	56
Figura A.4. Componente vertical média da velocidade das partículas no interior do tubo de sucção, para duas malhas testadas e três caudais volúmicos – $es = 0,8$	57
Figura A.5. Concentração de partículas no interior do tubo de sucção – $es = 0,8$; $t = 10 \text{ s}$	58

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 3.1. Porosidade da placa de distribuição de ar.....	28
Tabela 3.2. Parâmetros de simulação – Situação A.....	31
Tabela 3.3. Condições de fronteira – Situação A.	31
Tabela 3.4. Esquemas numéricos adotados – Situação A.	32
Tabela 3.6. Parâmetros de simulação – Situação B.....	33
Tabela 3.7. Condições de fronteira – Situação B.	34
Tabela 3.8. Esquemas numéricos adotados – Situação B.....	34
Tabela 4.1. Parâmetros de simulação usados na validação.	39

SIMBOLOGIA, SIGLAS E DEFINIÇÕES

Simbologia

B – Constante da lei logarítmica, (–)

$C_{1\varepsilon}$ – Constante do modelo k - ε , (–)

$C_{2\varepsilon}$ – Constante do modelo k - ε , (–)

C_D – Coeficiente de arrasto, (–)

C_μ – Constante do modelo k - ε , (–)

d_p – Diâmetro das partículas, (m)

e_s – Coeficiente de restituição, (–)

Fr – Fator de atrito, ($kg\ m^{-1}\ s^{-1}$)

g_0 – Função de distribuição radial, (–)

\mathbf{g} – Vetor aceleração gravítica, ($m\ s^{-2}$)

H – Altura do leito em operação, (m)

H_0 – Altura do leito em repouso, (m)

\mathbf{I} – Matriz identidade, (–)

k_s – Condutibilidade da temperatura granular, ($kg\ m^{-1}\ s^{-1}$)

k – Energia cinética turbulenta por unidade de massa, ($J\ kg^{-1}$)

L – Comprimento característico, (m)

n – Constante de Johnson & Jackson, (–)

$P_{s,Fr}$ – Pressão de atrito, ($kg\ m^{-1}\ s^{-1}$)

p_{JJ} – Constante de Johnson & Jackson, (–)

p – Pressão, (Pa)

Q – Caudal volúmico, ($m^3\ h^{-1}$)

Re – Número de Reynolds, (–)

r – Raio, (m)

S – Termo fonte, (–)

T – Temperatura, ($^{\circ}C$)

- t – Tempo, (s)
- u_τ – Velocidade de atrito, ($m s^{-1}$)
- u – Componente da velocidade segundo Ox , ($m s^{-1}$)
- \mathbf{U} – Vetor velocidade, ($m s^{-1}$)
- v – Componente da velocidade segundo Oy , ($m s^{-1}$)
- x – Coordenada, (m)
- y^+ – Distância adimensionalizada, (–)
- y – Coordenada, (m)
- α – Fração volumétrica, (–)
- β – Coeficiente de troca de quantidade de movimento, (–)
- Γ – Coeficiente difusivo, (–)
- γ_s – Dissipação de energia devida às colisões, ($kg s^{-3} m^{-1}$)
- ε – Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, ($J s^{-1}$)
- θ – Temperatura granular, ($m^2 s^{-2}$)
- λ – Viscosidade volumétrica, ($kg m^{-1} s^{-1}$)
- μ – Viscosidade dinâmica, ($kg m^{-1} s^{-1}$)
- μ_t – Viscosidade turbilhonar, ($kg m^{-1} s^{-1}$)
- ν – Viscosidade cinemática, ($m^2 s^{-1}$)
- ρ – Massa volúmica, ($kg m^{-3}$)
- σ_k – Constante do modelo k - ε , (–)
- σ_ε – Constante do modelo k - ε , (–)
- $\boldsymbol{\tau}$ – Tensor das tensões viscosas, (Pa)
- $\boldsymbol{\tau}_{s,w}$ – Tensão de atrito parietal para a fase sólida, (Pa)
- $\bar{\phi}$ – Média da propriedade genérica, (–)
- ϕ' – Flutuação da propriedade genérica, (–)
- ϕ_a – Ângulo de atrito interno, ($^\circ$)
- ϕ – Coeficiente de polimento, (–)
- ϕ – Propriedade genérica de variação contínua, (–)
- χ – Constante de von Karman, (–)

Letras em índice

g – Fase gasosa

s – Fase sólida

p – Partícula

i – Componente 1, 2

D – Arrasto

$máx$ – Máximo

Siglas

CAD – Computer Aided Design

CFD – Computational Fluid Dynamics

GUI – Graphic User Interface

KTGF – Kinetic Theory of Granular Flow

MP PIC – MultiPhase Particle-In-Cell

MVF – Método dos Volumes Finitos

OpenFOAM – Open Source Field Operation and Manipulation

PCM – Phase Change Material

RANS – Reynolds-Averaged Navier-Stokes

STL – Stereo Lithography

TCE – Tomografia por Capacitância Elétrica

TCEG – Teoria Cinética de Escoamentos Granulares

TVD – *Total Variation Diminishing*

UNICAMP – Universidade Estadual de Campinas

Definições

Fluidização – Operação pela qual partículas sólidas são transformadas num estado tipo fluido, através da suspensão em um gás ou líquido (Kunii & Levenspiel, 1991).

1. INTRODUÇÃO

A fluidização é, de uma forma genérica, o fenómeno físico onde partículas sólidas se comportam como um fluido. Esse comportamento é conseguido forçando um escoamento de ar ascendente a atravessar as partículas em repouso.

Assim que a força exercida pelo fluido em movimento na partícula atinge o valor da força gravítica, atinge-se o ponto mínimo de fluidização e as partículas começam a mover-se. Neste ponto, o movimento das partículas é ainda bastante modesto, sendo que se limita à reorganização das partículas através do princípio da energia mínima (Gidaspow, 1994).

À medida que a velocidade do escoamento aumenta, o movimento das partículas torna-se mais vigoroso atingindo o comportamento idêntico ao de um fluido. Um objeto leve que seja colocado no leito tem tendência a surgir na superfície, tal como acontece num líquido cuja densidade seja superior à do objeto em causa (Figura 1.1). Outras características semelhantes às de um líquido são a superfície horizontal, quando o leito é inclinado, e a proporcionalidade entre o gradiente de pressão no leito e o seu peso (Kunii & Levenspiel, 1991).

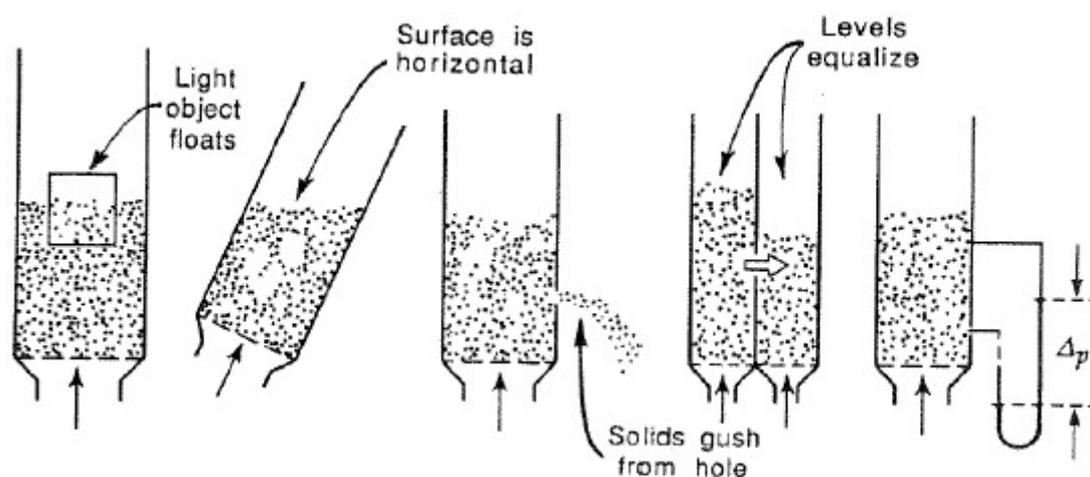


Figura 1.1. Propriedades típicas de um leito fluidizado (Kunii & Levenspiel, 1991).

As aplicações do processo em estudo são inúmeras, entre as quais se destacam as reações químicas sólido-fluido, a secagem, os revestimentos, a adsorção e a combustão de sólidos como carvão ou biomassa.

Os processos que envolvam uma grande quantidade de partículas idênticas exigem a homogeneidade das condições de operação. Nesta perspectiva, a fluidização conta com excelentes propriedades. Como consequência da mistura entre a fase sólida e a fase fluida, líquida ou gasosa, atingem-se altas taxas de transferência de calor e de massa entre as fases, assim como a homogeneidade do perfil de temperaturas (Kunii & Levenspiel, 1991). Contudo, a fluidização conta com algumas desvantagens. Essas ocorrem principalmente devido à abrasão gerada nas colisões entre partícula-partícula e partícula-equipamento, havendo eventual perda de material mais refinado, provocada pelo arrasto, e podendo ainda ocorrer a geração de cargas electrostáticas, conduzindo à aglomeração de partículas e à adesão destas nas paredes do reator (Cross, 1987).

A presente dissertação tem como objetivo a realização de simulações computacionais de um leito fluidizado do tipo Wurster, com auxílio do OpenFOAM® (OpenFOAM®, 2016), e avaliar o comportamento hidrodinâmico de partículas de cera de carnaúba, para diferentes caudais volúmicos de ar insuflado.

O trabalho encontra-se dividido em cinco capítulos.

O primeiro capítulo é destinado à introdução de conceitos, apresentação de ferramentas, definição da abordagem ao problema e revisão bibliográfica.

No segundo capítulo são descritos os fenômenos em causa e a fundamentação teórica, proposta por diversos autores, para duas situações distintas: (i) escoamento sem partículas; (ii) escoamento com partículas.

O terceiro capítulo é dedicado à apresentação do caso de estudo. São apresentadas as simplificações adotadas, a geometria do reator, a construção da malha, as condições de fronteira e as particularidades de cada uma das situações analisadas.

No quarto capítulo os resultados são apresentados e discutidos. Os escoamentos com e sem partículas são analisados separadamente. Para a situação com partículas, procedeu-se à realização de uma validação do algoritmo de cálculo utilizado, tendo como objetivo avaliar o desempenho do *software*.

O quinto capítulo é dedicado às conclusões retiradas durante a investigação e sugerem-se algumas propostas para trabalhos futuros.

1.1. Leito fluidizado “Wurster”

O leito fluidizado do tipo “Wurster”¹ é comumente utilizado para revestimentos de partículas e encontra-se esquematizado na Figura 1.2.

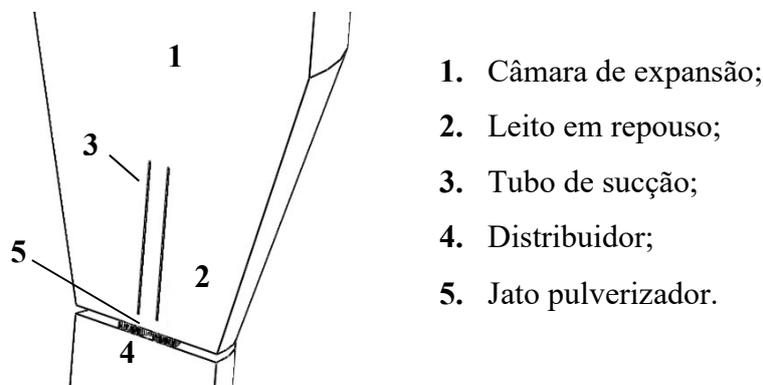


Figura 1.2. Desenho esquemático do leito fluidizado do tipo “Wurster” em corte.

O leito “Wurster” é um tipo de leito fluidizado em jato, contendo um tubo de sucção. O distribuidor é construído de tal forma a que o maior caudal de ar atravesse a zona interior do tubo de sucção, onde as partículas são sugadas para o seu interior e pulverizadas com o revestimento. As partículas são transportadas no interior do tubo de sucção no sentido ascendente, desacelerando na câmara de expansão até que caem na zona do leito em repouso (Figura 1.3). Durante o transporte ascendente, o revestimento seca por ação do ar quente. O processo repete-se até que a espessura do revestimento atinja o valor pretendido (Karlsson & Rasmuson, 2009).

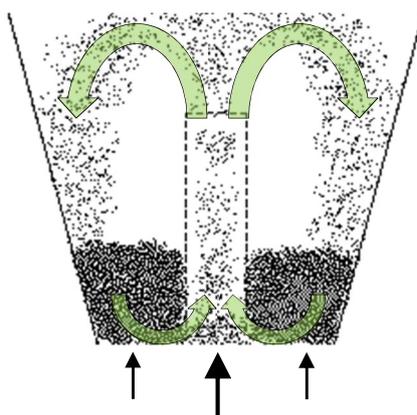


Figura 1.3. Desenho esquemático do movimento recirculatório das partículas num leito fluidizado do tipo “Wurster”.

¹ Uma visualização representativa do leito fluidizado do tipo “Wurster” pode ser consultada em: <https://www.youtube.com/watch?v=snLEMu1NAdM>

1.2. Modelação computacional da dinâmica de fluidos

A modelação computacional da dinâmica de fluidos², vulgo CFD, é uma ferramenta de cálculo comumente utilizada em diversas áreas da engenharia.

Com a crescente evolução dos recursos computacionais e das técnicas CFD, alguns entraves à evolução da ciência, presentes nos mais diversos métodos experimentais, como o consumo de recursos financeiros, humanos e materiais, são, em muitas situações, ultrapassados. A importância do CFD advém da eventual solução das equações complexas que governam os diferentes fenómenos associados à dinâmica de fluidos.

O método numérico de discretização mais utilizado na implementação do CFD é o Método dos Volumes Finitos (MVF). Trata-se de uma técnica onde se transformam³ as equações diferenciais (irresolúveis), que representam leis de conservação, em equações algébricas (resolúveis) resolvidas para os volumes de controlo (VC), definidos no domínio de cálculo. Como tal, o primeiro passo deste método passa por dividir o domínio em volumes mais pequenos. Os VC são definidos de forma a que cada um deles partilhe uma face comum com o VC contíguo. Os fluxos são calculados nas interfaces dos VC, o que assegura a conservação (o fluxo de saída através de uma face de um VC é igual ao fluxo de entrada na mesma face do VC adjacente) (Moukalled et al., 2016).

1.3. OpenFOAM

OpenFOAM® (*Open Source Field Operation and Manipulation*) é uma ferramenta CFD, de acesso sem restrições que, pelo acesso livre aos algoritmos de cálculo e possibilidade de personalização, tem despertado um crescente interesse de diversos académicos e investigadores.

Trata-se de uma ferramenta que utiliza o MVF e conta com uma vasta livreria de *solvers* e utilitários que o utilizador pode personalizar. Entre outros encontram-se os *solvers twoPhaseEulerFoam* – destinado a sistemas de dois fluidos incompressíveis com uma fase dispersa – e *simpleFoam* – para escoamentos incompressíveis, turbulentos e em regime permanente (OpenFOAM Foundation, 2014).

² *Computational Fluid Dynamics* (CFD) na literatura Anglo-Saxónica.

³ O processo de transformação das equações exatas irresolúveis (equações diferenciais de conservação) em equações aproximadas resolúveis (equações algébricas) tem por designação *Discretização*.

No OpenFOAM[®], cada simulação é organizada numa diretoria principal que contém outras subdiretorias. A subdiretoria que contém as condições iniciais é designada por “0” e no seu interior devem aloca-se, entre outros, os ficheiros referentes à velocidade inicial do escoamento, pressão, etc. A subdiretoria que contém os parâmetros geométricos do domínio de cálculo e propriedades constantes do fluido é designada por “*Constant*”. Por sua vez, os parâmetros de controlo da simulação (passo de tempo, *solver*, etc.), a discretização numérica, os critérios de convergência, entre outros, são especificados na subdiretoria “*System*”. Concluída a simulação, o pós-processamento implica a criação de uma nova subdiretoria, designada por “*PostProcessing*”, onde são registadas as propriedades calculadas em cada iteração.

A estrutura organizacional básica de um caso em OpenFOAM[®] encontra-se representada na Figura 1.4.

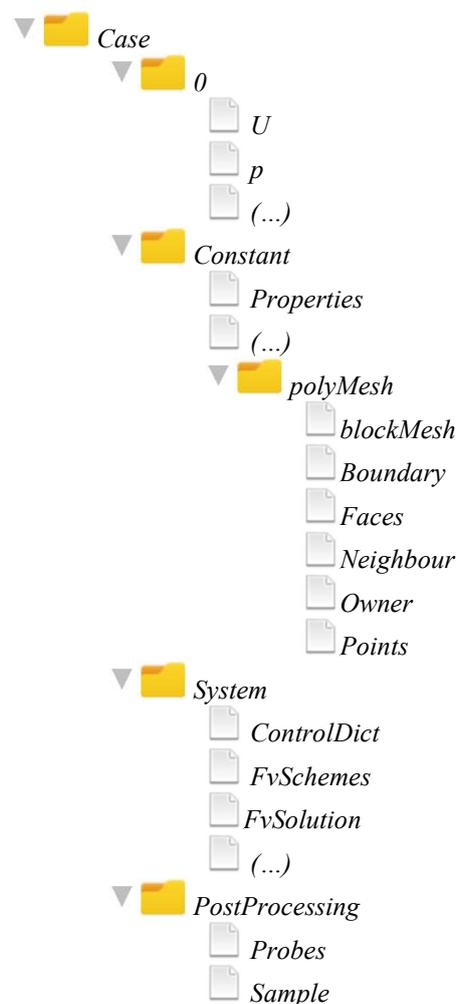


Figura 1.4. Estrutura organizacional básica de um caso em OpenFOAM[®].

1.4. Abordagem

Qualquer problema relacionado com a modelação computacional requer algum cuidado na escolha do caminho a seguir. Uma abordagem ao problema mal conseguida poderá levar a conclusões erróneas acerca do fenómeno em estudo e/ou a custos desnecessários.

Relativamente ao estudo da fluidização, onde partículas e fluidos interagem, existe duas formas de abordagem – Lagrangiana e Euleriana. Na abordagem Lagrangiana cada partícula é rastreada de forma individual, o que confere uma descrição da sua trajetória de grande qualidade. Contudo, esta opção acarreta grandes custos computacionais, pelo que apenas faz sentido recorrer a esta abordagem em estudos onde a fração volumétrica da fase sólida seja reduzida. Na abordagem Euleriana, tanto a fase sólida como a fase fluida são tratadas como meios contínuos e interpenetrantes e as equações descrevem as propriedades médias locais de ambas as fases. Desta forma, o número de equações apenas depende do número de fases em jogo e os custos computacionais são significativamente reduzidos quando comparados com a abordagem Lagrangiana. No entanto, o carácter discreto de um conjunto de partículas é perdido e a modelação das suas interações é necessária. Não obstante, atualmente esta é a abordagem comum aos problemas cujas frações volumétricas de fase sólida sejam elevadas (Taghipour et al. (2005), Sau & Biswal (2011), Herzog et al. (2012) e Benzarti et al. (2012)).

1.5. Revisão bibliográfica

Neste subcapítulo apresenta-se um resumo da pesquisa bibliográfica realizada para sustentar o desenvolvimento da presente dissertação. Assim, são citados alguns autores cujo trabalho científico acerca de leitos fluidizados permitiu a evolução da compreensão do fenómeno e, conseqüentemente, um avanço no conhecimento científico.

1.5.1. Desenvolvimento da teoria

Como já referido, a fluidização é a operação pela qual partículas sólidas são transformadas num estado tipo fluido, através da sua suspensão em um gás ou líquido (Kunii & Levenspiel, 1991).

Uma classificação de partículas foi sugerida por Geldart (1973), sendo essa amplamente utilizada pela comunidade científica por ser simples e intuitiva. Essa classificação tem por base a diferença da massa volúmica entre o sólido e o fluido e o diâmetro médio das partículas (Figura 1.5). Geldart (1973) sugeriu a classificação de partículas em quatro grandes grupos: A, B, C e D.

O grupo A é constituído por partículas pequenas e/ou de baixa densidade e tem a particularidade de exibir uma expansão do leito considerável antes da formação de bolsas de ar.

O grupo B é constituído por partículas de massa volúmica e diâmetro médios e a sua principal característica é a formação de bolsas de ar quando se atinge a velocidade mínima de fluidização.

O grupo C é constituído por partículas difíceis de fluidizar, pois devido à sua dimensão reduzida, as partículas mantêm-se coesas fazendo com que a mistura e a transferência de calor seja mais reduzida.

O grupo D é constituído por partículas de grandes dimensões e/ou muito densas. Normalmente, as partículas pertencentes a este grupo são usadas em leitos fluidizados de jato (Geldart, 1973).

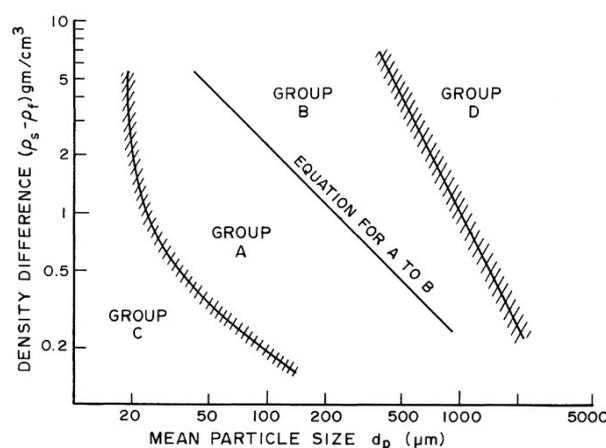


Figura 1.5. Classificação de Geldart para partículas fluidizadas. (Geldart, 1973) adaptado por Gidaspow (1994).

Bagnold (1954) realizou estudos sobre partículas dispersas em fluidos Newtonianos, de diferentes viscosidades, medindo a tensão tangencial provocada pela

mistura numa parede deformável. Segundo Gidaspow (1994), estes resultados foram o alicerce para a formulação da teoria cinética de escoamentos granulares⁴ (TCEG).

Mais tarde, através de Jackson (1963), Soo (1967) e Garg & Pritchett (1975), surge o modelo de dois fluidos, baseado nas sobejamente conhecidas equações de Navier-Stokes, em que a fase sólida é tratada como um domínio contínuo (Ding & Gidaspow, 1990).

Posteriormente, Ogawa et al. (1980) sugeriram que a energia mecânica de um escoamento granular é transformada em movimento aleatório da partícula e só depois dissipado em energia térmica (Figura 1.6). Ogawa et al. (1980) desenvolveram equações constitutivas para o movimento aleatório das partículas, em partículas perfeitamente fluidizadas (Gidaspow, 1994).

