

**UNIVERSIDADE DO VALE DO RIO DOS SINOS
UNIDADE ACADÊMICA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA
NÍVEL MESTRADO**

ÁLISSON RENAN STOCHERO DA SILVA

**MODELAGEM EXPERIMENTAL E COMPUTACIONAL DEM-CFD DA
FLUIDIZAÇÃO DE PARTÍCULAS GELDART-D COM FORMATO IRREGULAR**

**SÃO LEOPOLDO
2019**

Álison Renan Stochero da Silva

MODELAGEM EXPERIMENTAL E COMPUTACIONAL DEM-CFD DA FLUIDIZAÇÃO
DE PARTÍCULAS GELDART-D COM FORMATO IRREGULAR

Dissertação apresentada como pré-requisito
parcial para a obtenção do título de Mestre em
Engenharia Mecânica, pelo Programa de Pós-
Graduação em Engenharia Mecânica da
UNISINOS

Orientador: Profa. Dra. Flávia S. F. Zinani

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Paulo Roberto Wander – PPGEM/UNISINOS
Profa. Dra. Regina Célia Espinosa Modolo – PPGEM/UNISINOS
Profa. Dra. Adriane Prisco Petry – PROMEC/UFRGS

SÃO LEOPOLDO
2019

S586m Silva, Álisson Renan Stochero da.
Modelagem experimental e computacional DEM-CFD da
fluidização de partículas Geldart-D com formato irregular /
Álisson Renan Stochero da Silva. – 2019.
119 f. : il. ; 30 cm.

Dissertação (mestre) – Universidade do Vale do Rio dos
Sinos, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica,
2019.

“Orientador: Profa. Dra. Flávia S. F. Zinani.”

1. Fluidização. 2. DEM-CFD. 3. escoamento multifásico. 4.
Simulação computacional. 5. Geldart-D. I. Título.

CDU 621

Dedico este trabalho aos meus pais, Luiz Renê Dias da Silva e Cláudia de Fátima Stochero da Silva, pelo apoio incondicional e por sempre acreditarem que este dia chegaria.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer primeiramente à Profa. Flávia, pela excelente orientação, confiança, paciência, empenho e amizade durante a realização deste trabalho.

À UNISINOS pela infraestrutura fornecida.

À ESSS pela parceria e disponibilização do software Rocky DEM.

Aos parceiros da ESSS João Américo Aguirre de Oliveira Jr. e Lucilla Coelho de Almeida, pelo constante suporte ao longo das simulações efetuadas.

Aos membros da banca avaliadora, pelos importantes comentários, sugestões e correções, para aprimoramento do texto da dissertação.

À minha madrinha Márcia pelo auxílio na revisão do texto.

Aos colegas do PPGEM e aos bolsistas de Iniciação Científica pela amizade, momentos de descontração e pela assistência na elaboração de artigos e deste trabalho.

Aos funcionários e laboratoristas pelo apoio durante os testes experimentais.

Por fim, gostaria de agradecer a CAPES, onde o presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

RESUMO

Reatores de leito fluidizado encontram diversas aplicações em processos de conversão termo-energética. A preferência por este tipo de sistema se deve às características de altas taxas de transferência de calor e massa, entre o sólido particulado que compõe o leito e o agente fluidizante. A simulação computacional tridimensional destes sistemas é capaz de fornecer dados locais como campos de velocidade, pressão, temperatura e concentração de espécies químicas, o que não é possível de se obter em modelos zero-dimensionais ou experimentalmente, com a tecnologia hoje disponível. Dentre os modelos computacionais existentes, um dos mais recentes e atrativos, devido à sua precisão, é o que utiliza o acoplamento do Método dos Elementos Discretos (DEM) com a Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD). Nesta abordagem, o movimento da fase granular é computado diretamente pelo DEM, enquanto o fluido é tratado como um meio contínuo, por um modelo CFD. A interação entre as fases fluido e granular é realizada por um algoritmo de acoplamento. Com o objetivo de criar um modelo computacional DEM-CFD para a fluidização de partículas de polipropileno, realizou-se a caracterização física do material particulado, determinando a massa específica real e de carga, o diâmetro médio, a esfericidade, e os ângulos de repouso e de atrito interno (drawdown). As partículas foram classificadas como do tipo Geldart-D, e durante sua fluidização apresentaram comportamento de jorro. Os coeficientes de interação partícula-partícula e partícula-parede, como atrito estático, atrito dinâmico, coeficiente de restituição e resistência ao rolamento, parâmetros de entrada do DEM, foram obtidos via planejamento de experimentos e técnica de otimização. Observou-se que dentre estes parâmetros, o que possui maior efeito sobre os resultados é a resistência ao rolamento. As fluidizações em escala de laboratório forneceram os valores de referência para a velocidade de jorro mínimo, a máxima queda de pressão no leito e a queda de pressão na condição de jorro mínimo. Durante as simulações do reator, foi avaliado o refino de malha computacional, bem como, o refino de parede, utilizando quatro malhas com tamanho da célula, baseado no diâmetro das partículas, na razão de 2x, 3x e 5x, respectivamente. As simulações DEM-CFD da fluidização corroboram com os resultados experimentais, com um erro de 1,88% para U_{jm} , 0,66% para $\Delta P_{MÁX}$ e 0,77% para ΔP_{jm} , sendo uma poderosa ferramenta para estudos desta espécie.

Palavras-chave: Fluidização. DEM-CFD. escoamento multifásico. Simulação computacional. Geldart-D.

ABSTRACT

Fluidized bed reactors find many applications in thermo-energy conversion processes. The preference for this type of system is due to the characteristics of high heat transfer and mass transfer rates between the particulate solid that composes the bed and the fluidizing agent. The three-dimensional computational simulation of these systems is able to provide local data such as velocity, pressure, temperature and chemical species concentration fields, which can not be obtained in zero-dimensional models or experimentally with the technology available today. Among the existing computational models, one of the most recent and attractive, due to its accuracy, is the one that uses the Discrete Element Method (DEM) and Computational Fluid Dynamics (CFD) coupling. In this approach, the motion of the granular phase is computed directly by the DEM, while the fluid is treated as a continuous medium by a CFD model. The interaction between the fluid and granular phases is performed by a coupling algorithm. With the objective of creating a DEM-CFD computational model for the fluidization of polypropylene particles, the physical characterization of the particulate material was carried out, determining the real and bulk mass densities, mean diameter, sphericity and repose and internal friction (drawdown) angles. The polypropylene particles were classified as of the Geldart-D type, and during their fluidization showed spout behavior. The particle-particle and particle-wall interaction coefficients, such as static friction, dynamic friction, restitution coefficient and rolling resistance, DEM input parameters were obtained through experiment planning and optimization technique. It was observed that among these parameters, what has the greatest effect on the results was the rolling resistance. Laboratory scale fluidizations provided reference values for minimum jet velocity, maximum bed pressure drop, and pressure drop in the minimum jet condition. During the simulations of the reactor, the refining of computational mesh was evaluated, as well as the refining of the wall. It was used four kinds of mesh, with the cells size based of particles diameters, for ranges of 2x, 3x and 5x, respectively. The DEM-CFD simulations of fluidization corroborate with the experimental results with an error of 1,88% to U_{jm} , 0,66% to ΔP_{MAX} and 0,77% to ΔP_{MAX} , being a powerful tool for studies of this species.

Key-words: Fluidization. DEM-CFD. Multiphase flow. Computational Simulation. Geldart-D.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 - Tipos de configurações de escoamento de leitos fluidizados.	26
Figura 2.2 - Classificação de partículas de Geldart.	28
Figura 2.3 - Regiões características de um leito de jorro.	30
Figura 2.4 - Tipos mais comuns de distribuidores para leito fluidizado.	31
Figura 2.5 - Modelos de distribuidores tipo placa perfurada.	32
Figura 2.6 - Modelos de distribuidores tipo bocal.	32
Figura 2.7 - Queda de pressão em função da velocidade superficial do fluido.	34
Figura 2.8 - Curva característica da fluidização tipo jorro.	35
Figura 2.9 - Esquematização para determinar o diâmetro de Feret.	39
Figura 2.10 - Representação da esfericidade para uma partícula irregular.	40
Figura 2.11 - Tipos de métodos para determinação do ângulo de repouso estático e dinâmico.	42
Figura 2.12 - Esquematização do ângulo de atrito interno (drawdown).	43
Figura 2.13 - Comparação entre ângulo o ângulo de repouso e o ângulo drawdown.	44
Figura 2.14 - Comparação entre as abordagens Euler-Euler e Euler-Lagrange.	47
Figura 2.15 - Evolução do comportamento das partículas com o tempo durante a fluidização.	48
Figura 2.16 - Análise fluidodinâmica em um leito de jorro de acordo com a intensidade das forças coesivas.	49
Figura 2.17 - Comparação da simulação com a fluidização experimental.	51
Figura 2.18 - Comparação entre as simulações e as fluidizações de bancada.	53
Figura 3.1 - Bancada experimental de fluidização.	54
Figura 3.2 - Leito Fluidizado.	55
Figura 3.3 - Distribuidor tipo placa perfurada.	56
Figura 3.4 - Medidor de pressão diferencial.	57
Figura 3.5 - Módulo de aquisição e registro de dados.	57
Figura 3.6 - Medidor de vazão volumétrica.	57
Figura 3.7 – Partículas de polipropileno.	58
Figura 3.8 - Equipamento tridimensional de análise e medição de imagens da marca Starrett, modelo Galileo AV 300+ automático.	59
Figura 3.9 - Preparação das amostras para análise microscópica.	59
Figura 3.10 - Imagem das partículas tratadas com o software Image-J.	60

Figura 3.11 – Picnômetro empregado na determinação da massa específica real.....	61
Figura 3.12 - Medição da massa das amostras de polipropileno.....	62
Figura 3.13 - Fluidização do leito a vazio.....	63
Figura 3.14 - Análise da colisão entre partículas na abordagem DEM.....	65
Figura 3.15 – Domínio numérico utilizado no acoplamento DEM-CFD.....	71
Figura 3.16 - Algoritmo de acoplamento empregado.....	72
Figura 3.17 - Teste de queda livre numérico.....	74
Figura 3.18 - Teste numérico da perda de carga em um leito fixo.....	74
Figura 3.19 - Aparato experimental do experimento superfície inclinada.....	75
Figura 3.20 - Disposição das partículas sobre a superfície.....	75
Figura 3.21 - Câmera de alta velocidade utilizada para filmagem dos testes.....	76
Figura 3.22 - Teste para determinação do coeficiente de atrito dinâmico partícula-parede.....	77
Figura 3.23 - Equipamento para realização dos testes de ângulo de repouso e ângulo drawdown.	78
Figura 3.24 - Pilha formada durante o teste de ângulo de repouso.....	78
Figura 3.25 - Obtenção do ângulo de atrito interno (drawdown).....	78
Figura 3.26 - Demonstração do procedimento para obtenção dos ângulos de repouso e drawdown.....	79
Figura 3.27 - Equipamento de teste para determinação do coeficiente de restituição partícula- parede.....	79
Figura 3.28 – Simulação dos testes de ângulo de repouso e drawdown no Rocky DEM.....	82
Figura 4.1- Curva de fluidização do polipropileno.....	84
Figura 4.2 - Curva da defluidização do polipropileno.....	85
Figura 4.3 – Valores individuais para velocidade de jorro mínimo e sua queda de pressão....	85
Figura 4.4 – Máxima queda de pressão para as curvas características do polipropileno.....	86
Figura 4.5 – Valores médios encontrados para as curvas características do polipropileno.....	87
Figura 4.6 – Análise de sensibilidade dos parâmetros encontrados via otimização.....	89
Figura 4.7 – Superfície de resposta dos ângulos de repouso e drawdown em função dos parâmetros otimizados.....	90
Figura 4.8 – Malhas empregadas na simulação.....	91
Figura 4.9 – Valores recomendados de <i>Skewness</i> e <i>Orthogonal Quality</i>	92
Figura 4.10 – Curva de fluidização simulada com a malha 2x utilizando refino de parede.....	93
Figura 4.11 – Curva de fluidização simulada com a malha 2x sem refino de parede.....	93
Figura 4.12 – Curva de defluidização simulada com a malha 2x utilizando refino de parede.	94

Figura 4.13 – Curva de defluidização simulada com a malha 2x sem refino de parede.	94
Figura 4.14 – Curva característica de fluidização do polipropileno utilizando a malha 2x com refino de parede.	95
Figura 4.15 – Curva característica de fluidização do polipropileno utilizando a malha 2x sem refino de parede.	96
Figura 4.16 – Curva característica de defluidização do polipropileno utilizando a malha 2x com refino de parede.	97
Figura 4.17 – Curva característica de defluidização do polipropileno utilizando a malha 2x sem refino de parede.	97
Figura 4.18 – Obtenção da velocidade de jorro mínimo utilizando a malha 2x com refino de parede.....	98
Figura 4.19 – Obtenção da velocidade de jorro mínimo utilizando a malha 2x sem refino de parede.....	98
Figura 4.20 – Simulação das curvas características do polipropileno utilizando a malha 2x com refino de parede.	99
Figura 4.21 – Simulação das curvas características do polipropileno utilizando a malha 2x sem refino de parede.	99
Figura 4.22 – Simulação DEM-CFD da curva de fluidização do polipropileno utilizando a malha 3x.	101
Figura 4.23 – Simulação DEM-CFD da curva de defluidização do polipropileno utilizando a malha 3x.	101
Figura 4.24 – Obtenção da velocidade de jorro mínimo utilizando a malha 3x.....	102
Figura 4.25 – Simulação das curvas características do polipropileno utilizando a malha intermediária 3x.....	103
Figura 4.26 – Simulação DEM-CFD da curva de fluidização do polipropileno utilizando malha 5x.....	103
Figura 4.27 – Simulação DEM-CFD da curva de defluidização do polipropileno para a malha 5x.....	104
Figura 4.28 – Obtenção da velocidade de jorro mínimo utilizando a malha 5x.....	104
Figura 4.29 – Simulação das curvas características do polipropileno utilizando a malha grosseira 5x.....	105
Figura 4.30 – Comportamento da velocidade das partículas em função da posição dentro do leito para a malha 2x.....	107

Figura 4.31 – Comportamento da velocidade das partículas em função da posição dentro do leito para a malha 3x.....	107
Figura 4.32 – Comportamento da velocidade das partículas em função da posição dentro do leito para a malha 5x.....	108
Figura 4.33 – Comportamento fluidodinâmico do leito utilizando a malha 2x.....	109
Figura 4.34 – Comportamento fluidodinâmico do leito utilizando a malha 3x.....	110
Figura 4.35 – Comportamento fluidodinâmico do leito utilizando a malha 5x.....	111

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 - Configuração das simulações do ângulo de repouso e drawdown no Rocky DEM.	80
Tabela 3.2 – Combinações dos coeficientes para otimização.	83
Tabela 4.1 - Caracterização das partículas de polipropileno.	88
Tabela 4.2 – Combinações de parâmetros encontradas via otimização.	88
Tabela 4.3 – Análise do refino de malha.	92
Tabela 4.4 – Resultados encontrados para cada malha empregada.	105

LISTA DE SIGLAS

CFD	Computational Fluid Dynamics (Dinâmica dos Fluidos Computacional)
DEM	Discret Element Method (Método dos Elementos Discretos)
DPM	Dense Phase Method (Método de Fase Densa)
FPS	Frames por segundo
PP	Polipropileno
TFM	Two Fluid Model (Modelo Dois Fluidos)
UDF	User Define Functions (Funções Definidas pelo Usuário)

LISTA DE SIMBOLOS

A	Área da seção transversal do leito	[m ²]
Al	Alongamento	[-]
A_p	Área projetada da partícula na direção do escoamento	[m ²]
A_r	Ângulo de repouso	[°]
A_d	Ângulo drawdown	[°]
a_c	Aceleração da partícula	[m/s ²]
C_a	Coefficiente de arrasto	[-]
C_{aE}	Coefficiente de arrasto de Ergun	[-]
$C_{aW\&Y}$	Coefficiente de arrasto de Wen e Yu	[-]
$C_{aH\&G}$	Coefficiente de arrasto de Huilin e Gidaspow	[-]
D	Diâmetro do leito	[m]
E_D	Exatidão do paquímetro de medição	[m]
E_Q	Exatidão do medidor de vazão volumétrica	[%]
$E_{\Delta P}$	Exatidão do medidor de pressão diferencial	[%]
d_{ec}	Diâmetro circunscrito da partícula	[m]
d_{ei}	Diâmetro inscrito da partícula	[m]
\bar{d}_F	Diâmetro de Feret	[m]
d_{FH}	Diâmetro de Feret no sentido horizontal	[m]
d_{FV}	Diâmetro de Feret no sentido vertical	[m]
d_p	Diâmetro médio das partículas	[m]
m_p	Massa de material particulado	[kg]
ΔP	Valor medido da queda de pressão	[mbar]
ΔP_{jm}	Queda de pressão no leito na condição de jorro mínimo	[mbar]
ΔP_{mf}	Queda de pressão no leito na condição de mínima fluidização	[mbar]
ΔP_{max}	Queda de pressão máxima no leito	[mbar]
Δp_{leito}	Queda de pressão real do leito	[mbar]
$\Delta p_{carregado}$	Queda de pressão do leito preenchido	[mbar]
Δp_{vazio}	Queda de pressão do leito a vazio	[mbar]
F_a	Força de arrasto	[N]

F_E	Força de empuxo	[N]
$F_{\nabla P}$	Força devido ao gradiente de pressão	[N]
F_c	Força de contato	[N]
F_N	Força normal	[N]
F_T	Força tangencial	[N]
F_P	Força peso referente a uma partícula	[N]
F_{res}	Força resultante atuando sobre uma partícula	[N]
$F_{f \rightarrow p}$	Força de interação fluido-partícula	[N]
$F_{p \rightarrow f}$	Força de interação partícula-fluido	[N]
g	Aceleração gravitacional	[m/s ²]
H	Altura de retorno de partícula após colisão no teste de queda livre	[m]
H_0	Altura inicial da partícula no teste de queda livre	[m]
H_{mf}	Altura do leito na condição de mínima fluidização	[m]
J_p	Momento de inércia	[kg.m ²]
K_c	Rigidez de carregamento	[N/m]
K_d	Rigidez de descarregamento	[N/m]
$K_{i,j}$	Rigidez da partícula	[N/m]
E_i	Módulo de Young da partícula	[Pa]
L_T	Deslocamento tangencial relativo na colisão de partículas	[m]
M_c	Torque devido as forças de contato	[N.m]
ε_{mf}	Fração de vazios na condição de mínima fluidização	[-]
θ	Ângulo de inclinação	[°]
α_s	Fração volumétrica de sólidos	[-]
α_f	Fração volumétrica de fluido	[-]
φ	Esfericidade das partículas	[-]
μ	Viscosidade dinâmica do fluido	[Pa.s]
ρ_f	Massa específica do fluido	[kg/m ³]
ρ_b	Massa específica de carga das partículas	[kg/m ³]
ρ_{bc}	Massa específica de carga compactada das partículas	[kg/m ³]
ρ_{bs}	Massa específica de carga solta das partículas	[kg/m ³]
ρ_p	Massa específica real das partículas	[kg/m ³]
P_f	Pressão da fase fluida	[Pa]

Q	Vazão volumétrica	[m ³ /s]
Re	Número de Reynolds	[-]
Re_p	Número de Reynolds baseado na velocidade relativa entre fases	[-]
s	Deslocamento da partícula	[m]
t	Tempo	[s]
v	Velocidade superficial do fluido	[m/s]
U_{mf}	Velocidade superficial de mínima fluidização	[m/s]
u_f	Velocidade do fluido	[m/s]
v_p	Velocidade translacional da partícula	[m/s]
V_c	Volume da célula da malha computacional	[m ³]
V_p	Volume ocupado pelas partículas	[m ³]
V_{pc}	Volume de carga compactada de material particulado	[m ³]
V_{ps}	Volume de carga solta de material particulado	[m ³]
ω_p	Velocidade angular da partícula	[rad/s]
β_{pf}	Coefficiente de troca de quantidade de movimento entre fases	[kg/s]
δ	Sobreposição entre as partículas	[m]
ψ	Função de ligação	[-]
Γ_f	Tensor das tensões viscosas	[Pa]
μ_r	Resistência ao rolamento	[-]
μ_{epp}	Coefficiente de atrito estático partícula-partícula	[-]
μ_{dpp}	Coefficiente de atrito dinâmico partícula-partícula	[-]
μ_{epw}	Coefficiente de atrito estático partícula-parede	[-]
μ_{dpw}	Coefficiente de atrito dinâmico partícula-parede	[-]
$C.R_{pp}$	Coefficiente de restituição partícula-partícula	[-]
$C.R_{pw}$	Coefficiente de restituição partícula-parede	[-]
n	Número de medições	[-]
x_i	Medição unitária	[-]
\bar{x}	Média aritmética simples	[-]
σ	Desvio padrão	[-]
σ_m	Desvio padrão do valor médio das medições	[-]
$\sigma_{\Delta P}$	Incerteza de medição da medida da queda de pressão	[mbar]

σ_Q	Incerteza de medição da medida da vazão volumétrica	[mbar]
σ_A	Incerteza de medição da medida da área transversal do leito	[mbar]
σ_D	Incerteza de medição da medida do diâmetro do leito	[mbar]
σ_{jm}	Incerteza da média das medidas da velocidade de jorro mínimo	[m/s]

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	20
1.1 OBJETIVOS.....	22
1.1.1 Objetivo Geral	22
1.1.2 Objetivos Específicos.....	22
1.2 JUSTIFICATIVA	22
1.3 ESTRUTURA DA PESQUISA.....	23
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	25
2.1 FLUIDIZAÇÃO	25
2.1.1 Regimes de Fluidização.....	25
2.1.2 Classificação de Geldart	28
2.1.3 Fluidização Tipo Jorro.....	29
2.1.4 Tipos de Distribuidores.....	31
2.1.5 Fluidodinâmica em Leito Fluidizado.....	33
2.2 CARACTERIZAÇÃO DE PARTÍCULAS.....	36
2.2.1 Massa Específica Real.....	36
2.2.2 Massa Específica de Carga	36
2.2.3 Granulometria	38
2.2.4 Esfericidade.....	39
2.2.5 Ângulo de Repouso.....	40
2.2.6 Ângulo de Drawdown	43
2.3 SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE PROCESSOS DE FLUIDIZAÇÃO	44
2.3.1 Abordagem Euler-Euler	45
2.3.2 Abordagem Euler-Lagrange	46
2.4 ESTADO DA ARTE DE MODELOS DEM-CFD PARA SIMULAÇÃO DE PROCESSOS DE FLUIDIZAÇÃO	48
3 MATERIAIS E MÉTODOS	54
3.1 BANCADA EXPERIMENTAL.....	54
3.1.1 Conjunto Reator Leito fluidizado.....	55
3.1.2 Sistema de Medição, Leitura e Aquisição de Dados.....	56
3.2 CARACTERIZAÇÃO FÍSICA DO MATERIAL PARTICULADO	58
3.2.1 Material Particulado	58
3.2.2 Diâmetro Médio.....	58

3.2.3 Diâmetro de Feret.....	60
3.2.4 Esfericidade.....	61
3.2.5 Massa Específica Real.....	61
3.2.6 Massa Específica de Carga Compactada e Solta.....	61
3.3 METODOLOGIA EXPERIMENTAL.....	62
3.3.1 Determinação da Queda de Pressão a Vazio	62
3.3.2 Determinação das Curvas de Fluidização e Defluidização.....	64
3.4 MODELAGEM MATEMÁTICA	64
3.4.1 Modelagem da Fase Discreta.....	64
3.4.1.1 Forças de Contato	64
3.4.1.1.1 Força de Contato Normal.....	65
3.4.1.1.2 Força de Contato Tangencial.....	66
3.4.1.2 Força de Interação com o Fluido	66
3.4.1.3 Leis de Arrasto.....	67
3.4.2 Modelagem da Fase Fluida.....	68
3.5 METODOLOGIA COMPUTACIONAL.....	69
3.5.1 Solução da Fase Fluida	70
3.5.2 Solução da Fase Sólida.....	70
3.5.3 Domínio Numérico	71
3.5.4 Algoritmo de acoplamento DEM-CFD.....	72
3.6 CALIBRAÇÃO DO MODELO COMPUTACIONAL	73
3.6.1 Teste de Plano Inclinado.....	75
3.6.2 Superfície de Deslizamento.....	76
3.6.3 Ângulo de Repouso e Drawdown	77
3.6.4 Teste de Queda Livre - Experimental	79
3.6.5 Ajuste dos Coeficientes de Interação entre Partículas.....	80
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	84
4.1 CURVAS DE FLUIDIZAÇÃO E DEFLUIDIZAÇÃO EXPERIMENTAIS	84
4.2 CARACTERIZAÇÃO DAS PARTÍCULAS DE POLIPROPILENO.....	87
4.3 ANÁLISE DA QUALIDADE DA MALHA COMPUTACIONAL.....	91
4.4 ANÁLISE DO REFINO DE PAREDE NA MALHA COMPUTACIONAL.....	93
4.5 CURVAS DE FLUIDIZAÇÃO E DEFLUIDIZAÇÃO NUMÉRICAS	100
4.6 COMPORTAMENTO FLUIDODINÂMICO.....	106
5 CONCLUSÕES.....	113

REFERÊNCIAS 115
APÊNDICE A – CÁLCULO DAS INCERTEZAS 119

1 INTRODUÇÃO

O constante crescimento populacional, o aumento das atividades industriais e o acesso a novas tecnologias são as principais causas do incremento da demanda por energia. Conseqüentemente, aumentam as pesquisas por meios de tornar tanto os processos de conversão e uso de energia mais eficientes. Dentre os processos empregados para conversão de energia térmica, está o uso de reatores de leito fluidizado, caracterizados por proporcionarem uma mistura intensa entre um fluido e um sólido particulado, resultando em taxas elevadas de transferência de calor e massa, com uniformidade de temperatura e concentração de fases no interior do leito (CREMASCO, 2014).

O primeiro reator de leito fluidizado do qual se tem documentação foi realizado por Fritz Winkler em 16 de dezembro de 1921, na Alemanha. Em seu experimento, Winkler realizou a gaseificação de carvão em um reator de leito fluidizado, iniciando assim um novo processo denominado fluidização (SQUIRES, 1983 apud BASU, 2006).

A partir de então, a tecnologia de leito fluidizado vem sendo aplicada a diversos processos industriais, tais como operações físicas (troca de calor, solidificação e secagem de materiais, revestimento de objetos, resfriamento e limpeza de gases de combustão e processo de absorção), síntese e reações catalíticas, quebra de hidrocarbonetos, operações químicas (processo de obtenção do anidrido ftálico de naftaleno, decomposição de sulfato e cloreto, oxidação de butano em anidrido maleico e no processo de conversão do metanol para olefinas), combustão e incineração (aplicadas a geração de energia, caldeiras e destino de resíduos sólidos), carbonização e gaseificação, calcinação de partículas e biofluidização, aplicada ao cultivo de microrganismos (KUNII e LEVENSPIEL, 1991 e BASU, 2006).

No decorrer dos anos, o estudo, o desenvolvimento e o projeto de reatores de leitos fluidizados deu-se a partir do empirismo, através de métodos, muitas vezes, limitados. Mais recentemente, vêm sendo empregados modelos de simulação computacional como ferramentas de projeto, capazes de prever e reproduzir com boa exatidão fenômenos físicos e auxiliar na redução de tempo e custo de projeto.

Pode-se considerar que no processo de fluidização há um escoamento multifásico do tipo gás-sólido particulado (ou granular), em que o agente fluidizante é uma fase contínua e o conjunto de partículas sólidas é representada por uma ou mais fases dispersas. Para a modelagem deste tipo de escoamento, podem ser empregados modelos Eulerianos – também chamados modelos de dois fluidos, TFM (two fluid model) – ou modelos Lagrangeanos. No caso de modelos Eulerianos, tanto a fase gás como as fases granulares são consideradas fluidos

que ocupam o domínio como meios contínuos interpenetrantes. No caso de modelos Lagrangeanos, a fase gás é considerada uma fase contínua, enquanto a fase granular é modelada do ponto de vista Lagrangeano, ou seja, partícula a partícula.

Através da modelagem computacional é possível observar, em nível local, o sistema com grande riqueza de detalhes, como os campos de velocidade, pressão, temperatura e concentração de espécies químicas. A obtenção destes dados é praticamente inviável em experimentos de laboratório ou em escala piloto. Além disso, os modelos de simulação reduzem o custo em prototipagem, pois possibilitam a análise paramétrica do efeito de condições de operação e, principalmente, de mudanças na geometria do reator (ALMEIDA, 2018).

A modelagem de escoamentos multifásicos gás-sólido particulado é uma tarefa desafiadora devido à complexidade do comportamento fluidodinâmico de cada uma das fases e das interações entre elas. Em virtude disto, diversos estudos vêm sendo realizados a fim de se aprimorar os modelos computacionais existentes. Um dos métodos que vem sendo desenvolvido, busca resolver com precisão e separadamente os movimentos da fase fluida e da fase granular, bem como, modelar as interações entre as mesmas, a partir da união das técnicas computacionais DEM (Discret Element Method, Método de Elementos Discretos) e CFD (Computational Fluid Dynamics, Fluidodinâmica Computacional).

O método CFD resolve o escoamento do fluido, quantidade de calor e massa transferidas, através da resolução das equações de balanço de massa, quantidade de movimento, energia e espécies. O DEM resolve o movimento do sólido granular. O movimento de cada partícula é determinado, assim como as interações partícula-partícula, partícula-fluido e partícula-superfície, através da resolução de equações de balanço de forças (FONTE et al., 2015). O DEM é um método computacional robusto usado por pesquisadores e engenheiros na análise e otimização de projetos, equipamentos e sistemas de materiais granulares (COETZEE, 2017). A aplicação da modelagem DEM no âmbito industrial é vasta, presente em processos de escoamento e mistura de materiais (Sinnott e Cleary, 2016; Deen et al., 2007), na agricultura (Ding et al., 2018; Zhou, Chen e Sadek, 2014), na triagem de materiais (Elskamp e Kruggel-Emden, 2018), em processos de mineração (A. Grima e Wypych, 2010; Owen e Cleary, 2009), dentre outras aplicações.

No âmbito da conversão energética, o emprego de leitos fluidizados está fortemente atrelado à combustão e gaseificação de biomassas e carvões, os quais geralmente apresentam geometrias irregulares. Além disso, em várias aplicações são utilizadas partículas de diâmetro, relativamente grande, classificadas como tipo Geldart-D (Geldart, 1973). Assim, existe uma

forte motivação para o desenvolvimento de modelos computacionais, capazes de simular os processos de fluidização de sólidos granulares com formas irregulares.

Este trabalho trata do desenvolvimento de um modelo de bancada, de experimentos de calibração de parâmetros e de um modelo computacional de acoplamento DEM-CFD para simulação da fluidização de partículas do tipo Geldart-D de formato irregular.

1.1 OBJETIVOS

1.1.1 Objetivo Geral

O objetivo geral deste trabalho é desenvolver um modelo DEM-CFD, através de uma metodologia de calibração de parâmetros, para simular a fluidização em escala de bancada de partículas de polipropileno do tipo Geldart-D.

1.1.2 Objetivos Específicos

Dentre os objetivos específicos deste trabalho estão:

- Caracterizar o comportamento fluidodinâmico de partículas de polipropileno em uma bancada de fluidização em escala de laboratório;
- Verificar as velocidades características de fluidização;
- Desenvolver experimentos para caracterização do comportamento de partículas quanto à resistência, ao rolamento, aos coeficientes de atrito estático e dinâmico e coeficiente de restituição partícula-parede;
- Construir um modelo de calibração de parâmetros do DEM utilizando planejamento de experimentos;
- Realizar uma análise de sensibilidade dos parâmetros do método DEM: coeficiente de atrito estático, atrito dinâmico e coeficiente de restituição partícula-partícula, e resistência ao rolamento;
- Comparar os resultados do modelo computacional com resultados experimentais de bancada.