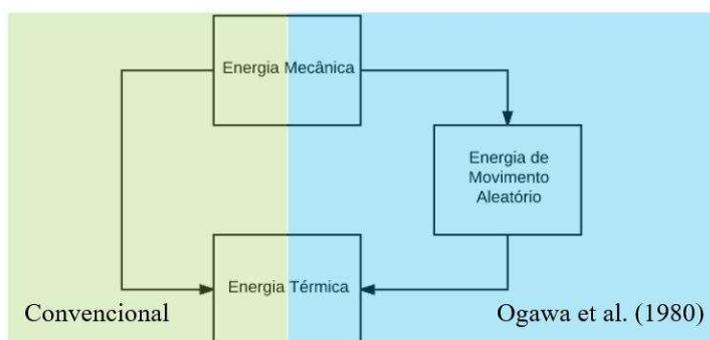


Figura 1.6. Fluxograma de energia em escoamentos granulares. Adaptado de Ogawa et al. (1980).

Jenkins & Savage (1983) continuaram a desenvolver a teoria introduzindo uma alteração na abordagem ao problema da colisão entre duas partículas, em leitos fluidizados. Apresentaram, assim, o conceito de coeficiente de restituição, o qual é definido como a razão entre as velocidades relativas das partículas, antes e depois da colisão (Kuwabara & Kono, 1987).

Um acrescido desenvolvimento do estado de arte foi observado no desenrolar da década de 80, com a introdução de diversas expressões que apoiam e aprimoram a teoria - em 1984, Lun et al. sugerem uma expressão para a pressão na fase sólida e, em 1987, Johnson & Jackson, sugeriram expressões que representam o atrito entre as partículas e entre as partículas e as paredes do leito. No final da década, em 1989, Syamlal & O'Brien sugerem uma das mais estudadas correlações para o coeficiente de transferência de quantidade de movimento em escoamentos granulares.

⁴ *Kinetic Theory of Granular Flow* (KTGF) na literatura Anglo-Saxónica.

Ding & Gidaspow (1990) desenvolveram um modelo capaz de modelar a viscosidade e as tensões na fase sólida, através da resolução numérica da equação de energia para as flutuações da velocidade das partículas. Do mesmo modo, desenvolveram uma correlação para o coeficiente de transferência de quantidade de movimento em escoamentos granulares, baseado na equação de Ergun (1952) e na correlação de Wen & Yu (1966).

A contribuição científica destes autores colmataram na escrita do livro “Multiphase Flow and Fluidization – Continuum and Kinetic Theory Descriptions”, em 1994, por Gidaspow, onde é descrita a TCEG.

1.5.2. Aplicação da teoria

No seguimento do trabalho realizado por Ding & Gidaspow (1990), Kuipers et al. (1993) estudaram o comportamento hidrodinâmico de um leito fluidizado bidimensional com um jato central. Naquele estudo, desenvolveram comparações entre os resultados obtidos por via computacional, utilizando o método das diferenças finitas, com os resultados determinados experimentalmente. Os resultados computacionais demonstraram concordância em relação à dimensão e forma das bolsas de ar no interior do leito. Nas suas conclusões, afirmam que a forma e dimensão das bolsas de ar formadas são fortemente dependentes da viscosidade da fase sólida.

Maronga & Wnukowski (1997) utilizaram partículas de lactose e pulverizaram-nas com água, através de um leito fluidizado com um *top spray*. Definindo vários pontos de prova, realizaram medições da temperatura, humidade e pressão dentro do leito, obtendo os perfis de distribuição dessas variáveis no interior do leito.

Cammarata et al. (2003) realizaram simulações tridimensionais e bidimensionais de um leito fluidizado borbulhante, contendo partículas do grupo B (Classificação de Geldart, 1973), utilizando o código comercial Ansys® CFX® (Ansys®, 2016). Na sua investigação, utilizaram duas teorias distintas: (i) TCEG e (ii) *Particle-bed* (Gibilaro, 2001). As suas comparações incidiram sobre a dimensão das bolsas de ar, expansão e porosidade do leito, concluindo que ambas as abordagens e ambos os domínios de cálculo apresentam boa concordância entre si. Adicionalmente, em Cammarata et al. (2003) refere-se que as simulações produzidas com o domínio tridimensional demoravam, em média, trinta vezes mais que as do domínio bidimensional.

Taghipour et al. (2005) continuaram o estudo de um leito fluidizado borbulhante e realizaram comparações entre os resultados experimentais e computacionais, utilizando o código comercial Ansys® Fluent®. Nas suas investigações, avaliaram as correlações referentes ao coeficiente de transferência de quantidade de movimento de Ding & Gidaspow (1990), Syamlal & O'Brien (1989) e Wen & Yu (1966). Nas suas conclusões, aqueles autores afirmam que aquele *software* é capaz de prever o comportamento do leito, para todas as correlações utilizadas. Adicionalmente, concluem que um coeficiente de restituição de 0,9, em detrimento de 0,99, conduziu a resultados mais realistas.

Uma vez mais, o Ansys® Fluent® foi o *software* escolhido para novo estudo de um leito fluidizado borbulhante conduzido por Loha et al. (2012), baseado na TCEG. Naquele estudo, quatro correlações para o coeficiente de transferência de quantidade de movimento foram utilizadas: (i) Ding & Gidaspow (1990), (ii) Syamlal & O'Brien (1989), (iii) EMMS (Yang et al., 2003) e (iv) McKeen (McKeen & Pugsley, 2003), respetivamente. No seguimento do estudo, Loha et al. (2012) concluíram que os modelos de Ding & Gidaspow (1990) e Syamlal & O'Brien (1989) são os que fornecem melhores resultados. Adicionalmente, estudaram o efeito da turbulência através do modelo RNG k- ϵ (Yakhot *et al.*, 1992), concluindo que em leitos fluidizados borbulhantes o efeito da turbulência não é significativo nos resultados.

Paralelamente a estudos de leito fluidizado borbulhante, foram realizadas simulações em outros tipos de leitos fluidizados, por outras equipas de investigação. Du et al. (2006) simularam um leito fluidizado do tipo jato, utilizando o Ansys® Fluent®. No seu trabalho, avaliaram a influência da tensão de atrito, do empacotamento máximo e do coeficiente de restituição para as partículas. Concluíram que: (i) o papel da tensão de atrito é mais importante na zona central do leito, tendo ainda um ligeiro impacto no comportamento do jato; (ii) o aumento do empacotamento máximo conduz ao aumento da velocidade da fase sólida e aumenta a porosidade do leito; (iii) o aumento do coeficiente de restituição leva a um aumento da temperatura granular e de todas as variáveis que dela dependam.

Sau & Biswal (2011) utilizaram o Ansys® Fluent® para a realização de simulações computacionais de um leito fluidizado cónico. No seu trabalho, fizeram uso da TCEG e utilizaram o modelo de Ding & Gidaspow (1990) para o coeficiente de transferência

de quantidade de movimento. No entanto, nos seus estudos, não existe qualquer trabalho realizado ao nível do coeficiente de restituição, tendo sido adotado um valor genérico.

O leito fluidizado do tipo “Wurster” também foi estudado e abordado pela comunidade científica. O trabalho de Šibanc, Srčić & Dreu (2013) representa um exemplo de tal, pois estudaram tanto o efeito da distância entre o tubo de sucção e a placa de distribuição de ar, bem como o caudal de ar insuflado, num leito fluidizado do tipo “Wurster”. Para a parte computacional do estudo utilizaram o Ansys® Fluent®. Nas suas conclusões, verificaram que os resultados obtidos para domínios bidimensionais são razoáveis e substituem, com qualidade aceitável, as mais intensivas simulações tridimensionais.

Semelhantemente, Šibanc et al. (2016) realizaram estudos experimentais no mesmo tipo de leito fluidizado. No topo do tubo de sucção, utilizaram um transmissor ótico por forma a medir a fração volumétrica de partículas. O efeito da distância entre o tubo de sucção e a placa de distribuição de ar, a quantidade de partículas e o caudal de ar insuflado foram objeto de estudo. Nas suas conclusões, referem que o aumento da concentração de partículas no interior do tubo de sucção é provocado por: (i) diminuição do caudal de ar; (ii) aumento a distância entre o tubo de sucção e a placa de distribuição; (iii) aumento do número de partículas no reator.

Wang et al. (2016) estudaram também um leito fluidizado do tipo “Wurster”. Na sua investigação, compararam os resultados obtidos por via experimental com aqueles obtidos por via computacional. Nos testes experimentais, utilizaram a tomografia por capacitância elétrica (*TCE*) para medir a concentração de partículas dentro e fora do tubo de sucção. Para os testes em CFD, duas abordagens foram objeto de estudo: (i) modelo de dois fluidos – Euleriana; (ii) *MultiPhase-particle-in-cell* (MP-PIC) – Lagrangiana. Nas suas conclusões, afirmam que os dois modelos são capazes de produzir resultados satisfatórios no estudo de leitos fluidizados do tipo “Wurster”.

Para além do estudo de apenas um leito fluidizado, foram efetuados trabalhos de investigação em dois leitos fluidizados, um com distribuição de ar uniforme e outro com um jato central. Tal é o caso de Liu & Hinrichsen (2014), onde foi implementado um modelo de dois fluidos em combinação com a TCEG, utilizando o OpenFOAM®. Através da modelação dos dois leitos fluidizados, avaliaram vários esquemas advectivos TVD (*total variation diminishing*). No total, cinco esquemas TVD foram implementados para discretizar os

termos de advecção da velocidade da fase sólida e da sua fração volumétrica. Desta investigação, concluem que os cinco esquemas TVD utilizados apresentam boa concordância nos resultados da média temporal da velocidade das partículas. Relativamente à fração volumétrica da fase sólida, dois dos esquemas utilizados apresentaram problemas de convergência, nomeadamente o SuperBee01 e MUSCL01.

Ainda em 2014, Liu & Hinrichsen, tendo como objetivo a aplicação prática dos estudos em leitos fluidizados, investigaram o comportamento hidrodinâmico e reações de metanização, num leito fluidizado, para a produção de gás natural sintético. As simulações computacionais foram desenvolvidas através do OpenFOAM[®], utilizando um domínio bidimensional. Os resultados obtidos para a expansão do leito e para as concentrações de produtos da reação apresentam boa concordância relativamente aos dados experimentais.

Como se poderá notar ao longo deste resumo bibliográfico, alguns *software* foram utilizados (em especial o Ansys[®] Fluent[®]) para realizar simulações em diferentes leitos fluidizados e tendo em mente diferentes objetivos. Como tal, um estudo comparativo de *software* foi conduzido por Herzog et al. (2012), com o intuito de definir aquele que permitiria obter resultados com maior grau de confiança. Nesse estudo, utilizaram, para o efeito, o OpenFOAM[®], MFX[®] (MFX, 2016) e Ansys[®] Fluent[®]. Os resultados computacionais foram comparados com valores experimentais, publicados por Taghipour et al. (2005). No seguimento do trabalho, Herzog et al. (2012) afirmam que os *softwares* MFX[®] e Ansys[®] Fluent[®] asseguram melhores resultados, quando comparados com os do OpenFOAM[®].

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo, são enunciados os princípios que governam a dinâmica de fluidos, para dois tipos de escoamento no interior do reator do tipo “Wurster” – com e sem partículas.

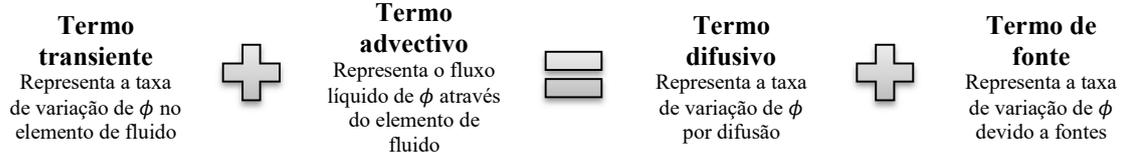
Numa primeira fase, é abordada sumariamente a teoria que sustenta a modelação do escoamento de ar, para a situação sem partículas. Para um estudo mais detalhado sobre o tema, sugere-se a leitura de Patankar (1980), Versteeg & Malalasekra (1995) e Oliveira & Lopes (2012).

Posteriormente, são abordados os tópicos teóricos que sustentam a modelação do escoamento de ar, para a situação com partículas. Para um estudo mais pormenorizado sobre esta problemática, sugere-se a leitura de Gidaspow (1994).

2.1. Situação A – Escoamento sem partículas

As equações que regem o comportamento do fluido no interior do reator são casos particulares da equação diferencial de transporte (expressão (2.1), Patankar (1980)), definida para a unidade de volume de fluido.

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{U}\phi) = \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) + S_\phi \quad (2.1)$$



Na expressão (2.1), ϕ representa uma propriedade genérica de variação contínua (por unidade de massa), ρ representa a massa volúmica do fluido, que no presente trabalho se assume constante, \mathbf{U} representa o vetor velocidade do escoamento, Γ_ϕ representa o coeficiente difusivo da variável ϕ e S_ϕ representa o termo de fonte.

Em escoamento incompressível, isotérmico e bidimensional (no plano xy), em coordenadas cartesianas, a propriedade genérica ϕ pode assumir o valor 1 e as variáveis u e

v (componentes da velocidade segundo Ox e Oy , respetivamente), transformando a expressão (2.1) nas equações de conservação de massa e de quantidade de movimento (expressões (2.2), (2.3) e (2.4), respetivamente):

$$\begin{aligned} \text{Conservação de massa, } \phi \equiv 1, \Gamma_\phi \equiv 0 \text{ e } S_\phi \equiv 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\begin{aligned} \text{Conservação de quantidade de movimento (} Ox \text{), } \phi \equiv u \text{ e } \Gamma_\phi \equiv \mu \\ \rho \frac{\partial(u)}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (u\mathbf{U}) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \nabla^2 u + S_x \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} \text{Conservação de quantidade de movimento (} Oy \text{), } \phi \equiv v \text{ e } \Gamma_\phi \equiv \mu \\ \rho \frac{\partial(v)}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (v\mathbf{U}) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \nabla^2 v + S_y \end{aligned} \quad (2.4)$$

A expressão (2.2) traduz a equação de conservação de massa que, para o caso de escoamentos incompressíveis, implica a conservação de volume.

Nas expressões (2.3) e (2.4) μ representa a viscosidade dinâmica do fluido em escoamento. As referidas expressões são as conhecidas equações de Navier-Stokes, que refletem, por unidade de volume de fluido, que a taxa de variação da quantidade de movimento é igual à ação conjunta das forças de corpo, viscosas e de pressão (Oliveira & Lopes, 2012).

2.1.1. Modelação da turbulência

A maioria dos escoamentos de interesse prático em engenharia acontecem em regime turbulento. Neste regime, ao contrário do que acontece em regime laminar, o escoamento é instável e caracterizado pela existência de turbilhões de diferentes escalas.

O regime de escoamento é caracterizado pela relação entre as forças de inércia e de viscosidade, traduzida matematicamente através do número de Reynolds (Re), expressão (2.5):

$$Re = \frac{\rho UL}{\mu} \quad (2.5)$$

Onde L representa um comprimento característico do escoamento.

Em regime turbulento, a evolução temporal das propriedades do escoamento, genericamente designadas por ϕ , oscila (ϕ') de forma caótica e aleatória em torno de um valor médio, $\bar{\phi}$. Osborn Reynolds sugeriu a decomposição materializada na expressão (2.6):

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (2.6)$$

Aplicando a decomposição de Reynolds às equações de conservação de quantidade de movimento, apresentadas no subcapítulo precedente, transformam-se as propriedades do escoamento p , u e v nos seus respetivos valores médios (expressões (2.7) e (2.8)). Esta formulação é designada por *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (RANS).

$$\rho \frac{\partial(\bar{u})}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (\bar{u}\mathbf{U}) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x} + \mu \nabla^2 \bar{u} - \rho \left[\frac{\partial \overline{u'^2}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{u'v'}}{\partial y} \right] + S_x \quad (2.7)$$

$$\rho \frac{\partial(\bar{v})}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (\bar{v}\mathbf{U}) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial y} + \mu \nabla^2 \bar{v} - \rho \left[\frac{\partial \overline{u'v'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'^2}}{\partial y} \right] + S_y \quad (2.8)$$

A formulação RANS faz incluir, às equações (2.3) e (2.4), os termos adicionais $-\rho \overline{u'v'}$, $-\rho \overline{u'^2}$ e $-\rho \overline{v'^2}$, designados por tensões de Reynolds, com dimensões de quantidade de movimento por unidades de área e de tempo, que funcionam como um mecanismo adicional de troca de quantidade de movimento entre diferentes regiões do escoamento (Oliveira & Lopes, 2012).

2.1.1.1. Modelo k - ε

A modelação da turbulência foi realizada com recurso ao modelo k - ε (Launder & Spalding, 1974). Trata-se de um modelo simples, para o qual é apenas necessário definir os valores iniciais e/ou de fronteira para os valores da energia cinética turbulenta, k , e para a sua taxa de dissipação, ε . A aplicabilidade deste modelo pressupõe a condição de regime plenamente turbulento.

Segundo Versteeg & Malalasekera (1995), o modelo k - ε apresenta uma performance razoavelmente boa para os mais diversos escoamentos existentes em meio industrial, sendo bem estabelecido e largamente validado. Por estes motivos, foi o modelo selecionado.

O modelo possui duas equações de transporte: uma para k , e outra para ε , apresentadas nas expressões (2.9) e (2.10), respetivamente:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho k \mathbf{U}) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu_t}{\sigma_k} \nabla k \right] + 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - \rho \varepsilon \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \varepsilon \mathbf{U}) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.10)$$



Nas expressões (2.9) e (2.10), μ_t representa a viscosidade turbulenta (propriedade do escoamento e não do fluido), definida na expressão (2.11).

$$\mu_t = \frac{\rho C_\mu k^2}{\varepsilon} \quad (2.11)$$

As equações apresentadas contêm cinco constantes, C_μ , σ_k , σ_ε , $C_{1\varepsilon}$ e $C_{2\varepsilon}$, ajustadas empiricamente para uma larga gama de escoamentos turbulentos (Versteeg & Malalasekra, 1995):

$$C_\mu = 0,09; \sigma_k = 1,00; \sigma_\varepsilon = 1,30; C_{1\varepsilon} = 1,44 \text{ e } C_{2\varepsilon} = 1,92 \quad (2.12)$$

No presente estudo, o conhecimento da distribuição do perfil de velocidade junto à parede não é relevante. Assim, a lei logarítmica será aplicada.

A lei logarítmica é apresentada através da expressão (2.13), onde B é constante ($B \cong 5$), χ representa a constante de von Karman ($\chi \cong 0,41$), y^+ a distância adimensional normal à parede e u_τ a velocidade de referência⁵.

$$\frac{\bar{u}}{u_\tau} = \frac{1}{\chi} \ln y^+ + B \quad (2.13)$$

$$y^+ = \frac{y u_\tau}{\nu} \quad (2.14)$$

Alguns autores, como por exemplo Versteeg & Malalasekra (1995), defendem que a aplicação desta lei é válida para $30 < y^+ < 500$.

⁵ Designada por velocidade de atrito, este termo surge de um processo de adimensionalização do perfil de velocidades médio no interior de uma estrutura de camada limite parietal. Na verdade, não se trata efetivamente de uma velocidade, apesar de ter as mesmas dimensões.

O modelo k - ε (Launder & Spalding, 1974) relaciona a tensão tangencial parietal com a energia cinética turbulenta e a sua taxa de dissipação através da velocidade de referência (expressões (2.15) e (2.16)) (Versteeg & Malalasekra, 1995):

$$k = \frac{u_\tau^2}{\sqrt{C_\mu}} \quad (2.15)$$

$$\varepsilon = \frac{u_\tau^3}{ky} \quad (2.16)$$

2.2. Situação B – escoamento com partículas

No subcapítulo que agora se inicia, apresenta-se a fundamentação teórica, que serve de base ao estudo da fluidização, adotando o modelo de dois fluidos. São abordadas as equações de conservação e constitutivas, resultantes da TCEG.

A modelação computacional para o escoamento com partículas assenta numa abordagem Euleriana. O modelo considera ambas as fases, sólida e gasosa, como sendo interpenetrantes e contínuas, onde uma fração volumétrica (α_i) é atribuída a cada uma delas e é verificada a condição $\sum_i \alpha_i = 1$ (Gidaspow, 1994).

2.2.1. Conservação de massa e quantidade de movimento

Partindo da hipótese do *continuum*, a equação de conservação de massa considera a massa volúmica ρ e a velocidade \mathbf{U} como sendo funções contínuas do tempo e do espaço. Como tal, para cada uma das fases, toma a seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{U}_g) = 0 \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \mathbf{U}_s) = 0 \quad (2.18)$$

Nas expressões (2.17) e (2.18), α_g representa a fração volumétrica da fase gasosa (ar), α_s a fração volumétrica da fase sólida, ρ_g a massa volúmica do ar, ρ_s a massa volúmica da fase sólida, \mathbf{U}_g o vetor velocidade do ar e \mathbf{U}_s o vetor velocidade da fase sólida.

A equação de conservação de quantidade de movimento dita o balanço entre a taxa de variação da quantidade de movimento do fluido e as forças que nele atuam, por unidade de volume de fluido. Para cada uma das fases, toma a seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \mathbf{U}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{U}_g \mathbf{U}_g) = -\alpha_g \nabla p + \nabla \cdot (\alpha_g \boldsymbol{\tau}_g) + \alpha_g \rho_g \mathbf{g} + \beta (\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_g) \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \mathbf{U}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \mathbf{U}_s \mathbf{U}_s) = -\alpha_s \nabla p - \nabla p_s + \nabla \cdot (\alpha_s \boldsymbol{\tau}_s) + \alpha_s \rho_s \mathbf{g} + \beta (\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_s) \quad (2.20)$$

Nas expressões (2.19) e (2.20), β representa o coeficiente de transferência de quantidade de movimento entre fases, \mathbf{g} o vetor da aceleração gravítica, p a pressão no leito, p_s a pressão da fase sólida, provocada pela interação entre partículas, e $\boldsymbol{\tau}_g$ e $\boldsymbol{\tau}_s$ representam o tensor das tensões viscosas da fase sólida e gasosa (expressões (2.21) e (2.22)).

$$\boldsymbol{\tau}_g = \mu_g [\nabla \mathbf{U}_g + (\nabla \mathbf{U}_g)^T] - \frac{2}{3} \mu_g (\nabla \cdot \mathbf{U}_g) \mathbf{I} \quad (2.21)$$

$$\boldsymbol{\tau}_s = \mu_s [\nabla \mathbf{U}_s + (\nabla \mathbf{U}_s)^T] + \left(\lambda_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) (\nabla \cdot \mathbf{U}_s) \mathbf{I} \quad (2.22)$$

Na expressão (2.21), μ_g representa a viscosidade dinâmica do ar e \mathbf{I} representa a matriz identidade. Na expressão (2.22), μ_s representa a viscosidade dinâmica da fase sólida e λ_s representa a viscosidade volumétrica da fase sólida. Estes parâmetros serão abordados no capítulo 2.2.3.3.

2.2.2. Coeficiente de transferência de quantidade de movimento

A transferência de quantidade de movimento, entre as duas fases distintas, é uma das forças dominantes do fenómeno da fluidização. Esta transferência de quantidade de movimento é representada pela força de arrasto. Correlações para o coeficiente de transferência de quantidade de movimento em sistemas gás-sólido foram propostas por Wen & Yu (1966), Syamlal & O'Brien (1989) e Ding & Gidaspow (1990), entre outros.

Para o coeficiente de transferência de quantidade de movimento entre a fase sólida e a fase gasosa, foi selecionado o modelo de Ding & Gidaspow (1990). Trata-se de um modelo muito adotado pela comunidade científica, estudado e validado por diversos autores, nomeadamente por Taghipour et al. (2005), Loha et al. (2012) e Liu & Hinrichsen (2014).

No modelo em questão, duas equações são aplicadas, dependendo da fração volumétrica da fase sólida. Para a região onde α_s é igual ou superior a 0,2, o coeficiente de transferência de quantidade de movimento baseia-se na equação de Ergun (1952), tomando a forma apresentada na expressão (2.23). Para valores de α_s inferiores a 0,2, o modelo baseia-se na correlação de Wen & Yu (1966), expressão (2.24).

$$\beta = 150 \frac{\alpha_s^2 \mu_g}{\alpha_g d_p^2} + 1,75 \frac{\rho_g \alpha_s}{d_p} |\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_s|; \alpha_s \geq 0,2 \quad (2.23)$$

$$\beta = \frac{3}{4} C_D \frac{\alpha_g \alpha_s \rho_g |\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_s|}{d_p} \alpha_g^{-2,65}; \alpha_s < 0,2 \quad (2.24)$$

Na expressão (2.24), C_D representa o coeficiente de arrasto, sendo este relacionado com o número de Reynolds através das expressões (2.25) e (2.26) (Gidaspow, 1994).

$$C_D = \frac{24}{Re_p} (1 + 0,15 Re_p^{0,687}); Re_p < 1000 \quad (2.25)$$

$$C_D = 0,44; Re_p \geq 1000 \quad (2.26)$$

Por sua vez, o valor Re é traduzido por:

$$Re_p = \frac{\alpha_g \rho_g |\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_s| d_p}{\mu_g} \quad (2.27)$$

Na expressão (2.27), d_p representa o diâmetro da partícula.

2.2.3. Teoria cinética de escoamentos granulares

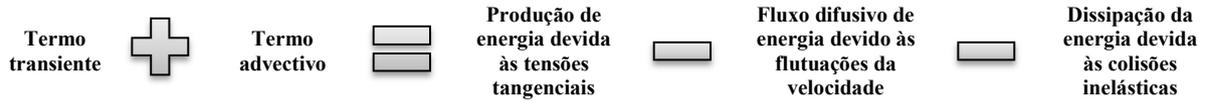
2.2.3.1. Temperatura granular, θ .

Uma definição importante na TCEG é a da energia das flutuações da velocidade na fase sólida, também conhecida como temperatura granular, θ . Tal como a temperatura, T , de um gás é proporcional à energia cinética das moléculas, de forma análoga, a temperatura granular é proporcional à energia cinética das partículas. A temperatura granular é então definida, através da expressão (Gidaspow, 1994).

$$\theta = \frac{1}{3} u'^2 \quad (2.28)$$

A temperatura granular é obtida a partir da sua equação de transporte (expressão (2.29)) derivada a partir da equação de Boltzmann para a distribuição de probabilidade do movimento aleatório das partículas (Gidaspow, 1994).

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s \theta) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \mathbf{U}_s \theta) \right] = \boldsymbol{\tau}_s : \nabla \mathbf{U}_s - \nabla \cdot (-k_s \nabla \theta) - \gamma_s \quad (2.29)$$



Na expressão (2.29), k_s representa a condutibilidade da energia com origem nas flutuações da velocidade instantânea e γ_s a dissipação da energia devida às colisões inelásticas entre partículas (Gidaspow, 1994). k_s e γ_s são obtidos com recurso às expressões (2.30) e (2.31), respetivamente.

$$k_s = \frac{150 \rho_s d_p \sqrt{\theta \pi}}{384 (1 + e_s) g_0} \left[1 + \frac{6}{5} (1 + e_s) g_0 \alpha_s \right]^2 + 2 \alpha_s^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e_s) \sqrt{\left(\frac{\theta}{\pi} \right)} \quad (2.30)$$

$$\gamma_s = 3 (1 - e_s^2) \alpha_s^2 \rho_s g_0 \theta \left[\frac{4}{d_p} \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} - \nabla \cdot \mathbf{U}_s \right] \quad (2.31)$$

Nas expressões anteriores, e_s representa o coeficiente de restituição e g_0 a função de distribuição radial. A colisão diz-se ser perfeitamente elástica se $e_s = 1$ e perfeitamente plástica se $e_s = 0$. Por sua vez, a função de distribuição radial define a probabilidade de colisões entre as partículas, materializada na expressão (2.32), sugerida por Ogawa et al. (1980) (indicado em Gidaspow, 1990).

$$g_0 = \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}} \right)^{1/3} \right]^{-1} \quad (2.32)$$

Na expressão (2.32), $\alpha_{s,max}$ representa o empacotamento máximo de sólido que se pode obter ao longo do processo. Por ser difícil determinar a sua relação com o comportamento hidrodinâmico, este parâmetro raramente é medido experimentalmente. Isto leva a que, na maioria dos estudos em CFD, tenha sido considerado como um parâmetro ajustável, sendo definido pela experiência (Du et al., 2006). Contudo, este parâmetro desempenha um papel importante na modelação do fenómeno. Com o objetivo de validar esta afirmação, verifique-se a evolução de g_0 em função de α_s , patente na Figura 2.1.

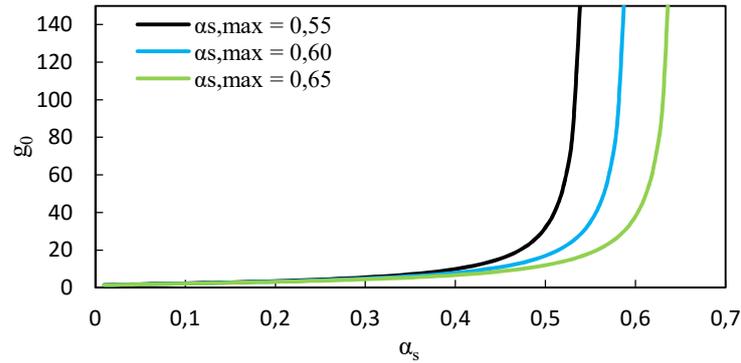


Figura 2.1. Evolução da função de distribuição radial em função da percentagem de sólido.

Após a análise da Figura 2.1, verifica-se que, para um dado α_s , g_0 aumenta à medida que se tomam valores superiores para $\alpha_{s,max}$. É, portanto, um parâmetro que requer alguma atenção, pois tem consequências nas restantes equações constitutivas da fase sólida e, por conseguinte, na equação de conservação de quantidade de movimento para a fase sólida. Um estudo mais aprofundado acerca da influência deste parâmetro em simulações computacionais foi elaborado por Du et al. (2006).

2.2.3.2. Pressão na fase sólida

Lun et al. (1984) sugerem uma expressão para a pressão na fase sólida (expressão (2.33)) que representa as forças normais às partículas devidas às suas interações. p_s conta com a contribuição de dois termos: (i) cinético e (ii) colisão (Benzarti et al., 2012).

$$p_s = \rho_s \alpha_s \theta + 2\alpha_s^2 g_0 \theta (1 + e_s) \quad (2.33)$$

2.2.3.3. Viscosidade volumétrica e dinâmica

Por fim, introduzem-se os conceitos de viscosidade volumétrica e dinâmica para a fase sólida.

A viscosidade volumétrica (expressão (2.34)) é definida como sendo a resistência da fase sólida às tensões de tração e compressão (Gidaspow, 1994).

$$\lambda_s = \frac{4}{3} \alpha_s^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e_s) \sqrt{\left(\frac{\theta}{\pi}\right)} \quad (2.34)$$

A viscosidade dinâmica da fase sólida resulta da contribuição de três componentes inerentes ao fenómeno: (i) Colisões, $\mu_{s,col}$, (ii) Movimento, $\mu_{s,kin}$, e (iii) Atrito entre partículas, $\mu_{s,Fr}$.

$$\mu_s = \mu_{s,col} + \mu_{s,kin} + \mu_{s,Fr} \quad (2.35)$$

As componentes associadas às colisões e ao movimento são materializadas nas expressões (2.36) e (2.37), por Gidaspow (1994), no seguimento do trabalho desenvolvido por Savage (1983) e Ding & Gidaspow (1990).

$$\mu_{s,col} = \frac{4}{5} \alpha_s^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e_s) \sqrt{\frac{\theta}{\pi}} \quad (2.36)$$

$$\mu_{s,kin} = \frac{10 \rho_s d_p \sqrt{\theta \pi}}{96 g_0 (1 + e_s)} \left[1 + \frac{4}{5} \alpha_s g_0 (1 + e_s) \right]^2 \quad (2.37)$$

A contribuição destas duas componentes varia em função da concentração da fase sólida. Nas zonas onde a concentração é baixa, as colisões entre partículas são menos prováveis, tornando a componente associada às colisões de menor importância. Por sua vez, em zonas cuja concentração é muito elevada, a componente associada ao atrito ganha importância face às restantes. É nestas zonas densas, onde as partículas estão em permanente contacto entre si e com o seu movimento restringido, que surgem tensões normais à superfície, denominadas por pressão de atrito, $P_{s,Fr}$.

Johnson & Jackson (1987) propuseram as expressões (2.38) e (2.39) para traduzir a componente associada ao atrito entre partículas:

$$\mu_{s,Fr} = P_{s,Fr} \sin \phi_a \quad (2.38)$$

$$P_{s,Fr} = Fr \frac{(\alpha_s - \alpha_{s,min})^n}{(\alpha_{s,max} - \alpha_s)^{p_{JJ}}} \quad (2.39)$$

Na expressão (2.38), ϕ_a representa o ângulo de atrito interno, *i.e.* a relação entre a tensão de corte máxima e tensão normal entre as partículas.

Relativamente à expressão (2.39), Fr representa o fator de atrito e p_{JJ} e n são constantes, cujo valor proposto por Johnson & Jackson (1987) é de 0,05, 2 e 5, respetivamente.

2.2.4. Condição de escorregamento parcial parietal para a fase sólida

A modelação de um sólido como sendo um fluido carece sempre de reflexão. Um fluido em contacto com uma superfície sólida adquire a sua velocidade. Por sua vez, para o caso de um sólido, tal não se verifica. No seguimento desta problemática, Johnson & Jackson (1987) sugeriram uma condição de fronteira (expressão (2.40)) que traduzisse uma condição de escorregamento parietal ao sólido (Liu & Hinrichsen, 2014).

$$\nabla\tau_{s,w} = -\frac{\pi}{6} \frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}} \phi \rho_s g_0 \sqrt{3\theta} \mathbf{U}_{s,w} \quad (2.40)$$

Na expressão (2.40), ϕ representa o coeficiente de polimento. Para $\phi = 0$, existe a condição de escorregamento total, ao passo que para $\phi = 1$ verifica-se a condição de aderência parietal (Liu & Hinrichsen, 2014).

Por falta de valores experimentais, considerou-se o valor de $\phi = 0,6$, utilizado por Loha et al. (2012). Contudo, recorda-se o leitor que Loha et al. (2012) afirmam que a condição de escorregamento parcial ou total não altera significativamente o comportamento global do leito.

3. CASO DE ESTUDO

O objeto de estudo da presente dissertação assenta na análise do reator de leito fluidizado do tipo “Wurster”, apresentado na Figura 3.1. Os valores computacionais aqui produzidos servirão para a comparação com os valores experimentais, obtidos pela equipa de investigadores da Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Brasil.



Figura 3.1. Fotografias do reator de leito fluidizado (instalado na UNICAMP).

Esta investigação visa o estudo do encapsulamento de partículas de cera de carnaúba, material amplamente utilizado em diferentes setores, tais como o têxtil, construção, alimentar, entre outros. Estudos sobre as propriedades térmicas dessa cera apontam para uma temperatura de fusão de aproximadamente 80°C e elevada energia de fusão, comparável com os *Phase Change Material* (PCM) clássicos (Ribeiro et al., 2013).

Os PCM's têm como principal característica a capacidade de absorção, armazenamento e libertação de grandes quantidades de energia durante a mudança de fase (Sharma et al., 2009), sendo que a encapsulação destes materiais permite conter a variação volumétrica que ocorre durante a mudança de fase. Como a cera tem um baixo ponto de fusão, não é possível efetuar os processos de secagem tradicionais, necessários para um encapsulamento correto. No entanto, o recobrimento deste tipo de partículas, em leito fluidizado, representa um grande desafio por ser pouco estudado e devido à grande suscetibilidade da partícula mudar de fase durante o processamento, inviabilizando o

encapsulamento. Assim, é de suma importância avaliar o comportamento hidrodinâmico das partículas, num leito fluidizado, por forma a prever o seu comportamento aquando do encapsulamento.

3.1. Simplificação

O domínio de cálculo foi construído utilizando apenas a ferramenta *blockMesh*, integrada no OpenFOAM®. Na presente dissertação pretende-se mostrar que é possível construir malhas relativamente complexas utilizando apenas o *software* em causa. Todavia, o OpenFOAM® permite importar ficheiros CAD, em formato STL (entre outros), e assim construir malhas com as mais variadas geometrias de forma relativamente simples e expedita.

Por forma a reduzir os custos computacionais, admite-se, em todas as simulações, condições de escoamento bidimensional (Figura 3.2). Esta consideração foi validada por Cammarata et al. (2003), onde os resultados computacionais obtidos num domínio tridimensional apresentaram uma boa concordância com os conseguidos num domínio bidimensional. Adicionalmente, em Cammarata et al. (2003) refere-se que as simulações produzidas com o domínio tridimensional demoravam, em média, trinta vezes mais tempo que as do domínio bidimensional.

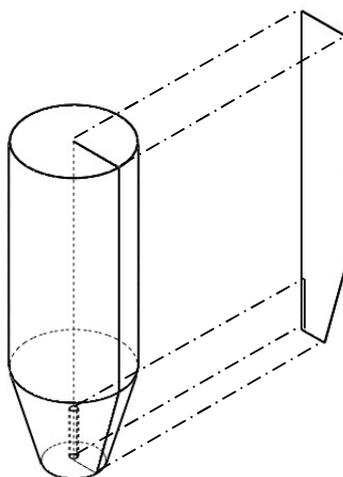


Figura 3.2. Representação esquemática do domínio de cálculo considerado.

3.2. Geometria

3.2.1. Reator

Na zona inferior do reator encontra-se uma placa perfurada, que tem como objetivo distribuir o ar injetado. A placa de distribuição de ar, objeto de discussão na secção 3.2.2, contém pequenos furos, o que dificultou a caracterização da velocidade do escoamento na proximidade da placa. Uma vez que apenas se dispôs dos caudais volúmicos de ar insuflado, a definição das condições iniciais para a velocidade do escoamento foi desafiante. A resolução do problema passou por acrescentar um pequeno troço de conduta a montante da placa de distribuição (Figura 3.3)), com um diâmetro conhecido, onde foi possível atribuir um valor médio para a velocidade ($U = \frac{4Q}{\pi D^2}$). Posteriormente, o cálculo da velocidade do escoamento na placa foi realizada pela simulação.

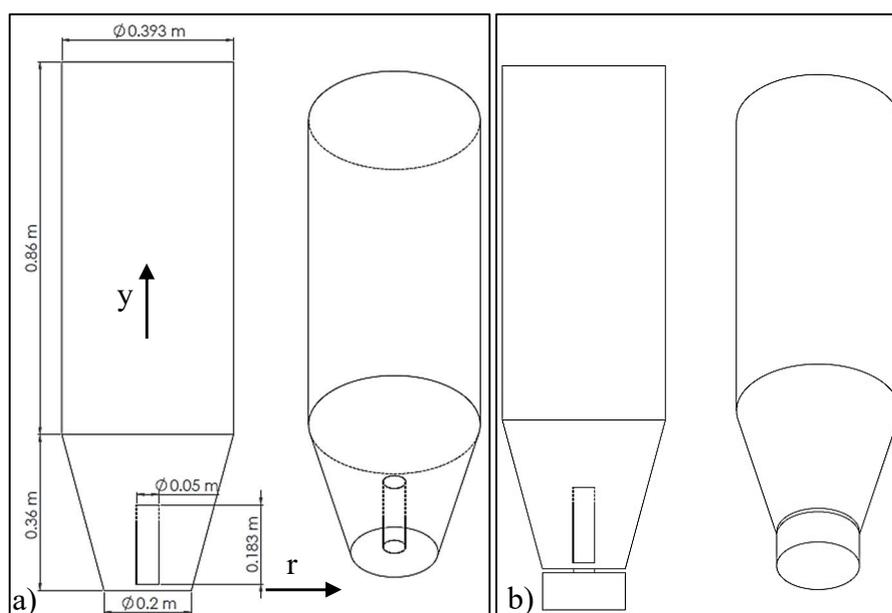


Figura 3.3. Desenho esquemático da geometria do reator: a) Dimensões; b) Alteração da geometria da entrada do reator.

3.2.2. Placa de distribuição de ar

Apesar da geometria do reator ser axissimétrica, a placa de distribuição não o é (Figura 3.4). Por forma a se conseguir desenvolver simulações bidimensionais com resultados coerentes, a geometria da placa de distribuição de ar teve de ser alterada. Assim, verificou-se qual a percentagem de abertura ao longo de cada fileira de furos (Tabela 3.1) e

aplicou-se, no plano, essa mesma percentagem de abertura, resultando na geometria apresentada na Figura 3.5.

Importa notar que, na Figura 3.4 a), o furo central e os dois furos laterais são destinados aos componentes de fixação do *spray* atomizador e do tubo de sucção, respetivamente, pelo que não há escoamento através dessas áreas.

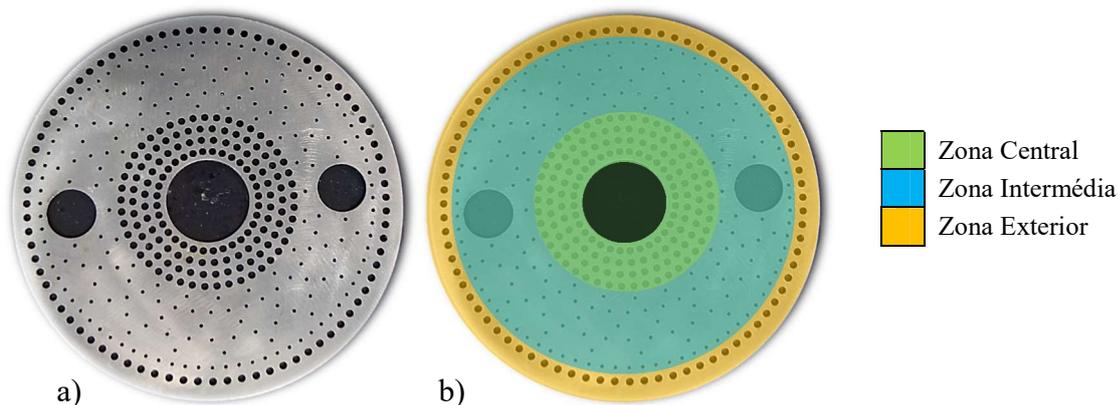


Figura 3.4. a) Fotografia da placa de distribuição de ar; b) Zoneamento.

Tabela 3.1. Porosidade da placa de distribuição de ar.

Zona	Fileira	Raio dos furos (m)	Nº. de furos	Área total da zona (m ²)	Área total de abertura da zona (m ²)	Porosidade (%)
Central	1 ^a	0,001	32	1,4x10 ⁻³	4,6x10 ⁻⁴	32,2
	2 ^a	0,001	32			
	3 ^a	0,001	38			
	4 ^a	0,001	45			
Intermédia	5 ^a	0,0005	20	3,5x10 ⁻³	1,63x10 ⁻⁴	4,6
	6 ^a	0,0005	36			
	7 ^a	0,0005	16			
	8 ^a	0,0005	36			
	9 ^a	0,0005	18			
	10 ^a	0,0005	81			
Exterior	11 ^a	0,001	81	2,4x10 ⁻³	2,5x10 ⁻⁴	10,4



Figura 3.5. Representação adotada para os furos do distribuidor (bidimensional).

Devido à baixa porosidade, e por razões de resolução, decidiu-se negligenciar as aberturas da zona intermédia.

3.3. Malha de cálculo

Conforme referido na secção 3.1, a criação da malha foi realizada através da ferramenta *blockMesh*. Esta ferramenta pressupõe a divisão do domínio de cálculo em blocos. Posteriormente, esses blocos deverão ser divididos em blocos mais pequenos, denominados por células, dando origem a uma malha estruturada (Figura 3.6).

Foram construídas três malhas diferentes, apresentadas na Figura 3.7, com o objetivo de se estudar a independência dos resultados relativamente à malha. Uma visão geral do tipo de fronteiras do domínio encontra-se esquematizada na Figura 3.8.

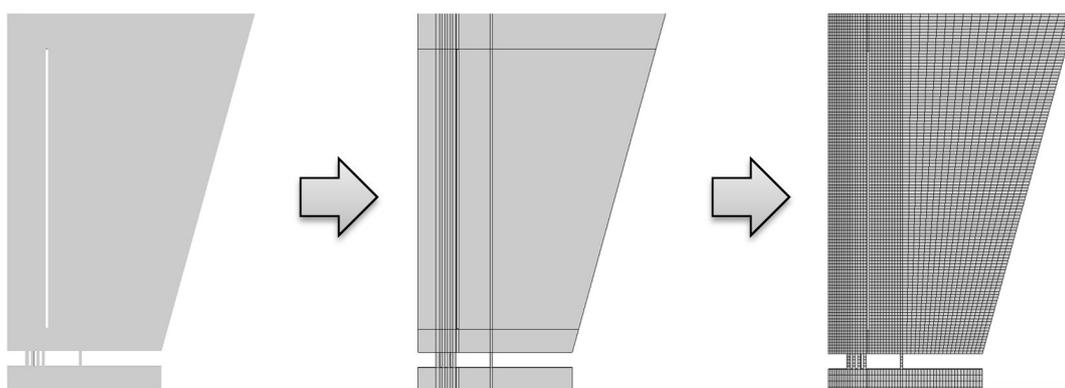


Figura 3.6. Construção da malha com a ferramenta *blockMesh*.