1.2 JUSTIFICATIVA

Os reatores de leito fluidizado estão presentes nas mais diversas aplicações industriais, desde o resfriamento e congelamento de materiais na indústria alimentícia, até na combustão e

gaseificação de sólidos-granulares, voltados à geração de energia. Através da modelagem computacional destes sistemas, é possível estudar e avaliar os fenômenos que ocorrem no interior dos reatores com uma grande riqueza de detalhes e informações, muitas vezes inconcebíveis experimentalmente. Os modelos Eulerianos usuais, costumam ser bastante limitados e fornecer resultados imprecisos. Já os modelos Lagrangeanos de uma via, em que a partícula sofre o efeito do fluido, mas o fluido não sente a partícula, são adequados somente para regiões dispersas, ou seja, com baixa concentração de partículas, o que não ocorre em leitos fluidizados.

O DEM é bastante preciso para o cálculo das forças e movimentos das partículas, e existem modelos para geometrias irregulares. No entanto, para modelar a fluidização o DEM não é suficiente, visto que este não modela o escoamento do fluido. Assim, se faz necessária uma técnica de CFD para a modelagem do escoamento do fluido. No acoplamento DEM-CFD, surge ainda a necessidade da modelagem da interação de duas vias entre o fluido e a fase granular. Nesta modelagem, geralmente são necessários parâmetros relativos ao sistema particulado, os quais não são diretamente acessados por métodos convencionais. Várias metodologias vêm sendo propostas na literatura, gerando resultados com diferentes níveis de qualidade e precisão. No caso da fluidização de partículas do tipo Geldart-D, os resultados são bastante escassos.

Neste contexto, é de extrema importância desenvolver metodologias de obtenção de parâmetros, para a modelagem DEM-CFD de um reator de leito fluidizado, composto por um sistema de partículas Geldart-D, e também testar a sensibilidade dos resultados numéricos obtidos, comparando-os com os resultados encontrados em uma bancada de laboratório.

1.3 ESTRUTURA DA PESQUISA

O capítulo 1 da dissertação apresentou a motivação para a pesquisa, os objetivos e sua justificativa.

O capítulo 2 apresenta a revisão bibliográfica, na qual são apresentados conceitos sobre fluidização, caracterização de materiais, processos de simulação numérica de escoamentos multifásicos, bem como, uma síntese do estado da arte.

O capítulo 3 aborda os materiais e métodos empregados para realização deste trabalho. São apresentadas as metodologias experimentais e computacionais, a modelagem matemática e, são mostrados também os procedimentos empregados para calibração das simulações.

No capítulo 4 são apresentados e discutidos os resultados experimentais (calibração dos coeficientes de interação partícula-partícula e partícula-parede do polipropileno e curvas de fluidização/defluidização) e os resultados computacionais obtidos.

Por fim, o capítulo 5 traz as principais observações e conclusões referentes ao desenvolvimento da pesquisa.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Nesta seção, apresenta-se um breve referencial teórico sobre fluidização, destacando os regimes de fluidização e a classificação de Geldart, onde também é abordada a caracterização de partículas, esclarecendo quais características e propriedades que são relevantes em processos de fluidização.

Em seguida, apresenta-se a revisão do estado da arte na simulação numérica de leitos fluidizados, expondo os modelos utilizados para modelagem numérica Euler-Euler (TFM) e Euler-Lagrange (DPM ou DEM), e métodos de acoplamento DEM-CFD para processos de fluidização, com ênfase em processos com partículas do tipo Geldart-D.

2.1 FLUIDIZAÇÃO

A fluidização pode ser descrita como uma operação em que um material no estado sólido, organizado em partículas, adquire um comportamento semelhante ao líquido, resultante da suspensão em um fluido, podendo ser este um gás ou um líquido.

Quando o fluido escoar em baixa velocidade, percolando entre os espaços vazios do material particulado, inicialmente em estado estacionário, sem promover sua suspensão, este leito é dito como fixo. Aumentando a velocidade de escoamento do fluido, ao ponto em que a força de arrasto promovida pelo fluido nas partículas se iguala a força peso das partículas, ocorre a suspensão do sólido particulado, classificando assim, o leito como fluidizado (KUNII e LEVENSPIEL, 1991).

Os leitos fluidizados podem ser caracterizados através da análise de seus regimes de escoamento e das propriedades do material particulado. Em geral, a classificação do regime de escoamento é dada pela análise do comportamento das bolhas e a classificação das partículas, é realizada em função de suas massas específicas e dimensões (FAN e ZHU, 1998 apud ALMEIDA, 2018).

2.1.1 Regimes de Fluidização

Segundo Cremasco (2014), os regimes fluidodinâmicos na fluidização dependem das características físicas da fase particulada, tais como distribuição granulométrica, tamanho médio das partículas, formato e massa específica, e das características da fase fluida, como viscosidade dinâmica e massa específica, e das condições operacionais do leito, como

temperatura e vazão da fase fluida, compactação do material particulado, altura efetiva e diâmetro do leito.

Kunii e Levenspiel (1991), propuseram uma classificação dos regimes de escoamento em leitos fluidizados, analisando o comportamento da interação fluido-partículas, tal qual a formação e desenvolvimento das bolhas de fluido, conforme figura 2.1.

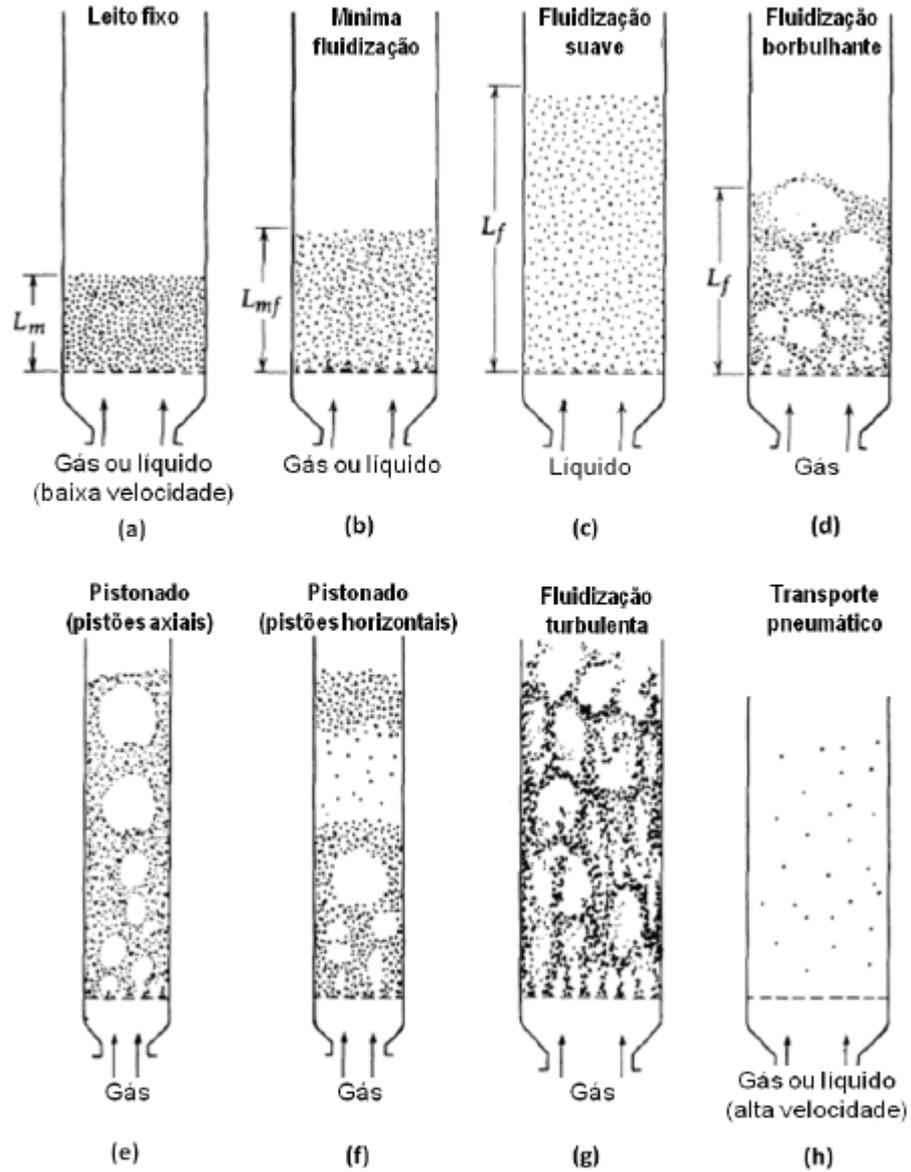


Figura 2.1 - Tipos de configurações de escoamento de leitos fluidizados.

Fonte: Adaptado de Kunii e Levenspiel (1991).

Inicialmente, o leito encontra-se em estado de leito fixo, vide figura 2.1(a), onde o fluido escoa com baixa vazão, através dos espaços vazios existentes entre o material particulado. A partir deste ponto, com um aumento da vazão, partículas sofrem pequenas vibrações e se deslocam verticalmente para cima, tornando o leito expandido.

Com o aumento gradual da vazão de fluido, chega-se a um ponto de estabilidade onde as forças de arrasto, provenientes do fluido, atuando nas partículas, se igualam a força peso exercida pelas partículas, fazendo com que o material particulado fique suspenso dentro do leito, conforme figura 2.1 (b). A velocidade neste ponto de estabilidade é chamada de velocidade de mínima fluidização U_{mf} .

Em fluidizações que utilizam líquido como fluido, ao aumentar a vazão de fluido acima do ponto de mínima fluidização, normalmente ocorre uma fluidização suave com uma expansão progressiva do leito, figura 2.1 (c). Operando em condições normais, instabilidades de escoamento são amortecidas e permanecem pequenas, e não é observado heterogeneidade ou a presença de grandes vazios de líquido no interior do leito.

No entanto, ao utilizar gás como fase fluida, esta configuração tem um comportamento diferente, onde o aumento da vazão acima do ponto de mínima fluidização gera grandes instabilidades, devido as agitações do fluido e a movimentação intensa das partículas, e ocorre a formação de bolhas de gás (regiões com alta fração volumétrica de gás), as quais coalescem formando bolhas maiores, conforme figura 2.1(d). Neste caso, o leito é denotado como leito borbulhante e, apesar das grandes perturbações no fluido e nas partículas, não ocorre um aumento expressivo, a partir do volume de mínima fluidização. Dificilmente sistemas líquido-sólido apresentarão regimes de fluidização borbulhante, exceto em casos muito específicos, onde se utiliza material particulado altamente denso e um líquido de baixa densidade.

Em sistemas gás-sólido, a formação de bolhas e sua aglutinação está ligada ao aumento da vazão de fluido, em que, quanto maior a vazão, maior será a coalescência das bolhas. Todavia, o formato das bolhas difere de acordo com o tamanho das partículas, onde, em um leito de pequeno diâmetro e material particulado fino, as bolhas tendem a ter um formato de pistões axiais, vide figura 2.1(e). Já utilizando partículas maiores, as bolhas têm um pendor pelo formato de pistões horizontais, os quais podem vir a ocupar toda a extensão axial do leito, conforme figura 2.1(f).

Quando particulados finos são fluidizados com uma vazão suficientemente alta, a ponto de exceder a velocidade terminal das partículas, o leito começa a apresentar um considerável arrasto de material particulado, onde em vez da formação de bolhas, ocorre a aglomeração de vazios de gás de vários tamanhos e formas, não sendo possível distinguir a superfície do leito. Nesta situação, é dito que se tem uma fluidização turbulenta, ilustrada na figura 2.1(g).

Aumentando-se ainda mais a velocidade de gás, o material sólido é carregado para fora do leito juntamente com o gás, obtendo-se um leito disperso ou diluído com transporte pneumático, vide figura 2.1(h). Tanto na fluidização turbulenta, como no transporte

pneumático, em regimes de operações estacionários, faz-se necessário coletar o material levado para fora do leito, o qual pode ser realizado através do emprego de ciclones.

2.1.2 Classificação de Geldart

Geldart (1973), analisando a formação de bolhas e as características fluidodinâmicas durante as fluidizações, verificou que as partículas se comportavam de maneira distinta para cada tipo de material sólido, assim como para o tipo de fluido em escoamento, e então, classificou as partículas em quatro grupos, propondo um diagrama relacionando a diferença de massa específica entre a fase fluida e o material granular com o diâmetro das partículas. A figura 2.2 ilustra o diagrama proposto por Geldart.

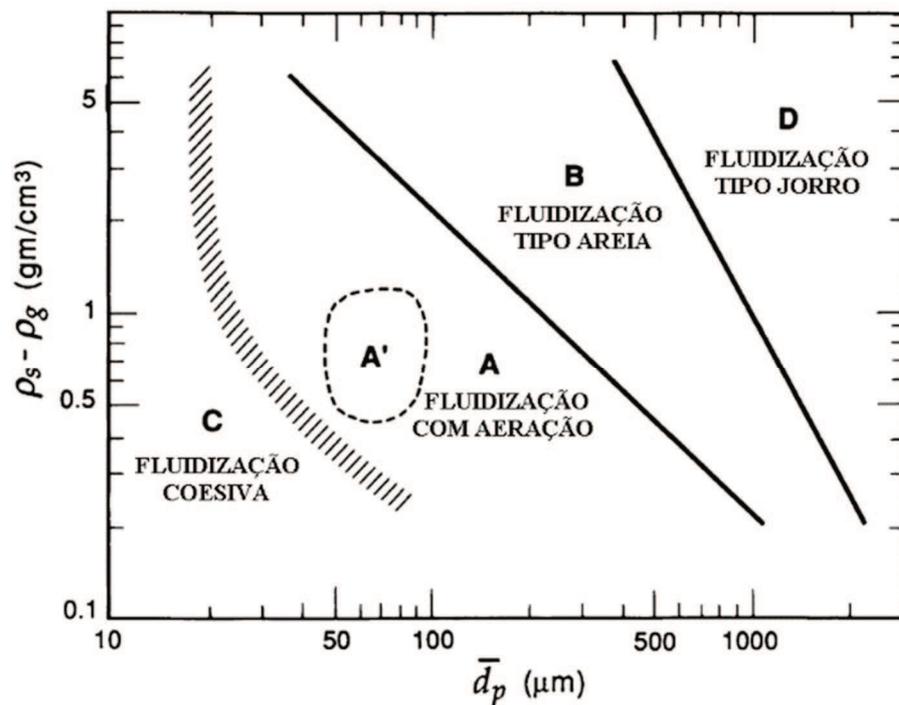


Figura 2.2 - Classificação de partículas de Geldart.

Fonte: Adaptado de Kunii e Levenspiel (1991).

A classificação de Geldart é importante para a previsão do comportamento de fluidização de partículas sólidas, porque em condições operacionais semelhantes partículas de diferentes grupos podem se comportar de maneira totalmente diferente (OCANHA, 2018). Com base nisso, a descrição de cada um dos 4 grupos de partículas é dada conforme:

- Grupo A: este grupo de partículas é caracterizado por apresentar materiais de pequeno tamanho médio e/ou baixa massa específica $\rho_p < 1,4 \text{ g/cm}^3$. Estes

materiais fluidizam bem, porém após exceder a velocidade de mínima fluidização, acaba ocorrendo uma grande expansão do leito mesmo antes do aparecimento de bolhas. O craqueamento catalítico de petróleo é um exemplo de emprego deste tipo de material particulado;

- Grupo B: esta categoria é formada por uma grande faixa de valores de tamanho médio e massa específica das partículas, geralmente com valores entre $40 \mu\text{m} < d_p < 500 \mu\text{m}$ e $4 \text{ g/cm}^3 > \rho_p > 1,4 \text{ g/cm}^3$. Neste grupo, está presente apenas a fluidização borbulhante, onde as bolhas são formadas na velocidade de mínima fluidização, ou levemente acima dela, com uma pequena expansão do leito. Existe uma movimentação muito pequena ou quase nula de partículas sem a presença de bolhas de fluido, onde ao interromper o fornecimento de gás, o leito entra em colapso rapidamente. A areia é o exemplo mais típico deste grupo.
- Grupo C: esta divisão é caracterizada por apresentar partículas coesivas (particulados finos e aderentes) fazendo com que sejam quase impossíveis de se fluidizar, pois provocam canais preferenciais e/ou slugs, onde para ser possível fluidizar este tipo de material, geralmente, utiliza-se agitadores e/ou vibradores, os quais realizam o desprendimento de sólidos, através da quebra dos canais preferenciais estáveis. Um exemplo de associação destes tipos de materiais é o cimento e a farinha de trigo, possuindo comportamentos semelhantes.
- Grupo D: Este grupo é composto por partículas grandes e/ou com alta massa específica, cuja fluidização é um caso particular, em que a fluidodinâmica presente no leito é caracterizada por jorro. De acordo com Basu (2006), este grupo possui particulados, geralmente maiores que $500 \mu\text{m}$, para ρ_p na ordem de 2500 kg/m^3 , requerendo velocidades de escoamento muito maiores para alcançar o regime de fluidização. Exemplos comuns destes materiais são grãos de produtos agrícolas, tais como arroz, milho, feijão, soja, dentre outros.

2.1.3 Fluidização Tipo Jorro

Como mencionado anteriormente, o leito de jorro é um caso particular da fluidização, sendo utilizada para a promoção do contato fluido-partículas no caso de partículas excessivamente grandes para o contato normal de fluidização, tais como partículas do grupo D de Geldart (CREMASCO, 2014). As principais características deste tipo de fluidização são, a

rápida coalescência de bolhas, formando grandes bolhas no interior do leito, altas taxas de transferência de calor e massa, mistura intensa de material particulado, necessidade de grandes quantidades de fluido para fluidizar e altas taxas de circulação de partículas, ascendendo pela parte central do leito com recirculação pelas paredes laterais. Devido as suas características, a fluidização tipo jorro possui diversas aplicações, tais como, granulação, recobrimento, reações químicas gás-partículas, combustão, aquecimento e resfriamento de sólidos, secagem de materiais e de pastas.

Cremasco (2014), classifica um leito de jorro em cinco regiões distintas do contato fluido-partícula, conforme figura 2.3.

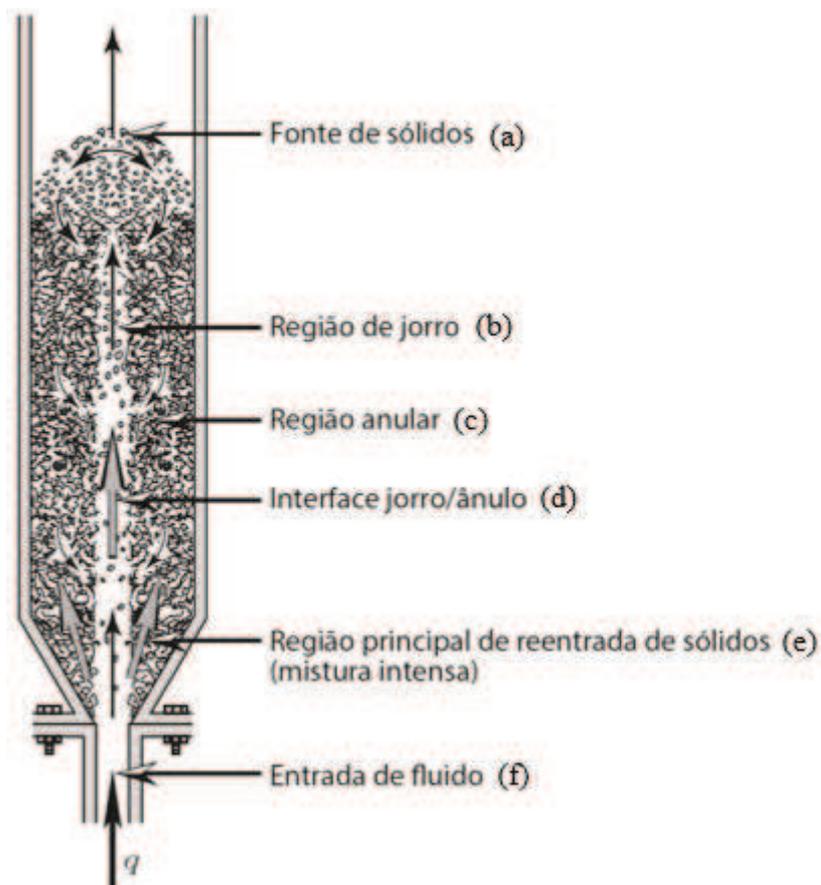


Figura 2.3 - Regiões características de um leito de jorro.

Fonte: Cremasco (2014).

A região de fonte de sólidos, figura 2.3(a), é o local onde realmente ocorre o jorro vertical acima da altura na qual estão localizadas as partículas em leito expandido. A região de jorro, figura 2.3(b), é onde ocorre o transporte ascendente e diluído das partículas, a região anular, figura 2.3(c), é o domínio onde se tem uma quantidade densa de partículas, escoando em contracorrente à fase fluida em ascensão (jorro), a interface jorro/ânulo, figura 2.3(d), como

o próprio nome diz, é o local de contato fluido-partícula, situado entre as regiões de jorro e anular, e por fim, tem a região principal de reentrada de sólidos, figura 2.3(e), situada na base do leito, onde ocorre uma mistura intensa fluido/partícula.

Em se tratando de fluidização gás-sólido, geralmente usa-se distribuidores localizados na base do leito, na região de entrada de fluido, figura 2.3(f), os quais têm as funções de servir suporte aos sólidos particulados, bem como, homogeneizar o escoamento de fluido, tornando-o mais laminar possível e melhorando a distribuição dos sólidos particulados. No entanto, é necessário empregar um distribuidor adequado ao tipo de material particulado utilizado, pois o modelo/formato deste distribuidor pode influenciar o comportamento da interação fluido-partículas, conseqüentemente, alterando o desempenho da fluidização e a perda de carga no leito. Para auxiliar na formação do jorro, geralmente o reator para este fim tem base cônica.

2.1.4 Tipos de Distribuidores

Existem diversos tipos de distribuidores que podem ser aplicados aos mais diversos processos industriais de leito fluidizado, com designs distintos, de forma a atender a condição de operação solicitada. As configurações de distribuidores mais encontradas são distribuidores tipo placa perfurada, distribuidores de bocais e distribuidores tipo aspersores, conforme figura 2.4.

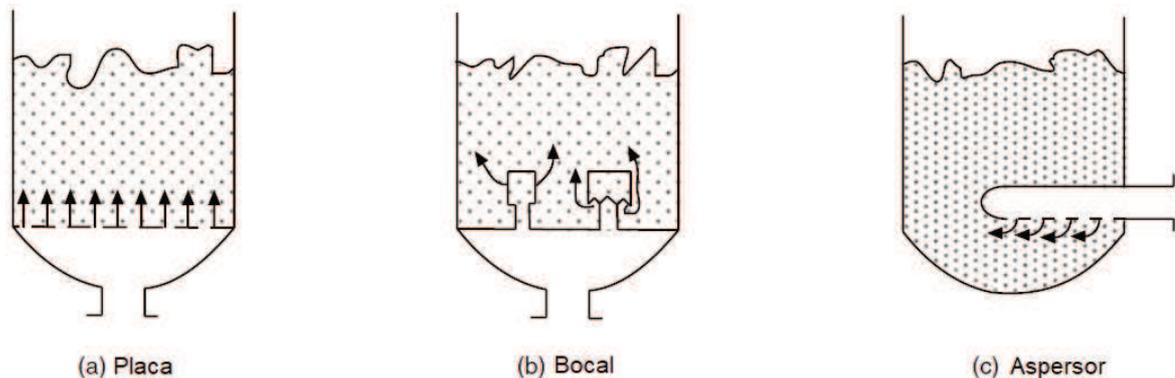


Figura 2.4 - Tipos mais comuns de distribuidores para leito fluidizado.

Fonte: Adaptado de Basu (2006).

Os distribuidores de placa perfurada, figura 2.4(a), são bastante empregados na indústria devido à facilidade de construção e baixo custo e, geralmente são empregados quando se utiliza sólidos mais grosseiros e em condições de operação com baixa temperatura e reações com o ambiente. Para cada classificação de distribuidor pode existir diversos modelos, onde os modelos mais típicos de distribuidores de placas perfuradas são ilustrados pela figura 2.5.

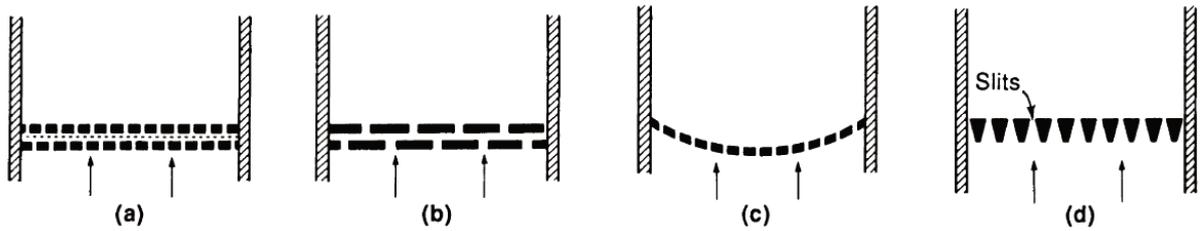


Figura 2.5 - Modelos de distribuidores tipo placa perfurada.

Fonte: Kunii e Levenspiel (1991).

Os modelos (a) e (b) são mais rígidos, pois são compostos por duas placas perfuradas, evitando assim, uma possível deflexão das placas, onde o modelo (a) ainda possui uma grade fina entre placas, impossibilitando que particulados mais finos possam passar à região abaixo do distribuidor. Os distribuidores com o modelo (c), são empregados quando a alternativa de reforçar a estrutura com mais placas é impraticável, pois as placas curvadas suportam grandes carregamentos e tensões térmicas. Este modelo evita que a formação e coalescência de bolhas ocorra apenas no centro do leito, melhorando desta forma, a distribuição de gás. Para tanto, quando este modelo de placa for curvado para cima (placa convexa), é necessário que as furações sejam realizadas próximas ao perímetro e não ao centro da placa, o que pode ser considerado um empecilho de construção. Para sobrepor o empecilho construtivo do modelo anterior, o formato de placa tipo (d) pode ser empregado.

O diâmetro dos orifícios de distribuidores de placas perfuradas varia de 1 a 2 mm para pequenos leitos experimentais até 50 mm em grandes aplicações de craqueamento catalítico de leito fluidizado (KUNII e LEVENSPIEL, 1991).

O distribuidor de bocal, figura 2.4 (b), é o tipo mais empregado na indústria de conversão energética de leito fluidizado (BASU, 2006). Este tipo de distribuidor é usado quando se tem condições severas de operação, tais quais altas temperaturas e ambiente extremamente reativo, e seus modelos mais comuns estão ilustrados pela figura 2.6.

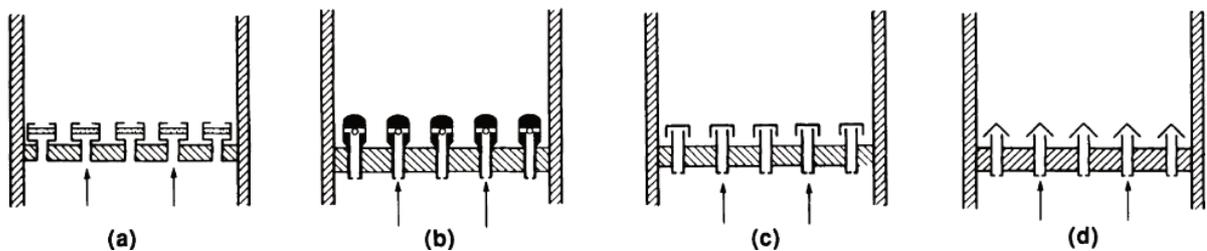


Figura 2.6 - Modelos de distribuidores tipo bocal.

Fonte: Kunii e Levenspiel (1991).

A configuração (a), é composta por uma placa porosa no interior de cada bocal, servindo como um filtro e fornecendo uma boa distribuição de gás no interior do leito, no entanto, ocorre a deposição de partículas nos espaços entre bocais. Para esta configuração, deve-se garantir que o fluido de entrada esteja livre de elementos que possam vir obstruir os orifícios da placa porosa. Os modelos (b), (c) e (d), são bastante utilizados pois previnem que materiais sólidos possam vir a retornar, através do distribuidor.

Para garantir que o gás flua através deste tipo de distribuidor sem perturbações, é importante que os orifícios dos bocais tenham uma alta resistência ao escoamento de fluido-partícula, pois devido aos jatos de gás em altas velocidades, através dos pequenos orifícios dos bocais, pode haver um grande atrito partícula-bocal, erodindo as paredes dos distribuidores. Devido à complexa construção dos distribuidores tipo bocal, seu custo é muito mais elevado quando comparado com os distribuidores de placa perfurada (KUNII e LEVENSPIEL, 1991).

Já os distribuidores tipo aspersão, são empregados sob condições especiais, tais como limitações de espaço ou quando uma mistura de gases explosivos/inflamáveis é introduzida dentro do reator, onde, através de tubos, o gás é injetado e distribuído dentro do leito (BASU, 2006). Um exemplo de aplicação deste tipo de distribuidor pode ser encontrado em caldeiras a gás.

Logo, a escolha do tipo e do design do distribuidor deve ser feita com muito cuidado, pois é uma das principais etapas do desenvolvimento de um processo de um leito fluidizado.

2.1.5 Fluidodinâmica em Leito Fluidizado

O Estudo da fluidodinâmica de um leito fluidizado é dado pela análise da velocidade de mínima fluidização e da queda de pressão nesta condição. A velocidade teórica de mínima fluidização é obtida quando a força de arrasto exercida pelo fluido sobre as partículas se iguala ao peso de material particulado presente no leito, e pode ser determinada através da equação de Ergun (1952), tomando a seguinte forma:

$$-\frac{\Delta P_{mf}}{H_{mf}} = 150 \left[\frac{(1 - \varepsilon_{mf})^2}{\varepsilon_{mf}^3} \right] \frac{\mu}{(\varphi d_p)^2} U_{mf} + 1,75 \left(\frac{1 - \varepsilon_{mf}}{\varepsilon_{mf}^3} \right) \frac{\rho_f}{(\varphi d_p)} U_{mf}^2, \quad (2.1)$$

onde ΔP_{mf} representa a queda de pressão no leito na condição de mínima fluidização, H_{mf} representa a altura do leito em mínima fluidização, μ é a viscosidade dinâmica do fluido, U_{mf} é a velocidade mínima de fluidização, ε_{mf} é a fração de vazios em condição de mínima

fluidização, ρ_f é a densidade do fluido, d_p é o diâmetro médio das partículas e φ é a esfericidade das partículas.

A queda de pressão na condição de mínima fluidização é obtida conforme equação 2.2.

$$-\Delta P_{mf} = (1 - \varepsilon_{mf})(\rho_p - \rho_f)gH_{mf}, \quad (2.2)$$

onde g é a aceleração gravitacional, definida aproximadamente como $9,81 \text{ m/s}^2$.

A fração de vazios na condição de mínima fluidização é dada pela equação 2.3, relacionando a queda de pressão na condição de mínima fluidização com o peso aparente do leito.

$$\varepsilon_{mf} = 1 - \frac{m_p}{H_{mf}(A)(\rho_p - \rho_f)}, \quad (2.3)$$

onde m_p é a massa de material particulado, A refere-se a área da seção transversal do leito e ρ_p é a massa específica das partículas.

As equações 2.1 e 2.2 fornecem os valores teóricos para a velocidade de mínima fluidização e para a queda de pressão nesta condição. No entanto, também é possível determinar estas grandezas, a partir da curva característica de fluidização, obtida experimentalmente, conforme figura 2.7.