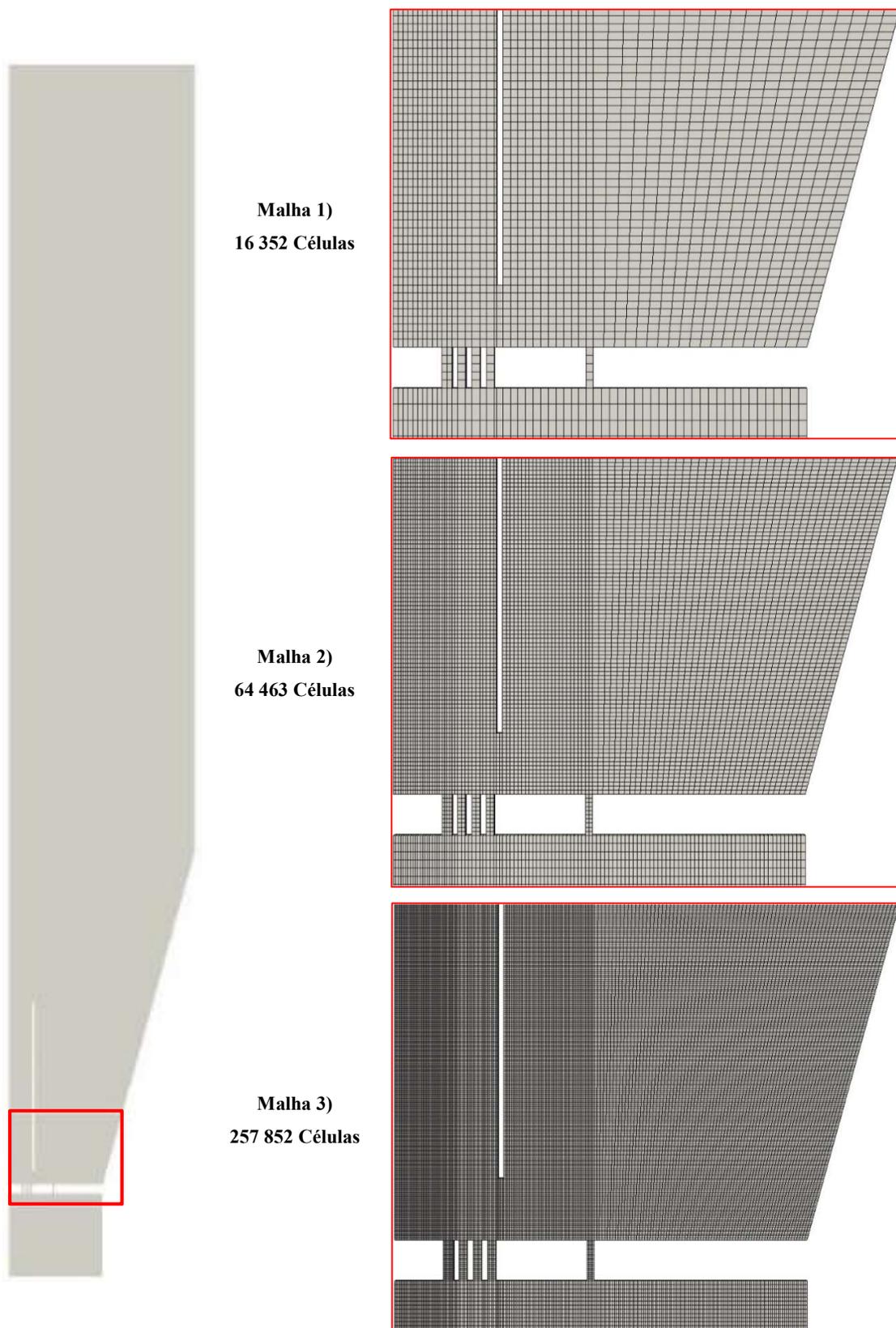


Figura 3.7. Pormenor das malhas consideradas nos testes de independência de malha.

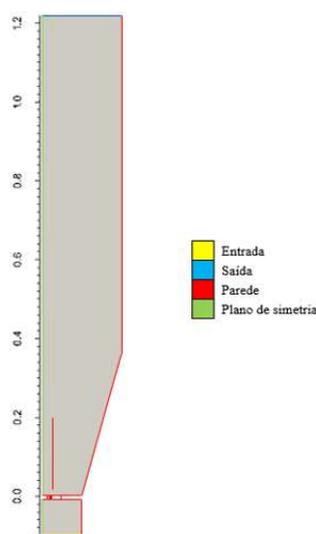


Figura 3.8. Visão geral do tipo de fronteira do domínio.

3.4. Situação A – escoamento sem partículas

Na situação A, o escoamento sem partículas no interior do reator foi simulado com o objetivo de caracterizar a componente vertical do campo de velocidade. Aqui, foram consideradas condições de escoamento bidimensional, incompressível, isotérmico e regime permanente. Realizaram-se alguns testes de independência de malha, tendo-se considerado três malhas distintas (com 16 352, 64 463 e 257 852 células, ver Figura 3.7). Foram simulados, para cada uma das malhas, três caudais volúmicos.

Os parâmetros de simulação, as condições de fronteira e os esquemas numéricos adotados encontram-se especificados nas Tabelas 3.2, 3.3 e 3.4, respetivamente.

Tabela 3.2. Parâmetros de simulação – Situação A.

Parâmetro	Valor
Caudal volúmico ($\text{m}^3 \text{h}^{-1}$)	136, 200 e 300
Massa volúmica do ar (kg m^{-3})	1,2
Viscosidade dinâmica do ar ($\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$)	10^{-6}
Critério de convergência: Controlo de Resíduos (U, p)	10^{-6}

Tabela 3.3. Condições de fronteira – Situação A.

Região	Entrada	Saída	Paredes	Plano de simetria
Tipo	<i>Patch</i>	<i>Patch</i>	<i>Wall</i>	<i>symmetryPlane</i>
U	<i>fixedValue</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>fixedValue</i>	<i>symmetryPlane</i>
p	<i>zeroGradient</i>	<i>fixedValue</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>symmetryPlane</i>
k	<i>fixedValue</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>kWallFunction</i>	<i>symmetryPlane</i>
ε	<i>fixedValue</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>epsilonWallFunction</i>	<i>symmetryPlane</i>

Tabela 3.4. Esquemas numéricos adotados – Situação A.

Termo	Discretização	Interpolação
$\frac{\partial}{\partial t}$	Estacionário	
∇	<i>Gauss</i>	<i>linear</i>
$\nabla \cdot$	<i>Gauss</i>	<i>upwind</i>
∇^2	<i>Gauss</i>	<i>linear</i>

3.5. Situação B – escoamento com partículas

Na situação B, foi simulado o escoamento com partículas no interior do reator com o objetivo de caracterizar o comportamento hidrodinâmico do leito. Foi determinada a distribuição de concentração volumétrica no interior do tubo de sucção, assim como a componente vertical da velocidade das partículas.

Foram aplicadas condições de escoamento bidimensional e incompressível. Realizaram-se alguns testes de independência de malha, tendo-se considerado duas malhas distintas (com 16 352 e 64 463 células). A Malha 3), com 257 852 células, não foi objeto de estudo devido ao tempo disponível para a realização das simulações. Foram simulados três caudais volúmicos para cada uma das malhas.

Para as partículas, foi determinado o coeficiente de restituição. Trata-se de um parâmetro essencial, uma vez que descreve a energia absorvida nas colisões durante a fluidização. O método mais utilizado para o cálculo deste coeficiente é o teste de queda livre (Figura 3.9), onde o coeficiente de restituição pode ser obtido através da expressão (3.1) (Antonyuk et al., 2010). h_2 e h_1 representam a altura da partícula antes e depois da queda, respectivamente. O teste foi realizado colocando partículas de cera de carnaúba a 0,3 m de altura (h_1). Deixou-se cair livremente a partícula e verificou-se que, depois da colisão, a partícula atingia aproximadamente 0,037 m de altura (h_2).

$$e = \frac{U_2}{U_1} \approx \sqrt{\frac{h_2}{h_1}} = \sqrt{\frac{0,037}{0,3}} \cong 0,35 \quad (3.1)$$

Uma avaliação comparativa sobre a influência deste parâmetro nos resultados obtidos pode ser consultada no Apêndice A.

Os parâmetros de simulação, as condições de fronteira, os esquemas numéricos e o volume de partículas simuladas encontram-se apresentados nas Tabelas 3.5, 3.6 e 3.7 e Figura 3.10, respectivamente.

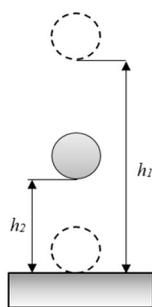


Figura 3.9. Representação esquemática do teste de queda livre.

Tabela 3.5. Parâmetros de simulação – Situação B.

Parâmetro	Valor/Método
Caudal volúmico ($\text{m}^3 \text{h}^{-1}$)	136, 200 e 300
Massa volúmica das partículas (kg m^{-3})	801
Diâmetro médio das partículas (m)	$1,533 \times 10^{-3}$
Coefficiente de restituição	0,35
Calor específico a pressão constante ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$)	3373
Passo de tempo (s)	0,001
Tempo total simulado (s)	10
Concentração volumétrica de partículas inicial (%)	60 ^a
Concentração volumétrica de partículas máxima (%)	62 ^b
Coefficiente de transferência de quantidade de movimento	Ding & Gidaspow (1990)
Pressão na fase sólida	Lun et al. (1984)
Viscosidade da fase sólida	Gidaspow (1994)
Condição de escorregamento parietal da fase sólida	Johnson & Jackson (1987)
Função de distribuição radial	Ogawa et al. (1980)

^a Valor utilizado por alguns dos autores citados, nomeadamente, Liu & Henriksen (2014), Herzog et al. (2012) e Taghipour et al. (2005).

^b Por falta de valores experimentais e coerência na literatura, adotou-se pelo valor padrão definido nos tutoriais do OpenFOAM[®]

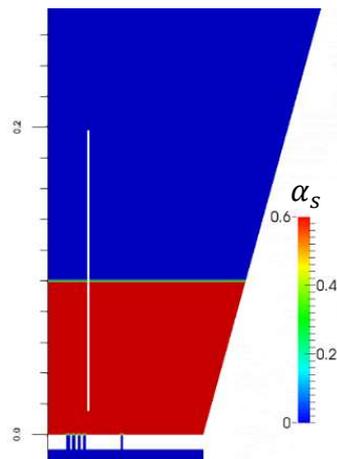


Figura 3.10. Representação da concentração inicial de partículas no reator.

Tabela 3.6. Condições de fronteira – Situação B.

Região	Entrada	Saída	Paredes	Plano de simetria
Tipo	<i>Patch</i>	<i>Patch</i>	<i>Wall</i>	<i>symmetryPlane</i>
U (ar)	<i>fixedValue</i>	<i>pressureInletOutletVelocity</i>	<i>fixedValue</i>	<i>symmetryPlane</i>
U (partículas)	<i>fixedValue</i>	<i>fixedValue</i>	<i>JJParticleSlip</i>	<i>symmetryPlane</i>
p	<i>fixedFluxPressure</i>	<i>fixedValue</i>	<i>fixedFluxPressure</i>	<i>symmetryPlane</i>
θ	<i>fixedValue</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>JJParticleTheta</i>	<i>symmetryPlane</i>
k	<i>fixedValue</i>	<i>inletOutlet</i>	<i>kWallFunction</i>	<i>symmetryPlane</i>
ε	<i>fixedValue</i>	<i>inletOutlet</i>	<i>epsilonWallFunction</i>	<i>symmetryPlane</i>

Tabela 3.7. Esquemas numéricos adotados – Situação B.

Termo	Discretização	Interpolação
$\frac{\partial}{\partial t}$	<i>Euler implicit</i>	
∇	<i>Gauss</i>	<i>linear</i>
$\nabla \cdot$	<i>Gauss</i>	<i>TVD (vanLeer)</i>
∇^2	<i>Gauss</i>	<i>TVD (limitedLinearV1)</i>
		<i>linear</i>

4. APRESENTAÇÃO E DISCUSSÃO DE RESULTADOS

Este capítulo encontra-se dividido em duas secções. Na primeira secção, são apresentados os resultados referentes à situação A – escoamento sem partículas. Na secção seguinte, são apresentados os resultados referentes à situação B – escoamento com partículas.

4.1. Situação A – Escoamento sem partículas

Neste subcapítulo será analisado a componente vertical do campo de velocidade no interior do reator e a sua influência no movimento recirculatório das partículas.

A Figura 4.1 apresenta a posição das linhas de amostragem. Seis linhas foram consideradas. A primeira, ligeiramente acima da placa de distribuição de ar ($y = 0,0075\text{ m}$), tem como objetivo captar as variações provocadas pelos furos. A segunda, terceira e quarta ($y = 0,015\text{ m}$, $y = 0,1065\text{ m}$ e $y = 0,198\text{ m}$, respetivamente), destinam-se à obtenção da distribuição da velocidade ao nível do tubo de sucção. A quinta e sexta ($y = 0,36\text{ m}$ e $y = 0,5\text{ m}$, respetivamente) tiveram como objetivo registar a influência da câmara de expansão na distribuição do campo de velocidades.

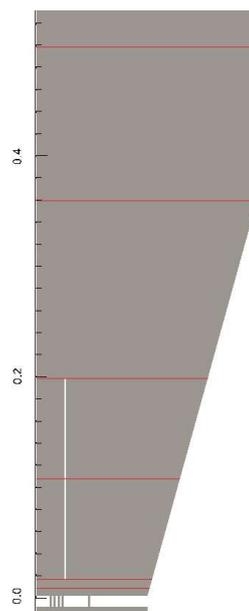


Figura 4.1. Posição das linhas de amostragem – situação A.

As Figuras 4.2 e 4.3 apresentam a distribuição da componente vertical do campo de velocidades no interior do reator e os perfis obtidos, para diferentes alturas, com três malhas, e para três caudais volúmicos testados.

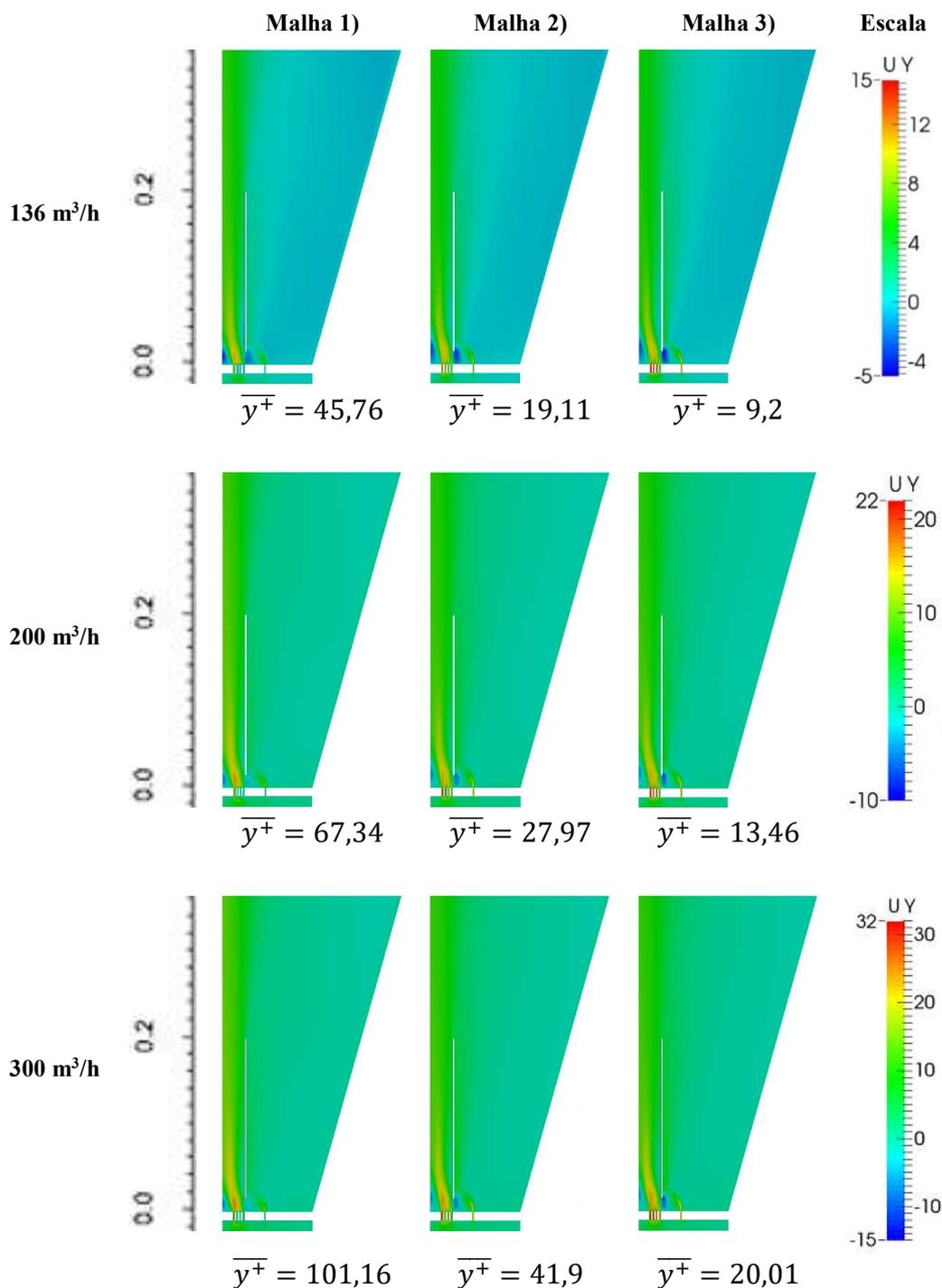


Figura 4.2. Distribuição da componente vertical do campo de velocidade (m/s) no interior do reator sem partículas.

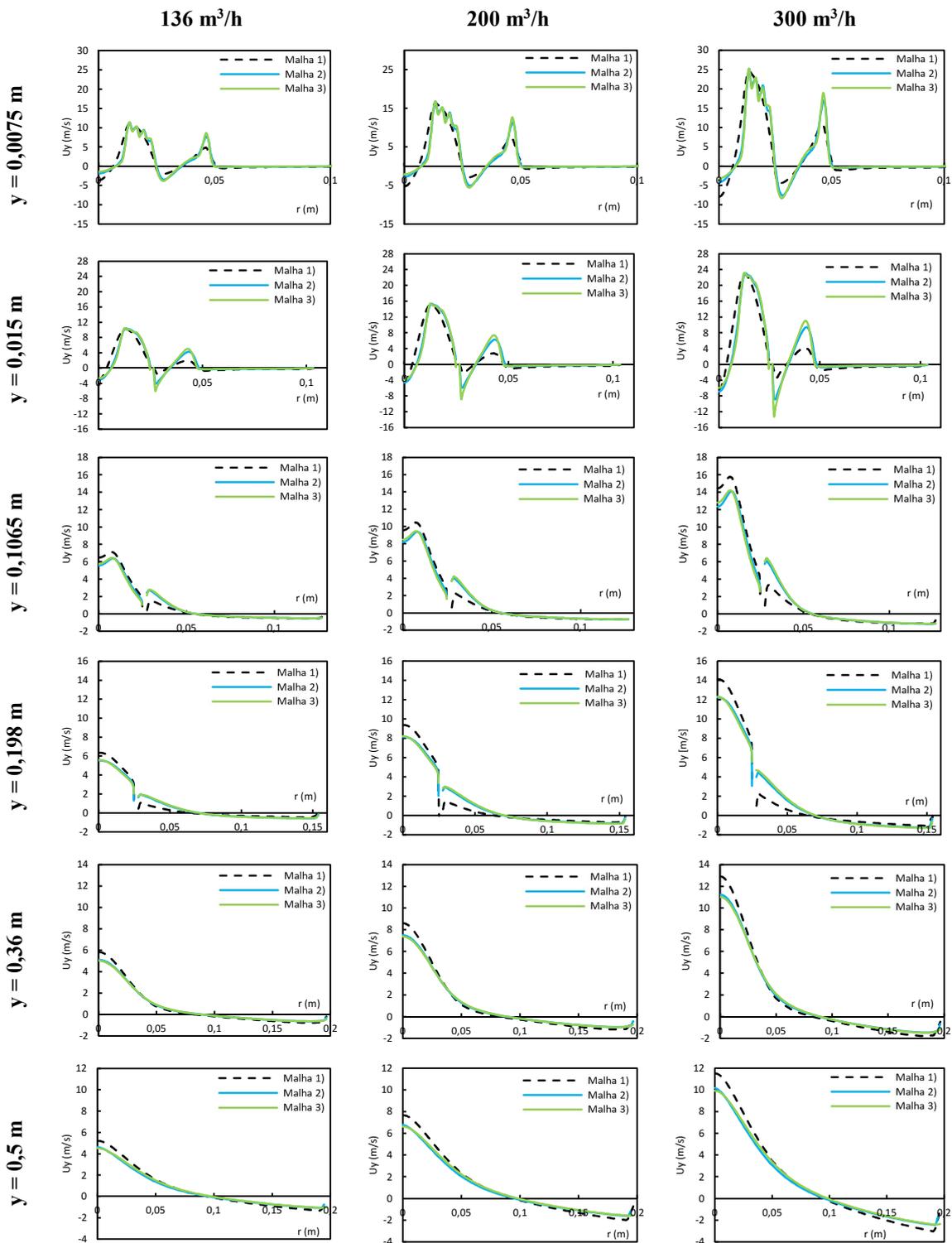


Figura 4.3. Perfis de velocidade obtidos, a diversas alturas (y), para três malhas testadas e vários caudais.

Os perfis de velocidade obtidos (Figura 4.3) permitiram aferir a sensibilidade dos resultados em relação à malha de cálculo utilizada. Verificou-se que, à medida que se aumenta o número de células, os resultados tendem a convergir. As maiores discrepâncias

registaram-se entre os resultados obtidos com as malhas 1) e 2), sendo que as diferenças entre as malhas 2) e 3) não apresentaram diferenças significativas. A malha 2) foi, portanto, aquela cujo compromisso qualidade-custo se assumiu como satisfeito.

Nas Figuras 4.2 e 4.3 podem observar-se duas zonas distintas do escoamento com sentidos opostos. Constata-se que, no interior do tubo de sucção, a velocidade do escoamento apresenta o seu valor mais elevado, o que permitirá o transporte pneumático das partículas no sentido ascendente. Na câmara de expansão, a velocidade do escoamento é menor, havendo regiões onde inverte o seu sentido, tornando-se descendente, o que favorece a deposição das partículas novamente no leito estático.