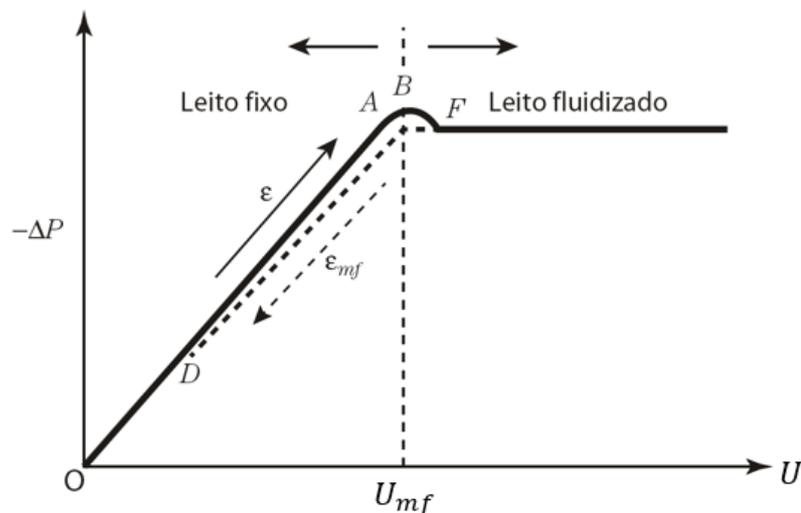


Figura 2.7 - Queda de pressão em função da velocidade superficial do fluido.

Fonte: Cremasco (2014).

Tratando-se de fluidização tipo jorro, a descrição do comportamento fluidodinâmico torna-se mais complexa em relação à fluidização homogênea, em virtude da quantidade de

regiões com interação fluido-partícula. A figura 2.8 mostra a curva característica para um leito de jorro.

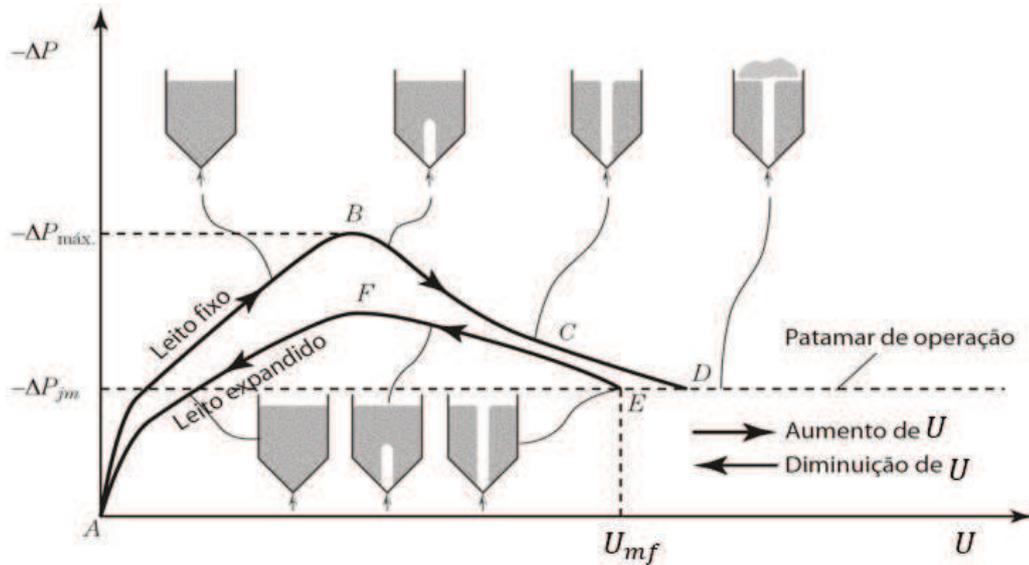


Figura 2.8 - Curva característica da fluidização tipo jorro.

Fonte: Cremasco (2014).

A queda de pressão na condição de jorro mínimo, ΔP_{jm} , pode ser determinada através de correlações empíricas, conhecida da máxima queda de pressão no leito, conforme equações 2.4 e 2.5, respectivamente definidas por Becker (1961) e Malek e Lu (1965).

$$-\Delta P_{max} = (1 - \varepsilon_{mf})(\rho_p - \rho_f)gH_{jm}, \quad (2.4)$$

onde H_{jm} é a altura do leito na condição de mínima fluidização. A queda de pressão de jorro mínimo é definida como dois terços da queda de pressão no pico da curva:

$$-\Delta P_{jm} = \frac{2}{3}(-\Delta P_{max}), \quad (2.5)$$

onde H_{jm} é a altura do leito na condição de jorro mínimo.

Vale lembrar que os fenômenos de interação fluido-partículas em um leito de jorro são bastante complexos, fazendo com que as correlações utilizadas apresentem um erro na previsão de suas estimativas, na qual a equação 2.1, por exemplo, apresenta um erro de aproximadamente 20% (CREMASCO, 2014). No entanto, evidencia-se na literatura, diversos trabalhos propondo novas correlações para diferentes configurações de leito, material particulado e tipos de fluido,

cabendo ao pesquisador avaliar e empregar a correlação que mais se aproxima das suas condições experimentais.

2.2 CARACTERIZAÇÃO DE PARTÍCULAS

O conhecimento das características físicas e morfológicas de um conjunto de partículas é de suma importância para os estudos referentes à tecnologia de sistemas particulados. Dentro do campo da ciência de leito fluidizado, o comportamento de uma fluidização depende de algumas propriedades físicas do material particulado, tais como, massa específica real, de carga compactada e solta, granulometria, esfericidade, aspecto de forma e ângulos de repouso e drawdown.

2.2.1 Massa Específica Real

A massa específica real é definida como a massa de um certo material (m_p) dividida pelo volume ocupado pelo mesmo (V_p), sem considerar os espaços vazios entre as partículas, conforme equação 2.6.

$$\rho_p = \frac{m_p}{V_p}. \quad (2.6)$$

Esta definição de massa específica é geralmente utilizada quando se tem uma quantidade grande de partículas porosas, com rachaduras em sua estrutura, e pode ser realizada por análise de picnometria, onde um recipiente com uma amostra de material é preenchido com um fluido de teste (gás ou líquido), o qual completa os espaços vazios determinando assim, a massa específica real do material testado.

2.2.2 Massa Específica de Carga

A massa específica de carga (ρ_b), é determinada de forma semelhante à massa específica real, dividindo-se a massa das partículas pelo seu volume ocupado, considerando agora os espaços vazios e a porosidade do material particulado. Ela depende do tamanho, formato, estado da superfície e grau de “empacotamento” das partículas (OKA, 2004).

Abdullah e Geldart (1999) apresentam dois métodos básicos para determinação da massa específica de carga considerando fatores de empacotamento, o primeiro denominado de massa específica de carga solta e o segundo de massa específica de carga compactada.

A massa específica de carga solta, é determinada livre de compactação, sofrendo influência apenas da gravidade. Segundo Ocanha (2018), a massa específica de carga solta, deve ser determinada sem que haja a compactação, afim de não interferir na estrutura dos vazios e dos poros do material particulado. Logo, a massa específica de carga solta é dada segundo a equação 2.7, onde V_{ps} representa o volume de carga solta, considerando os vazios e poros, sem compactação.

$$\rho_{bs} = \frac{m_p}{V_{ps}}. \quad (2.7)$$

A massa específica de carga compactada, é determinada similarmente à massa específica de carga solta, porém agora é acrescentado algum modo de empacotamento aleatório, como por exemplo, através de vibração ou impactos consecutivos, a fim de reduzir os espaços vazios entre as partículas. A equação 2.8 determina a massa específica de carga compactada.

$$\rho_{bc} = \frac{m_p}{V_{pc}}, \quad (2.8)$$

onde V_{pc} é o volume de material com compactação aleatória.

Outro método de determinar a massa específica de carga, solta ou compactada, é em função da porosidade do material, conforme equação 2.9, em que ε é a porosidade conhecida das partículas.

$$\rho_b = \rho_p(1 - \varepsilon). \quad (2.9)$$

Conforme Oka (2004), quanto maior o empacotamento maior será a densidade de carga do material, podendo variar numa faixa em torno de 1,5 vezes. O autor classifica os materiais em função da massa específica de carga, sendo:

- Materiais leves: $\rho_b < 600 \text{ kg/m}^3$
- Materiais meio-pesados: $600 < \rho_b < 2000 \text{ kg/m}^3$, e
- Materiais pesados: $\rho_b > 2000 \text{ kg/m}^3$.

Normalmente as correlações para predição da perda de carga do leito e determinação da velocidade de mínima fluidização, utilizam a massa específica real como propriedade em suas formulações. No entanto, Ocanha (2018), observou que a massa específica de carga é a propriedade que mais exerce influência nas velocidades características de fluidização, chegando a representar 76,5 % da variância dos resultados para a U_{mf} . Com isso, ressalta-se a importância desta propriedade, na análise fluidodinâmica de leitos fluidizados, cuja determinação é rápida e simples.

2.2.3 Granulometria

O estudo da morfologia das partículas é essencial quando se trata de sistemas particulados, especialmente quando aplicado à tecnologia de leitos fluidizados, pois exerce influência em importantes aspectos, tais como o valor da velocidade terminal, como também na superfície de contato das partículas (CREMASCO, 2014).

Em um sistema composto por um conjunto de materiais particulados, pode haver partículas com os mais diversos tamanhos e formatos geométricos, podendo variar desde formatos regulares, tal qual uma esfera, até formatos totalmente irregulares, sem padrões definidos. Existem diversas definições para representar a forma de determinado material particulado, onde os mais usuais são através da definição de arredondamento, alongamento e esfericidade.

A partir do formato de uma partícula, pode-se determinar o seu tamanho, onde para uma partícula com formato esférico regular, o tamanho pode ser definido facilmente pelo diâmetro da esfera, empregando métodos triviais, como por exemplo, utilizando um paquímetro.

Já, quando se trata de uma partícula com formato irregular, o procedimento para determinação de seu tamanho é mais complexo. De acordo com Genehr (2015), partículas irregulares têm seu tamanho normalmente definido, baseado em alguma propriedade de referência. A escolha de um diâmetro equivalente para caracterização de tais partículas depende, na maioria das vezes, da aplicação pretendida. Existem diversas definições para determinação do diâmetro equivalente de uma partícula, dentre elas, a definição do diâmetro de Feret.

O diâmetro de Feret é definido como a média da distância entre duas linhas paralelas tangentes ao contorno da projeção da partícula. A figura 2.9 mostra a esquematização do diâmetro de Feret.

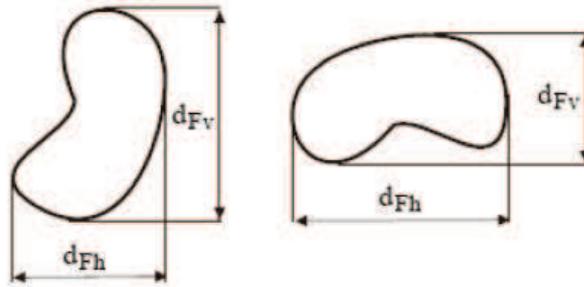


Figura 2.9 - Esquemática para determinar o diâmetro de Feret.

Fonte: Ocanha (2018).

Por analogia a figura 2.9, o diâmetro de Feret é determinado pela equação 2.10, onde d_{FH} é o diâmetro de Feret da partícula no plano horizontal e d_{FV} representa o diâmetro de Feret no sentido vertical.

$$\bar{d}_F = \frac{d_{FH} + d_{FV}}{2}. \quad (2.10)$$

Este diâmetro é bastante utilizado em análises de imagens por microscopia, fornecendo valores com boa precisão, principalmente no estudo de fluidizações, utilizando misturas com biomassas que, geralmente apresentam formatos irregulares.

2.2.4 Esfericidade

No estudo morfológico de materiais particulados, existe uma tendência em considerar as partículas esféricas de modo a simplificar os cálculos. No entanto, dificilmente tais partículas estarão dispostas neste formato, fazendo-se necessário definir um índice que traduz o quanto o formato da partícula se aproxima ao de uma esfera (MELO, 2010).

Existem diversas metodologias empregadas para determinar a esfericidade de uma partícula irregular, onde uma aproximação bastante utilizada é a definição de Peçanha e Massarani (1986) apud Cremasco (2014), vide equação 2.11, que relaciona o grau de alongamento com o grau de esfericidade na forma. Esta definição é empregada, principalmente, quando se utiliza a técnica de análise de imagens bidimensionais.

$$\varphi = \frac{1}{Al'}, \quad (2.11)$$

onde Al representa o alongamento, que é a razão entre o diâmetro circunscrito d_{ec} pelo inscrito d_{ei} , obtido através da equação 2.12.

$$Al = \frac{d_{ec}}{d_{ei}}. \quad (2.12)$$

A figura 2.10 ilustra a relação de diâmetros inscrito e circunscrito para uma partícula irregular.

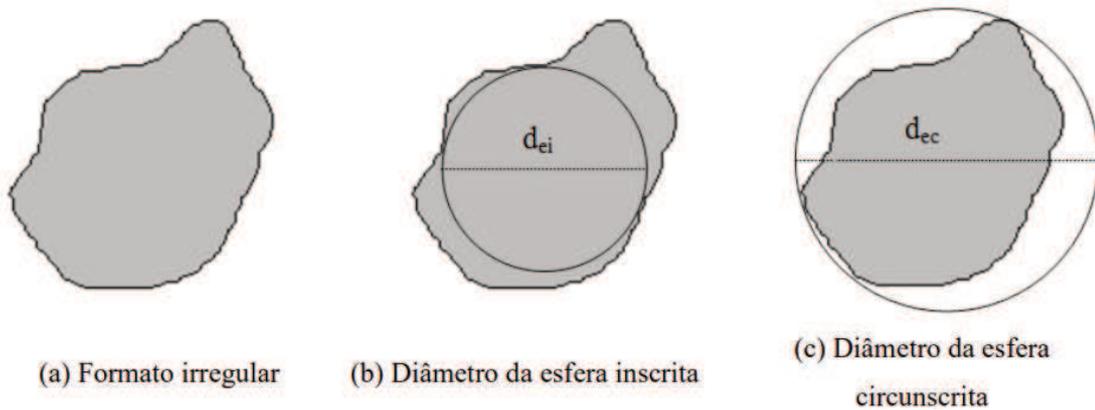


Figura 2.10 - Representação da esfericidade para uma partícula irregular.

Fonte: Lourenço (2012).

Logo, rearranjando a equação 2.11 em função do alongamento, obtém-se assim, a equação para a esfericidade:

$$\varphi = \frac{d_{ei}}{d_{ec}}. \quad (2.13)$$

2.2.5 Ângulo de Repouso

O ângulo de repouso é um dos mais importantes parâmetros macroscópicos na caracterização do comportamento de materiais granulares, exercendo influência em muitos fenômenos importantes, tais como avalanche, segregação e estratificação de elementos particulados (ZHOU et al., 2002). Ele está fortemente atrelado às propriedades do material granulado, tal qual o atrito oriundo do movimento translacional e rotacional, a massa específica, o tamanho e o formato das partículas, bem como, o método utilizado para a formação da pilha de sólidos particulados.

Na análise de leitos fluidizados, Ocanha (2018) verificou que o ângulo de repouso estático possui elevada influência na predição da velocidade de mínima fluidização e na velocidade de fluidização completa.

Beakawi Al-Hashemi e Baghabra Al-Amoudi, 2018, relatam que a definição do ângulo de repouso é uma tarefa peculiarmente específica, pois depende muito da aplicação e do material empregado. Em se tratando de sólidos particulados, uma definição física para o ângulo de repouso é entendida como o ângulo que diferencia as transições entre fases do material granular. Devido a sua importância, o estudo do ângulo de repouso é aplicado nas mais diversas áreas, como por exemplo, no campo da agricultura (no projeto de silos para armazenagem de grãos), na indústria farmacêutica (na produção e escoamento de remédios encapsulados), na geologia (na avaliação e monitoramento de dunas de areia e outras formações granulares), no manuseio de materiais a granel, na extração de minérios, na engenharia civil, na calibração de modelos numéricos, dentre outras.

A determinação do ângulo de repouso pode ser feita através de experimentos como também via simulações numéricas, utilizando softwares DEM, por exemplo. De acordo com (Geldart et al., 2006), existem dois tipos principais de ângulos de repouso: o ângulo de repouso estático e o ângulo de repouso dinâmico. Segundo Farias (2012), o ângulo de repouso estático refere-se à fricção de sólido granular entre si mesmo quando todo o material está estático em uma pilha de material armazenado, e o ângulo de repouso dinâmico, está relacionado quando o volume de particulados está em movimento.

A figura 2.11 mostra quatro métodos bastante usuais para obtenção do ângulo de repouso estático e dinâmico.

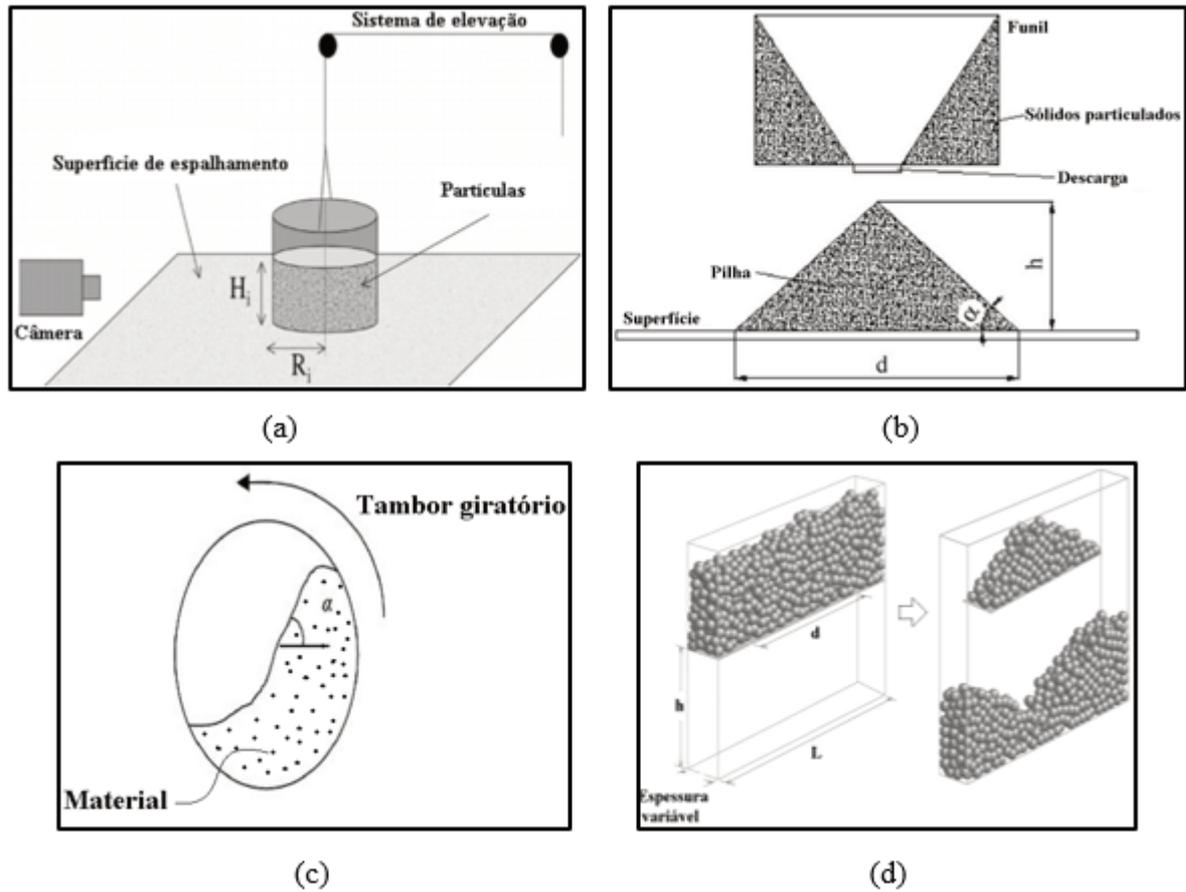


Figura 2.11 - Tipos de métodos para determinação do ângulo de repouso estático e dinâmico. Fonte: Adaptado de Beakawi Al-Hashemi e Baghabra Al-Amoudi (2018); Wang et al. (2010) e Zhou et al. (2002).

As figuras 2.11(a), (b) e (d), demonstram metodologias bastante usuais para determinar o ângulo de repouso estático. No método (a), descrito no artigo de revisão de Beakawi Al-Hashemi e Baghabra Al-Amoudi (2018), um recipiente cilíndrico de dimensões R_i e H_i é preenchido com material granular. Então, este cilindro é puxado verticalmente com velocidade constante, fazendo com que o material em seu interior venha a escoar, formando uma pilha, onde o ângulo formado entre a superfície inclinada da pilha com o plano horizontal, é o ângulo de repouso estático.

Na ilustração (b), aplicada no estudo experimental de Wang et al. (2010), a pilha é formada através do escoamento do material que passa por funil, o qual está fixado a uma certa altura da superfície de deposição. A metodologia (d), foi utilizada no estudo experimental e numérico de Zhou et al. (2002), onde um reservatório retangular é preenchido com material particulado, e então, as laterais deste reservatório são retiradas, fazendo com que o material escoe para baixo, formando uma pilha central.

Já a metodologia ilustrada pela figura 2.11(c), é empregada para definição do ângulo de repouso dinâmico, também descrita no estudo de Beakawi Al-Hashemi e Baghabra Al-Amoudi (2018), onde um cilindro giratório é preenchido com elementos granulares, em que o material gira junto com o tambor, formando o ângulo de repouso dinâmico.

Oka (2004) faz a classificação da fluidez (forças de atrito e adesivas entre partículas) de materiais, utilizando como parâmetro o ângulo de repouso, A_r , definindo assim:

- Material granular com muita fluidez: $25 < A_r < 30^\circ$
- Material granular com boa fluidez: $30 < A_r < 38^\circ$
- Fluidez razoável tipo pó: $38 < A_r < 45^\circ$
- Pós coesivos: $45 < A_r < 55^\circ$ e
- Pós muito coesivos: $55 < A_r < 70^\circ$.

Logo, conceitua-se materiais com boa fluidez como aqueles que escoam facilmente, sem restrições ao fluir de reservatórios, silos, dutos, etc. Já materiais coesivos, são aqueles que não conseguem escoar sem que haja uma interferência externa, por exemplo, o emprego de mecanismos vibratórios, dentre outros.

2.2.6 Ângulo de Drawdown

Também conhecido como ângulo de atrito interno, este ângulo pode ser descrito como uma variação do ângulo de repouso estático convencional, obtido através da angulação interna pós formação da pilha externa, oriunda do derramamento de material.

Oka (2004), define o ângulo de atrito interno como o ângulo de equilíbrio entre a superfície de partículas escoadas e as partículas estacionárias em um reservatório, onde o mesmo será sempre maior que o ângulo de repouso. A figura 2.12 ilustra a formação do ângulo drawdown.

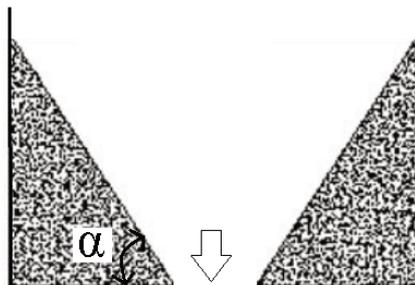


Figura 2.12 - Esquemática do ângulo de atrito interno (drawdown).

Realizando um comparativo entre o ângulo de atrito interno com o ângulo de repouso externo, Cho et al. (2006) apud Beakawi Al-Hashemi e Baghabra Al-Amoudi (2018), verificaram em seu estudo que o ângulo de atrito interno é, significativamente, maior que o ângulo de repouso externo, devido ao aumento dos contatos entre partículas durante o escoamento do material no funil interno. A figura 2.13 mostra a comparação realizada.

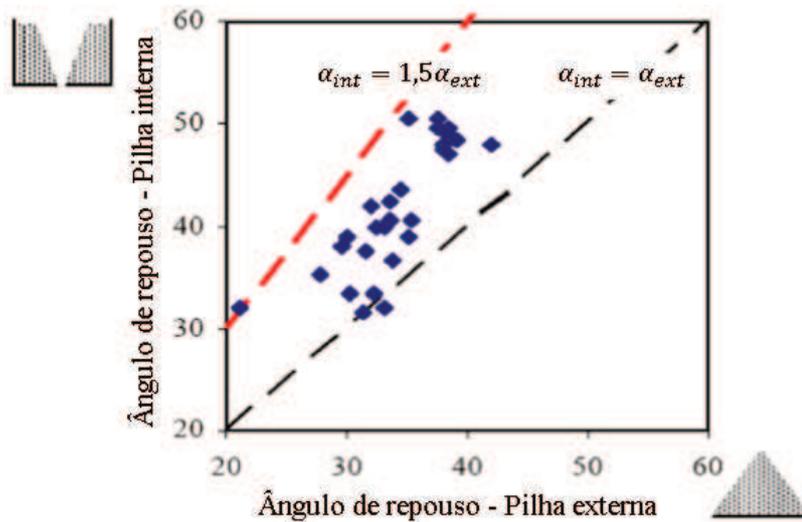


Figura 2.13 - Comparação entre ângulo o ângulo de repouso e o ângulo drawdown.

Fonte: Adaptado de Beakawi Al-Hashemi e Baghabra Al-Amoudi (2018).

A partir do gráfico acima, é possível verificar que o ângulo drawdown, geralmente é maior que o ângulo de repouso, salvo em casos muito específicos, quando se utiliza materiais de mesmo formato e tamanho.

2.3 SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE PROCESSOS DE FLUIDIZAÇÃO

O emprego de ferramentas computacionais na avaliação e projeto de leitos fluidizados tem aumentado significativamente, devido à série de benefícios obtidos, tais como o ganho na quantidade de parâmetros que podem ser medidos, melhorando o conhecimento sobre a hidrodinâmica e os fenômenos de transporte no interior de um leito. Outro grande benefício da modelagem computacional, no estudo de leitos fluidizados é a possibilidade de aplicação de diferentes condições de operação (tipos de fluido, material particulado, temperatura, condição do escoamento) e arranjos geométricos (tamanho e formato do leito e do distribuidor), sem a necessidade de construção de protótipos, o que reduz, consideravelmente, o tempo de projeto, e conseqüentemente, o seu custo.

No entanto, é importante salientar que, a precisão de um modelo numérico para predição de um fenômeno, depende de uma série de fatores. Pannala, Syamlal (2011) relatam alguns motivos que podem vir a afetar os modelos de predição, tais como, a formulação incoerente das equações governantes de um sistema, conhecimento insuficiente das relações constitutivas, tratamento insatisfatório das equações diferenciais parciais governantes, informação insuficiente das condições iniciais e de contorno do problema e malha computacional fora de resolução.

Assim sendo, a modelagem de escoamentos gás-sólido em leitos fluidizados, pode ser agrupada em duas espécies principais: Euler-Euler e Euler-Lagrange.

2.3.1 Abordagem Euler-Euler

O método Euler-Euler ou Euleriano, também conhecido como TFM (Two Fluid Model), assume que ambas as fases, fluido e sólido, são descritas como fases contínuas interpenetrantes. Seus campos de velocidade, pressão e fração volumétrica são resolvidos no domínio computacional, através da solução das equações de balanço de massa e quantidade de movimento para cada uma das fases. A interação entre as fases se dá através de termos fonte de quantidade de movimento, que usam modelos específicos para os diferentes mecanismos de interação.

O mecanismo predominante na maioria dos casos considerados é o arrasto, o qual é calculado por modelos desenvolvidos especificamente para processos de fluidização, como o modelo de Syamlal e O'Brien (1987), o modelo de Gidaspow (1986), modelo de Huilin e Gidaspow (2003) e modelo de Ergun (1952), dentre outros.

Zinani et al. (2016) analisaram os efeitos dos modelos de arrasto de Gidaspow (1986), Hill-Koch-Ladd - HKL (2001) e Syamlal e O'Brien (1987) na simulação de um leito fluidizado borbulhante, utilizando o software de código aberto MFIX. Os resultados encontrados para predição das formações de bolhas e da velocidade do fluido foram comparados com dados experimentais obtidos na literatura. As correlações de Gidaspow e HKL foram as que mais se aproximaram dos resultados experimentais. Os autores verificaram que os modelos fornecem respostas bastante diferentes entre si, impactando fortemente nos resultados das predições.

2.3.2 Abordagem Euler-Lagrange

Na abordagem Euler-Lagrange, o tratamento para cada fase é feito de maneira distinta. A fase fluida é analisada como um meio contínuo (modelagem Euleriana), e seus campos de velocidade e pressão são resolvidos através das equações de balanço de massa e quantidade de movimento para volumes de controle. A fase sólida é analisada de maneira discreta, sob o ponto de vista Lagrangeano. O movimento de cada partícula é calculado pela resolução da segunda lei de Newton, que governa a movimentação translacional e rotacional das partículas, conforme as equações 2.14 e 2.15.

$$m_p \frac{dv_p}{dt} = \mathbf{F}_c + \mathbf{F}_{f \rightarrow p} + m_p g \quad (2.14)$$

$$\mathbf{J}_p \frac{d\omega_p}{dt} = \mathbf{M}_c \quad (2.15)$$

onde m_p refere-se a massa da partícula, g é a aceleração da gravidade, v_p e ω_p representam as velocidades translacional e angular da partícula, \mathbf{J}_p é o momento de inércia, \mathbf{F}_c é a força de contato, devido às interações partícula-partícula e partícula-parede, \mathbf{M}_c é o torque aplicado pelas forças de contato e $\mathbf{F}_{f \rightarrow p}$ é a força adicional, a qual contabiliza a interação fluido-partícula, cujo detalhamento é apresentado na seção 3.5.1.2.

Dentro da modelagem Euler-Lagrange, o modo como o domínio é analisado pode ser categorizado em dois tipos: método uma via (one-way) e método duas vias (two-way). No método uma-via, a troca de quantidade de movimento acontece apenas para o material particulado, onde apenas o fluido afeta o movimento das partículas, porém, esta suposição é válida somente para partículas pequenas e em baixas concentrações (COCCO, KARRI e KNOWLTON, 2011).

Já no método duas-vias, a partícula é influenciada e influencia no comportamento da fase fluida, e isto é evidenciado na aplicação das equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia, através da inserção do termo referente à fração volumétrica de cada fase, α , respectivamente (PASSALACQUA, VEDULA e FOX, 2011).

A figura 2.14 mostra a comparação entre as abordagens Euler-Euler e Euler-Lagrange na modelagem computacional de um leito fluidizado, utilizando gás como fase fluida.

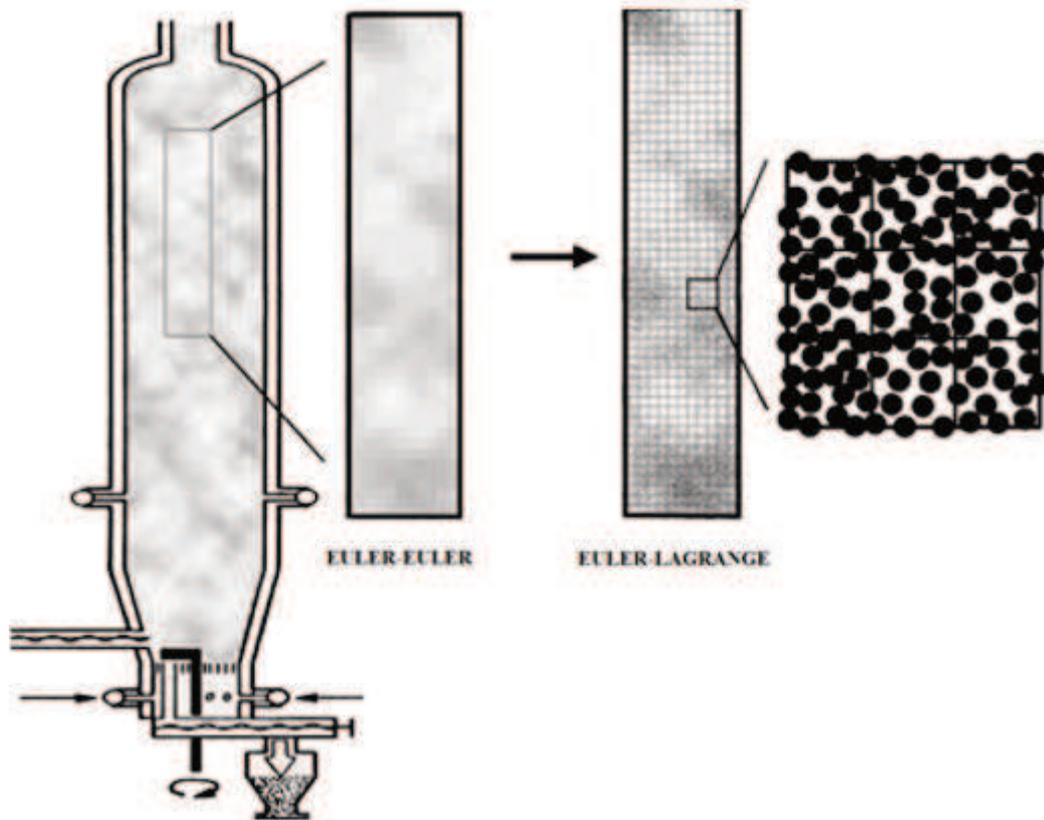


Figura 2.14 - Comparação entre as abordagens Euler-Euler e Euler-Lagrange.