4.2. Situação B – Escoamento com partículas

No decurso do presente trabalho não foi possível a obtenção de resultados experimentais que serviriam de prova do desempenho do modelo de cálculo, nomeadamente do *solver twoPhaseEulerFoam*. Assim, realizou-se uma validação com recurso a dados experimentais disponíveis na literatura, com o objetivo de testar o *software*.

4.2.1. Validação do solver *twoPhaseEulerFoam*

Taghipour et al. (2005) disponibilizam informação acerca dos estudos experimental e computacional, relativa ao comportamento hidrodinâmico de partículas esféricas de vidro num reator de leito fluidizado borbulhante. O reator em questão encontra-se esquematizado na Figura 4.4, o qual contém aproximadamente 19 milhões de partículas.

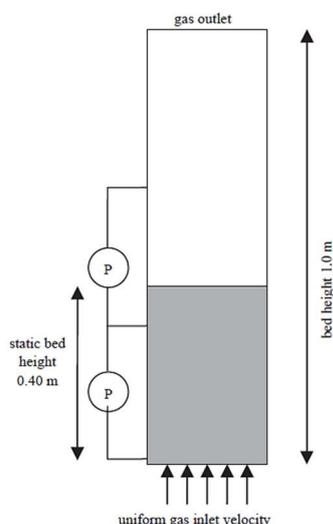


Figura 4.4. Desenho esquemático do leito fluidizado (bidimensional) (Taghipour et al., 2005).

Os testes foram realizados numa coluna com 1,0 m de altura, 0,28 m de largura e 0,025 m de espessura (Figura 4.5). A fluidização foi realizada à temperatura ambiente, com partículas com 275 μm de diâmetro médio e massa volúmica de 2500 kg/m^3 . Adicionalmente, consideraram-se os parâmetros indicados na Tabela 4.1 para as simulações computacionais.

Por forma a validar o *software* e garantir um nível de confiança elevado na sua capacidade de resposta, confrontaram-se os seguintes parâmetros: (i) fração volumétrica média de fase sólida, (ii) queda de pressão através do leito e (iii) razão de expansão do leito.

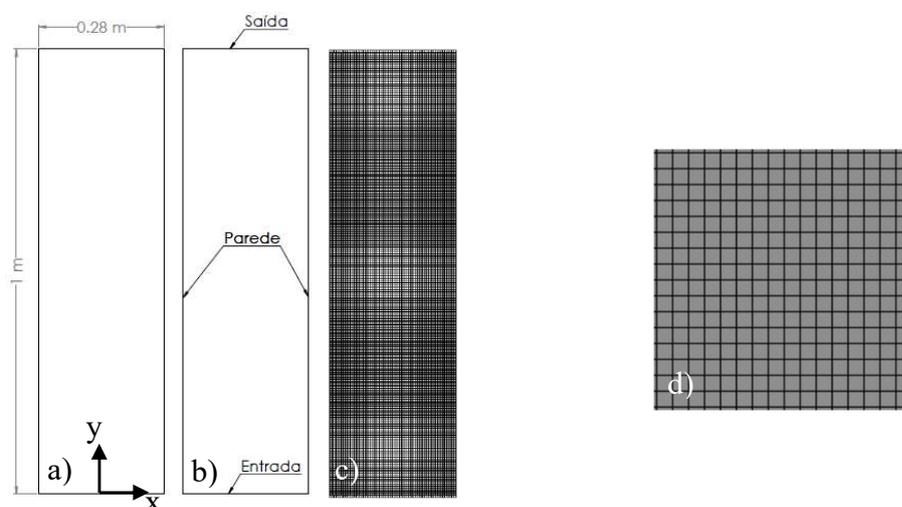


Figura 4.5. a) Representação das dimensões do domínio de cálculo; b) condições de fronteira; c) malha utilizada na simulação; d) pormenor da malha.

Tabela 4.1. Parâmetros de simulação usados na validação.

Parâmetro	Valor/Método
Altura do leito (m)	1
Largura do leito (m)	0,28
Altura inicial do leito (m)	0,4
Concentração inicial de partículas (%)	60
Velocidade do ar (m/s)	0,38; 0,46
Diâmetro das partículas (m)	$2,75 \times 10^{-4}$
Massa volúmica das partículas (kg/m^3)	2500
Coefficiente de restituição	0,9
Coefficiente de troca de quantidade de movimento	Ding & Gidaspow (1990)
Passo de tempo (s)	0,001
Espaçamento de malha (m)	0,005
Tempo total simulado (s)	60

As simulações foram realizadas respeitando os parâmetros definidos por Taghipour et al. (2005), o que implica que não tenham sido desenvolvidos testes de independência de malha.

4.2.1.1. Resultados preliminares

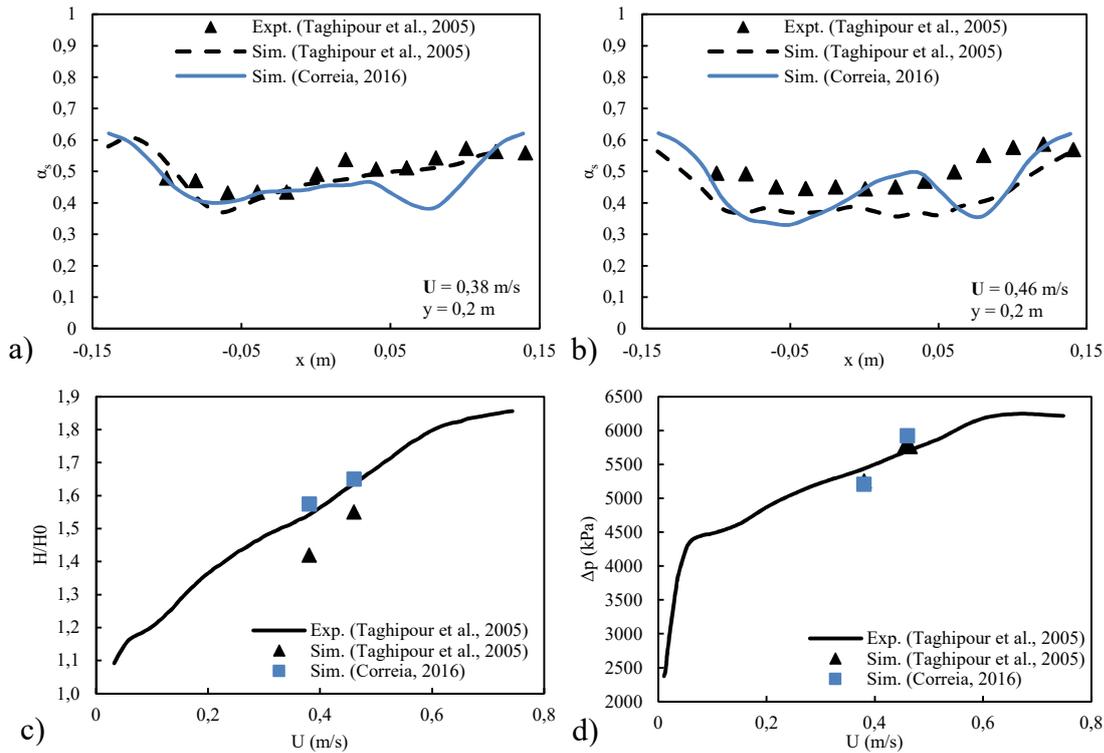


Figura 4.6. Resultados numéricos: a) Média temporal da fração volúmica de fase sólida ($U = 0,38$ m/s; $y = 0,2$ m); b) Média temporal da fração volúmica de fase sólida ($U = 0,46$ m/s; $y = 0,2$ m); c) Razão de expansão média do leito (H/H_0)⁶; d) Queda de pressão no leito, para $y = 0$ m e $y = 0,6$ m.

Da análise dos gráficos apresentados na Figura 4.6 verificou-se que os resultados da simulação computacional, obtidos através do OpenFOAM[®], apresentam uma concordância razoável com os resultados experimentais disponibilizados por Taghipour et al. (2005).

Dever-se-á salientar que os resultados numéricos até aqui apresentados não consideram o efeito da turbulência. De facto, recorrendo à expressão do número de Reynolds (expressão (2.27)) e considerando que a velocidade relativa entre o gás e as partículas é inferior à velocidade de entrada, o valor máximo para este parâmetro toma o valor:

$$Re_p = \frac{\alpha_g \rho_g |\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_s| d_p}{\mu_g} \cong \frac{0,4 \times 1,2 \times 0,38 \times 2,75 \times 10^{-4}}{10^{-5}} \cong 5 \quad (4.1)$$

⁶ H representa a altura do leito de partículas em operação e H_0 representa a altura do leito em repouso.

O número de Reynolds é bastante baixo, o que permite afirmar que o regime de escoamento é claramente laminar e que a consideração da velocidade relativa igual à velocidade de entrada não afeta significativamente o regime de regime de escoamento.

A Figura 4.7 apresenta uma comparação visual entre os resultados experimentais e computacionais, para a fração de fase sólida. Não existe indicação por parte de Taghipour et al. (2005) sobre o momento em que a fotografia (Figura 4.7 a)) foi registada, definiu-se o tempo de 5 segundos de simulação para a obtenção da Figura 4.7 b).

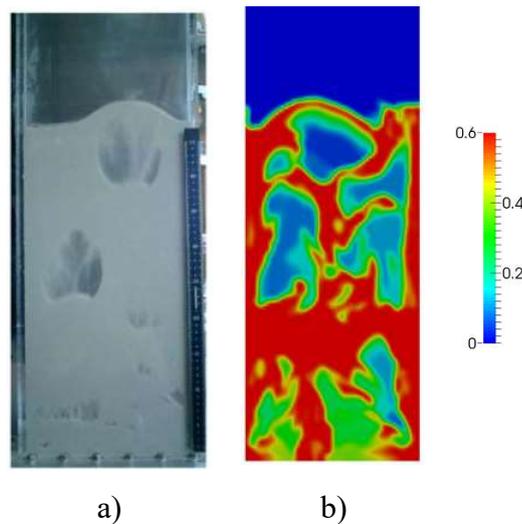


Figura 4.7. Comparação da fração de fase sólida ($U=0,38$ m/s): a) Fotografia (Taghipour et al., 2005); b) Simulação ($t=5$ s).

A imagem b), relativa à simulação, apresenta concordância na dimensão e posição das bolsas de ar formadas no interior do leito, isto é, bolsas maiores na parte superior do leito. Contudo, a concentração de fase sólida na zona inferior é menor do que a observada na imagem a). Taghipour et al. (2005) justificam esta discrepância com o facto de não se considerar o efeito da placa de distribuição do ar nas simulações computacionais levadas a cabo, afirmando ainda que: “Na prática, a penetração do ar e o comportamento hidrodinâmico do leito perto da placa de distribuição são significativamente afetados pela geometria do distribuidor.” (tradução livre de Taghipour et al., 2005)

4.2.1.2. Conclusões preliminares

A validação do solver *twoPhaseEulerFoam*, integrado no OpenFOAM®, teve como objetivo avaliar o desempenho daquele algoritmo de cálculo no estudo hidrodinâmico de leitos fluidizados. Foram realizadas duas simulações, para a diferentes velocidades do ar de entrada.

Na avaliação dos dados, determinou-se a média temporal da fração volumétrica de fase sólida, a média temporal da expansão do leito e a média temporal da queda de pressão ao longo do leito.

Da análise dos resultados computacionais resulta:

- Concordância razoável com os resultados experimentais disponíveis e, conseqüentemente, bom desempenho do *solver twoPhaseEulerFoam*;
- Menor concentração de partículas junto da placa de distribuição de ar, fruto da não representação exata da geometria da placa;
- Coerência na dimensão e posição das bolsas de ar.

4.2.2. Caso de estudo

A análise das Figuras 4.8, 4.9 e 4.10 permite avaliar qual o caudal volúmico necessário para que ocorra a fluidização das partículas no reator do tipo “Wurster”, qual a concentração volumétrica de partículas no interior do tubo de sucção, e ainda a altura do repuxo.

Verificou-se que, para um caudal volúmico de 136 m³/h de ar insuflado, as partículas têm dificuldade em abandonar, em repuxo, o tubo de sucção, mantendo-se a concentração de partículas relativamente elevada no seu interior. Assim, para aquele caudal, seria difícil a uniformização do recobrimento, bem como a sua produção contínua.

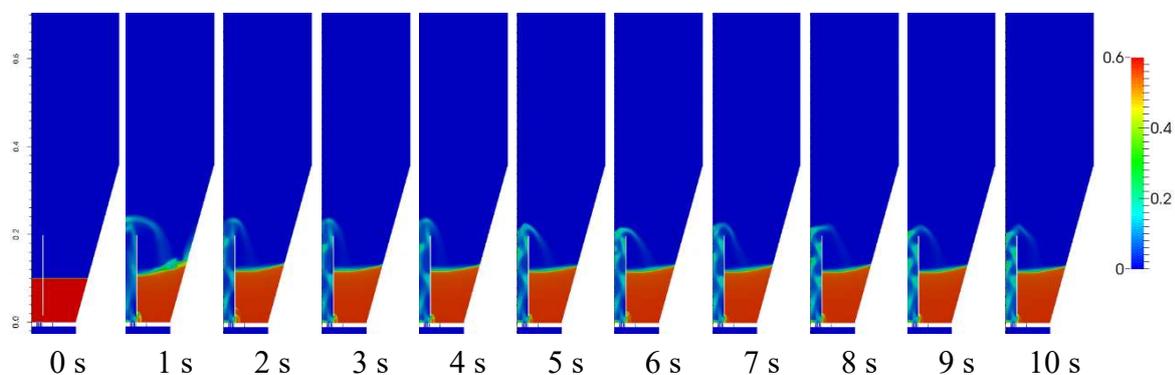


Figura 4.8. Evolução da fração volumétrica das partículas no interior do reator – $Q = 136 \text{ m}^3/h$.

Para um caudal volúmico de $200 \text{ m}^3/\text{h}$ de ar insuflado, observou-se que as partículas não apresentam dificuldade em abandonar o tubo de sucção, sendo a sua concentração média inferior no interior do tubo, relativamente ao caso do caudal de $136 \text{ m}^3/\text{h}$. A altura do repuxo atinge, em média, 29 cm em relação à placa de distribuição.

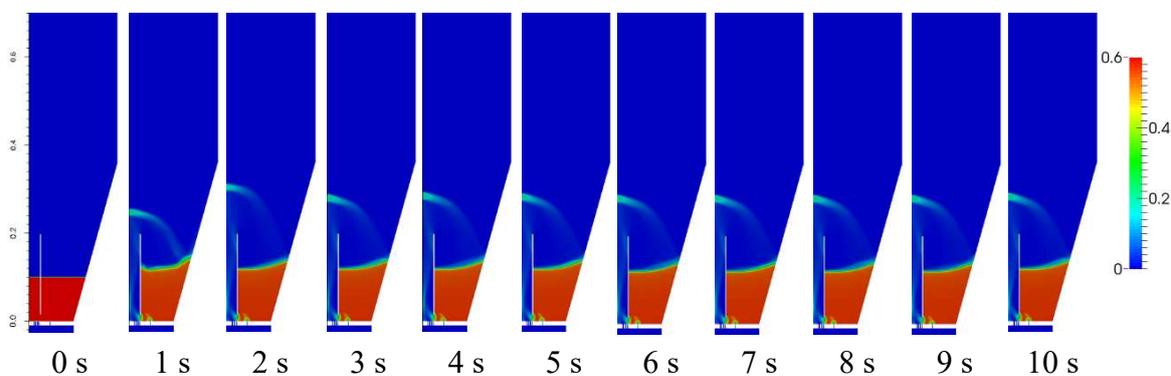


Figura 4.9. Evolução da fração volumétrica das partículas no interior do reator – $Q = 200 \text{ m}^3/\text{h}$.

Para um caudal volúmico de $300 \text{ m}^3/\text{h}$ as partículas apresentaram um comportamento idêntico ao do de $200 \text{ m}^3/\text{h}$. Visualmente, as frações volumétricas de partículas, para os dois caudais mais elevados, mantêm-se idênticas no interior do tubo de sucção. A principal diferença verificou-se na altura do repuxo. Será de salientar que um aumento da altura do repuxo implica que as partículas se mantenham mais tempo sujeitas ao escoamento de ar, o que se traduz num maior potencial de secagem e, conseqüentemente, num melhor acabamento superficial das partículas.

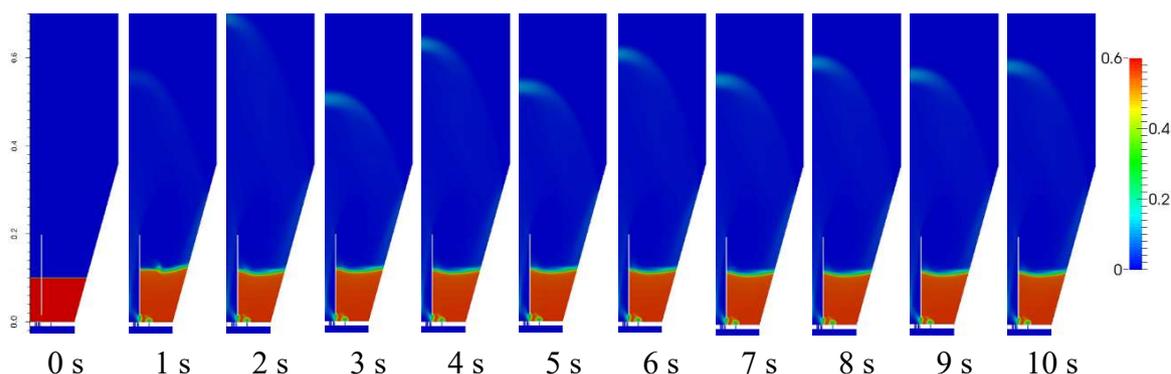


Figura 4.10. Evolução da fração volumétrica das partículas no interior do reator – $Q = 300 \text{ m}^3/\text{h}$.

A Figura 4.11 apresenta, em detalhe, a fração volumétrica de partículas no interior do tubo de sucção, para $t = 10$ segundos de simulação. A representação em detalhe revela um pormenor que evidencia a existência de uma zona com deposição de partículas, no centro da placa de distribuição de ar. Para o caudal de $136 \text{ m}^3/\text{h}$, verificou-se a existência de uma elevada concentração de partículas no local onde deverá ser colocado o *spray*

atomizador ($y = 0\text{ m}$; $r = 0\text{ m}$). Por sua vez, para o caudal de $200\text{ m}^3/\text{h}$ também se verificou uma concentração de partículas no mesmo local, ainda que reduzida, idêntica à do caudal de $300\text{ m}^3/\text{h}$.

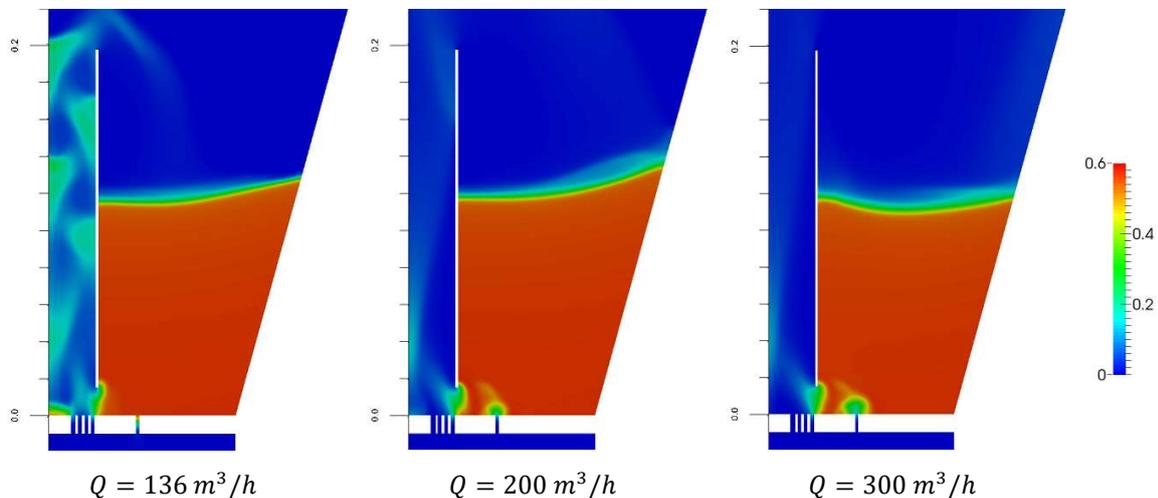


Figura 4.11. Concentração de partículas no interior do tubo de sucção – $t = 10\text{ s}$.

A Figura 4.12 apresenta os vetores do campo de velocidades das partículas. Como seria de esperar, a velocidade das partículas é tanto maior, quanto maior for o caudal de ar insuflado. De salientar que, para $136\text{ m}^3/\text{h}$ de caudal de ar insuflado, verificou-se uma zona onde ocorre recirculação, responsável pela deposição das partículas verificada na Figura 4.11.

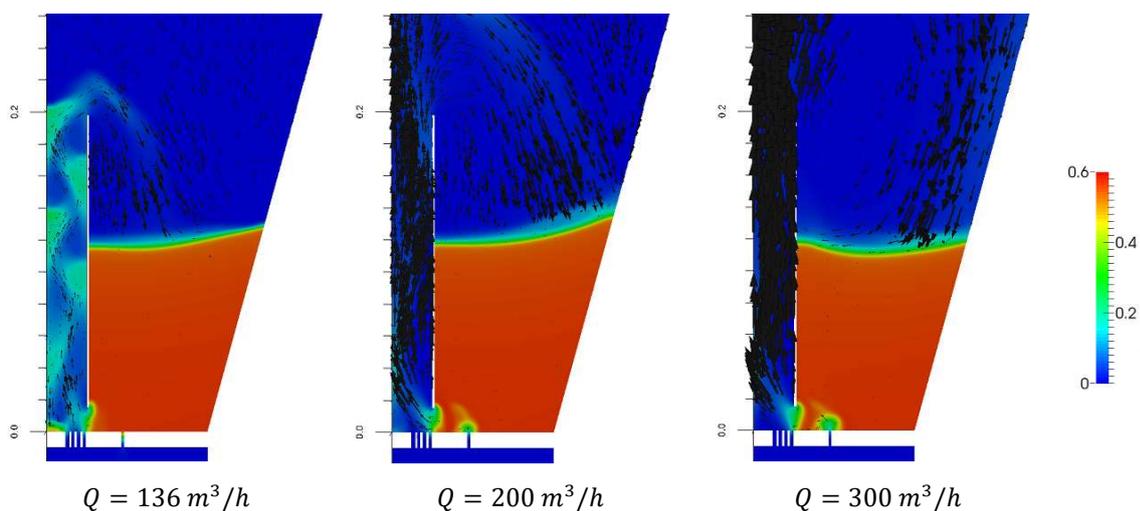


Figura 4.12. Vetores da velocidade das partículas no interior do tubo de sucção – $t = 10\text{ s}$.