Fonte: Adaptado de Deen et al. (2007).

A seção retirada do leito à esquerda da Fig. 2.14, representa a modelagem TFM, onde as partes sombreadas em cinza referem-se à fração volumétrica de material particulado, e a seção do leito à direita, refere-se à modelagem discreta, resolvida com a mesma malha do modelo dois fluidos.

Similar à abordagem Lagrangeana, um método bastante utilizado para analisar a fase discreta é através da modelagem DEM. Este método foi proposto originalmente por Cundall no período de 1971 e 1974 e, posteriormente aperfeiçoado por Cundall e Strack em 1979, através do desenvolvimento da abordagem de esferas macias (CUNDALL; STRACK, 1979). O DEM é baseado na modelagem discreta do movimento de cada partícula em um sistema, através da resolução das equações de movimento provenientes da 2ª Lei de Newton.

2.4 ESTADO DA ARTE DE MODELOS DEM-CFD PARA SIMULAÇÃO DE PROCESSOS DE FLUIDIZAÇÃO

Diversos estudos utilizando modelos DEM-CFD vêm sendo realizados a fim de obter melhor compreensão dos fenômenos fluidodinâmicos presentes em reatores de leito fluidizado.

Fonte et al. (2015), analisaram o acoplamento DEM-CFD comparando o efeito das abordagens uma-via e duas-vias, bem como, o efeito da aplicação de diferentes correlações de arrasto para materiais de diferentes formatos e características físicas. Na abordagem uma-via, foram confrontadas duas correlações de arrasto: a correlação modificada de Schiller e Naumann com a correlação de Ganser. A correlação de Schiller e Naumann, por negligenciar o formato não-esférico das partículas, prediz velocidades terminais maiores, prejudicando a exatidão dos resultados. Já a correlação de Ganser, por considerar a geometria de cada partícula, forneceu resultados mais precisos, visto que o formato geométrico exerce importante influência na força de arrasto.

Na abordagem duas-vias, foi simulado um leito fluidizado retangular tridimensional de dimensões 230 x 80 x 1220 mm (largura x espessura x altura), com partículas Geldart D com 3,256 mm de diâmetro, totalizando 92.949 partículas no domínio, depositadas a uma altura de leito fixo de 164 mm, utilizando ar como fase fluida e modelo de turbulência padrão κ - ϵ . A figura 2.15 mostra a simulação do leito realizada pelos autores.

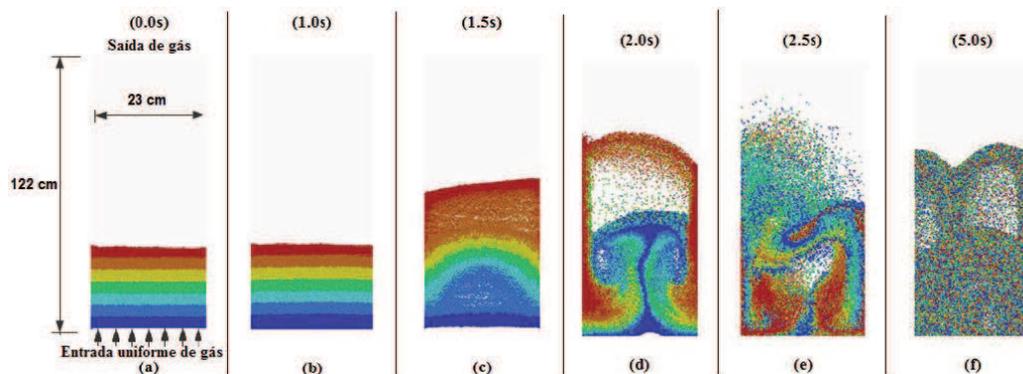


Figura 2.15 - Evolução do comportamento das partículas com o tempo durante a fluidização.

Fonte: Adaptado de Fonte et al. (2015).

Os autores então concluíram o quão relevante é a aplicação correta das leis de arrastos, visto que irá impactar diretamente no comportamento das partículas. Também verificaram que a simulação do leito fluidizado utilizando uma abordagem duas-vias, possui boa concordância com correlações presentes na literatura, confirmando a importância da consideração do efeito das partículas no comportamento do fluido, em casos de escoamentos densos.

XU et al. (2017) através de um modelo numérico DEM-CFD estudaram o comportamento de partículas coesivas na fluidodinâmica de leitos fluidizados tipo jorro, principalmente na análise dos padrões de escoamento, concentração de partículas, velocidades e fluxos de circulação. Foi adotada uma abordagem de esferas macias para análise da fase sólida, com os contatos das partículas descritos pelo modelo de Hertz-Mindlin sem deslizamento. Foi utilizado um reator de leito fluidizado de base plana, com dimensões 134 x 32 x 600 mm (largura x espessura x altura), preenchido com as partículas até uma altura de 100 mm. Foi utilizado gás como fase fluida e partículas esféricas do grupo Geldart-D com 2,6 mm de diâmetro para a fase sólida e massa específica de 2600 kg/m³, totalizando 29.110 partículas. O tamanho das células computacionais usadas pelos autores foi de aproximadamente 3 – 4 vezes o diâmetro das partículas. Os coeficientes de atrito partícula-partícula e partícula-parede utilizados nas simulações foram iguais.

Os autores investigaram 3 níveis de intensidade das forças coesivas: 5x, 10x e 20x o peso das partículas e verificaram que, quando as forças coesivas são pequenas (até 5x o peso do material particulado), o comportamento fluidodinâmico não se altera significativamente, no entanto, conforme as forças coesivas são aumentadas (acima de 5x), ocorre a diminuição das partículas na região central de jorro, decorrente da diminuição da taxa de recirculação de material. Já para a velocidade das partículas na região central, os autores verificaram o aumento da velocidade como incremento das forças coesivas. A figura 2.16 mostra análises feitas no trabalho.

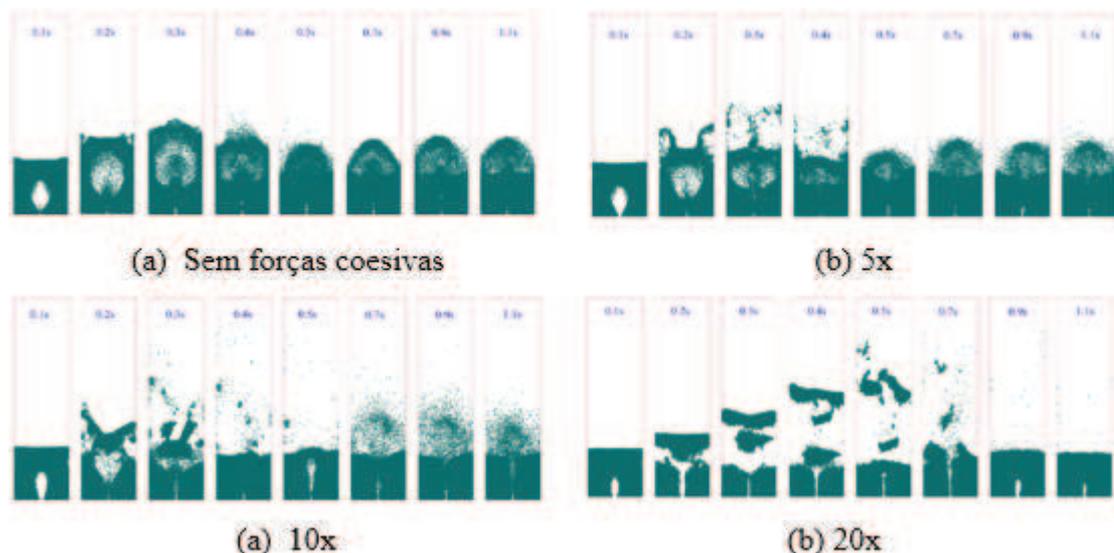


Figura 2.16 - Análise fluidodinâmica em um leito de jorro de acordo com a intensidade das forças coesivas.

Fonte: Adaptado de XU et al. (2017).

Gupta et al. (2014) simularam através de um modelo DEM-CFD escoamentos densos em leitos fluidizados gás-sólido, a fim de verificar os efeitos de parede no leito, bem como, o tamanho das partículas na fluidodinâmica e na predição de temperatura durante a fluidização. A fase fluida foi simulada através do software OpenFOAM-1.7.1 e a fase discreta foi simulada através do código LAMMPS-versão 2013. Foram simuladas um total de 9240 partículas esféricas, com diâmetro de 1,2 mm e massa específica de 1000 kg/m³. O leito empregado possui dimensões de 44 x 1000 x 10 mm (largura x altura x espessura), utilizando um distribuidor de placa porosa.

Os autores compararam as simulações com experimentos, e verificaram que, através do acoplamento DEM-CFD, é possível capturar com boa precisão a velocidade de mínima fluidização, bem como, as flutuações na queda de pressão no leito. Não foi realizada uma análise sensível de algumas propriedades das partículas, tais como rigidez, coeficiente de restituição e coeficiente de atrito dinâmico. Os autores observaram que, próximo das paredes do leito, ocorreram divergências entre a simulação e o experimento, nos perfis de velocidade e temperatura das partículas. Foi verificado que a interação partícula-parede é o fator dominante no comportamento das partículas em regiões próximas da parede do leito (5x o diâmetro das partículas). Em relação ao tamanho das partículas, foi observado que partículas menores possuem maiores velocidades no interior do leito, o que pode vir a acarretar erros na predição da velocidade na parte superior e na base do leito.

Lee e Lim (2017) estudaram o comportamento da mistura de sólidos em leito fluidizado borbulhante, usando dois tipos de modelagem, através do método TFM e da abordagem CFD-DEM. Foi empregado o software ANSYS Fluent para realização das simulações, em que os autores utilizaram um leito fluidizado de dimensões 64 x 8 x 800 mm (largura x espessura x altura). A fase fluida utilizada foi um gás com massa específica de 1,205 kg/m³, e a fase sólida empregada representada por 50.000 partículas esféricas com 1 mm de diâmetro e massa específica real de 2500 kg/m³. A malha empregada pelos autores é composta por células com dimensões de 2 mm. Para configuração da simulação, foi realizado um experimento numérico para determinação do coeficiente de restituição.

Foi verificado o bom comportamento da fluidização para ambos os métodos, com pequenas divergências em relação à fração de volume de sólidos. Os autores observaram um comportamento similar das bolhas em ambas as abordagens, que aumentam em quantidade e tamanho, conforme é incrementada a velocidade do fluido, elevando a taxa de mistura. Comparando as abordagens TFM e CFD-DEM para baixas velocidades de fluido, foi verificado que o método CFD-DEM prediz maiores taxas de mistura de sólidos em comparação com o

método TFM. Já para altas velocidades de fluido, as abordagens apresentam boa concordância entre si.

Norouzi et al. (2017) estudaram a implementação de um solver DEM-CFD, analisando a predição da fluidodinâmica de escoamentos gás-sólido em leitos fluidizados borbulhantes e leitos fluidizados tipo jorro em diferentes tipos de configurações, utilizando o software de código aberto OpenFOAM®. Foram utilizadas partículas com diferentes tamanhos e massas específicas. Para verificação do solver DEM os autores realizaram o teste numérico de queda livre de uma partícula sobre uma superfície plana e compararam com a solução exata. O acoplamento DEM-CFD também foi verificado, através do teste de queda livre de uma partícula em um meio fluido, a fim de obter o comportamento e magnitude da interação fluido-partícula.

Os resultados foram comparados com experimentos da literatura, e foi verificado que o solver com acoplamento DEM-CFD utilizado é capaz de prever a frequência e a intensidade das bolhas em macroestruturas de leitos fluidizados borbulhantes, porém, para mesoestruturas o solver de acoplamento tende a subestimar o valor da intensidade. Para a simulação da fluidização do leito de jorro, o solver foi capaz de prever o comportamento fluidodinâmico do leito referente a fonte de jorro, a concentração de material particulado e velocidade das partículas. A figura 2.17 mostra a simulação da fluidização tipo jorro em comparação com os dados experimentais da literatura.

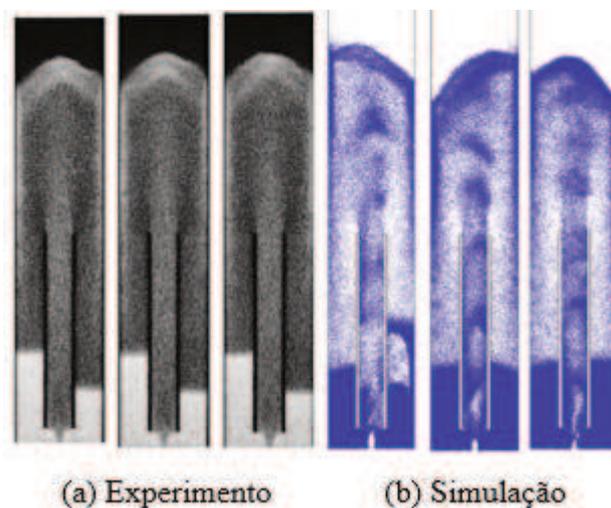


Figura 2.17 - Comparação da simulação com a fluidização experimental.

Fonte: Adaptado de Norouzi et al. (2017).

Almeida (2018) estudou a simulação de um acoplamento DEM-CFD de reatores nucleares de leitos fluidizados. As simulações foram realizadas a partir de um leito fluidizado com partículas Geldart-D, através do acoplamento dos softwares Rocky-DEM e ANSYS-

Fluent. A validação do acoplamento foi feita através de testes computacionais comparados com suas soluções analíticas, a fim de ajustar os parâmetros das simulações, tais como o fator de interação fluido-partícula, perda de carga em um leito fixo e propriedades térmicas.

Foi simulado um reator de leito fluidizado retangular de dimensões 7,62 x 22,86 x 121,92 cm (espessura x largura x altura), composto por 92.949 partículas de alta esfericidade e tamanho uniforme, com 3,26 mm de diâmetro e massa específica de 1131 kg/m^3 , pertencentes ao grupo Geldart-D, com temperatura inicial de $50 \text{ }^\circ\text{C}$. Na entrada de ar do leito, o escoamento de gás é considerado uniforme sem a utilização de distribuidores. Os coeficientes de interação partícula-partícula foram obtidos via experimentos, em que os coeficientes de atrito estático e dinâmico são iguais a 0,7 e o coeficiente de restituição de energia é de 0,3.

A autora verificou que o acoplamento DEM-CFD proposto é uma alternativa adequada para modelagem de reatores de leito fluidizado. Observou-se que o comportamento das partículas e das bolhas estão de acordo com os resultados reportados na literatura, sendo o acoplamento capaz de prever o comportamento característico de jorro. Foi averiguado que a transferência de calor entre as fases com a suposição de temperatura uniforme na partícula, acarreta erros consideráveis. Já com a condução de calor na partícula, os resultados obtidos tiveram boa concordância.

Zhong et al. (2009) simulou um leito fluidizado utilizando a modelagem DEM-CFD, em um leito tridimensional, com partículas cilíndricas alongadas, compostas por aglomerados de partículas esféricas. Foi empregado um leito retangular de base plana, de dimensões 30 x 100 x 500 mm (espessura x largura x altura). O leito foi preenchido a uma altura de 80 mm com partículas de formato cilíndrico de 2 mm de diâmetro e 6 mm de comprimento, com densidade de 850 kg/m^3 . A fase fluida empregada foi um gás com densidade de 1166 kg/m^3 e viscosidade de $19,2 \times 10^{-6} \text{ Pa}\cdot\text{s}$.

O autor utilizou um valor de 0,25 para o coeficiente de atrito partícula-parede e de 0,3 para o coeficiente de atrito partícula-partícula. Os módulos de elasticidade e os coeficientes de Poisson das partículas e da superfície foram iguais, 0,33 e $3 \times 10^9 \text{ Pa}$, respectivamente. A figura 2.18 mostra a comparação do comportamento fluidodinâmico das simulações com os experimentos para diferentes velocidades de fluido.

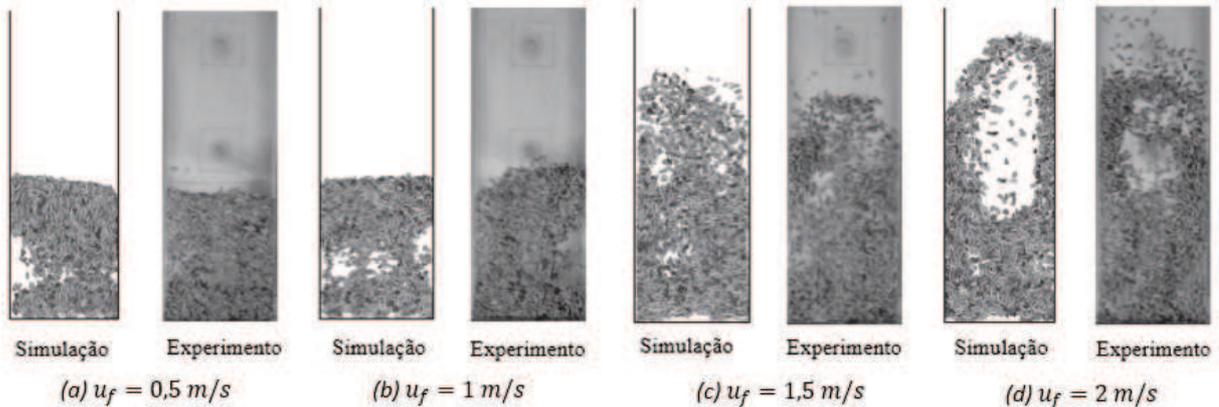


Figura 2.18 - Comparação entre as simulações e as fluidizações de bancada.

Fonte: Adaptado de Zhong et al. (2009).

Foi verificado que as simulações dos padrões de escoamento e das quedas de pressão para diferentes velocidades do fluido, possuem boa concordância com os resultados experimentais. Observou-se que a fração volumétrica de partículas aumenta com o incremento da velocidade do gás, em que, quanto maior a velocidade do gás maior a dispersão da fração volumétrica de material particulado na coluna do leito. A análise da distribuição de velocidade do fluido mostrou que para baixas velocidades de escoamento, a velocidade é uniforme na extensão da largura do leito, já para altas velocidades, a velocidade torna-se maior na região central do leito em relação as paredes.

Por fim, Zhong et al. (2009) também analisou as colisões de interação partícula-partícula e partícula-parede, verificando um comportamento inversamente proporcional entre estas colisões, em que, quanto maior a velocidade superficial do fluido, maiores serão as colisões entre o material particulado e as paredes do leito e, conseqüentemente, menores serão as colisões partícula-partícula.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

Esta seção fornece a descrição dos procedimentos, materiais e equipamentos utilizados, bem como, das metodologias, experimental e numérica, empregadas para desenvolvimento deste trabalho.

A modelagem computacional das fluidizações foi realizada via acoplamento DEM-CFD, utilizando os softwares Rocky DEM e ANSYS Fluent, tendo como base para análise e validação das simulações, os resultados obtidos através de uma bancada experimental. Foi empregada uma fluidização do tipo gás-sólido, onde utilizou-se ar como fase fluida e particulados de polipropileno como fase sólida, com as partículas de polipropileno dispostas em formato de esferas irregulares. A modelagem DEM foi realizada em condições de operação iguais ao experimento. Buscou-se então, estabelecer quais parâmetros devem ser calibrados na simulação para convergir os resultados das curvas de fluidização numérica com as curvas de fluidização experimentais.

3.1 BANCADA EXPERIMENTAL

A bancada experimental de fluidização utilizada nesse trabalho foi projetada por Genehr (2015), cujo detalhamento está descrito na figura 3.1.

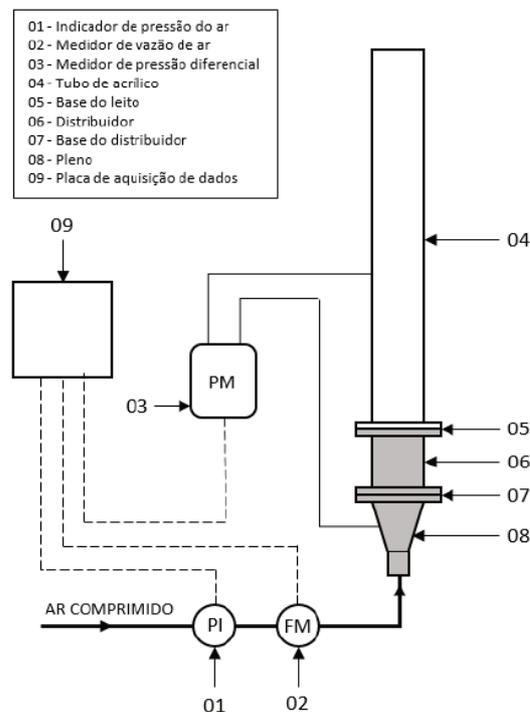


Figura 3.1 - Bancada experimental de fluidização.

Fonte: Genehr (2015).

A bancada experimental é composta pelo reator de leito fluidizado e os instrumentos de medição, leitura e aquisição de dados. O conjunto experimental foi alocado no laboratório de Pneumática do departamento de Engenharia Mecânica da UNISINOS, em ambiente com temperatura controlada e isento de poeira.

3.1.1 Conjunto Reator Leito fluidizado

. O reator de leito fluidizado utilizado para os testes possui formato cilíndrico, composto por um tubo de acrílico com 94 mm de diâmetro interno, espessura da parede do tubo de 3 mm e comprimento do tubo de 910 mm, conforme figura 3.2.

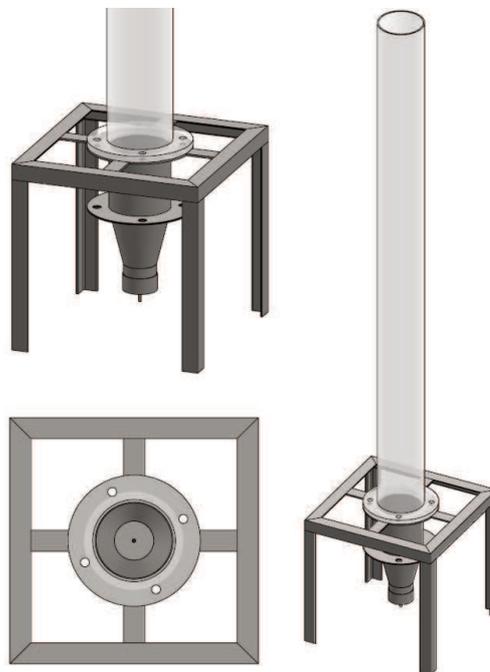


Figura 3.2 - Leito Fluidizado.

Fonte: Adaptado de Genehr (2015).

A conexão entre os segmentos do leito fluidizado é realizada através de flanges com união por porca/parafusos. O distribuidor, figura 3.1(6) é feito de aço inox, com um comprimento de 100 mm. Abaixo do distribuidor localiza-se o pleno, figura 3.1(8), por onde o ar é insuflado.

Na base do distribuidor de ar, figura 3.1(7), estão alojadas esferas de vidro com aproximadamente 9 mm de diâmetro, que ajudam na homogeneização do ar, a fim de evitar a formação de caminhos preferenciais.

Na base da coluna de fluidização figura 3.1(5), foi inserida uma placa perfurada para auxiliar na distribuição do ar, na sustentação de material e na promoção de jorro dos particulados granulares. A figura 3.3 mostra o distribuidor tipo placa perfurada utilizado.



Figura 3.3 - Distribuidor tipo placa perfurada.

A placa distribuidora é feita de polipropileno (PP) e possui 57 orifícios igualmente espaçados e com 4 mm de diâmetro, com as bordas da placa sem orifícios, de forma a assegurar o comportamento de jorro durante as fluidizações. Abaixo da placa distribuidora foi instalada uma grade de metal com aberturas de 2 mm, para prevenir que os materiais granulares venham a cair sob a placa de distribuição. A escolha do distribuidor deu-se devido ao estudo de Michelotto (2018), o qual verificou que este modelo de placa distribuidora é adequado para fluidizar materiais granulares de formato cilíndrico e com grandes dimensões, mais especificamente palitos de bambu, obtendo um bom comportamento fluidodinâmico com aceitáveis velocidades mínimas de fluidização.

3.1.2 Sistema de Medição, Leitura e Aquisição de Dados

A bancada experimental dispõe de um medidor de pressão diferencial, um medidor de vazão e um módulo de aquisição e registro de dados.

A medição da pressão diferencial é utilizada para determinação da queda de pressão no leito, em que são tomados 2 pontos de pressão, um logo acima do pleno e outro na coluna de fluidização, acima do montante de material depositado. Para tanto, utiliza-se um instrumento da marca NOVUS, modelo HUBBA 699, com uma faixa de medição ajustável de 0 – 16 mbar, 0 – 25 mbar e 0 a 50 mbar, com uma exatidão de 2,3%, vide figura 3.4.



Figura 3.4 - Medidor de pressão diferencial.

A aquisição de dados é realizada através de um módulo de leitura e registro da marca NOVUS, modelo Fieldlogger, conforme figura 3.5.



Figura 3.5 - Módulo de aquisição e registro de dados.

Este equipamento possui oito entradas analógicas/digitais (resolução de conversão A/D de 24 bits) configuráveis por software para sinais de tensão, corrente, termopares, dentre outros. Também possibilita conexão via USB para transferência de dados a um computador. Os instrumentos de medição são alimentados através de uma fonte estabilizada, com tensão de saída de 24 Vcc. O registro dos dados é efetuado em tempo real, com frequência de aquisição de 1 Hz.

A medição da vazão de ar injetada no leito é realizada através de um medidor de vazão da marca IFM, modelo SD6050, de acordo com a figura 3.6.

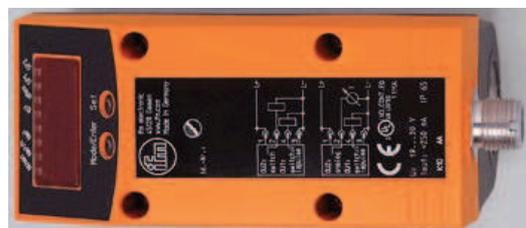


Figura 3.6 - Medidor de vazão volumétrica.

O medidor possui saída de sinal analógico de 4 a 20 mA e opera em uma faixa de medição de vazão de 0,2 – 75 Nm³/h, com exatidão de $\pm 1,5\%$.

3.2 CARACTERIZAÇÃO FÍSICA DO MATERIAL PARTICULADO

3.2.1 Material Particulado

A fase sólida empregada neste trabalho é composta por partículas de polipropileno, dispostas em formato de esferas irregulares. A escolha deste tipo de material se deu devido às restrições inerentes ao acoplamento DEM-CFD, em que o tamanho do material particulado está diretamente ligado ao refino de malha, que por consequência, está associado ao tempo de simulação, onde malhas mais refinadas ou partículas muito pequenas resultam em maiores tempos de simulação computacional.

A caracterização física deste material foi realizada através da determinação do diâmetro médio das partículas, diâmetro de Feret, esfericidade, massa específica real e de carga e ângulo de repouso e drawdown. A figura 3.7 mostra a disposição do material particulado utilizado.



Figura 3.7 – Partículas de polipropileno.

3.2.2 Diâmetro Médio

O valor para o diâmetro médio (d_p) foi obtido através de uma análise microscópica de imagem, onde utilizou-se um equipamento de medição de imagens tridimensional com aumento de 62x, conforme figura 3.8.



Figura 3.8 - Equipamento tridimensional de análise e medição de imagens da marca Starrett, modelo Galileo AV 300+ automático.

Para realizar as análises de imagens do material particulado, foram separadas 190 amostras de partículas de polipropileno, conforme figura 3.9.



Figura 3.9 - Preparação das amostras para análise microscópica.

As imagens geradas pelo equipamento tridimensional foram tratadas no software Image-J, o qual fornece os valores para o diâmetro médio das partículas. A figura 3.10 demonstra as imagens pós-tratamento no software.

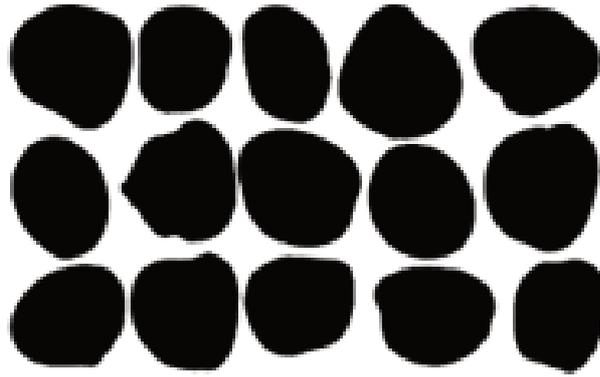


Figura 3.10 - Imagem das partículas tratadas com o software Image-J.

Após o tratamento das imagens, o software Image-J fornece uma tabela com valores médios e unitários da área projetada pelas partículas. Aplicando o valor encontrado na equação referente a área de um círculo, obtém-se o valor para o diâmetro médio e unitário do material particulado. O procedimento empregado para obtenção do diâmetro médio das partículas é descrito sequencialmente, a seguir:

- O primeiro passo a ser realizado é a calibração das medidas do software, através de uma medida conhecida, por exemplo, através de um paquímetro, régua ou objetos de medida padronizados. O software reconhece a medida inserida e então, a converte para uma escala de pixels.
- Posteriormente, é realizado o tratamento das imagens advindas do equipamento tridimensional, através da conversão em escala de cinza (8-bit) na guia “Image → Type → 8-bit”. O tom da escala de cinza pode ser alterado na guia “Image → Adjust → Threshold”;
- Após conversão das imagens em escala de cinza é realizado o preenchimento de espaços vazios e reparação de deformações nas imagens na guia “Process → Binary → Fill Holes”;
- Depois do tratamento, é obtida a área média projetada do material, que é utilizada para descobrir o diâmetro médio das partículas, através da guia “Analyse → Measure”. Os valores encontrados são mostrados em uma tabela no software Image-J, a qual pode ser exportada para o Excel.

3.2.3 Diâmetro de Feret

O diâmetro de Feret é obtido também através da utilização do Image-J, a partir dos mesmos procedimentos utilizados para determinação do diâmetro médio. Após o tratamento

das imagens, o software realiza a análise destas e fornece uma tabela com os valores finais do diâmetro de Feret. No entanto, é preciso habilitar no software quais parâmetros serão mensurados através da guia “Analyse→Set Measurements”.

3.2.4 Esfericidade

A esfericidade também é obtida através do Image-J, realizando os mesmos procedimentos descritos nos itens 3.2.2 e 3.2.3, em que a esfericidade é determinada através da equação 2.12, pela relação dos diâmetros inscrito e circunscrito, onde os diâmetros de Feret são utilizados.

3.2.5 Massa Específica Real

A massa específica real (ρ_p) foi determinada através de uma análise de picnometria a gás hélio, onde o gás é introduzido nas amostras de material, preenchendo assim, os vazios e fornecendo o valor real da massa específica do material. As amostras foram separadas em um béquer de 10 ml e então colocadas em um picnômetro, conforme figura 3.11.



Figura 3.11 – Picnômetro empregado na determinação da massa específica real.

O picnômetro utilizado é da marca Micrometrics, modelo AccuPyc II 1340. Este equipamento possui uma precisão de 0,02% e exatidão de 0,03% na leitura, e atende as normas ASTM C604-2012 e ASTM D6761-2012.

3.2.6 Massa Específica de Carga Compactada e Solta

Para determinação da massa específica de carga compactada (ρ_{bc}) foi utilizada a mesma metodologia empregada no trabalho de Ocanha, 2018. Encheu-se um béquer de volume conhecido com as partículas, de modo que o material ficasse o mais compactado possível para

medição da massa do mesmo. Divide-se então, o valor da massa pelo volume de material no recipiente, obtendo assim, a massa específica aparente compactada, vide figura 3.12, onde é mostrado o procedimento para obtenção dos resultados, referente a massa específica de carga compactada, com as medições de volume e massa realizadas em triplicatas em uma balança digital de marca BEL modelo M500, com resolução de 0,001 g.



Figura 3.12 - Medição da massa das amostras de polipropileno.

A determinação da massa específica de carga solta (ρ_{bs}) foi determinada após a fluidização dos materiais, utilizando o mesmo procedimento empregado para a massa específica de carga compactada. Para tanto, utilizou-se o volume de leito expandido como base para cálculo. As medições foram feitas sempre em triplicata, utilizando uma quantidade de material de uma vez o diâmetro do leito, onde a média aritmética simples foi empregada para obtenção das massas específicas de carga compactada e solta.

3.3 METODOLOGIA EXPERIMENTAL

Esta seção apresenta os procedimentos empregados na preparação e na realização das fluidizações das partículas.

3.3.1 Determinação da Queda de Pressão a Vazio

Este procedimento foi realizado a fim de descontar a perda de carga fixa do leito, devido ao distribuidor e a coluna de fluidização. Deste modo, é avaliada apenas a perda de carga decorrente do material particulado no leito.

As fluidizações a vazio foram realizadas em triplicata, onde a vazão de ar é incrementada a partir de uma válvula tipo agulha, durante um tempo de aproximadamente 3 minutos. O medidor de vazão utilizado fornece os valores em Nm³/h, logo, é necessário converter esta grandeza para velocidade, dada em m/s, assim, obtendo-se as curvas de fluidização da queda de pressão do leito vazio em função da velocidade superficial do ar, das quais retiram-se as equações para correção da perda de carga do leito carregado. A figura 3.13 mostra o gráfico das fluidizações a vazio.

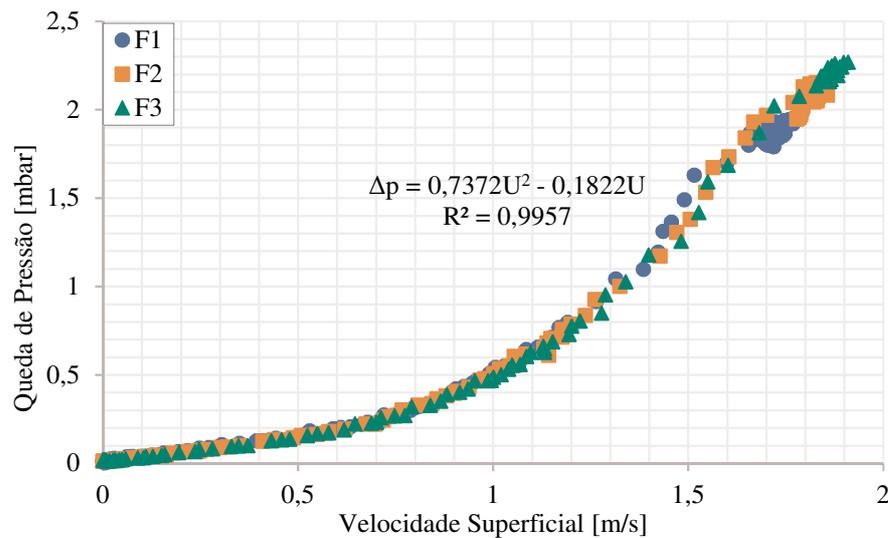


Figura 3.13 - Fluidização do leito a vazio.

Através da equação da queda de pressão em função da velocidade do ar obtida a partir das curvas de fluidização do leito a vazio, é realizado o ajuste da queda de pressão real do leito, segundo equação 3.1.

$$\Delta p_{leito} = \Delta p_{carregado} - \Delta p_{vazio}, \quad (3.1)$$

em que $\Delta p_{carregado}$ refere-se ao valor da queda de pressão medida com o leito preenchido de material particulado e Δp_{vazio} é o valor medido da queda de pressão para o leito vazio. Substituindo os valores de queda de pressão do leito vazio na equação anterior, obtém-se:

$$\Delta p_{leito} = \Delta p_{carregado} - (0,7372U^2 - 0,1822U). \quad (3.2)$$

3.3.2 Determinação das Curvas de Fluidização e Defluidização

As curvas de fluidização foram realizadas em triplicata, com incremento constante da vazão de ar. A aquisição dos dados de queda de pressão e vazão de ar foi feita a cada segundo e o tempo de abertura da válvula tipo agulha foi em torno de 3 minutos, para uma vazão máxima de aproximadamente 50 Nm³/h, devido a restrições da rede de ar comprimido. O leito foi preenchido com 385,307g de partículas de polipropileno, a fim de que a altura de material depositado fosse uma vez o diâmetro da coluna do leito ($H/D = 1$).

Já as curvas de defluidização foram obtidas após a abertura total da válvula de controle de vazão, onde esperou-se um tempo de aproximadamente 10s para estabilização da vazão e então, começou-se o procedimento reverso com o fechamento da válvula, também com um tempo médio de 3 minutos. Entre os intervalos das etapas de fluidização/defluidização o material particulado foi retirado do leito e colocado novamente sempre a fim de obter o maior empacotamento possível.

Os valores para a velocidade de jorro mínimo, a queda de pressão nesta condição e a máxima queda de pressão no leito, são obtidas via análise gráfica, conforme descrito pela seção 2.1.5 (Fig. 2.8). A análise das incertezas destas grandezas está disponível no Apêndice – A deste trabalho.

3.4 MODELAGEM MATEMÁTICA

Esta seção aborda a modelagem matemática da fase discreta e da fase fluida do acoplamento DEM-CFD empregado. A formulação matemática de ambas as fases é baseada no trabalho de Almeida (2018).

3.4.1 Modelagem da Fase Discreta

Neste trabalho, o material particulado é tratado de forma discreta, sendo acompanhado pelo domínio de forma Lagrangeana, através das equações governantes da 2ª Lei de Newton, para movimentação translacional e rotacional, conforme equações 2.14 e 2.15.

3.4.1.1 Forças de Contato

Neste estudo, foi adotado o modelo DEM de esferas macias, desenvolvido por Cundall e Strack (1979), em que se considera que as partículas podem se sobrepor levemente umas sobre

às outras durante as colisões. A figura 3.14 ilustra a colisão entre duas partículas na abordagem de esferas macias.

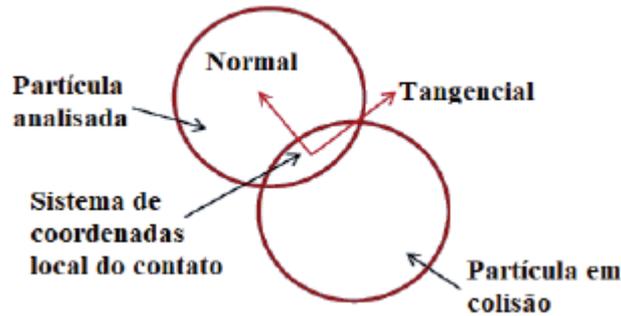


Figura 3.14 - Análise da colisão entre partículas na abordagem DEM.

Fonte: Almeida (2018).

A força de contato entre as partículas é decomposta em dois componentes ortogonais, resultando na força normal F_N , e na força tangencial F_T .

3.4.1.1.1 Força de Contato Normal

A força de contato normal é calculada através do modelo de histerese linear proposto por Walton (1993) e utilizado por Almeida (2018), de acordo com a equação 3.3:

$$F_N = \begin{cases} \min(F_N^0 + K_d \Delta\delta, K_c \delta), & \text{para } \Delta\delta \geq 0, \\ \max(F_N^0 + K_d \Delta\delta, 0.001 K_c \delta), & \text{para } \Delta\delta \leq 0, \end{cases} \quad (3.3)$$

em que F_N^0 é a força de contato normal no passo de tempo anterior, K_c e K_d referem-se as rigidezes de carregamento e descarregamento, δ é a sobreposição entre as partículas durante a colisão e $\Delta\delta$ é a diferença entre as sobreposições do passo de tempo atual com o passo de tempo anterior (δ^0), conforme equação 3.4.

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

Durante a aproximação das partículas, a sobreposição assume valor positivo e, no decorrer do afastamento das partículas após colisão, a sobreposição diminui, assumindo valor negativo. As equações 3.5 e 3.6 fornecem as rigidezes K_c e K_d :

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

$$K_d = \frac{K_i K_j}{(K_i + K_j)(C \cdot R_{pp})^2}, \quad (3.6)$$

onde ε é o coeficiente de restituição das partículas em colisão, $K_{i,j}$ representa a rigidez das partículas, calculada em função do módulo de Young, E_i e o diâmetro da partícula, d_p , vide equação 3.7.

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

3.4.1.1.2 Força de Contato Tangencial

A força de contato tangencial está relacionada com a força normal e deve ser menor ou igual a força de contato normal multiplicada pelo coeficiente de atrito estático, μ_{epp} , no instante em que não há deslizamento. No momento em que ocorre o deslizamento da partícula, a força tangencial assume um novo valor, sendo multiplicada pelo atrito dinâmico, μ_{dpp} (Almeida, 2018).

Logo, a força de contato tangencial é obtida através da equação 3.8, em que se utiliza um modelo elástico-friccional.

$$F_T = \begin{cases} \min(F_T^0 + K_c L_T, \mu_{epp} F_N) & \text{sem deslizamento,} \\ \max(F_T^0 + K_c L_T, \mu_{dpp} F_N) & \text{com deslizamento,} \end{cases} \quad (3.8)$$

sendo F_T^0 a força de contato tangencial no passo de tempo anterior e L_T o deslocamento tangencial relativo durante a colisão. O deslizamento durante o contato entre as partículas, ocorre a partir do instante em que $F_T \geq \mu_{epp} F_N$, e cessa quando $F_T \leq \mu_{dpp} F_N$.

3.4.1.2 Força de Interação com o Fluido

A força proveniente da interação fluido-partícula é apresentada pela equação 3.9. Neste trabalho, devido à grande diferença entre as massas específicas do fluido e dos materiais particulados, apenas a força de arrasto (F_a), e a força devido ao gradiente de pressão ($F_{\nabla p}$) serão contabilizadas, conforme Almeida (2018).

$$\mathbf{F}_{f \rightarrow p} = F_a + F_{VP}, \quad (3.9)$$

A força de arrasto F_a atuando sobre as partículas é determinada conforme equação 3.10, sendo:

$$F_a = \frac{1}{2} C_a \rho_f A_p |u_f - v_p| (u_f - v_p), \quad (3.10)$$

onde A_p é a área projetada da partícula na direção do escoamento de fluido, C_a refere-se ao coeficiente de arrasto e $u_f - v_p$ é a velocidade relativa entre a partícula e o fluido em escoamento.

3.4.1.3 Leis de Arrasto

Neste trabalho é empregada a correlação de Huilin e Gidaspow (2003), utilizando o número de Reynolds baseado na velocidade relativa entre a partícula e o fluido, e no diâmetro da partícula, conforme equação 3.11.

$$Re_p = \frac{\rho_f (u_f - v_p) d_p}{\mu_f}, \quad (3.11)$$

onde μ_f é a viscosidade dinâmica da fase fluida.

A correlação de Huilin & Gidaspow (2003), apesar de não levar em consideração o formato das partículas, foi utilizada para a simulação do leito fluidizado, por levar em consideração o empacotamento de material particulado. Esta correlação é uma união da correlação para o coeficiente de arrasto de Wen e Yu (1966), equação 3.12, com a correlação de Ergun (1952), equação 3.13, e é dada conforme equação 3.14.

$$C_{a_{W\&Y}} = \max \left\{ \frac{24}{\alpha_f Re_p} (1 + 0.15 \alpha_f Re_p^{0.687}) \alpha_f^{-1.65}, 0.44 \alpha_f^{-1.65} \right\}. \quad (3.12)$$

A equação 3.12 foi desenvolvida a partir de experimentos em leitos fluidizados, para baixas concentrações de partículas $\alpha_s < 0.2$, e é apresentada como uma correção da correlação de Schiller e Naumann (1933) em função da fração volumétrica de fluido (Almeida, 2018).

$$C_{aE} = 200 \frac{\alpha_s}{\alpha_f Re} + \frac{7}{3}, \quad (3.13)$$

A correlação de Ergun (1952) é baseada na perda de carga para leitos fixos, sendo aplicável a uma faixa de fração volumétrica de sólidos de $\alpha_s < 0,2$ até o limite máximo de empacotamento, normalmente 60 a 70% (Crowe et al., 2012 apud Almeida, 2018).

$$C_{aH\&G} = \psi C_{aE} + (1 - \psi) C_{aW\&Y}, \quad (3.14)$$

em que ψ é uma função de ligação, dada pela equação 3.15:

$$\psi = \frac{\tan^{-1}[150 \cdot 1.75(0.8 - \alpha_f)]}{\pi} + 0.5. \quad (3.15)$$

3.4.2 Modelagem da Fase Fluida

A fase fluida foi modelada através das equações de balanço de massa (Eq. 3.16) e de quantidade de movimento (Eq. 3.17).

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_f \rho_f) + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \mathbf{u}_f) = 0 \quad (3.16)$$

onde α_f refere-se à fração volumétrica da fase fluida, ρ_f é a massa específica e \mathbf{u}_f representa a velocidade do fluido. O primeiro termo à esquerda das equações de conservação de massa indica a taxa de massa acumulada por unidade volumétrica e o segundo termo fornece a taxa líquida do fluxo convectivo de massa. O termo à direita da equação denota a transferência de massa entre fases, devido a reações químicas ou processos físicos, onde na ausência destes fenômenos, este termo é considerado nulo.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_f \rho_f \mathbf{u}_f) + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \mathbf{u}_f \mathbf{u}_f) = -\alpha_f \nabla P_f + \nabla \cdot (\alpha_f \Gamma_f) + \alpha_f \rho_f \mathbf{g} + \mathbf{F}_{p \rightarrow f} \quad (3.17)$$

Na equação da quantidade de movimento, P_f , Γ_f , \mathbf{g} e $\mathbf{F}_{p \rightarrow f}$, correspondem a pressão da fase fluida, o tensor das tensões viscosas, vetor gravidade e transferência de quantidade de movimento entre as fases.

O tensor das tensões viscosas da fase fluida (Γ_f), utilizado na equação 3.17 é definido pela equação 3.18, sendo:

$$\Gamma_f = \mu_f (\nabla \mathbf{u}_f + \nabla \mathbf{u}_f^T) + \left(\lambda_f - \frac{2}{3} \mu_f \right) \nabla \cdot \mathbf{u}_f \mathbf{I}. \quad (3.18)$$

O efeito da interação do material particulado na fase fluida é calculado pelo Rocky DEM e inserido na equação da quantidade de movimento da fase fluida, que é resolvida pelo ANSYS Fluent através do termo fonte $\mathbf{F}_{p \rightarrow f}$ via UDF. Para o aprimoramento da convergência do cálculo deste termo fonte, utiliza-se um tratamento semi-implícito para troca de quantidade de movimento entre as fases, conforme Almeida (2018), através da equação 3.19.

$$\mathbf{F}_{p \rightarrow f} = - \frac{\sum_{p=1}^N \beta_{pf} \mathbf{v}_p + \mathbf{F}_{\nabla p}}{V_c} - \frac{\sum_{p=1}^N \beta_{pf}}{V_c} \mathbf{u}_f, \quad (3.19)$$

onde β_{pf} é o coeficiente de troca de quantidade de movimento entre a fase sólida e a fase fluida e V_c é o volume da célula da malha.

A equação 3.19 está separada em dois termos, o primeiro sendo um termo explícito, cujo cálculo é realizado do lado DEM pelo Rocky, e o segundo termo sendo a parte implícita, em função da velocidade do fluido no respectivo passo de tempo. O coeficiente β_{pf} é dado pela equação 3.20.

$$\beta_{pf} = \frac{1}{2} C_a \rho_f A_p |\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p|, \quad (3.20)$$

em que o coeficiente de arrasto C_a é obtido pelas leis de arrasto descritas na seção 3.5.1.3.

3.5 METODOLOGIA COMPUTACIONAL

Nesta seção é abordada a metodologia computacional utilizada no lado CFD e no lado DEM, tal como o algoritmo de simulação empregado e a interação entre os softwares Rocky DEM-ANSYS Fluent.

3.5.1 Solução da Fase Fluida

A solução da fase fluida foi realizada com o auxílio do software ANSYS Fluent 19.2 (versão acadêmica). O projeto foi realizado no *Workbench 19.2*, através da criação da geometria e da malha. A geometria foi elaborada no *DesignModler* com as mesmas dimensões da coluna do leito fluidizado, considerando a placa distribuidora utilizada. A malha foi elaborada no *Mesh*, onde o método empregado foi o método *Multizone* com volumes finitos hexaédricos.

O refino de malha é uma etapa bastante importante na garantia de confiabilidade dos resultados numéricos, particularmente quando se utiliza de um acoplamento DEM-CFD, em que a relação do tamanho das partículas com o tamanho das células da malha numérica é excessivamente grande. O emprego de uma malha numérica altamente grosseira, implica diretamente na parte CFD do acoplamento, reduzindo a exatidão das grandezas calculadas em cada célula da malha. Já malhas muito refinadas, acabam por acarretar erros numéricos, em virtude de que várias células ficam parcialmente ou totalmente sem preenchimento pela fase sólida. Pepiot e Desjardins (2012), verificaram que para uma completa resolução das equações da fase gasosa é necessário que o refino máximo de malha esteja aproximadamente na ordem de 1,74x o diâmetro das partículas. Neste sentido, foram testadas malhas com tamanho de célula de 2x, 3x e 5x o diâmetro das partículas. Também investigou-se a influência do refino da malha, junto às paredes do leito.

Na configuração das simulações no Fluent, empregou-se um modelo multifásico Euleriano, com um modelo de turbulência $\kappa\text{-}\varepsilon$ (disperso e com tratamento *scalable* nas proximidades da parede do leito) e em regime de operação transiente. O método de solução empregado para o acoplamento pressão-velocidade foi o algoritmo *PC-SIMPLE*, que é utilizado para escoamentos multifásicos. A resolução do regime transiente e do modelo de turbulência se deu através de um método de primeira ordem implícito (*First Order Implicit*). Em relação a discretização espacial do problema, utilizou-se o algoritmo *PRESTO!* para a pressão e *QUICK* para a fração volumétrica. Para a solução da quantidade de movimento, empregou-se um método de segunda ordem (*Second Order Upwind*).

3.5.2 Solução da Fase Sólida

A solução da fase sólida (particulados) foi obtida de forma explícita com o auxílio do software Rocky DEM 4.2. A metodologia utilizada pelo código comercial está descrita em ordem sequencial, conforme Almeida (2018):

- Detecção dos contatos;
- Cálculo das forças de contato;
- Cálculo da fração volumétrica das partículas;
- Cálculo das forças de interação com o fluido;
- Atualização da posição e velocidade das partículas e
- Cálculo dos termos fontes para envio ao solver CFD.

3.5.3 Domínio Numérico

O domínio numérico é expresso identicamente ao experimento, conforme demonstrado pela figura 3.15, onde foi simulada a geometria da coluna de fluidização, juntamente com a placa distribuidora de ar. A determinação da pressão diferencial é realizada a partir da entrada de ar e na altura de 130 mm, região acima do depósito de partículas, o qual foi efetuado na razão de altura e diâmetro $H/D = 1$ e com alto empacotamento. A entrada de ar é realizada pelos 57 orifícios da placa distribuidora, localizada na base da coluna de fluidização.

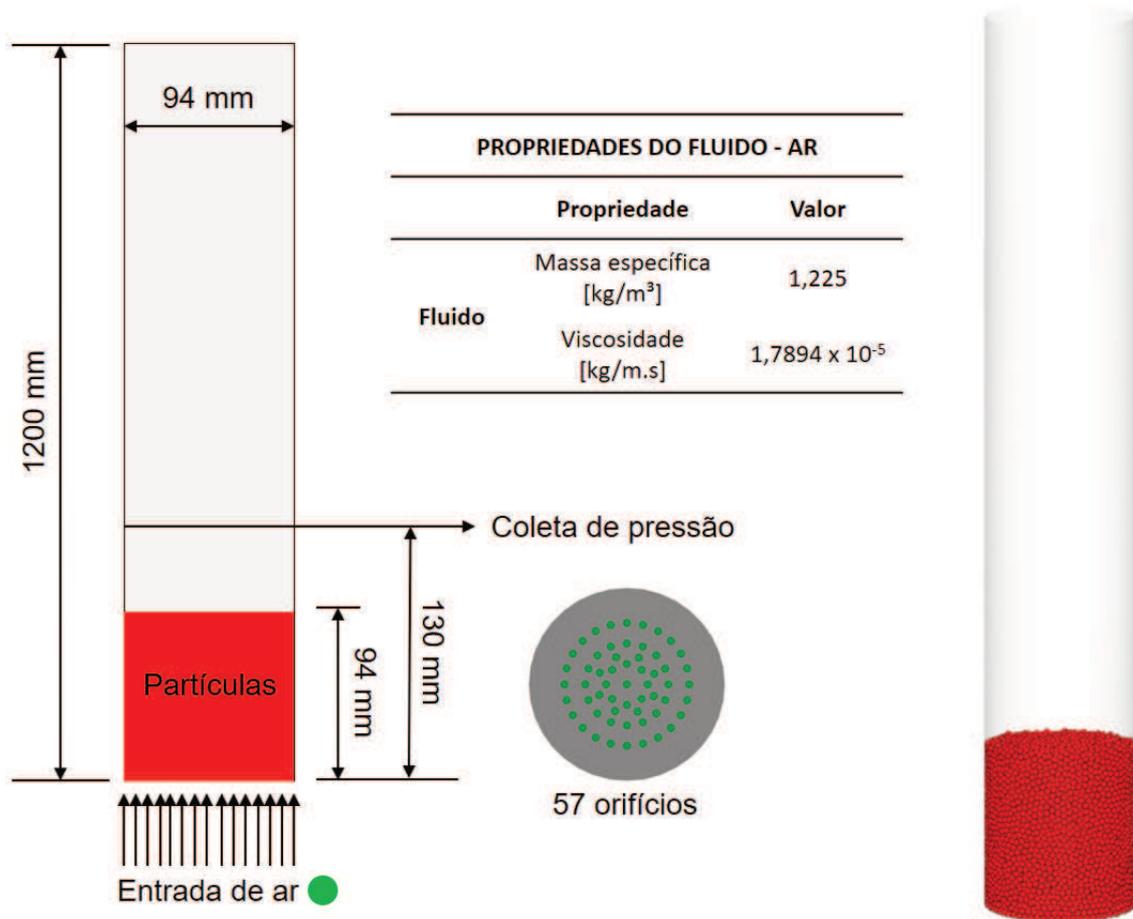


Figura 3.15 – Domínio numérico utilizado no acoplamento DEM-CFD.

3.5.4 Algoritmo de acoplamento DEM-CFD

O algoritmo de acoplamento utilizado é baseado no trabalho de Almeida (2018), em que os softwares Fluent e Rocky rodam em paralelo. Neste trabalho, foram utilizados um total de 16 processadores para solução das fases fluida e particulada, estabelecendo 8 CPUs (Intel® Xeon® 2.4 GHz) para resolução de cada fase. A figura 3.16 demonstra o algoritmo empregado neste acoplamento.

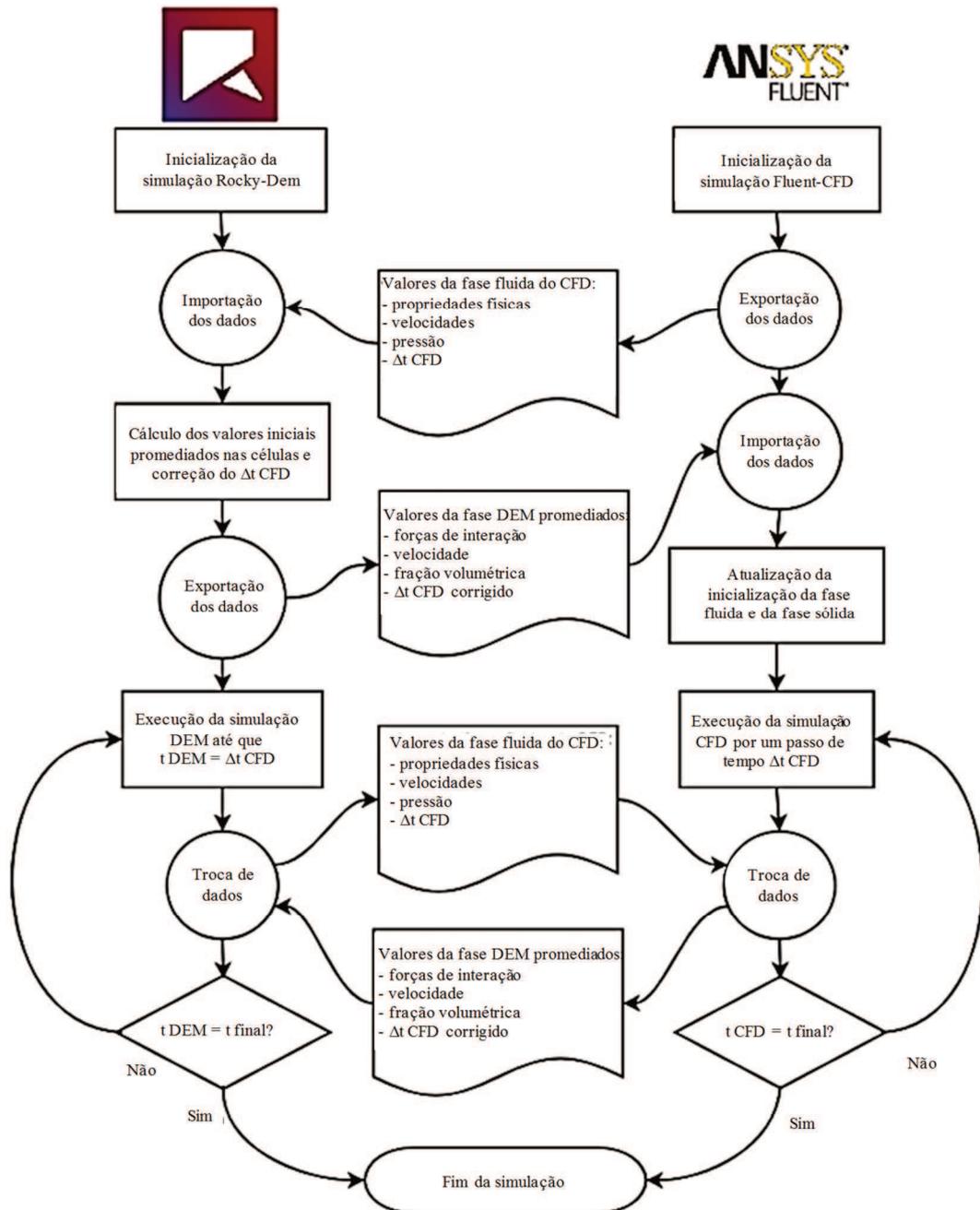


Figura 3.16 - Algoritmo de acoplamento empregado.

Fonte: Adaptado de Almeida (2018).

3.6 CALIBRAÇÃO DO MODELO COMPUTACIONAL

A determinação dos parâmetros de entrada utilizados nas simulações é de suma importância, visto que para se obter resultados confiáveis e precisos, é necessário que os parâmetros que representam a interação entre partículas, partícula-superfície e partícula-fluido, sejam modelados com boa exatidão, a fim de representar com acurácia o modelo físico. Neste sentido, observa-se que a modelagem DEM ainda carece de procedimentos e metodologias para tal finalidade. Em virtude disso, alguns estudos vêm sendo realizados com o intuito de introduzir procedimentos de validação e calibração, dentre eles, YAN et al. (2015), que investigaram via modelagem DEM o efeito do módulo de elasticidade, do coeficiente de atrito estático, da resistência ao rolamento e do coeficiente de restituição sobre o ângulo de repouso e na taxa de descarregamento de material, Coetzee (2016), que propôs uma metodologia de calibração analisando o formato da partícula para diferentes tipos de experimentos, e Grima et al. (2011), que utilizaram uma técnica de otimização de parâmetros automática.

Neste trabalho, foi realizada a calibração da modelagem computacional, através de uma série de testes experimentais e numéricos, cujos resultados dependem das interações entre partículas, entre partículas-superfície (parede) e entre fluido-partículas, a fim de ajustar os parâmetros da modelagem DEM e do acoplamento DEM-CFD.

Os testes experimentais referentes a interação partícula-partícula e partícula-parede foram realizados em laboratório e no software Rocky[®]. Foi empregada uma técnica de otimização via software ANSYS DesignXplorer – *Response Surface Optimization*, em que se buscou a combinação de parâmetros que minimizasse as diferenças entre os resultados dos experimentos em laboratório e computacionais. Os parâmetros investigados foram atrito estático, atrito dinâmico, coeficiente de restituição entre partículas e partícula-parede e resistência ao rolamento.

O ajuste da interação fluido-partícula utilizando o acoplamento DEM-CFD Rocky-Fluent foi estudado e validado por Almeida (2018), através de dois casos testes numéricos. O primeiro caso é o teste de uma partícula em queda livre, figura 3.17, onde as únicas forças agindo sobre a partícula analisada são a força de arrasto F_a , a força de empuxo F_E , e a força peso F_P , utilizando um acoplamento DEM-CFD de uma via.

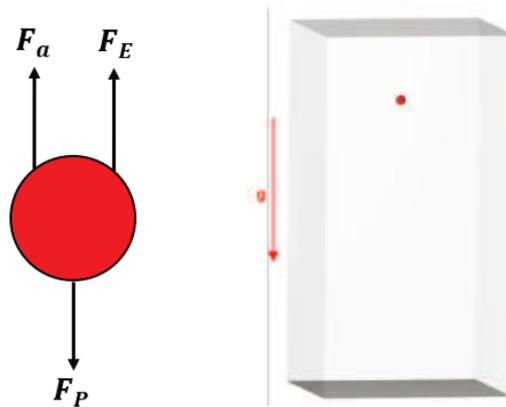


Figura 3.17 - Teste de queda livre numérico.

Fonte: Almeida (2018).

O segundo caso teste realizado por Almeida (2018) é o da perda de carga em um leito fixo, utilizando com acoplamento DEM-CFD de duas vias, a fim de obter corretamente a perda de carga em um leito fixo, carregado com material particulado com um fluido (ar) em escoamento, vide figura 3.18.

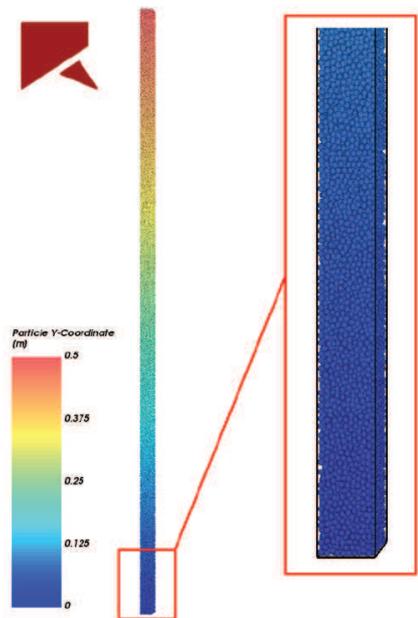


Figura 3.18 - Teste numérico da perda de carga em um leito fixo.

Fonte: Almeida (2018).

Para validação dos testes numéricos, a autora confrontou os resultados simulados com suas respectivas soluções analíticas.