A Figura 4.13 apresenta a posição das linhas de prova, através das quais se registou a concentração volumétrica média de partículas e a componente vertical da sua velocidade, entre 2 e 10 segundos de simulação.

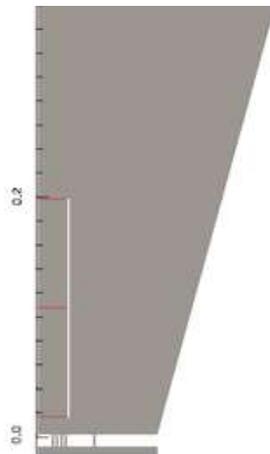


Figura 4.13. Posição das linhas de amostragem – situação B.

A Figura 4.14 apresenta a concentração volumétrica média temporal ($t = 2\text{ s}$ a $t = 10\text{ s}$) das partículas ao longo do tempo, para as duas malhas testadas e os três caudais volúmicos. As linhas a traço interrompido representam os testes realizados para malha 1), ao passo que as linhas a cheio representam os testes com a malha 2). Por sua vez, as cores preta, azul e verde representam os testes realizados para os caudais de $136\text{ m}^3/\text{h}$, $200\text{ m}^3/\text{h}$ e $300\text{ m}^3/\text{h}$, respetivamente. Constatou-se assim que existe influência da malha nos resultados obtidos. Em todos os caudais verificou-se uma diminuição da concentração média de partículas ao longo do tubo de sucção. Adicionalmente, verificou-se que quanto maior for o caudal, menor é a variação dos resultados entre as malhas. No entanto, identifica-se a necessidade de realizar testes com a malha 3) (mais refinada), por forma a avaliar a dependência dos resultados entre as malhas 2) e 3). Os respetivos desvios padrão relativamente às médias apresentadas ao longo do trabalho podem ser consultados no Apêndice B.

De uma forma geral, a Figura 4.14 vem reforçar a ideia de que as concentrações volumétricas de partículas, para os dois caudais mais elevados, se mantêm relativamente idênticas no interior do tudo de sucção.

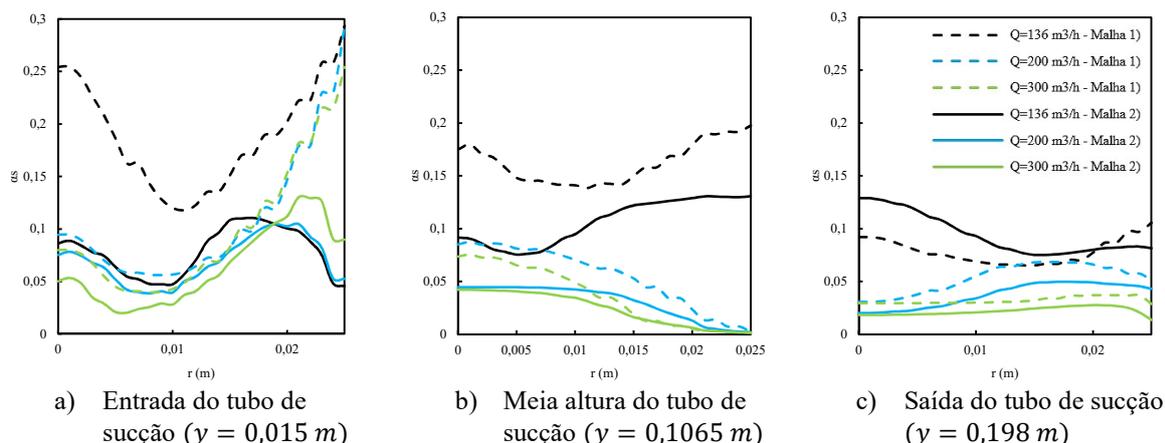


Figura 4.14. Concentração volumétrica média (entre $t = 2 \text{ s}$ a $t = 10 \text{ s}$) de partículas no interior do tubo de sucção, para as duas malhas testadas e os três caudais volúmicos.

A Figura 4.15 apresenta a evolução da concentração volumétrica média (entre $t = 2 \text{ s}$ a $t = 10 \text{ s}$) de partículas ao longo do eixo do reator ($r = 0 \text{ m}$). A análise à figura permite aferir qual a altura média do repuxo, para cada um dos caudais. Verificou-se que, para $136 \text{ m}^3/\text{h}$, a altura do repuxo atinge aproximadamente 20 cm, valor próximo do valor da altura da saída do tubo de sucção (19,8 cm). Para $200 \text{ m}^3/\text{h}$, a altura do repuxo atinge aproximadamente 29 cm, ao passo que, para $300 \text{ m}^3/\text{h}$, a altura do repuxo é de cerca de 59 cm. Adicionalmente, verificou-se que o refinamento da malha conduziu a maiores alturas do repuxo, o que evidencia a dependência dos resultados em relação à malha, e a necessidade de testes adicionais com malhas mais refinadas, como por exemplo a malha 3).

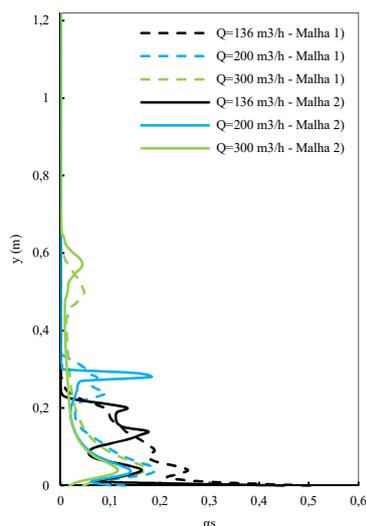


Figura 4.15. Concentração volumétrica média (entre $t = 2 \text{ s}$ a $t = 10 \text{ s}$) de partículas no eixo do reator ($r = 0 \text{ m}$), para as duas malhas testadas e os três caudais volúmicos.

A Figura 4.16 apresenta a evolução da altura do repuxo, em função do caudal.

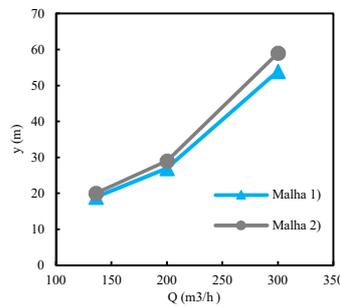


Figura 4.16. Evolução da altura (y) do repuxo em função do caudal volumétrico de ar insuflado (Q).

No que concerne ao perfil da velocidade ascendente média das partículas (Figura 4.17), a influência da malha não é tão acentuada, como acontece para a concentração volumétrica. Na Figura 4.17 a), verificou-se a existência de uma zona onde a velocidade toma valores negativos, provocando o movimento descendente e conseqüente deposição das partículas na zona do *spray* atomizador ($y = 0\text{ m}$; $r = 0\text{ m}$). A avaliação preliminar, via Figura 4.11, mencionada na subsecção 42, é agora corroborada.

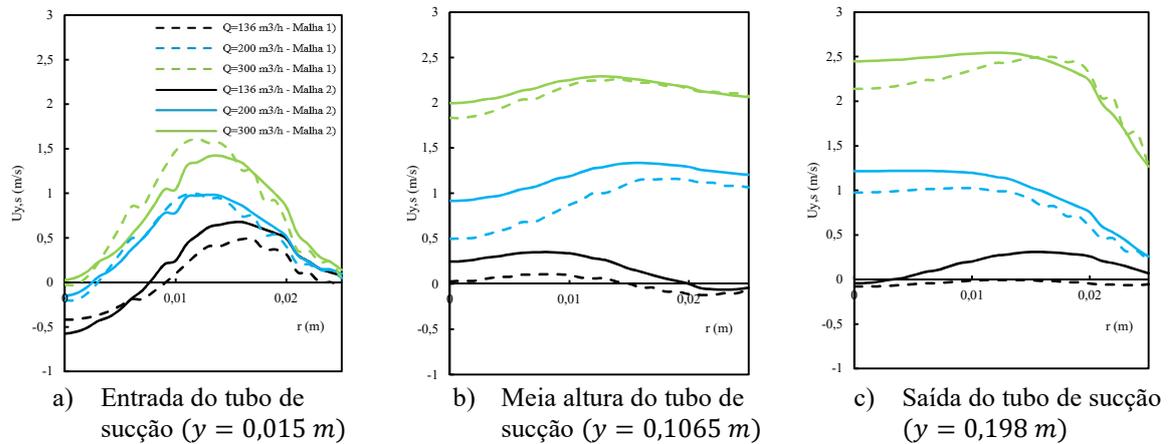


Figura 4.17. Componente vertical média da velocidade das partículas no interior do tubo de sucção, para duas malhas testadas e três caudais volumétricos.

5. CONCLUSÕES

O presente trabalho teve como objetivo o estudo computacional de um leito fluidizado do tipo “Wurster”, carregado de partículas de cera de carnaúba, com recurso ao *software* de acesso sem restrições OpenFOAM®.

Foram realizadas simulações para duas situações: (i) sem partículas e (ii) com partículas. Para ambas as situações, foi estudado o efeito do caudal volúmico de ar insuflado, tendo-se testado caudais iguais a 136 m³/h, 200 m³/h e 300 m³/h.

Na situação sem partículas, foi registada a componente vertical do perfil de velocidade no interior do reator – aquela de maior importância. Adicionalmente, realizaram-se testes de independência de malha, com três malhas distintas, por forma a aferir a sensibilidade dos resultados em relação àquele parâmetro.

Da análise de resultados, concluiu-se que o escoamento é favorável ao movimento recirculatório das partículas, característico do leito fluidizado do tipo “Wurster”. Relativamente à malha, verificou-se que a Malha 2), com 64463 células, é aquela cujo compromisso qualidade-custo parece ser satisfeito.

Na situação com partículas, foi realizada, com sucesso, uma validação do *solver twoPhaseEulerFoam*. Para a validação recorreu-se a resultados disponíveis na literatura, atendendo a que não foi possível obter resultados experimentais, em tempo útil, no leito instalado na UNICAMP.

Realizaram-se vários testes de independência de malha, com duas malhas distintas.

Da análise de resultados, concluiu-se que:

- O caudal de 136 m³/h não promove as condições necessárias à fluidização, pois não assegura a saída das partículas do interior do tubo de sucção;
- Para 200 m³/h e 300 m³/h de ar insuflado, os resultados mostraram-se idênticos para as concentrações volumétricas das partículas no interior do tubo de sucção;

- Para 136 m³/h e 200 m³/h, verificou-se a existência de deposição de partículas no local do *spray* atomizador;
- O caudal de 300 m³/h apresentou maior potencial de secagem do recobrimento, dado que a altura/tempo de queda é superior ao dos outros dois caudais;
- Os testes de independência de malha demonstraram a necessidade da realização de testes adicionais, nomeadamente para a Malha 3), que, por razões de calendário, não foi possível concluir no presente trabalho.

5.1. Propostas para trabalhos futuros

O estudo do leito fluidizado não se esgota, de maneira alguma, no presente trabalho. Como tal, apresentam-se subsequentemente algumas propostas para trabalhos futuros.

- Avaliação da influência de diversos parâmetros da TCEG tais como, por exemplo, a condição de escorregamento parietal da fase sólida ou o coeficiente de transferência de quantidade de movimento entre fases;
- A simulação da distribuição de temperatura no interior do leito;
- Avaliação da influência dos esquemas numéricos nos resultados finais;
- Testes com malhas mais refinadas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Anslys® (2016). <http://ansys.com/>. Acedido em Julho de 2016.
- Antonyuk, S., Heinrich, S., Tomas, J., Deen, N. G., Van Buijtenen, M. S. & Kuipers, J. A. M. (2010). “Energy absorption during compression and impact of dry elastic-plastic spherical granules”. *Granular Matter*, 12(1), 15–47.
- Bagnold, R. (1954). “Experiments on a gravity-free dispersion of large solid spheres in a Newtonian fluid under shear”. *Royal Society*, 225, 49-63.
- Benzarti, S., Mhiri, H., & Bournot, H. (2012). “Drag models for simulation gas-solid flow in the bubbling fluidized bed of FCC particles”. *International Journal of Chemical, Molecular, Nuclear, Materials and Metallurgical Engineering*, 61(1), 111–116.
- Cammarata, L., Lettieri, P., Micale, G., & Colman, D. (2003). “2D and 3D CFD simulations of bubbling fluidized beds using Eulerian-Eulerian models”. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 1(48), 1-15.
- Cross, J. (1987). “Electrostatics: principles, problems and applications”. *Adam Higler*.
- Ding, J., & Gidaspow, D. (1990). “A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow.” *American Institute of Chemical Engineers*, 36(4), 523–538.
- Du, W., Bao, X., Xu, J., & Wei, W. (2006). “Computational fluid dynamics (CFD) modelling of spouted bed: Influence of frictional stress, maximum packing limit and coefficient of restitution of particles”. *Chemical Engineering Science*, 61(14), 4558–4570.
- Ergun, S. (1952). “Fluid flow through packed columns”. *Chemical Engineering progress*, 48, 89-94.
- Garg, S. & Pritchett, J. (1975). “Dynamics of gas-fluidized beds”. *Applied Physics*, 46(10), 4493.
- Geldart, D. (1973). “Types of gas fluidization”. *Powder Technology*, 7, 285–292.
- Gibilaro, L. (2001). “Fluidization-dynamics”. *Butterworth–Heinemann*.
- Gidaspow, D. (1994). “Multiphase flow and fluidization: Continuum and kinetic theory descriptions”. *Academic Press, Inc*.

- Herzog, N., Schreiber, M., Egbers, C., & Krautz, H. (2012). “A comparative study of different CFD-codes for numerical simulation of gas-solid fluidized bed hydrodynamics”. *Computers and Chemical Engineering*, 39, 41–46.
- Jackson, R. (1963). “The mechanics of fluidized beds”. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, 41.
- Jenkins, J. & Savage, S. (1983). “A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles”. *Fluid Mechanics*, 130, 187-202.
- Johnson, P. & Jackson, R. (1987). “Frictional-collisional constitutive relations for granular materials, with application to plane shearing”. *Fluid Mechanics Journal*, 176, 67-93.
- Karlsson, S., & Rasmuson, A. (2009). “CFD modeling of the “Wurster” bed coater”. *American Institute of Chemical Engineers*, 55(10), 2578-2590.
- Kuipers, J., Duin, K., Beckum, F. & Swaaij, W. (1993). “Computer simulation of the hydrodynamics of a two-dimensional gas-fluidized bed”. *Computers Chemical Engineering*, 17(8), 839-858.
- Kunii, D., & Levenspiel, O. (1991). “Fluidization Engineering” (2.^a ed.). *Butterworth–Heinemann Series in Chemical Engineering*.
- Kuwabara, G. & Kono, K. (1987). “Restitution coefficient in a collision between two spheres”. *Japanese Journal of Applied Physics*, 26(8), 1230-1233.
- Lauder, B. E., & Spalding, D. B. (1974). “The numerical computation of turbulent flows”. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 3, 269–289.
- Liu, Y., & Hinrichsen, O. (2014). “CFD modelling of bubbling fluidized beds using OpenFOAM®: Model validation and comparison of TVD differencing schemes”. *Computers and Chemical Engineering*, 69, 75–88.
- Loha, C., Chattopadhyay, H., & Chatterjee, P. (2012). “Assessment of drag models in simulating bubbling fluidized bed hydrodynamics”. *Chemical Engineering Science*, 75, 400–407.
- Lun, C., Savage, S., Jeffrey, D. & Chepurniy, N. (1984). “Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield”. *Fluid Mechanics Journal*, 140, 223-256.
- Maronga, S. J., & Wnukowski, P. (1997). “Establishing temperature and humidity profiles in fluidized bed particulate coating”. *Powder Technology*, 94(2), 181–185.

- McKeen, T. & Pugsley, T. (2003). “Simulation and experimental validation of a freely bubbling bed of FCC catalyst”. *Powder Technology*, 129, 139–152.
- MFIX (2016). <https://mfix.netl.doe.gov/>. Acedido em Julho de 2016.
- Moukalled, F., Mangani, L. & Darwish, M. (2016). “The finite volume method in computational fluid dynamics”. *Springer*.
- Ogawa, S., Umemura, A. & Oshima, N. (1980). “On the equations of fully fluidized granular materials”. *Applied Mathematics and Physics*, 31, 483-493.
- Oliveira, L. A. & Lopes, A. G. (2012). “Mecânica dos fluidos” (4.ª ed.). *LIDEL*.
- OpenFOAM Foundation (2014). “OpenFOAM user guide”. <http://cfd.direct/openfoam/user-guide/standard-solvers/#x13-920003.5>
- OpenFOAM® (2016). <http://openfoam.org/> . Acedido em Julho de 2016.
- Patankar, S. (1980). “Numerical heat transfer and fluid flow”. *Hemisphere Publishing Corporation*.
- Ribeiro, L. F. V., Silva, V. M. & Soares, A. S. P. (2013). “Investigation of phase change material encapsulation by complex coacervation”. *Journal of Colloid Science and Biotecnology*, 2, 78-85.
- Sau, D. & Biswal, K. (2011). “Computational fluid dynamics and experimental study of the hydrodynamics of a gas – solid tapered fluidized bed”. *Applied Mathematical Modelling*, 35(5), 2265–2278.
- Savage, S. B. (1983). “Granular flows at high shear rates”. Em “Theory of dispersed multiphase flow”, Ed. R. E. Meyer. *Academic Press*, 339-358.
- Sharma, A., Tyagi, V. V., Chen, C. R. & Buddhi, D. (2009). “Review on thermal energy storage with phase change materials and applications”. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 13, 318–345.
- Šibanc, R., Srčić, S., & Dreu, R. (2013). “Numerical simulation of two-phase flow in a “Wurster” coating chamber and comparison with experimental results”. *Chemical Engineering Science*, 99, 225–237.
- Šibanc, R., Zun, I. & Dreu, R. (2016). “Measurement of particle concentration in a “Wurster” coater draft tube using light attenuation”. *Chemical Engineering Research and Design*, 110, 20-31.
- Soo, S. (1967). “Fluid dynamics of multiphase system”. *Blaisdell, Waltham, MA*.

- Syamlal, M. & O'Brien, T. (1989). "Computer simulation of bubbles in a fluidized bed". *American Institute of Chemical Engineers*, 85, 22-31.
- Taghipour, F., Ellis, N., & Wong, C. (2005). "Experimental and computational study of gas – solid fluidized bed hydrodynamics". *Chemical Engineering Science*, 60, 6857–6867.
- Versteeg, H. & Malalasekera, W. (1995). "An introduction to computational fluid Dynamics – The finite volume method". *Longman Scientific & Technical*.
- Wang, H., Qiu, G., Ye, J., & Yang, W. (2016). "Experimental study and modelling on gas-solid flow in a lab-scale fluidised bed with "Wurster" tube". *Powder Technology*, 1–14.
- Wen, C. & Yu, Y. (1966). "Mechanics of fluidization". *Chemical Engineering Progress*, 62, 100-111.
- Yakhot, V., Orszag, S. A., Thangam, S., Gatski, T. B. & Speziale, C. G. (1992). "Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique". *Physics of Fluids*, 4(7), 1510–1520.
- Yang, N., Wang, W., Ge, W. & Li, J. (2003). "CFD simulation of concurrent-up gas–solid flow in circulating fluidized bed with structure-dependent drag coefficient". *Chemical Engineering Journal*, 96, 71–80.

APÊNDICE A – EFEITO DO COEFICIENTE DE RESTITUIÇÃO

O coeficiente de restituição é um parâmetro característico das partículas que afeta as relações constitutivas da fase sólida e, conseqüentemente, a conservação de quantidade de movimento. Como tal, trata-se de um parâmetro de suma importância no comportamento hidrodinâmico do leito. Nesta secção, pretende-se quantificar a sua influência nos resultados.

As simulações foram conduzidas para a Malha 2) (Figura 3.7), fazendo-se variar o coeficiente de restituição e_s .

A Figura A.1 apresenta a concentração volumétrica média de partículas, para (a) a entrada ($y = 0,015\text{ m}$), (b) a meia altura ($y = 0,1065\text{ m}$) e (c) à saída do tubo de sucção ($y = 0,198\text{ m}$).

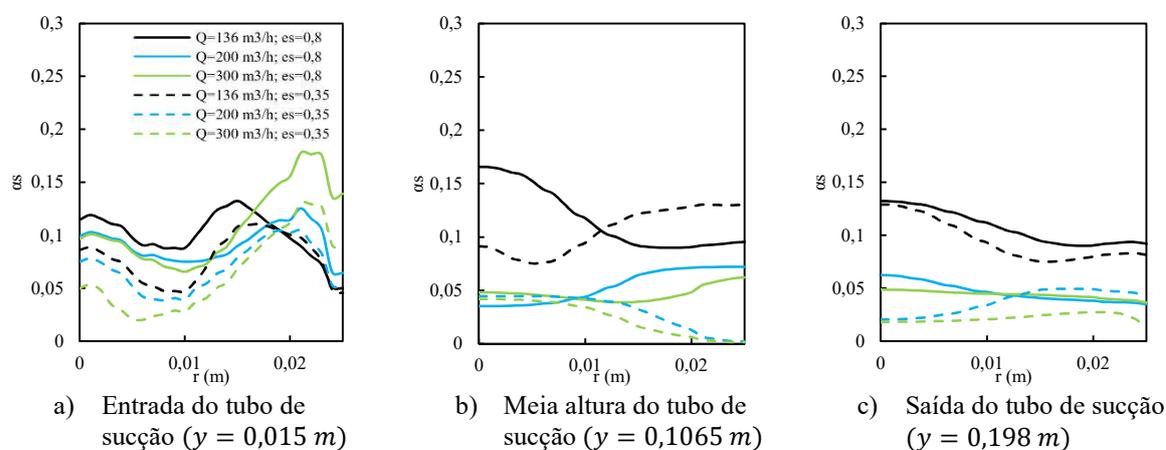


Figura A.1. Concentração volumétrica média de partículas no interior do tubo de sucção, para duas malhas testadas e três caudais volúmicos – $e_s = 0,8$.

A análise da Figura A.1 permite constatar de que forma o coeficiente de restituição afeta os resultados finais.

Nas zonas de entrada e saída do tubo de sucção, verificou-se que o aumento de e_s conduz ao aumento da concentração média de partículas.

Na zona a meia altura do tubo de sucção, é notório que o aumento de e_s influencia os resultados de forma dependente do caudal de ar insuflado: (i) para $136\text{ m}^3/\text{h}$, verificou-se um aumento da concentração média de partículas na zona interior e uma

diminuição junto às paredes do tubo de sucção; (ii) para 200 m³/h e 300 m³/h, verificou-se um aumento da concentração média de partículas significativo junto à parede do tubo de sucção ($r > 0,01 m$).