3.6.1 Teste de Plano Inclinado

Este experimento foi utilizado para obtenção do valor do coeficiente de atrito estático partícula-parede. Foi construído um aparato experimental, vide figura 3.19, que consiste em uma superfície de acrílico inclinável de dimensões 400 x 300 mm, sobre a qual as partículas são depositadas.



Figura 3.19 - Aparato experimental do experimento superfície inclinada.

Durante o teste, 348,852 g de partículas de polipropileno foram dispostas em formato de pilha, conforme figura 3.20, a fim de obter o valor do coeficiente de atrito estático partícula-parede. O recipiente que faz a descarga de material para formação da pilha consiste em um cilindro de acrílico, com 120 mm de diâmetro externo, 120 mm de altura e 3 mm de espessura. Conforme a placa é inclinada, a força de atrito deve ser suficiente para balancear a força peso decomposta naquela direção. Conforme o ângulo aumenta, a componente da gravidade excede o valor máximo da força de atrito e a partícula desliza. Assim, o ângulo de atrito estático partícula-parede é obtido diretamente do experimento.

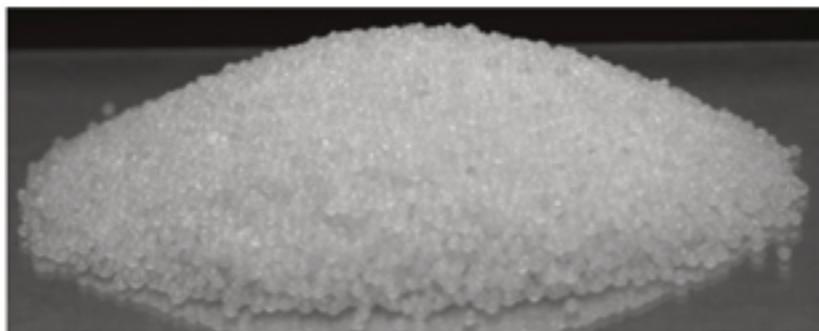


Figura 3.20 - Disposição das partículas sobre a superfície.

Realizaram-se 10 repetições e obteve-se o ângulo médio em que os elementos começam a ter movimento, obtidos da parte posterior da pilha de material. Este ângulo é aplicado na equação 3.21, que fornece o valor para o coeficiente de atrito estático partícula-parede, $\mu_{e_{pw}}$.

$$\mu_{e_{pw}} = \tan(\theta) \quad (3.21)$$

em que θ refere-se ao ângulo médio de inclinação em que as partículas começam a escorregar.

Para obter um valor preciso dos ângulos de inclinação, utilizou-se uma câmera de alta velocidade, da marca IDT, modelo Motion Pro Y4, vide figura 3.21.



Figura 3.21 - Câmera de alta velocidade utilizada para filmagem dos testes.

De forma a garantir uma boa precisão nos valores dos ângulos experimentais, foi utilizado um valor de taxa de Frames por Segundo (FPS) de 200, ou seja, foram obtidas 200 imagens por segundo durante um tempo de teste de 15 segundos.

3.6.2 Superfície de Deslizamento

O experimento da superfície de deslizamento foi realizado para determinação do coeficiente de atrito dinâmico partícula-parede. Amostras de material particulado escorrem por uma superfície côncava de acrílico com 120 mm de diâmetro e 360 mm de comprimento, inclinada em 45°, de forma a garantir o escorregamento do material, conforme figura. 3.22.



Figura 3.22 - Teste para determinação do coeficiente de atrito dinâmico partícula-parede.

O coeficiente de atrito dinâmico partícula-parede $\mu_{d_{pw}}$ é definido a partir da segunda Lei de Newton, aplicada a um corpo em deslizamento puro, conforme equação 3.22.

$$\mu_{d_{pw}} = \frac{g \operatorname{sen}(\theta) - a_c}{g \operatorname{cos}(\theta)} \quad (3.22)$$

em que g é a aceleração gravitacional e a_c é a aceleração da partícula, definida pela equação 3.23.

$$a_c = \frac{2s}{t^2} \quad (3.23)$$

onde s é a distância percorrida pela partícula e t é o tempo de deslocamento.

O tempo de escorregamento e a distância percorrida são utilizados para determinação do coeficiente de atrito dinâmico partícula-parede. Sendo assim, para obter precisamente o tempo de deslize das partículas, o teste foi filmado com a câmera de alta velocidade operando a uma taxa de FPS de 800, realizando 10 repetições do experimento.

3.6.3 Ângulo de Repouso e Drawdown

A obtenção dos ângulos de repouso (A_R) e drawdown (A_D) foi feita a partir de um equipamento específico desenvolvido para ambos os testes, conforme figura 3.23, onde para cada material foram feitas 10 repetições, com obtenção do resultado a partir de média aritmética simples.



Figura 3.23 - Equipamento para realização dos testes de ângulo de repouso e ângulo drawdown.

Primeiramente, é realizado o teste de ângulo de repouso, onde um cilindro de dimensões conhecidas (120 mm de altura, 120 mm de diâmetro e 3 mm de espessura) é preenchido cuidadosamente, de forma a manter o material particulado o mais compactado possível. Em seguida, o cilindro é movimentado verticalmente com velocidade constante de aproximadamente 16 mm/s, conforme utilizado no trabalho de Rahman et al. (2011), formando assim a pilha de partículas de onde são retirados os valores do ângulo de repouso, cada ângulo separado 180° um do outro. A figura 3.24 ilustra a formação da pilha do ângulo de repouso.



Figura 3.24 - Pilha formada durante o teste de ângulo de repouso.

Após a formação da pilha do ângulo de repouso, as superfícies do equipamento são movimentadas horizontalmente em sentidos opostos, com velocidade constante de aproximadamente 16 mm/s. Assim, ocorre o escoamento da parte central da pilha primária de material, formando duas novas pilhas, das quais são retirados os valores dos ângulos de atrito interno, ou drawdown, conforme figura 3.25



Figura 3.25 - Obtenção do ângulo de atrito interno (drawdown).

A figura 3.26 mostra a esquematização do procedimento para obtenção do ângulo de repouso e do ângulo drawdown.

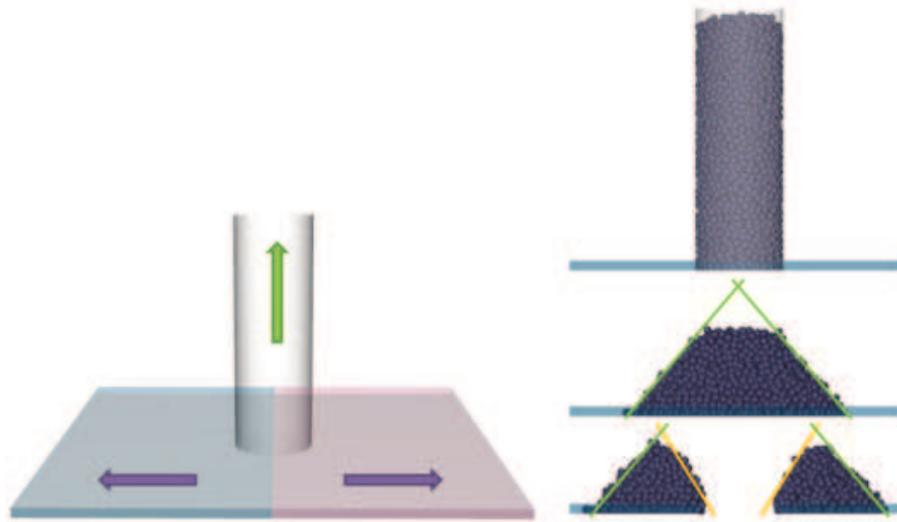


Figura 3.26 - Demonstração do procedimento para obtenção dos ângulos de repouso e drawdown.

Fonte: ESSS.

3.6.4 Teste de Queda Livre - Experimental

Este teste foi empregado para determinação do coeficiente de restituição (partícula-parede) das partículas de polipropileno, $C. R_{pw}$, usado como parâmetro de calibração direta nas simulações. O experimento consiste em abandonar uma partícula em queda livre, de uma altura previamente conhecida, obtendo assim a altura de retorno desta após contato com uma superfície inferior de acrílico. A figura 3.27 mostra o equipamento desenvolvido para este teste.



Figura 3.27 - Equipamento de teste para determinação do coeficiente de restituição partícula-parede.

O experimento utilizou 10 repetições, obtendo-se o valor do coeficiente de restituição pela relação entre a altura inicial e a altura de retorno de partícula, conforme mostrado na equação 3.24.

$$C. R_{pw} = \sqrt{\frac{H}{H_0}} \quad (3.24)$$

onde H é a altura de retorno da partícula após colisão com a superfície e H_0 é a altura inicial de teste.

A altura de retorno da partícula foi obtida através da filmagem do teste com a câmera de alta velocidade, operando a uma taxa de 800 FPS. Se a colisão for perfeitamente elástica, o coeficiente de restituição é igual a 1, e se a colisão for perfeitamente inelástica assume-se $C. R_{pw} = 0$. Então, o valor deve estar dentro da faixa de 0 - 1, dependendo do tipo de material, da geometria e da velocidade relativa da partícula durante o impacto.

3.6.5 Ajuste dos Coeficientes de Interação entre Partículas

Os coeficientes de resistência ao rolamento, atrito estático, atrito dinâmico e coeficiente de restituição partícula-partícula não foram obtidos diretamente via experimentos. Para tanto, foi necessário utilizar um algoritmo genético de otimização. Neste caso, optou-se pelo otimizador da ANSYS DesignXplorer, através de uma otimização multiobjetivos baseada em uma superfície de resposta.

Os valores dos coeficientes são obtidos através das simulações dos testes de ângulo de repouso e ângulo drawdown, onde a modelagem dos experimentos foi feita em escala real e utilizando os mesmos procedimentos dos testes. Os parâmetros e condições de entrada utilizados nas simulações estão descritos na tabela 3.1.

Tabela 3.1 - Configuração das simulações do ângulo de repouso e drawdown no Rocky DEM.

Parâmetros e Condições de Entrada	Valores
Massa específica real da partícula [kg/m ³]	876
Massa específica da superfície [kg/m ³]	1185
Diâmetro médio das partículas [m]	0,003834
Módulo de elasticidade da partícula [GPa]	0,0214
Módulo de elasticidade da superfície [GPa]	3,03
Coeficiente de Poisson da partícula [-]	0,3

Coeficiente de Poisson da superfície [-]	0,37
Rotação de partículas [-]	Presente
Coeficiente de resistência ao rolamento, μ_r [-]	Otimização
Atrito estático partícula-partícula, $\mu_{e_{pp}}$ [-]	Otimização
Atrito estático partícula-parede, $\mu_{e_{pw}}$ [-]	0,299
Atrito dinâmico partícula-partícula, $\mu_{d_{pp}}$ [-]	Otimização
Atrito dinâmico partícula-parede, $\mu_{d_{pw}}$ [-]	0,270
Coeficiente de restituição partícula-partícula, $C.R_{pp}$ [-]	Otimização
Coeficiente de restituição partícula-parede, $C.R_{pw}$ [-]	0,691
Massa total de particulado de polipropileno [kg]	0,348852
Tempo de carregamento de partículas [s]	2
Velocidade de subida do cilindro de descarga [m/s]	0,016
Tempo de movimentação do cilindro [s]	6
Velocidade de abertura das placas horizontais [m/s]	0,016
Tempo de abertura das placas [s]	3

Em relação com os experimentos, o tempo de abertura das superfícies horizontais na modelagem do ângulo drawdown, foi de apenas 3 segundos, pois foi verificado que neste intervalo de tempo as pilhas para avaliação do ângulo de atrito interno já estão completamente formadas.

Como o passo de tempo durante a simulação é calculado em função da rigidez do material, a duração da simulação está ligada ao módulo de elasticidade. Yan et al. (2015) observaram em seu estudo que, numa faixa de 10^7 a 10^{11} Pa, o módulo de elasticidade não afeta consideravelmente os resultados. No entanto, a magnitude de influência do módulo de elasticidade no tempo de simulação pode variar dependendo de caso a caso. Posto isso, neste estudo reduziu-se o módulo de elasticidade do polipropileno $2,14 \times 10^9$ Pa para $2,14 \times 10^7$ Pa.

A figura 3.28 ilustra as etapas da simulação do teste de ângulo de repouso e drawdown.

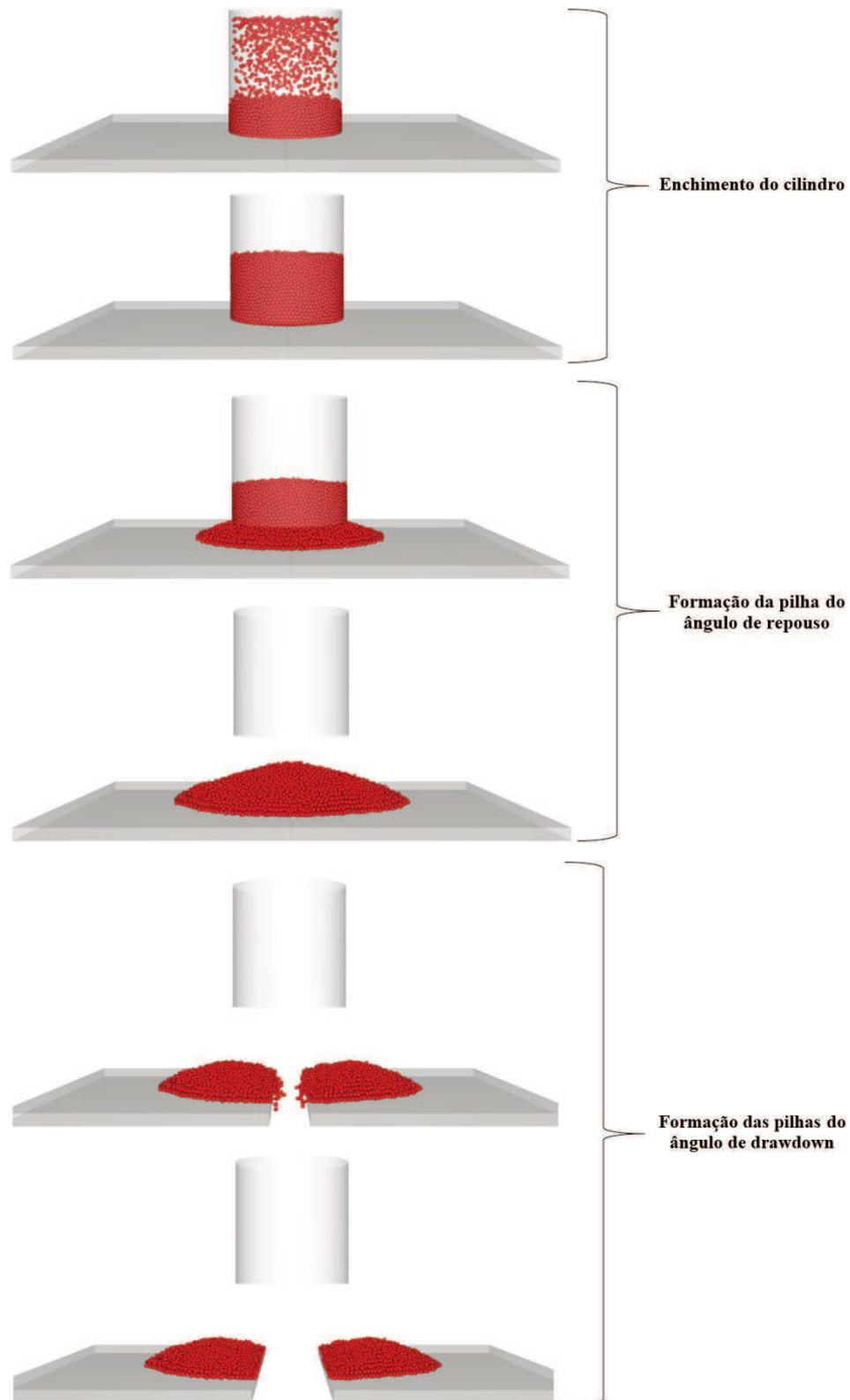


Figura 3.28 – Simulação dos testes de ângulo de repouso e drawdown no Rocky DEM.

Com base nos os experimentos e nas simulações do ângulo de repouso e drawdown, determinou-se uma faixa de valores, na qual foi realizada a otimização dos coeficientes de interação entre partículas. A delimitação do campo de busca para a resistência ao rolamento foi

definida uma faixa de valores de 0,05 a 0,45, para o coeficiente de restituição partícula-partícula entre 0,4 a 0,8, e para o atrito estático e dinâmico partícula-partícula uma faixa entre 0,2 a 0,5, respeitando a condição física de que o atrito estático é sempre maior que o dinâmico.

Então, com o espaço de busca definido, foram gerados 30 *design points*, através do método manual *Screening*, disponível no algoritmo de otimização direta da ANSYS DesignXplorer. A tabela 3.2 mostra os *design points* gerados pelo algoritmo otimizador.

Tabela 3.2 – Combinações dos coeficientes para omtimização.

$C. R_{pp}$	$\mu_{d_{pp}}$	$\mu_{e_{pp}}$	μ_r
0,407	0,205	0,205	0,053
0,433	0,280	0,405	0,113
0,460	0,243	0,338	0,173
0,473	0,393	0,438	0,059
0,513	0,224	0,472	0,149
0,540	0,299	0,316	0,065
0,593	0,336	0,449	0,185
0,620	0,214	0,383	0,101
0,633	0,364	0,483	0,131
0,673	0,252	0,427	0,077
0,700	0,327	0,361	0,137
0,727	0,233	0,294	0,197
0,740	0,383	0,394	0,054
0,753	0,308	0,494	0,084
0,780	0,271	0,309	0,144
0,407	0,205	0,205	0,204
0,433	0,28	0,405	0,304
0,46	0,243	0,338	0,404
0,473	0,393	0,438	0,214
0,513	0,224	0,472	0,364
0,54	0,299	0,316	0,224
0,593	0,336	0,449	0,424
0,62	0,214	0,383	0,284
0,633	0,364	0,483	0,334
0,673	0,252	0,427	0,244
0,7	0,327	0,361	0,344
0,727	0,233	0,294	0,444
0,74	0,383	0,394	0,206
0,753	0,308	0,494	0,256
0,780	0,271	0,309	0,356

Após isto, aplicou-se o método de otimização MOGA (Multi-Objective Genetic Algorithm) via otimização por superfície de resposta, a fim de encontrar as melhores combinações de parâmetros.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Este capítulo apresenta os resultados das curvas de fluidização e defluidização experimentais, a caracterização física das partículas, a calibração dos parâmetros da modelagem DEM e os resultados obtidos nas simulações que utilizaram a metodologia de acoplamento DEM-CFD discutida neste trabalho.

4.1 CURVAS DE FLUIDIZAÇÃO E DEFLUIDIZAÇÃO EXPERIMENTAIS

As figuras 4.1 e 4.2 apresentam as curvas de fluidização e defluidização das partículas de polipropileno realizadas em triplicada.

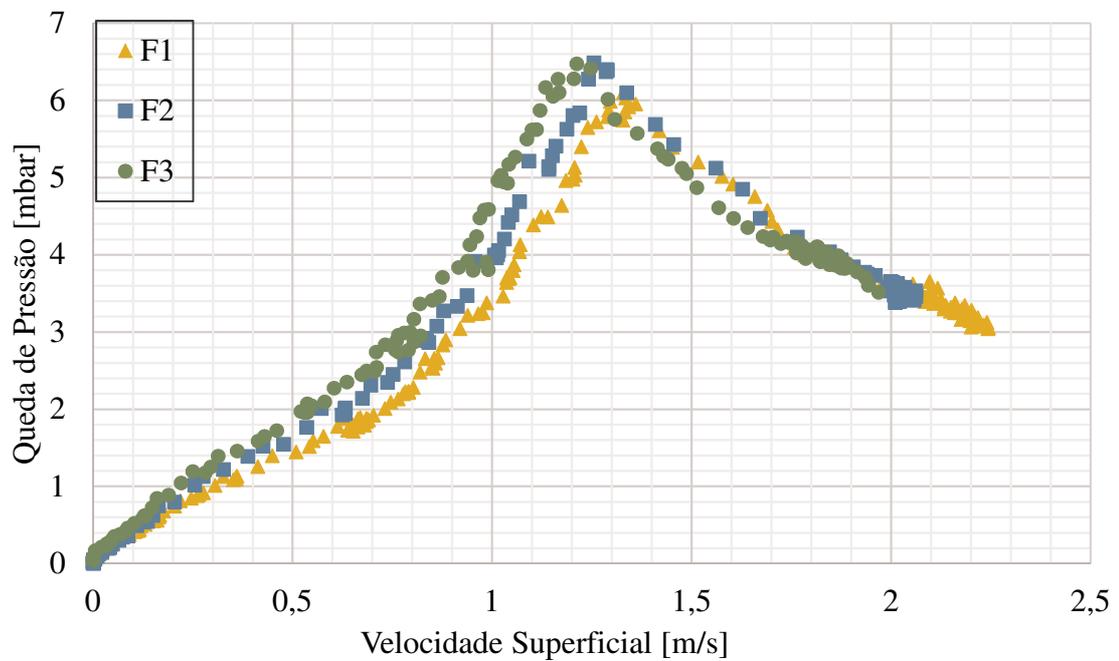


Figura 4.1- Curva de fluidização do polipropileno.

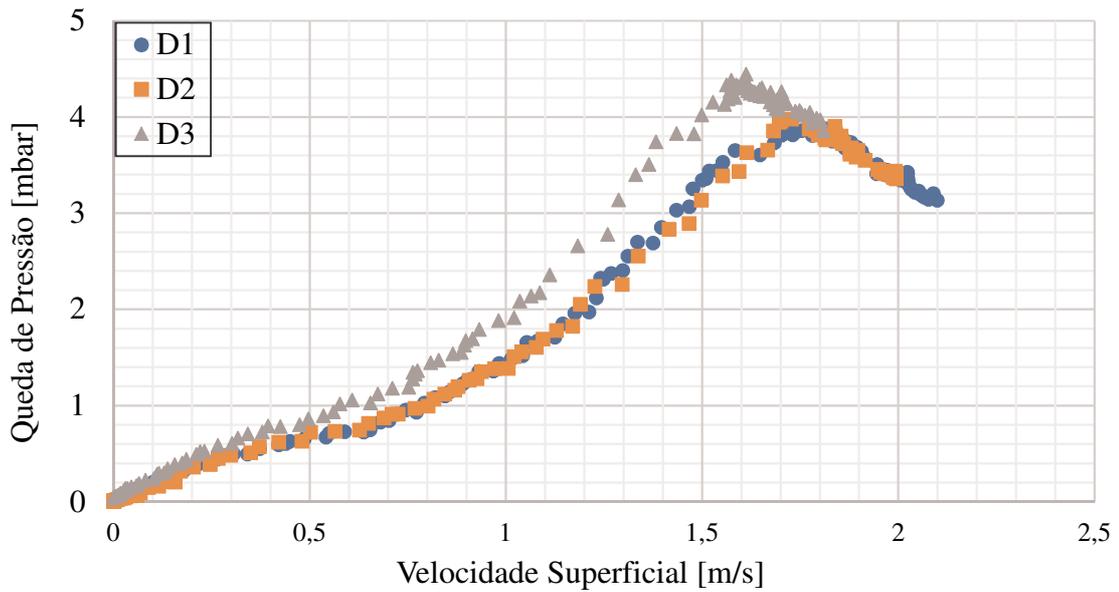


Figura 4.2 - Curva da defluidização do polipropileno.

A partir das curvas observadas nas figuras 4.1 e 4.2, determinou-se a velocidade de jorro mínimo experimental, conforme procedimento descrito no capítulo 2.1.5. Devido à elevada quantidade de pontos coletados e a instabilidade das curvas, em consequência da variação de pressão da rede de ar comprimido, as margens de visualização das curvas características de fluidização e defluidização foram ampliadas, de modo a melhor aproximar os valores para a velocidade de jorro mínimo e a queda de pressão nesta condição. A figura 4.3 demonstra a obtenção destes valores.

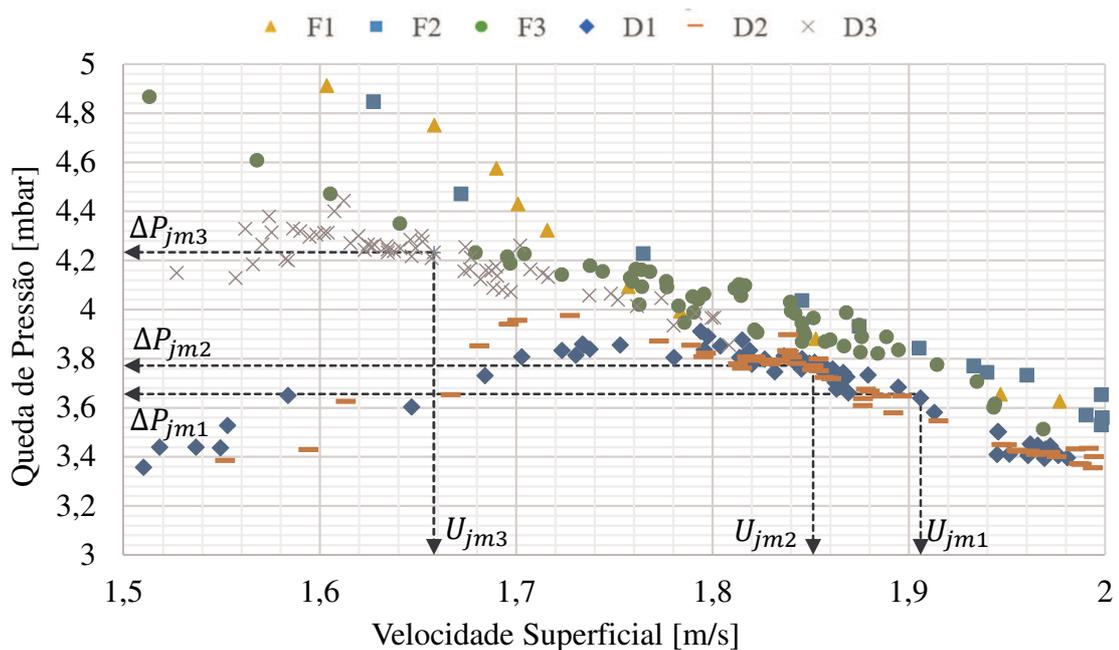


Figura 4.3 – Valores individuais para velocidade de jorro mínimo e sua queda de pressão.

Na figura 4.3 são obtidos os valores para a velocidade de jorro mínimo e sua respectiva queda de pressão para cada repetição realizada. Foi verificado um valor para U_{jm1} de $1,906 \pm 0,029$ m/s e de $3,655 \pm 0,084$ mbar para ΔP_{jm1} , para U_{jm2} um valor de $1,851 \pm 0,028$ m/s juntamente com um valor de $3,771 \pm 0,087$ mbar para ΔP_{jm2} , e para a terceira repetição, foi encontrado um valor de $1,658 \pm 0,025$ m/s para U_{jm3} com um valor de $4,233 \pm 0,097$ mbar para ΔP_{jm3} .

Da forma análoga, foi encontrada a máxima queda de pressão para cada uma das três repetições, conforme figura 4.4.

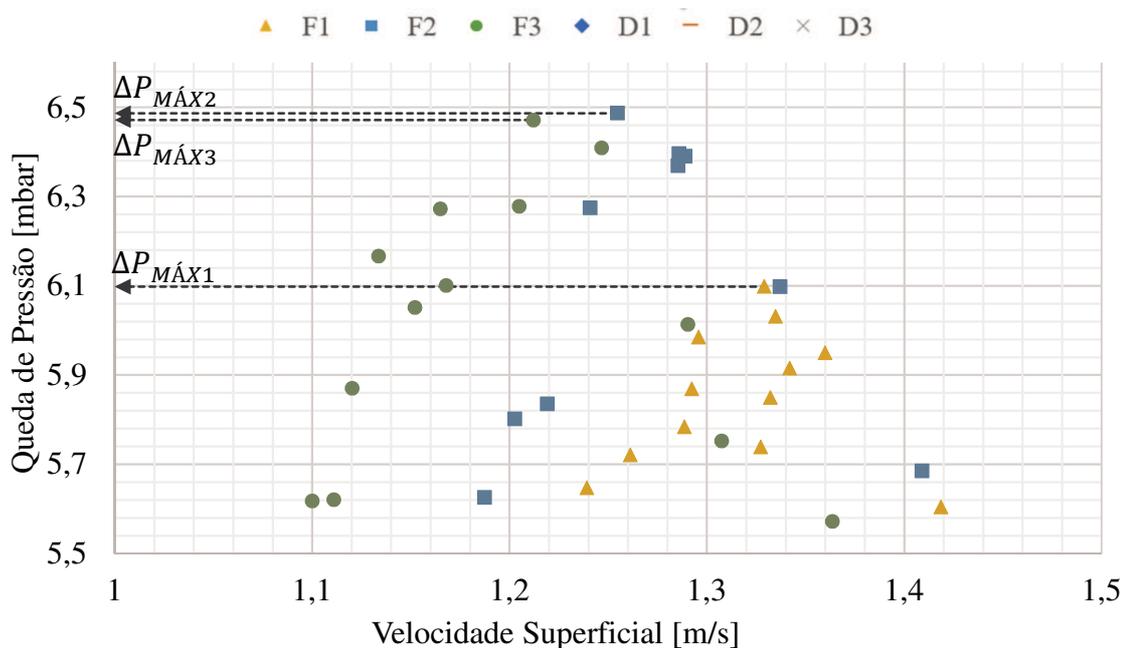


Figura 4.4 – Máxima queda de pressão para as curvas características do polipropileno.

Analisando a figura 4.4, verifica-se que o maior valor para a queda de pressão máxima foi de $6,486 \pm 0,149$ mbar para $\Delta P_{MÁX2}$, seguida por $\Delta P_{MÁX3}$ com um valor de $6,471 \pm 0,149$ mbar e um valor de $6,098 \pm 0,140$ mbar para $\Delta P_{MÁX1}$.

A figura 4.5 fornece as curvas características da fluidização e defluidização do polipropileno com os valores médios encontrados para a velocidade de jorro mínimo, para a queda de pressão máxima e para a queda de pressão na condição de jorro mínimo.

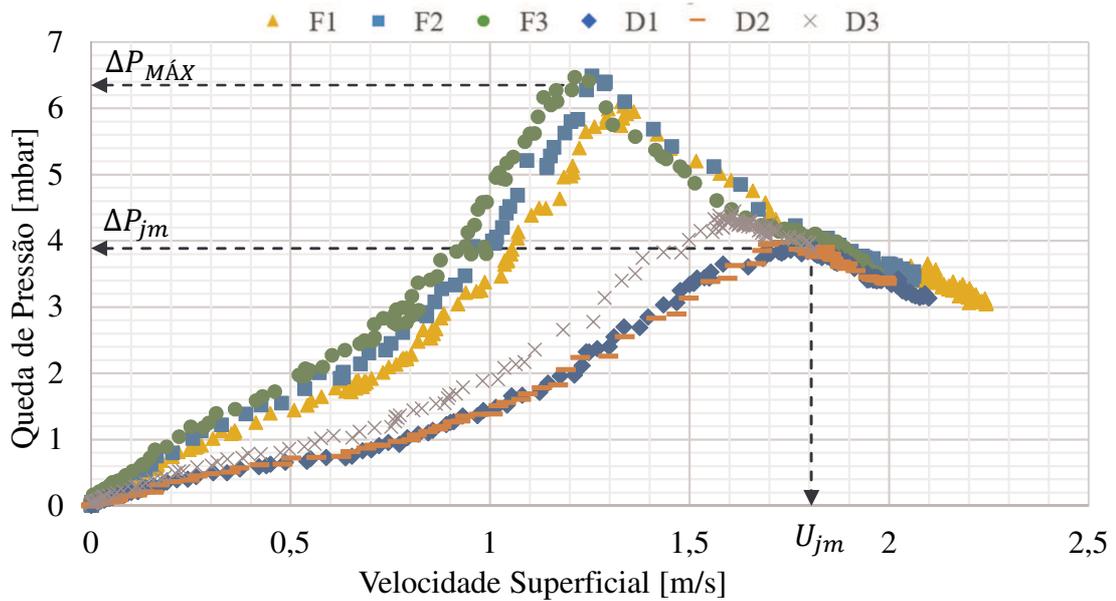


Figura 4.5 – Valores médios encontrados para as curvas características do polipropileno.

Analisando o gráfico apresentado na figura 4.5, verifica-se que a velocidade de jorro mínimo média para as partículas de polipropileno foi de aproximadamente $1,805 \pm 0,080$ m/s, com uma queda de pressão média nesta condição em torno de $3,886 \pm 0,198$ mbar. A média da queda de pressão máxima verificada foi de aproximadamente $6,351 \pm 0,194$ mbar, já com o desconto da queda de pressão da coluna do leito a vazio.

Durante as fluidizações foi observada visualmente qual a vazão no momento em que o jorro aflora sobre a superfície de material particulado depositado, sendo esta em torno de $43 \text{ Nm}^3/\text{h}$, que em termos de velocidade é de aproximadamente $1,72$ m/s, muito próximo com o valor obtido através do procedimento gráfico utilizado para obtenção da velocidade de jorro mínimo e da queda de pressão nesta condição, conforme demonstrado na figura 4.5.

4.2 CARACTERIZAÇÃO DAS PARTÍCULAS DE POLIPROPILENO

A caracterização física das partículas de polipropileno foi feita a fim de determinar as propriedades referentes ao material particulado, especificamente a massa específica real e massa específica de carga, o diâmetro médio e a esfericidade, como também obter as propriedades de interação entre partículas e partículas-parede, através dos coeficientes de atrito estático e atrito dinâmico, coeficiente de restituição, ângulo de repouso e ângulo drawdown. A tabela 4.1 mostra os resultados encontrados na caracterização das partículas de polipropileno, fornecendo as propriedades físicas e geométricas do material particulado, bem como, os

coeficientes de interação partícula-parede, através da média aritmética simples (\bar{X}) e do desvio padrão (σ).

Tabela 4.1 - Caracterização das partículas de polipropileno.

	d_p	φ	ρ_p	ρ_{bc}	ρ_{bs}	$\mu_{s_{pw}}$	$\mu_{d_{pw}}$	A_R	A_D	$C. R_{pw}$
	[mm]	[-]	[kg/m ³]	[kg/m ³]	[kg/m ³]	[-]	[-]	[°]	[°]	[-]
\bar{X}	3,834	0,817	876,0	590,7	528,8	0,299	0,270	20,376	20,564	0,691
σ	0,238	0,057	0,3			0,008	0,043	1,330	1,716	0,087

Em geral, os valores encontrados para o ângulo drawdown são maiores que os de ângulo de repouso, devido ao aumento do contato entre partículas durante o escoamento de material (BEAKAWI AL-HASHEMI; BAGHABRA AL-AMOUDI, 2018). Neste trabalho, conforme ilustrado pela Tab. 4.1, verifica-se que os resultados obtidos para os ângulos foram muito próximos, com o valor do ângulo drawdown levemente superior ao ângulo de repouso, porém estatisticamente, sem diferença significativa.

Já os coeficientes de interação entre partículas (atrito estático, dinâmico e coeficiente de restituição), juntamente com a resistência ao rolamento, foram obtidos via otimização, descrita no item 3.6.5. Como resultado, o algoritmo de otimização gerou 3 candidatos principais, demonstrados pela tabela 4.2.

Tabela 4.2 – Combinações de parâmetros encontradas via otimização.

Candidato	$C. R_{pp}$	$\mu_{d_{pp}}$	$\mu_{e_{pp}}$	μ_r	Ângulo de repouso	Ângulo drawdown
1	0,73321	0,46297	0,48906	0,066324	★ ★ ★ 20,465	★ ★ ★ 20,579
2	0,77767	0,43713	0,46565	0,069276	★ ★ ★ 20,346	★ ★ ★ 20,774
3	0,40573	0,43698	0,46565	0,066942	★ ★ ★ 20,574	★ ★ ★ 20,795

O algoritmo de otimização MOGA utiliza os valores dos experimentos de ângulo de repouso e drawdown como valores de referência e busca encontrar as melhores combinações de parâmetros dentro do espaço de busca informado. Os três candidatos oriundos da otimização possuem valores de ângulo de repouso e drawdown extremamente próximos aos dos experimentos, dentro da faixa de desvio padrão dos testes experimentais.

Analisando a diferença relativa entre os valores encontrados na otimização com os valores experimentais, o candidato 1, possui um erro relativo de +0,43% para o ângulo de

repouso e de +0,07% para o ângulo drawdown, o candidato 2 apresenta um erro relativo de -0,14% para o ângulo de repouso e de +1,02% para o ângulo drawdown, e o candidato 3, fornece um erro relativo de +0,97% para o ângulo de repouso e de +1,12 para o ângulo drawdown. Verifica-se então que, o candidato que apresenta maior exatidão dos valores de ângulo de repouso e drawdown em relação aos experimentos é o candidato 1, fornecendo a melhor combinação de parâmetros que representam com acurácia as grandezas físicas envolvidas nos testes experimentais.

Além disso, realizou-se uma análise de sensibilidade da influência de cada parâmetro nos valores dos ângulos de repouso e drawdown. A figura 4.6 traz esta análise realizada.

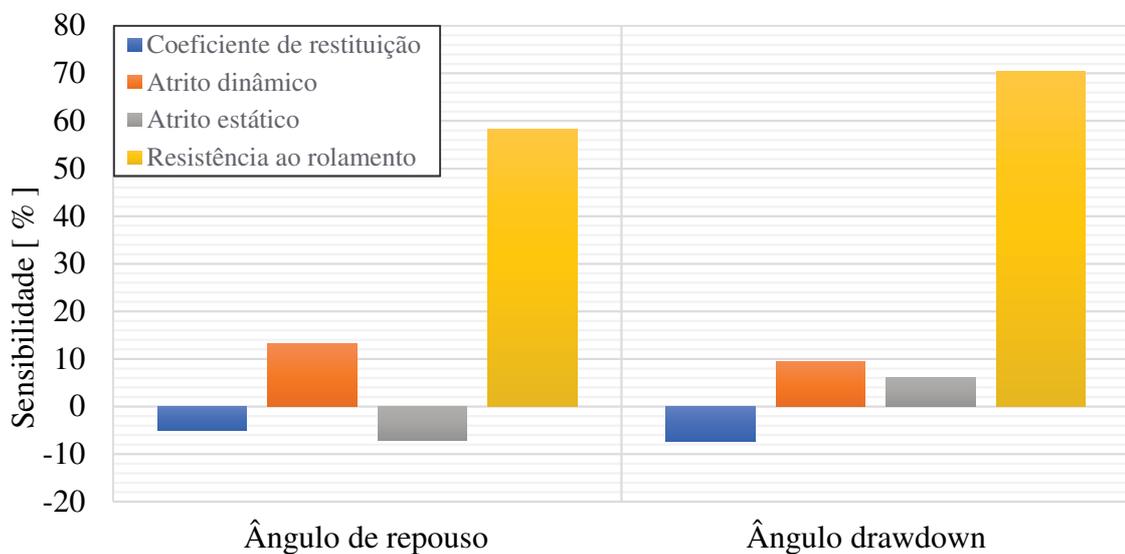


Figura 4.6 – Análise de sensibilidade dos parâmetros encontrados via otimização.

Através da Fig. 4.6 verifica-se que o parâmetro de interação partícula-partícula que mais exerce influência sobre o ângulo de repouso é a resistência ao rolamento (+58,29%), seguida pelo atrito dinâmico (+13,15%) e atrito estático (+7,03%), com uma leve influência do coeficiente de restituição (-5,06%). Em relação ao ângulo drawdown, a resistência ao rolamento também é o parâmetro de maior influência (+70,38%), seguida pelo atrito dinâmico (+9,39%), coeficiente de restituição (-7,32%) e atrito estático (+6,14%).

Outros trabalhos também avaliaram a influência dos parâmetros de interação partícula-partícula sobre os ângulos de repouso e drawdown, por exemplo, o estudo de Yan et al. (2015), onde os autores observaram que o coeficiente de restituição não possui influência na formação do ângulo de repouso e drawdown. Os autores também verificaram que a resistência ao rolamento é um parâmetro secundário ao atrito estático, visto que este é o parâmetro de principal influência na fluidez das partículas. Estas divergências encontradas na literatura podem estar

relacionadas a uma série de fatores, como o software DEM e o método de otimização empregado, o tamanho do material particulado, seu formato e suas propriedades físicas.

O comportamento gráfico dos ângulos de repouso e drawdown em função dos coeficientes de resistência ao rolamento, atrito estático, atrito dinâmico e coeficiente de restituição entre partículas, pode ser visualizado através de gráficos de superfície, tal qual ilustrado pela figura 4.7.

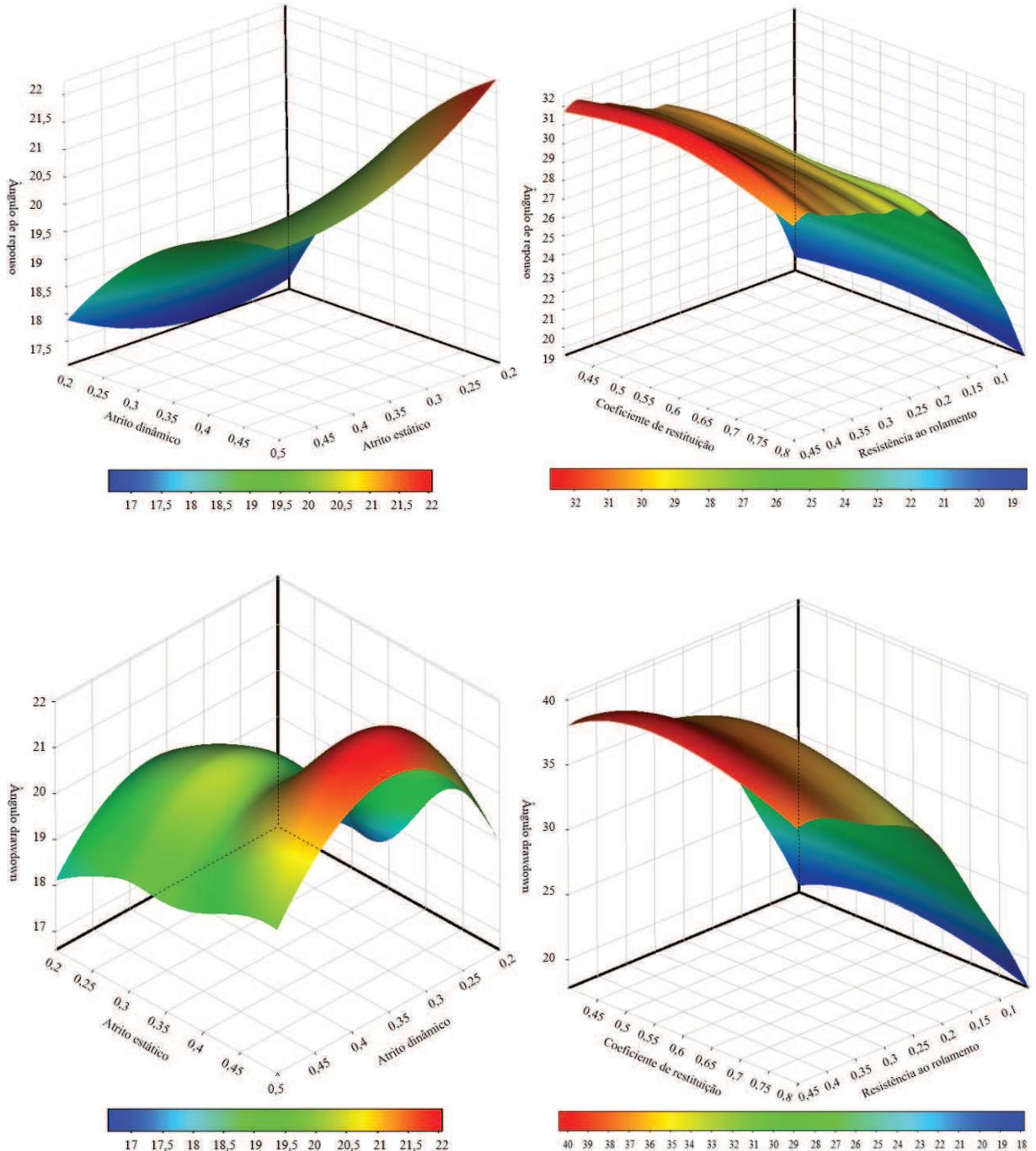


Figura 4.7 – Superfície de resposta dos ângulos de repouso e drawdown em função dos parâmetros otimizados.

Pela figura 4.7 pode ser comprovada visualmente a influência dominante da resistência ao rolamento, tanto para o ângulo de repouso como o ângulo drawdown, com uma grande variação, na faixa de 18° a 40° . Também é possível observar o efeito dos demais coeficientes, o atrito estático, o atrito dinâmico e o coeficiente de restituição, os quais apresentam baixo impacto na variação dos valores de ângulo de repouso e drawdown, porém significativos.

4.3 ANÁLISE DA QUALIDADE DA MALHA COMPUTACIONAL

A figura 4.8 evidencia as quatro malhas numéricas criadas, variando o tamanho das células em função do diâmetro médio do material particulado. A malha mais grosseira recebeu um tamanho de célula na ordem de cinco vezes o diâmetro médio das partículas, a malha intermediária deteve um tamanho de célula de três vezes o diâmetro médio das partículas, e a malha mais refinada, utilizou um tamanho de célula de duas vezes o diâmetro médio do material particulado, com e sem refino de parede.

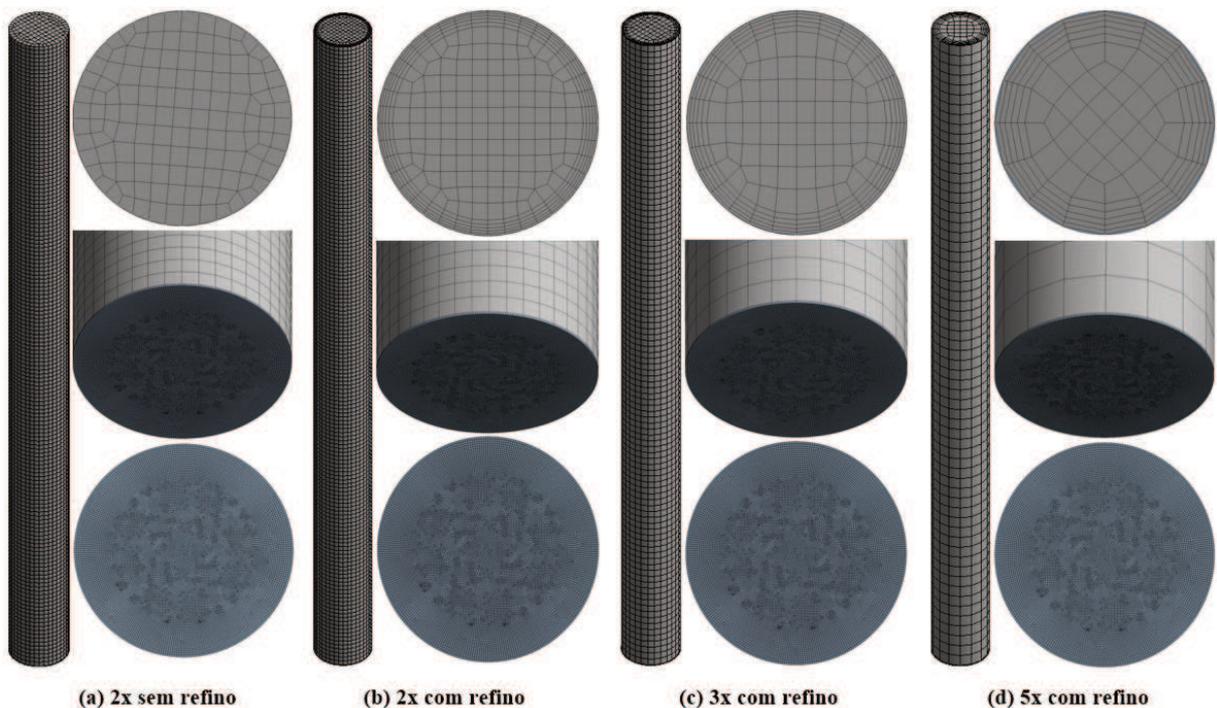


Figura 4.8 – Malhas empregadas na simulação.

Conforme observado na Fig. 4.8, a coluna do leito foi dividida em duas seções, a parte inferior, composta por uma camada delgada onde está localizada a placa distribuidora perfurada, e a parte superior, referente a coluna de fluidização do reator. Este procedimento foi necessário devido à diferença entre o tamanho de elemento das malhas empregadas com o diâmetro dos orifícios presentes na placa distribuidora, os quais são relativamente menores.

Com isto, no processo de geração da malha a placa distribuidora não é mapeada pelo *mesh*, ignorando assim a presença dos orifícios na geometria do distribuidor. Então, a fim de sanar esta inconformidade, a parte inferior da coluna do leito foi separada do restante, com uma espessura de 1 mm, apenas para realização do refino de malha nas regiões próximas dos orifícios, onde foi definido um tamanho de elemento de 1 mm.

No intuito de avaliar a qualidade das malhas criadas, foram utilizados como critério os parâmetros de qualidade *Skewness* e *Orthogonal Quality*, demonstrados pela tabela 4.3.

Tabela 4.3 – Análise do refino de malha.

Malha	Tamanho da célula [m]	Número de células	Assimetria [-]	Qualidade ortogonal [-]
1 – [2x]	0,007668	32704	0,1318	0,9775
2 – [2x]*	0,007668	64261	0,0953	0,9864
3 – [3x]*	0,011502	35025	0,1140	0,9828
4 – [5x]*	0,019170	19821	0,1285	0,9776

*Com refino de parede

Segundo manual técnico da ANSYS (2014), para garantir uma boa malha numérica o valor para o parâmetro assimetria (*skewness*) deve estar compreendido em uma faixa de 0 – 0,8, e o valor para o parâmetro qualidade ortogonal (*orthogonal quality*) deve estar presente em uma faixa entre 0,2 – 1. A figura 4.9 mostra a classificação da qualidade da malha de acordo com estes índices.

Skewness					
Excelente	Muito bom	Bom	Aceitável	Ruim	Inaceitável
0-0.25	0.25-0.50	0.50-0.80	0.80-0.94	0.95-0.97	0.98-1.00
Orthogonal Quality					
Inaceitável	Ruim	Aceitável	Bom	Muito bom	Excelente
0-0.001	0.001-0.14	0.15-0.20	0.20-0.69	0.70-0.95	0.95-1.00

Figura 4.9 – Valores recomendados de *Skewness* e *Orthogonal Quality*.

Fonte: Adaptado de ANSYS (2014).

Observando os valores da Tab. 4.3, verifica-se que as quatro malhas criadas possuem qualidade excelente, de acordo com a descrição realizada na Fig. 4.9.

4.4 ANÁLISE DO REFINO DE PAREDE NA MALHA COMPUTACIONAL

O estudo do refino de parede foi feito através do confronto das curvas de fluidização e defluidização numéricas com as experimentais. As figuras 4.10 e 4.11 apresentam as curvas de fluidização simuladas, com e sem refino de parede, enquanto as figuras 4.12 e 4.13 ilustram as curvas numéricas de defluidização, na configuração com refino de parede e sem refino, respectivamente. O setup da simulação foi gerado utilizando a malha com maior refino (2x) e os valores dos coeficientes de interação partícula-partícula oriundos do candidato 1, proveniente da otimização de parâmetros mostrada na Tab. 4.2.

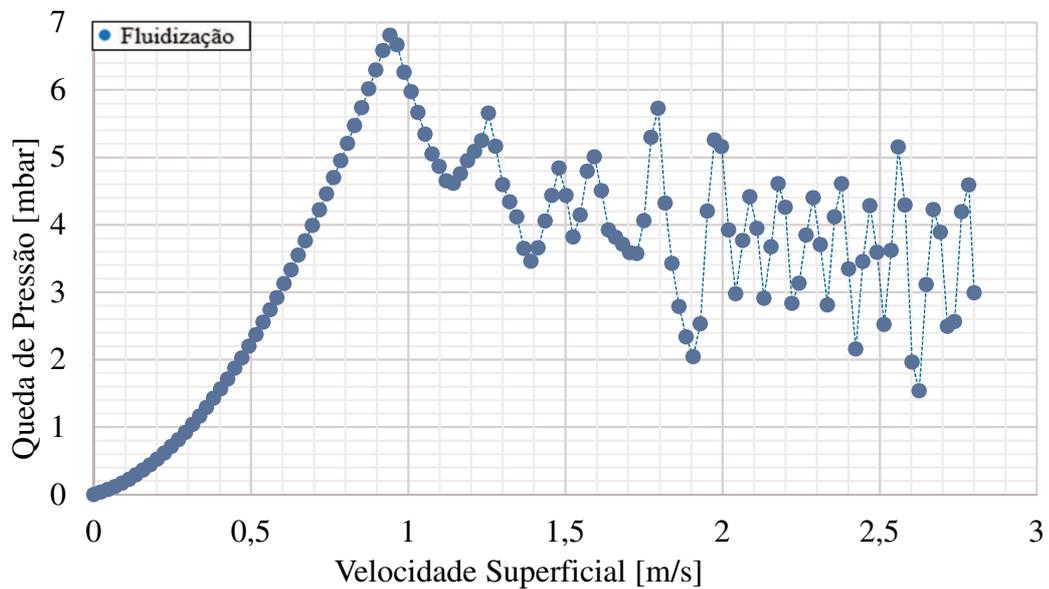


Figura 4.10 – Curva de fluidização simulada com a malha 2x utilizando refino de parede.

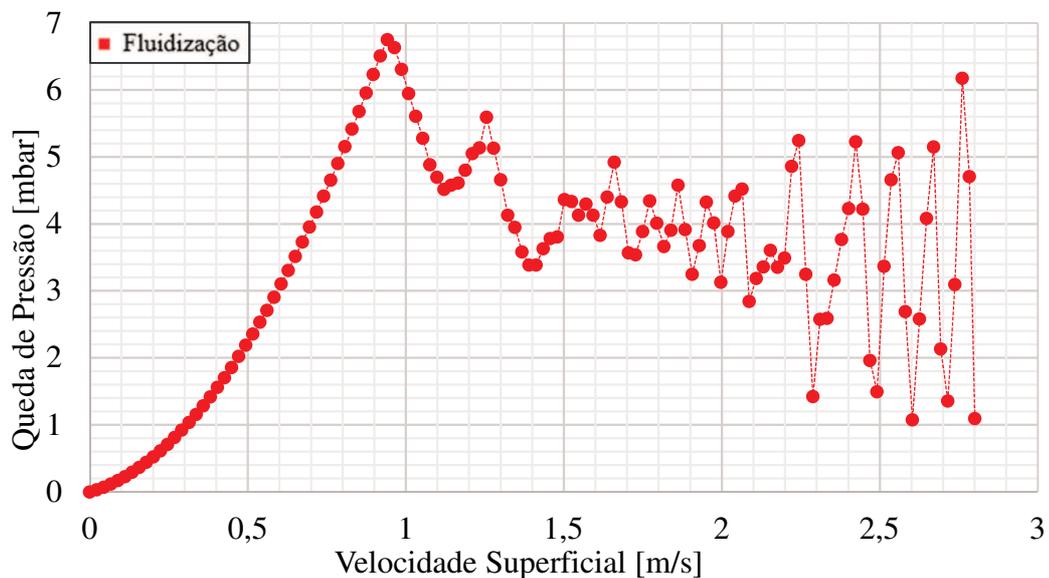


Figura 4.11 – Curva de fluidização simulada com a malha 2x sem refino de parede.

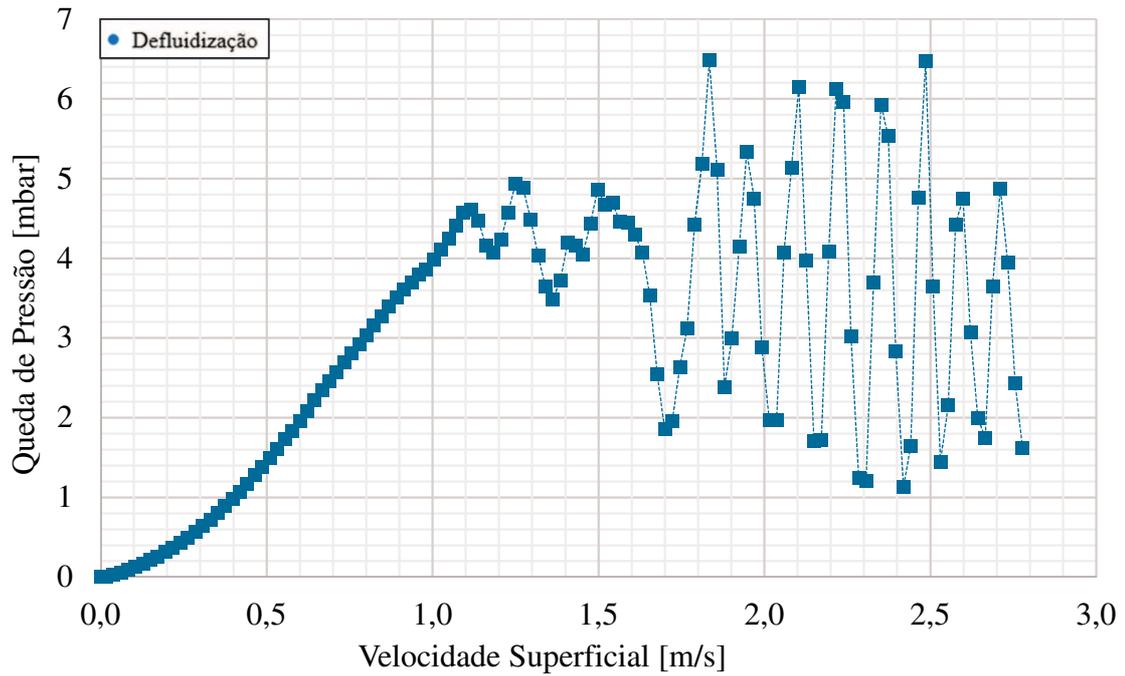


Figura 4.12 – Curva de defluidização simulada com a malha 2x utilizando refinamento de parede.

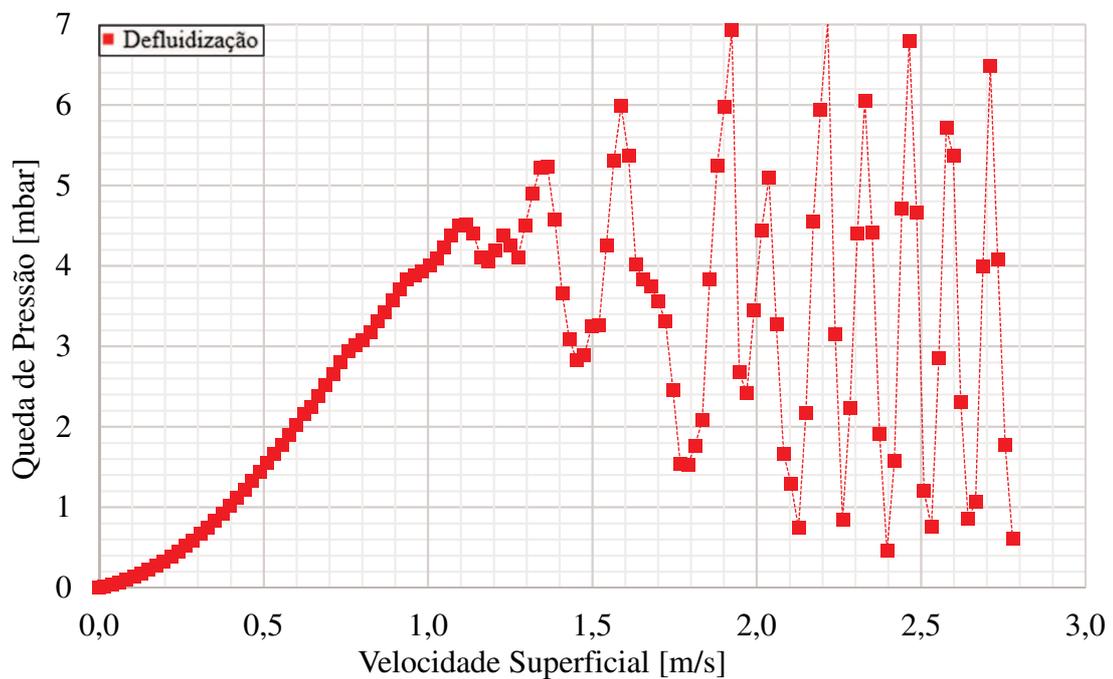


Figura 4.13 – Curva de defluidização simulada com a malha 2x sem refinamento de parede.

Em consequência da notável variação dos valores de queda de pressão, não é possível estimar graficamente a velocidade de jorro mínimo e a respectiva queda de pressão nesta condição, através da análise direta dos pontos simulados. No entanto, é de conhecimento que

um leito característico de jorro tende a alcançar um patamar de operação constante, no qual o incremento da velocidade já não afeta significativamente o valor para a queda de pressão, conforme descrito pela figura 2.8, presente na seção 2.1.5 deste trabalho. Deste modo, é possível traçar uma linha com a média temporal no gráfico da curva de fluidização, partindo da região onde há o início da oscilação dos valores da queda de pressão, da qual se obtém o valor aproximado para a queda de pressão na condição de jorro mínimo.

Além disso, para captar o comportamento da curva sem a poluição gráfica gerada pelas oscilações, é inserida uma linha de tendência polinomial, a qual exhibe o comportamento aproximado da curva em função da distribuição dos pontos. A velocidade de jorro mínimo é obtida então determinando a intersecção entre a linha da média temporal com a linha de tendência polinomial referente a curva de defluidização.

As figuras 4.14 e 4.15 trazem as curvas de fluidização do polipropileno para os casos utilizando o refino de parede e sem o refino de parede.

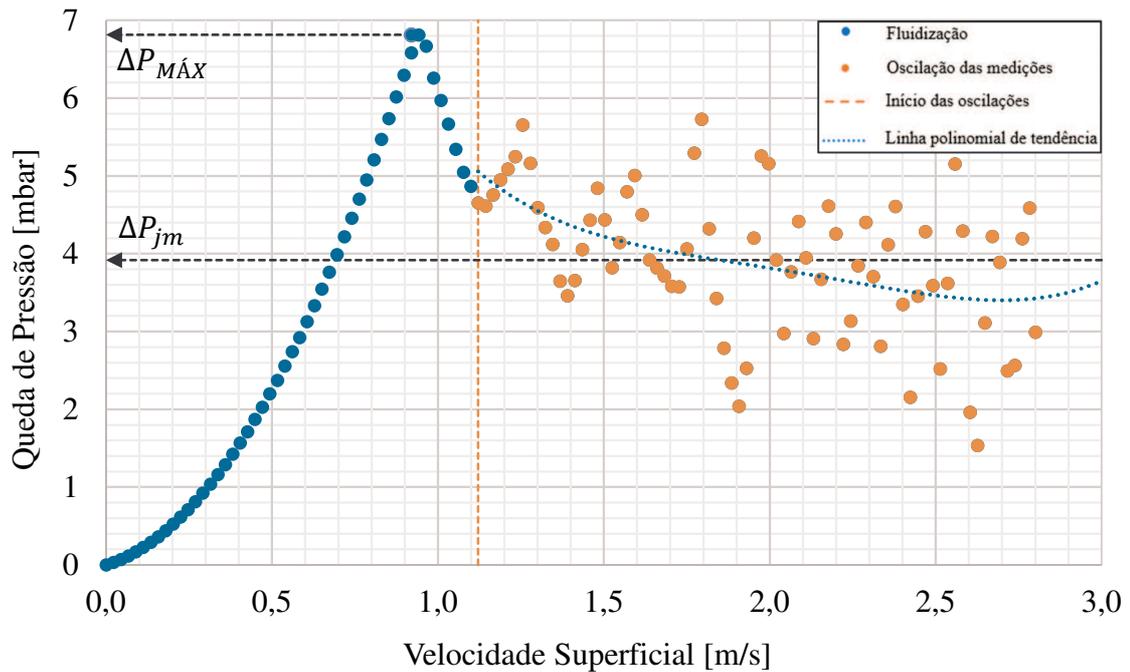


Figura 4.14 – Curva característica de fluidização do polipropileno utilizando a malha 2x com refino de parede.