A Figura A.2 apresenta a concentração média de partículas ao longo do eixo vertical do reator. Aqui, verificou-se que, para 136 m³/h de ar insuflado, o aumento de e_s não alterara significativamente os resultados. Todavia, para 200 m³/h e 300 m³/h, verifica-se uma diminuição da altura do repuxo, que é tanto mais acentuada quanto maior for o caudal de ar insuflado. A evolução da altura do repuxo é apresentada, em função do caudal volúmico, na Figura A.3.

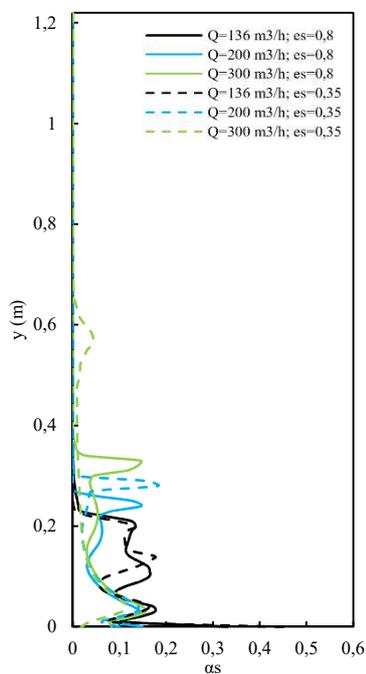


Figura A.2. Concentração volumétrica média de partículas no eixo do reator, para duas malhas testadas e três caudais volúmcicos – $e_s = 0,8$.

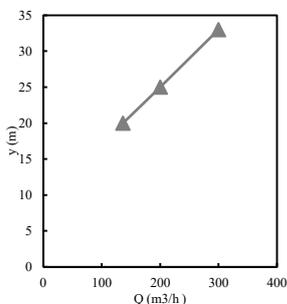


Figura A.3. Evolução da altura (y) do repuxo em função do caudal volúmico de ar insuflado – $e_s = 0,8$.

No que toca à distribuição da componente vertical média da velocidade das partículas, verificou-se que: (i) para a entrada do tubo de sucção, e_s não apresenta influência significativa; (ii) para a zona a meia altura do tubo de sucção, o aumento de e_s conduz à diminuição da velocidade das partículas junto à parede; (iii) à saída do tubo de sucção, o aumento de e_s torna-se mais significativo para 300 m³/h, diminuindo a velocidade ascendente das partículas de forma significativa. A constatação (iii) corrobora a análise feita à Figura A.2, onde se verifica uma franca diminuição da altura do repuxo, para um caudal de 300 m³/h.

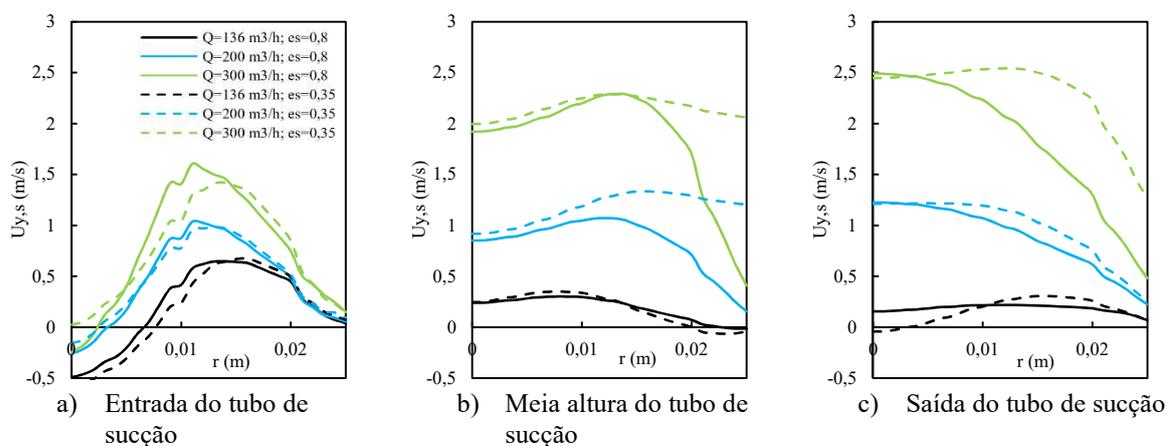


Figura A.4. Componente vertical média da velocidade das partículas no interior do tubo de sucção, para duas malhas testadas e três caudais volúmicos – $e_s = 0,8$.

Podemos então afirmar-se que, com base nos resultados obtidos, o caudal ideal para a fluidização é dependente do coeficiente de restituição. Para $e_s = 0,35$, o caudal de 300 m³/h é aquele que promove melhores condições à fluidização e secagem. Para $e_s = 0,8$, o caudal de 300 m³/h é também aquele com melhores condições à fluidização, ainda que com menores diferenças face ao caudal de 200 m³/h. Por sua vez, o caudal de 136 m³/h não promove as condições necessárias à fluidização, pois não assegura a saída contínua das partículas do interior do tubo de sucção (Figura A.5).

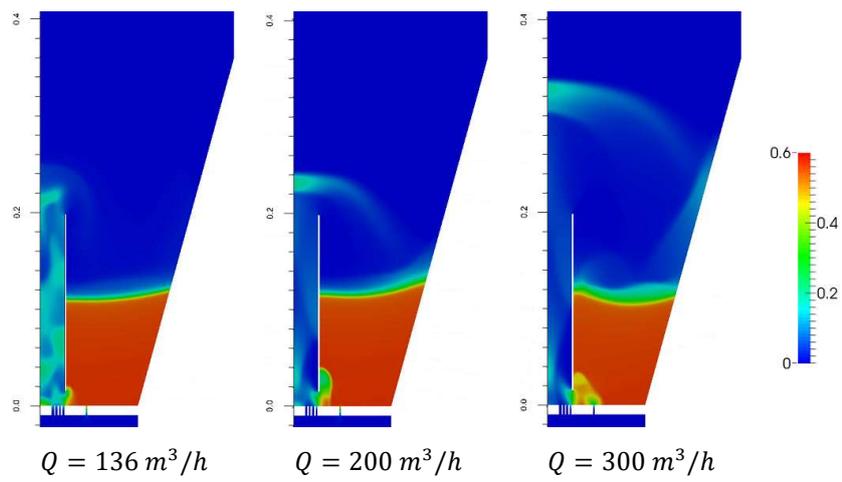


Figura A.5. Concentração de partículas no interior do tubo de sucção – $e_s = 0,8$; $t = 10 \text{ s}$.

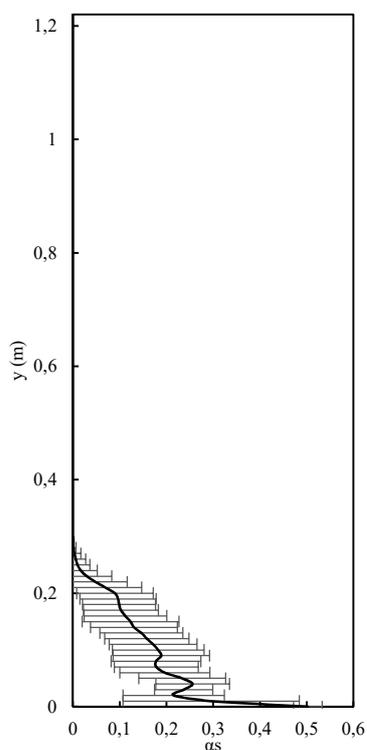
APÊNDICE B – DESVIO PADRÃO

Na presente secção, fornecem-se os valores das médias temporais (entre $t = 2\text{ s}$ e $t = 10\text{ s}$), apresentadas ao longo do trabalho, com os correspondentes desvios padrão.

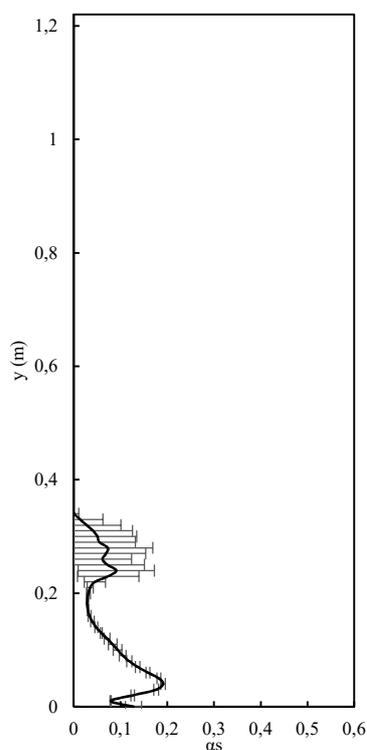
Malha 1)

Fração volumétrica de partículas

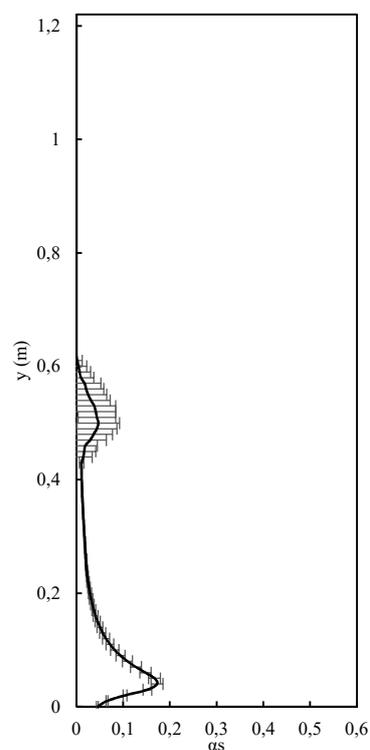
Eixo do reator ($r = 0\text{ m}$)



$Q = 136\text{ m}^3/\text{h}; e = 0,35$

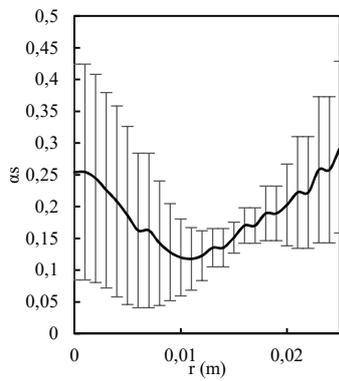


$Q = 200\text{ m}^3/\text{h}; e = 0,35$

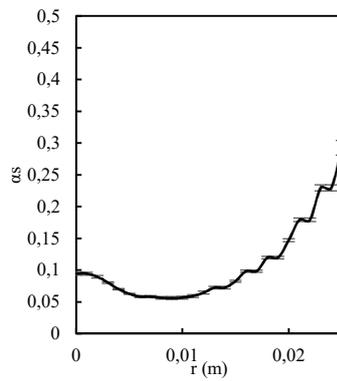


$Q = 300\text{ m}^3/\text{h}; e = 0,35$

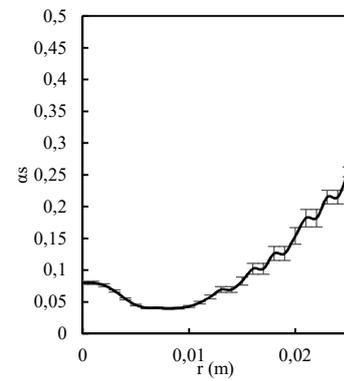
Entrada do tubo de sucção ($y = 0,015 \text{ m}$)



$Q = 136 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

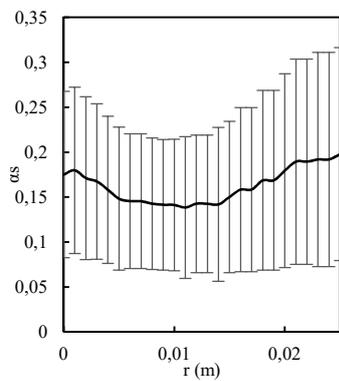


$Q = 200 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

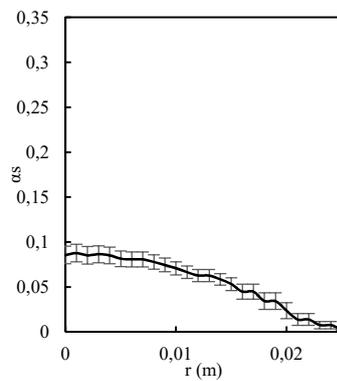


$Q = 300 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

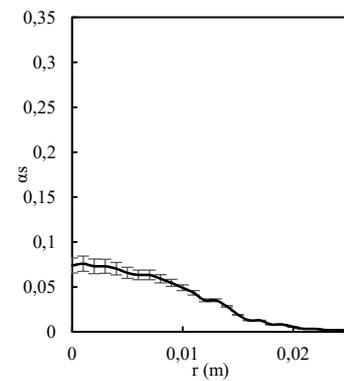
Meia altura do tubo de sucção ($y = 0,1065 \text{ m}$)



$Q = 136 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

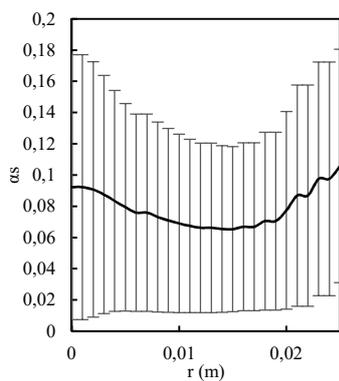


$Q = 200 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

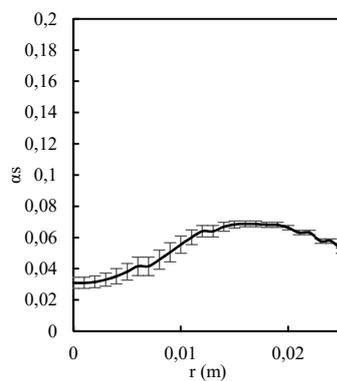


$Q = 300 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

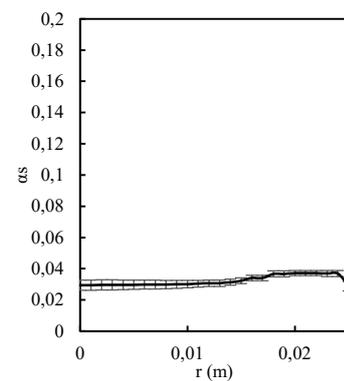
Saída do tubo de sucção ($y = 0,198 \text{ m}$)



$Q = 136 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$



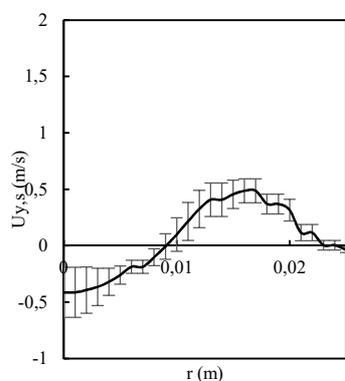
$Q = 200 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$



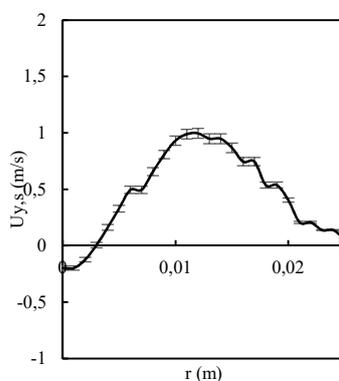
$Q = 300 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

Componente vertical da velocidade das partículas

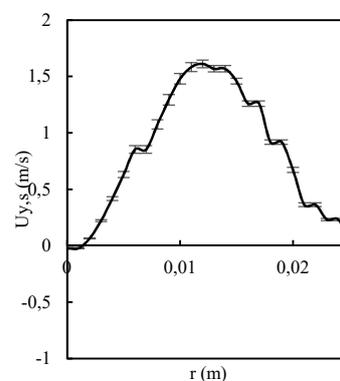
Entrada do tubo de sucção ($y = 0,015 \text{ m}$)



$Q = 136 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

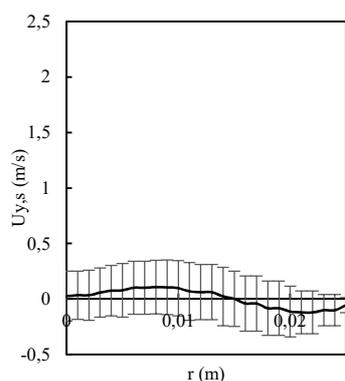


$Q = 200 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

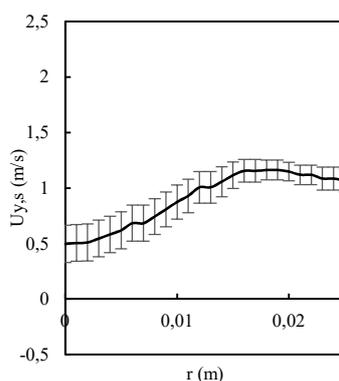


$Q = 300 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

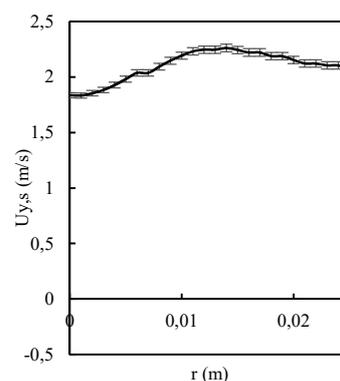
Meia altura do tubo de sucção ($y = 0,1065 \text{ m}$)



$Q = 136 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

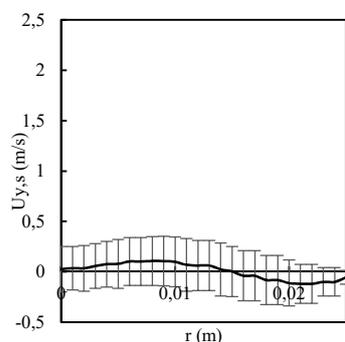


$Q = 200 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

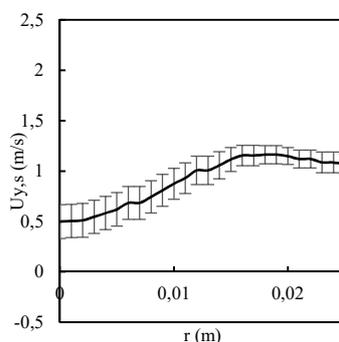


$Q = 300 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

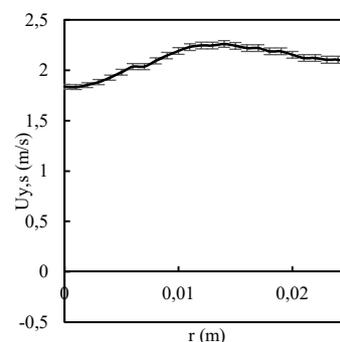
Saída do tubo de sucção ($y = 0,198 \text{ m}$)



$Q = 136 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$



$Q = 200 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

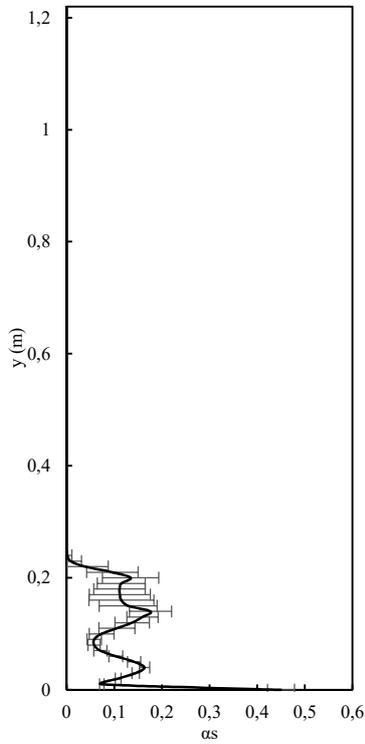


$Q = 300 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

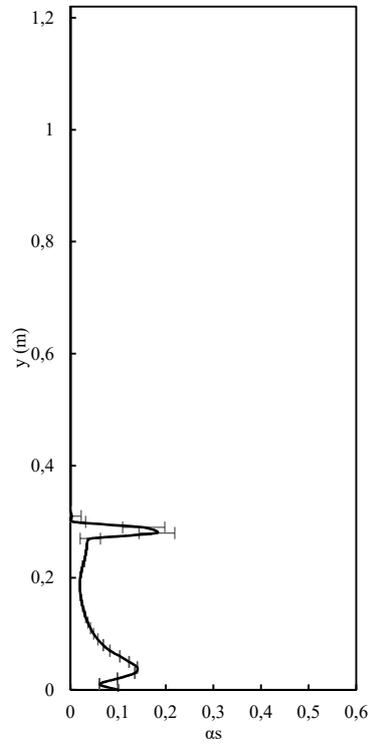
Malha 2)

Fração volumétrica de partículas

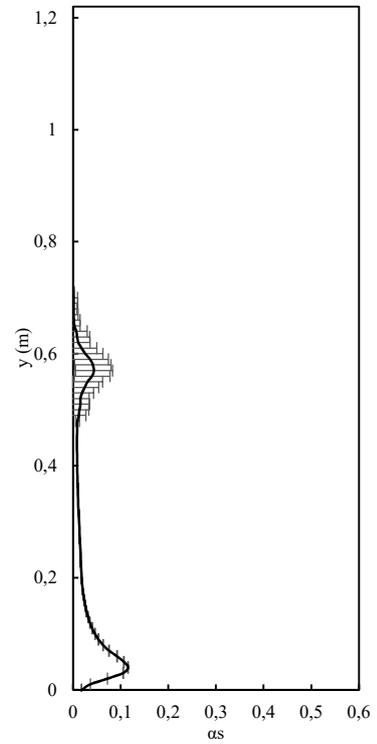
Eixo do reator ($r = 0\text{ m}$)



$Q = 136\text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

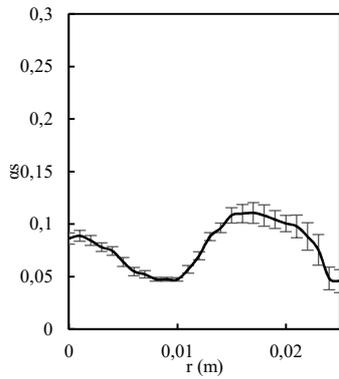


$Q = 200\text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

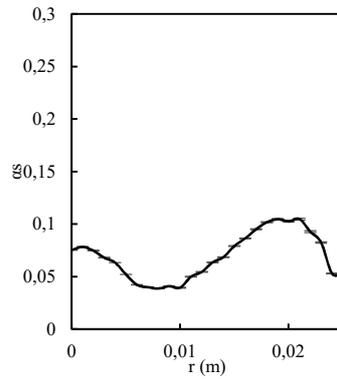


$Q = 300\text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

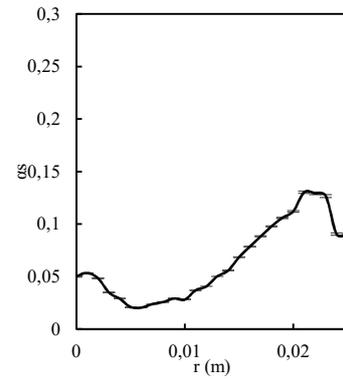
Entrada do tubo de sucção ($y = 0,015 \text{ m}$)



$Q = 136 \text{ m}^3/h; e_s = 0,35$

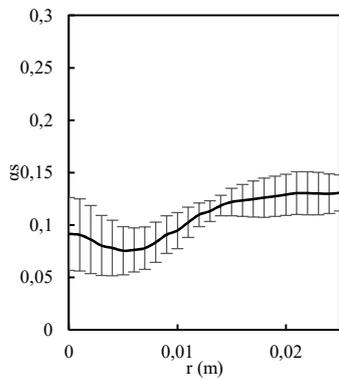


$Q = 200 \text{ m}^3/h; e_s = 0,35$

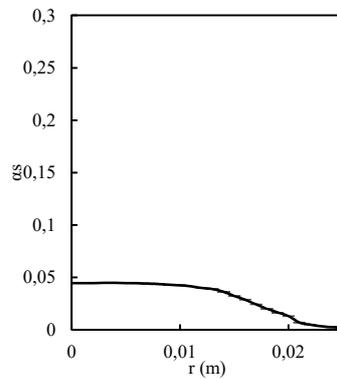


$Q = 300 \text{ m}^3/h; e_s = 0,35$

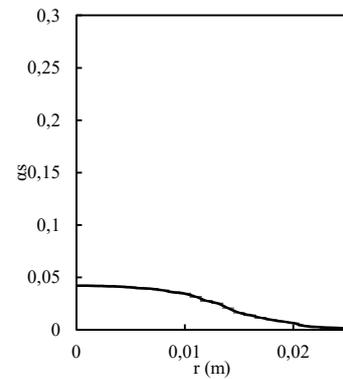
Meia altura do tubo de sucção ($y = 0,1065 \text{ m}$)



$Q = 136 \text{ m}^3/h; e_s = 0,35$

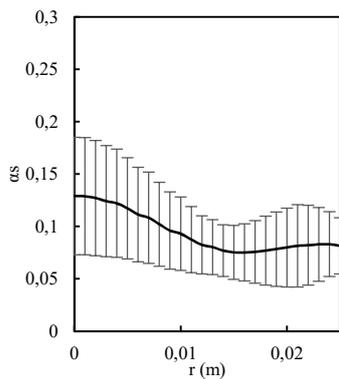


$Q = 200 \text{ m}^3/h; e_s = 0,35$

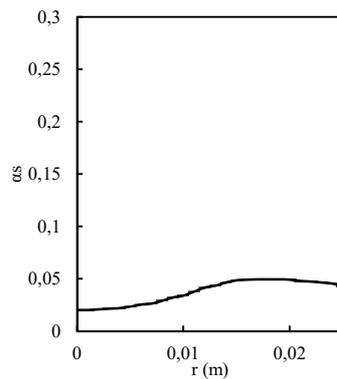


$Q = 300 \text{ m}^3/h; e_s = 0,35$

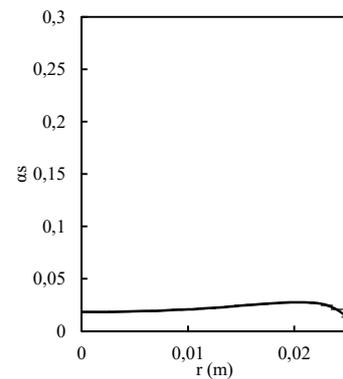
Saída do tubo de sucção ($y = 0,198 \text{ m}$)



$Q = 136 \text{ m}^3/h; e_s = 0,35$



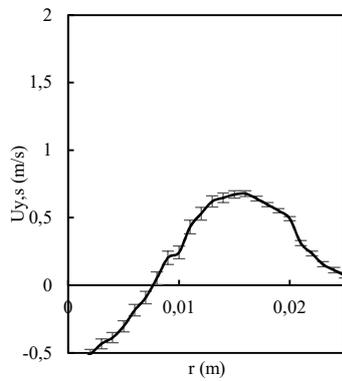
$Q = 200 \text{ m}^3/h; e_s = 0,35$



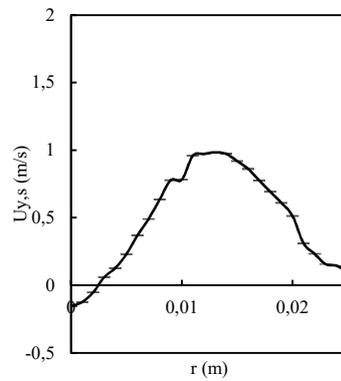
$Q = 300 \text{ m}^3/h; e_s = 0,35$

Componente vertical da velocidade das partículas

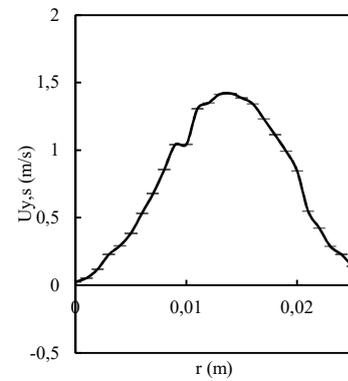
Entrada do tubo de sucção ($y = 0,015 \text{ m}$)



$Q = 136 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

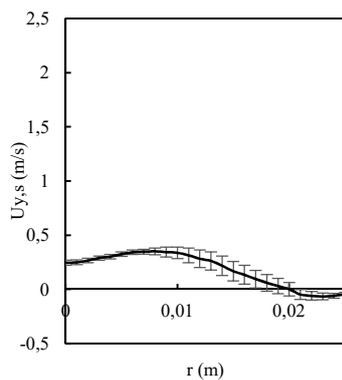


$Q = 200 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

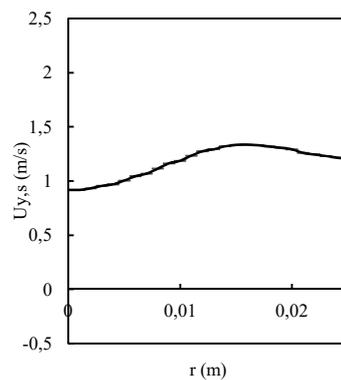


$Q = 300 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

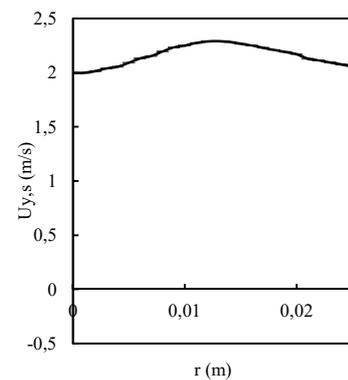
Meia altura do tubo de sucção ($y = 0,1065 \text{ m}$)



$Q = 136 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

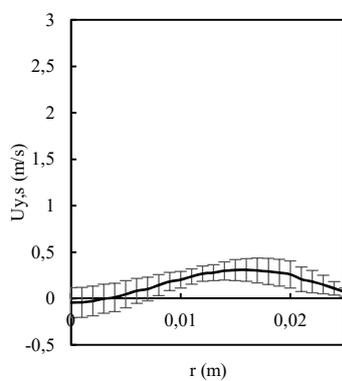


$Q = 200 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

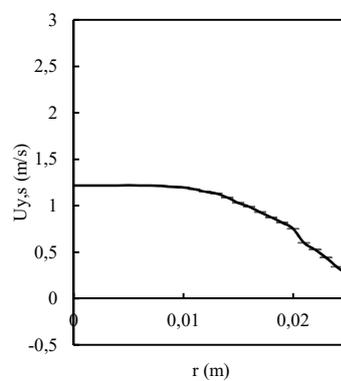


$Q = 300 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

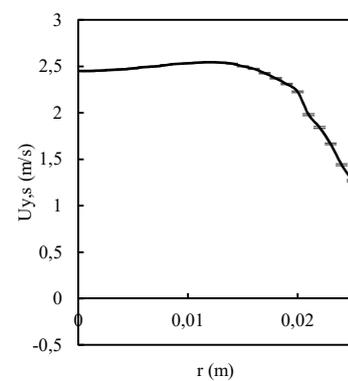
Saída do tubo de sucção ($y = 0,198 \text{ m}$)



$Q = 136 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$



$Q = 200 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

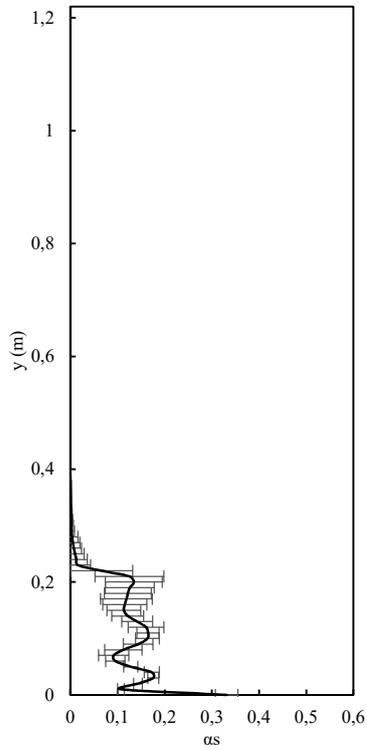


$Q = 300 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,35$

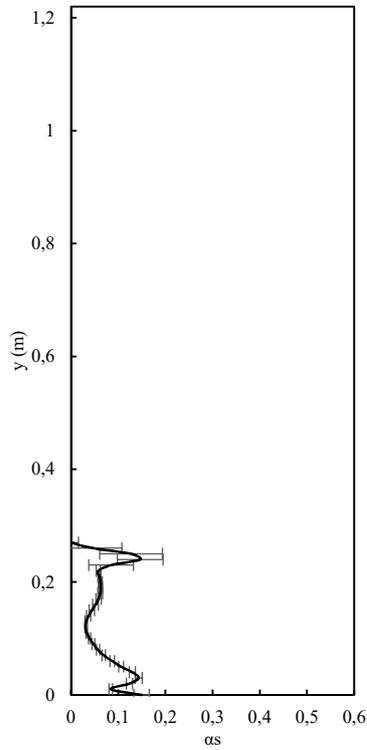
Malha 2)

Fração volumétrica de partículas

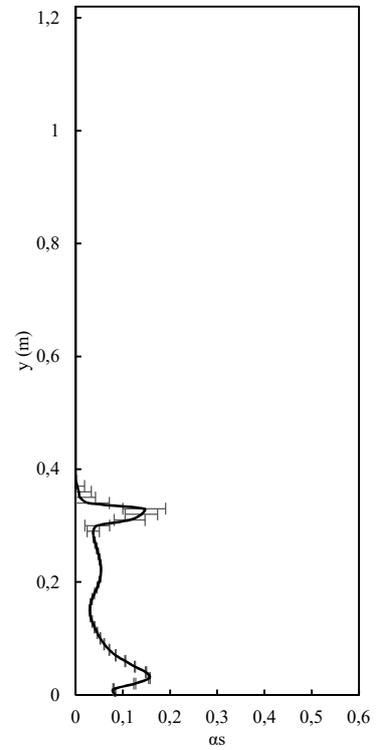
Eixo do reator ($r = 0\text{ m}$)



$Q = 136\text{ m}^3/h; e_s = 0,8$

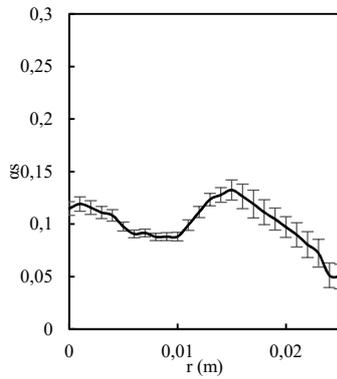


$Q = 200\text{ m}^3/h; e_s = 0,8$

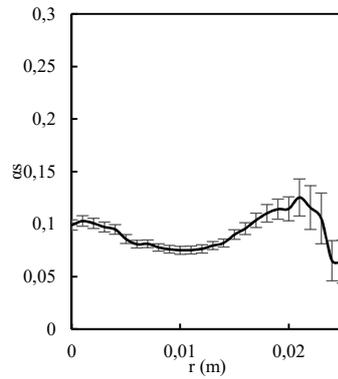


$Q = 300\text{ m}^3/h; e_s = 0,8$

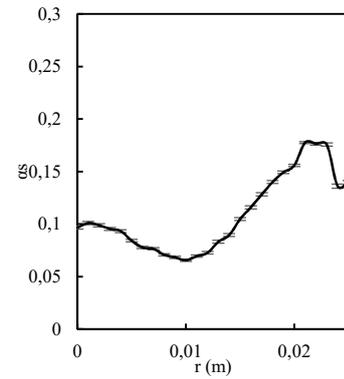
Entrada do tubo de sucção ($y = 0,015 \text{ m}$)



$Q = 136 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,8$

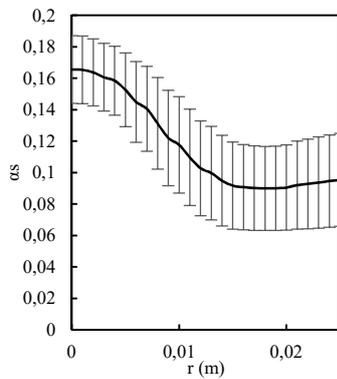


$Q = 200 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,8$

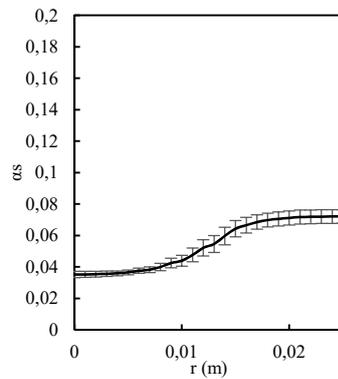


$Q = 300 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,8$

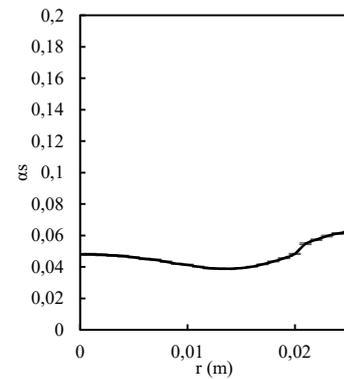
Meia altura do tubo de sucção ($y = 0,1065 \text{ m}$)



$Q = 136 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,8$

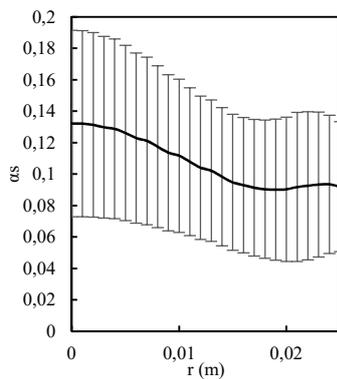


$Q = 200 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,8$

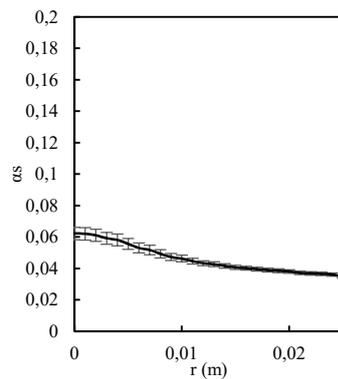


$Q = 300 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,8$

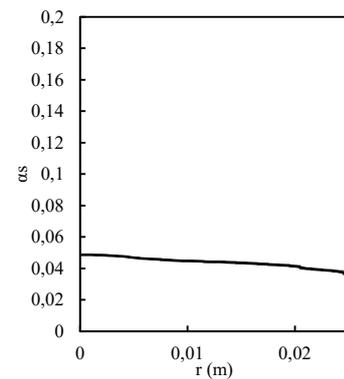
Saída do tubo de sucção ($y = 0,198 \text{ m}$)



$Q = 136 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,8$



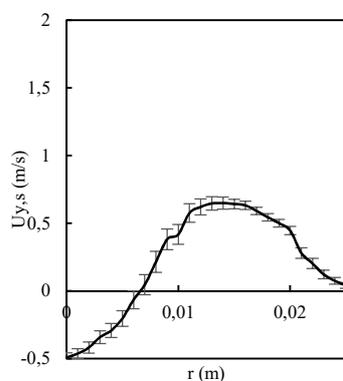
$Q = 200 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,8$



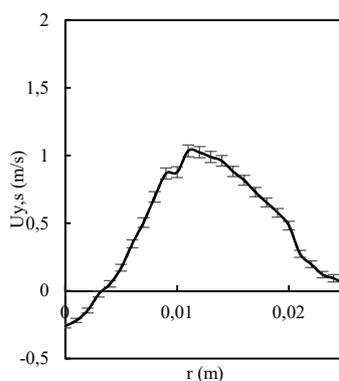
$Q = 300 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,8$

Componente vertical da velocidade das partículas

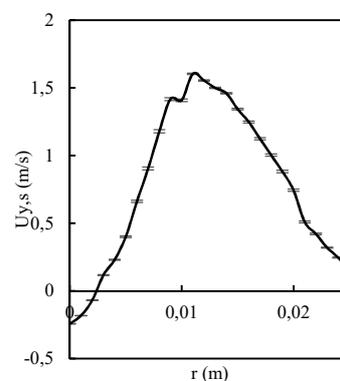
Entrada do tubo de sucção ($y = 0,015 \text{ m}$)



$Q = 136 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,8$

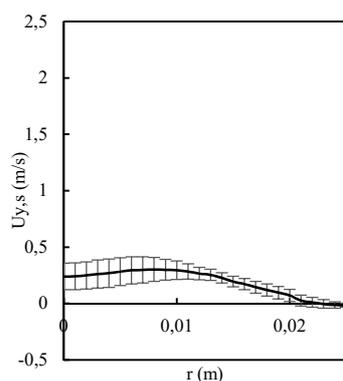


$Q = 200 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,8$

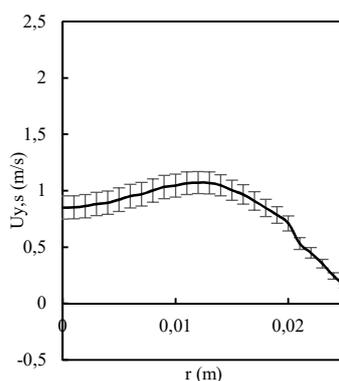


$Q = 300 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,8$

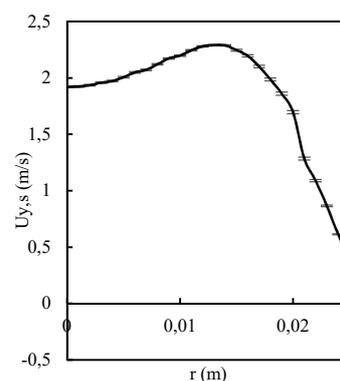
Meia altura do tubo de sucção ($y = 0,1065 \text{ m}$)



$Q = 136 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,8$

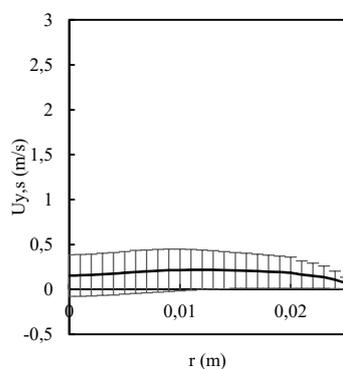


$Q = 200 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,8$

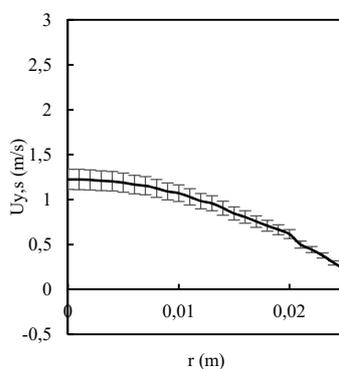


$Q = 300 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,8$

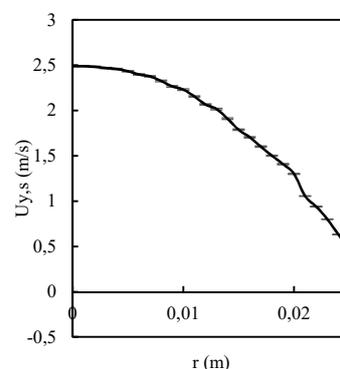
Saída do tubo de sucção ($y = 0,198 \text{ m}$)



$Q = 136 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,8$



$Q = 200 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,8$



$Q = 300 \text{ m}^3/\text{h}; e_s = 0,8$

ÍNDICE REMISSIVO

A

abordagem Euleriana, 6, 17
abordagem Lagrangiana, 6

B

blockMesh, 5, 26, 29
bolsas de ar, 7, 9, 41, 42

C

caudal volúmico, 42, 43
cera de carnaúba, 25
CFD, 4, 11, 20
Classificação de Geldart, 7, 9
coeficiente de polimento, 23
coeficiente de restituição, 8, 10, 11, 20, 32
coeficiente de transferência de quantidade de movimento, 8, 9, 10, 11, 18, 19
condutibilidade da energia com origem nas flutuações da velocidade, 20

D

decomposição de Reynolds, 15
dissipação da energia devida às colisões inelásticas, 20
domínio bidimensional, 9, 12, 26
domínio contínuo, 8
domínio tridimensional, 9, 26

E

empacotamento máximo, 10, 20
equação de conservação de massa, 14, 17
equação de conservação de quantidade de movimento, 18, 21
equação diferencial de transporte, 13
equações de Navier-Stokes, 8, 14

F

fase fluida, 2, 6
fase sólida, 2, 6, 8, 9, 10, 12, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 33, 39, 40, 41, 42
fluidização, 1, 2, 6, 7, 17, 18, 32, 39, 42
fluidizado borbulhante, 9
função de distribuição radial, 20, 21

L

lei logarítmica, 16
leito fluidizado, i, 1, 3, 9, 10, 11, 12, 25, 26, 38

M

malha, 29, 30, 37, 39, 40
modelo k- ϵ , 15, 17

O

OpenFOAM, i, 2, 4, 5, 11, 12, 26, 40, 42

P

partículas, 1, 2, 3, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 25, 26, 31, 32, 33, 34, 35, 38, 39, 40, 42, 43
perfil de velocidades, 16
Phase Change Material, 25
placa de distribuição de ar, 11, 27, 28, 42

R

Reynolds, 14, 15, 19, 40
Reynolds-averaged Navier-Stokes, 15

S

simpleFoam, 4
spray atomizador, 28

T

TCEG, 8, 9, 10, 11, 19
temperatura granular, 10, 19, 20
teste de queda livre, 32, 33
tubo de sucção, 3, 11, 28, 42, 43
twoPhaseEulerFoam, 4, 38, 42

V

viscosidade dinâmica, 14, 18, 21, 22
viscosidade volumétrica, 18, 21

W

Wurster, 3, 11, 13, 25, 38, 42