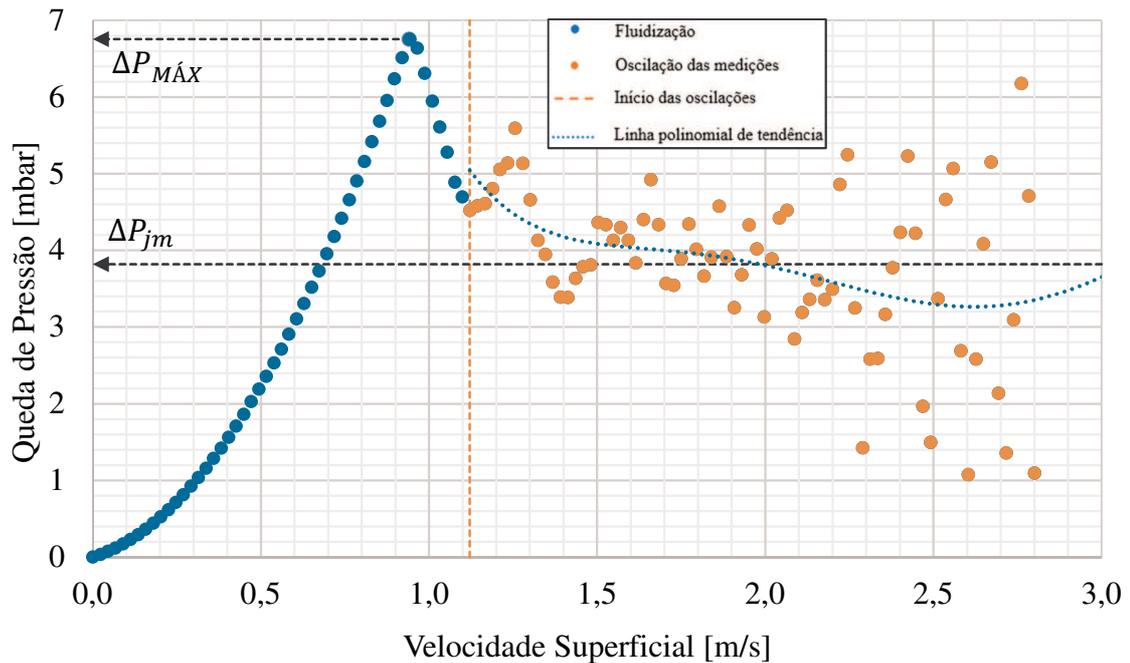


Figura 4.15 – Curva característica de fluidização do polipropileno utilizando a malha 2x sem refino de parede.

Com base na Fig. 4.14, verifica-se que a imposição do refino de parede resulta em um valor de 6,813 mbar para a máxima queda de pressão e de aproximadamente $3,916 \pm 0,920$ mbar para a queda de pressão na condição de jorro mínimo. Pela Fig. 4.15, é observado que sem o refino de parede, o valor encontrado para a máxima queda de pressão é de 6,755 mbar, e em torno de $3,82 \pm 1,04$ mbar para a queda de pressão no estado de jorro mínimo.

As linhas traçadas nas figuras 4.14 e 4.15 fornecem um valor aproximado para a queda de pressão na condição de jorro mínimo, atuando como critério de avaliação do refino de parede. As figuras 4.16 e 4.17 indicam as curvas de defluidização para a malha com refino de parede e sem o refino de parede.

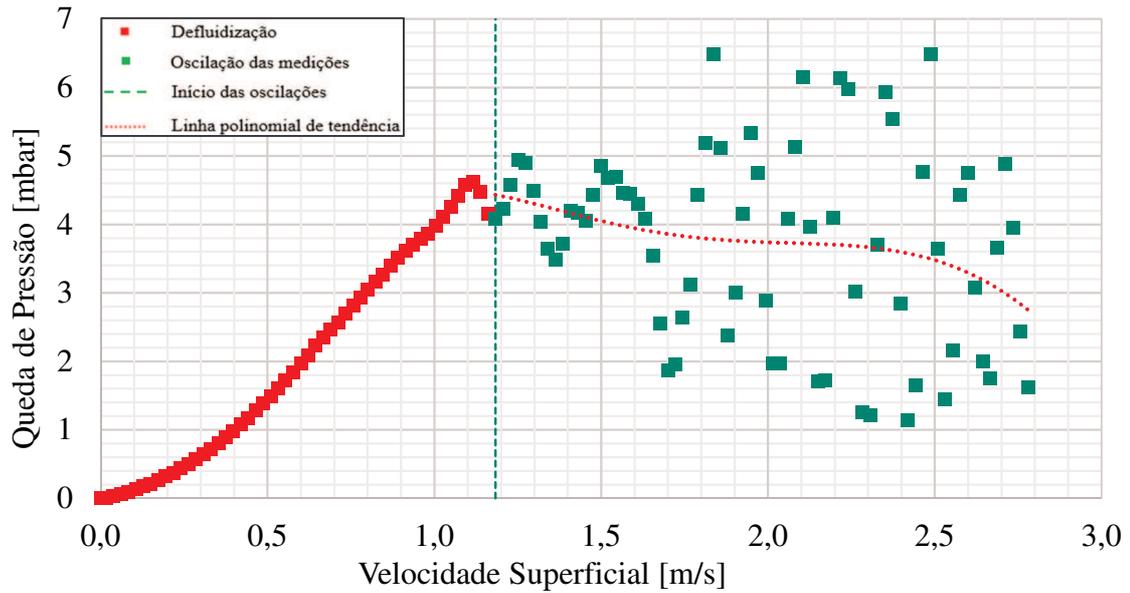


Figura 4.16 – Curva característica de defluidização do polipropileno utilizando a malha 2x com refino de parede.

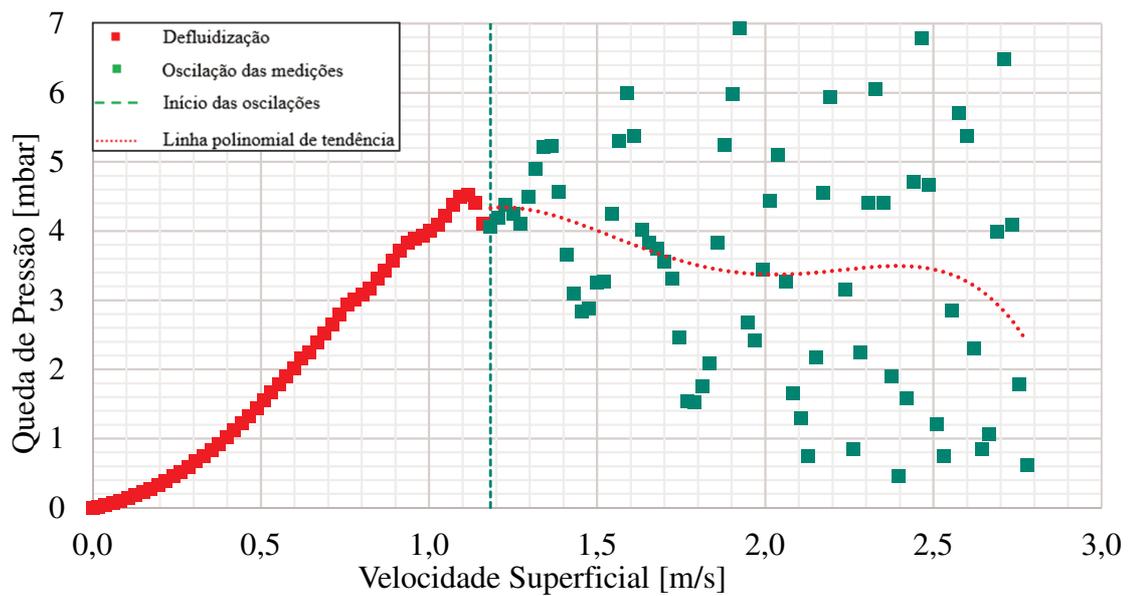


Figura 4.17 – Curva característica de defluidização do polipropileno utilizando a malha 2x sem refino de parede.

Ampliando e transpondo os gráficos de fluidização e defluidização para os casos com refino de parede e sem refino de parede, podem ser vistos os pontos exatos em que foram obtidas as velocidades de jorro mínimo, vide figuras 4.18 e 4.19.

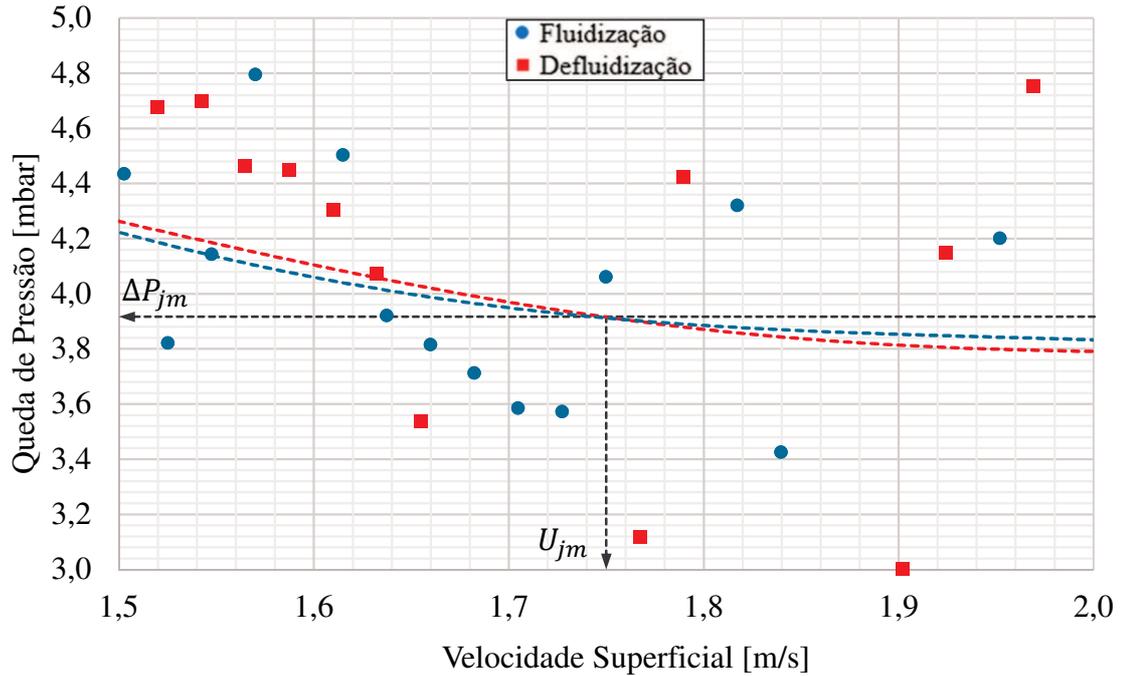


Figura 4.18 – Obtenção da velocidade de jorro mínimo utilizando a malha 2x com refino de parede.

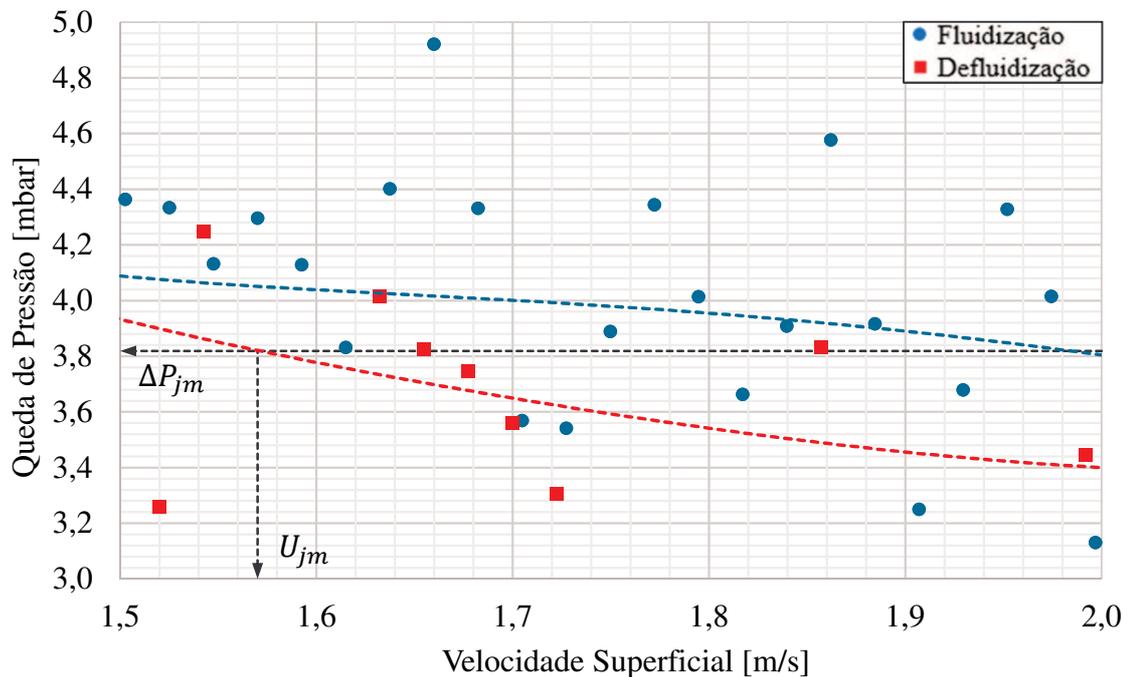


Figura 4.19 – Obtenção da velocidade de jorro mínimo utilizando a malha 2x sem refino de parede.

Utilizando o refino de parede obteve-se uma velocidade de jorro mínimo de aproximadamente 1,75 m/s, enquanto que sem o refino foi encontrada uma velocidade de jorro mínimo em torno de 1,57 m/s. As figuras 4.20 e 4.21 ilustram os resultados encontrados pelo

método da análise gráfica, através da sobreposição das curvas numéricas de fluidização e defluidização, utilizando a malha de maior refino (2x) para os casos com e sem refino de parede, respectivamente.

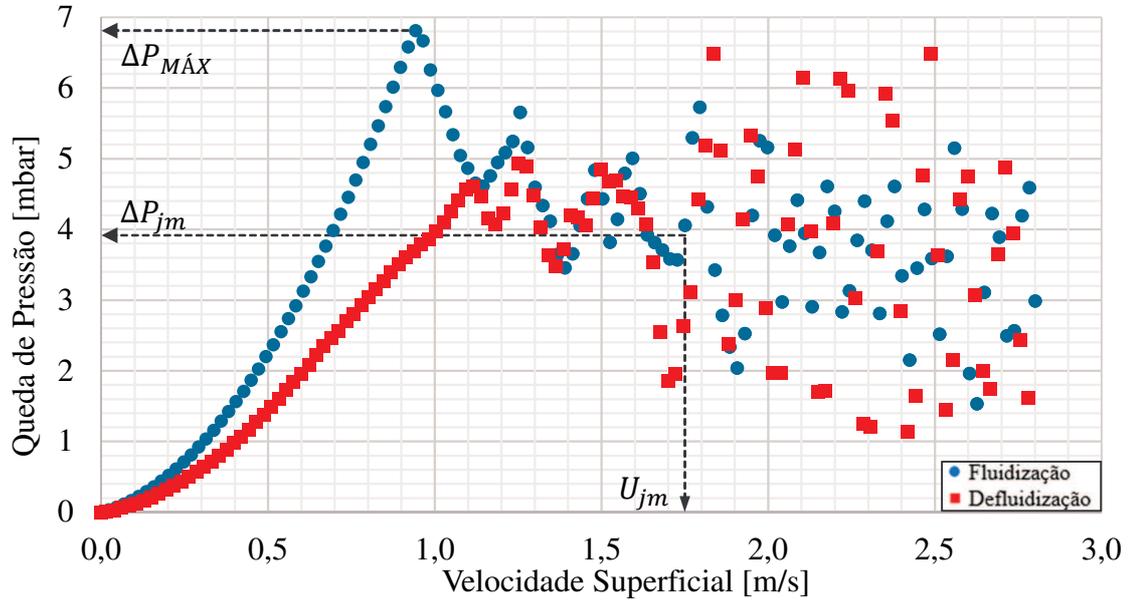


Figura 4.20 – Simulação das curvas características do polipropileno utilizando a malha 2x com refino de parede.

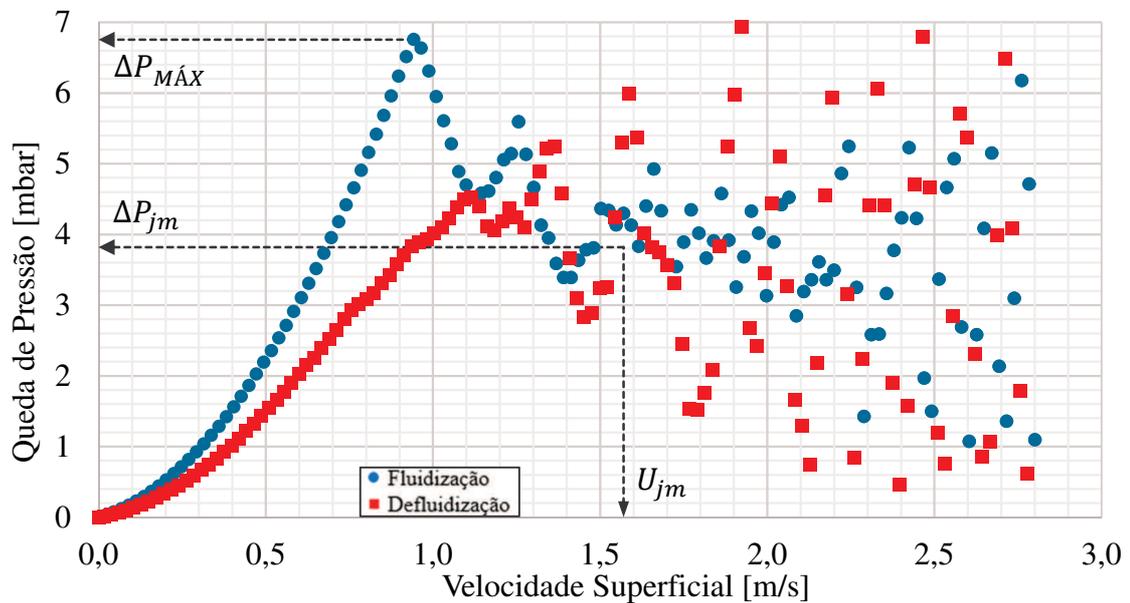


Figura 4.21 – Simulação das curvas características do polipropileno utilizando a malha 2x sem refino de parede.

Comparando com os resultados experimentais, verifica-se uma diferença relativa de 7,27% para a máxima queda de pressão, de 3,04% para a velocidade de jorro mínimo e de 0,77% para a queda de pressão na condição de jorro mínimo utilizando a malha com o refino

de parede. Já para o caso sem refino de parede, é verificado uma diferença de 6,36% para a máxima queda de pressão, de 13,02% para a velocidade de jorro mínimo e de 1,72% para a queda de pressão nesta condição.

Verifica-se então que, utilizando a malha com refino de parede nas simulações das curvas características de fluidização e defluidização do polipropileno, encontra-se resultados mais próximos dos experimentais para a velocidade de jorro mínimo e para a queda de pressão nesta condição, devido a maior captação da influência dos efeitos de parede no interior do reator. Já para a queda de pressão máxima, a malha sem refino de parede produziu resultados mais próximos aos experimentais, no entanto, como neste estudo os parâmetros de maior impacto são a velocidade de jorro mínimo e sua respectiva queda de pressão, o emprego do refino de parede se torna mais adequado para este trabalho, além de apresentar uma menor dispersão de valores nas curvas numéricas de fluidização e defluidização.

4.5 CURVAS DE FLUIDIZAÇÃO E DEFLUIDIZAÇÃO NUMÉRICAS

A simulação DEM-CFD das curvas características de fluidização e defluidização do polipropileno foram realizadas utilizando as malhas 2*, 3* e 4*, conforme ilustrado pela Tab. 4.3, as quais possuem o tamanho de suas células relacionado ao tamanho do elemento, 2x, 3x e 5x, respectivamente, e empregando os valores do candidato 1, vide Tab. 4.2, para os coeficientes de interação entre partículas. As curvas referentes a malha mais refinada (2x) estão ilustradas na seção 4.4 deste trabalho, onde foi avaliada a influência do refino de parede na simulação do leito.

As figuras 4.22 e 4.23 mostram as curvas características de fluidização e defluidização para a malha intermediária (3x).

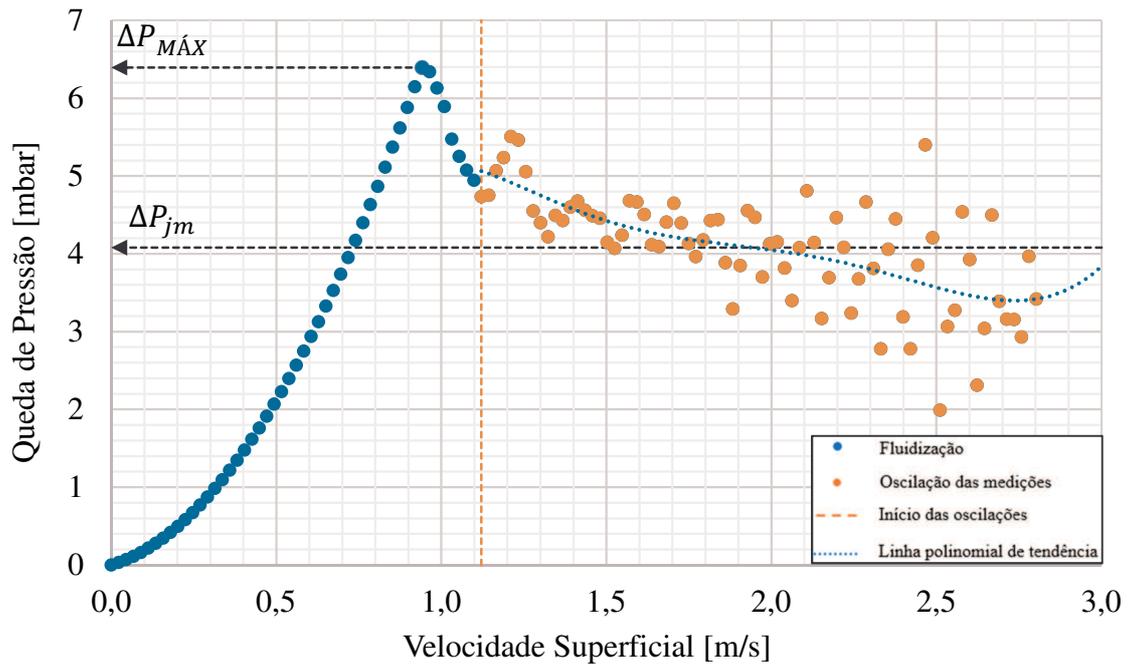


Figura 4.22 – Simulação DEM-CFD da curva de fluidização do polipropileno utilizando a malha 3x.

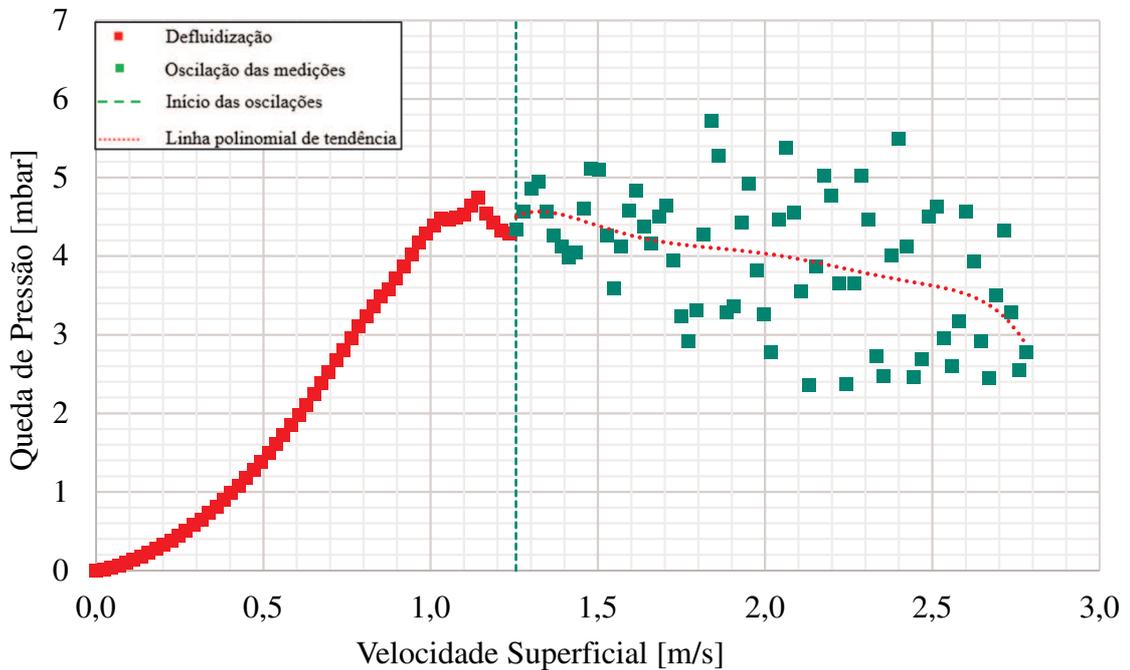


Figura 4.23 – Simulação DEM-CFD da curva de defluidização do polipropileno utilizando a malha 3x.

Através da curva de fluidização, demonstrada pela figura 4.22, é retirado o valor para a queda de pressão máxima no leito, que foi de 6,393 mbar e o valor aproximado para a queda de pressão na condição de jorro mínimo, com um valor de $4,081 \pm 0,703$ mbar. A velocidade de

jorro mínimo e a respectiva queda de pressão são obtidos utilizando a mesma abordagem empregada na obtenção dos valores experimentais.

Devido à intensa variação da queda de pressão a partir de determinado ponto, torna-se difícil a obtenção dos valores via análise gráfica; então, realizou-se o mesmo procedimento empregado na análise da malha mais refinada (2x), onde foram inseridas linhas de tendência polinomiais, de modo a captar o comportamento da curva sem a poluição gráfica gerada pelas oscilações. Também foi inserida uma linha média referente aos valores da queda de pressão na região de alta variação, da qual é obtida a queda de pressão na condição de jorro mínimo.

A figura 4.24 evidencia a obtenção da velocidade de jorro mínimo e da queda de pressão nesta condição, através do cruzamento das curvas numéricas de fluidização e defluidização, onde os intervalos de escala do gráfico foram ampliados, a fim de facilitar a visualização.

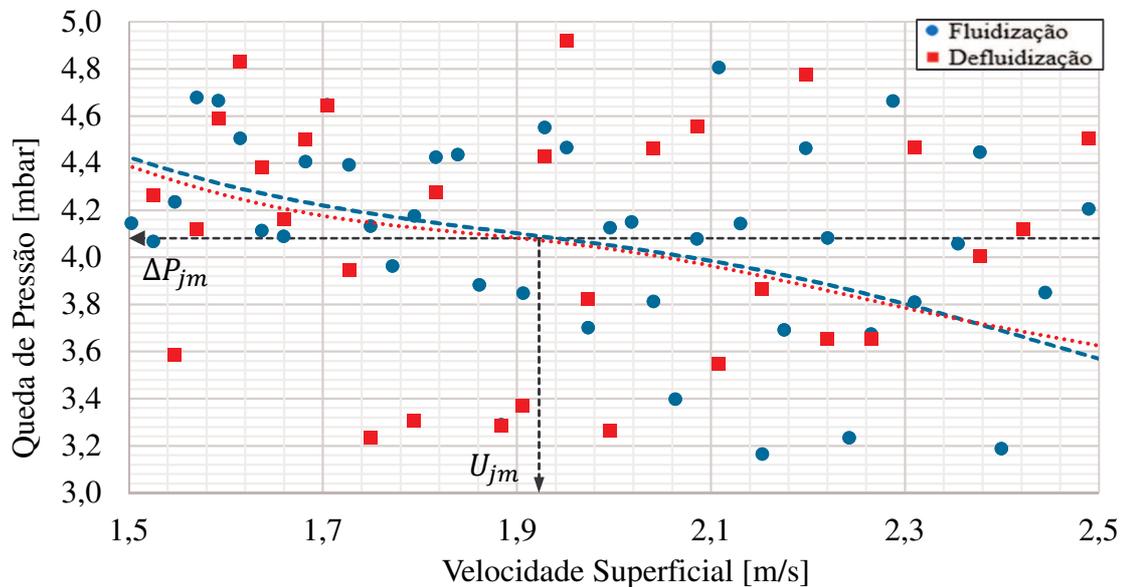


Figura 4.24 – Obtenção da velocidade de jorro mínimo utilizando a malha 3x.

A partir da avaliação gráfica das curvas características do polipropileno utilizando a malha intermediária (3x), foi obtido um valor para a velocidade de jorro mínimo de 1,923 m/s. Comparando os resultados numéricos com os valores experimentais, a diferença relativa para a máxima queda de pressão foi de 0,66%, para a velocidade de jorro mínimo de 6,53% e para a queda de pressão na condição de jorro mínimo de 5,01%.

A figura 4.25 ilustra os resultados encontrados pelo método da análise gráfica através da sobreposição das curvas numéricas de fluidização e defluidização, utilizando a malha intermediária (3x).

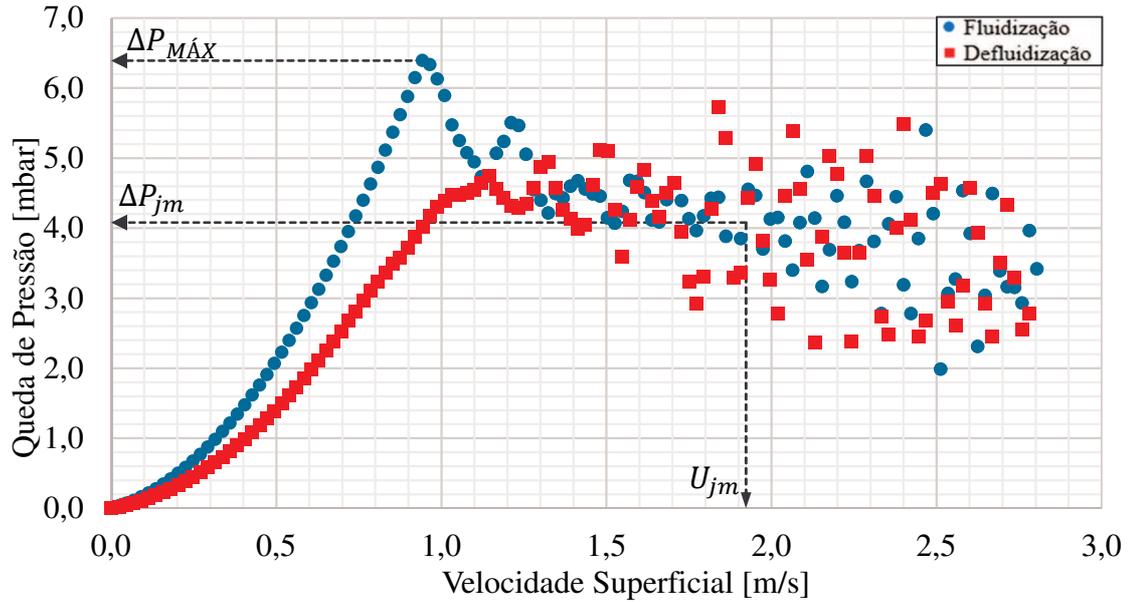


Figura 4.25 – Simulação das curvas características do polipropileno utilizando a malha intermediária 3x.

A análise da malha mais grosseira (5x) foi realizada da mesma forma, onde a figura 4.26 traz a curva de fluidização desta configuração.

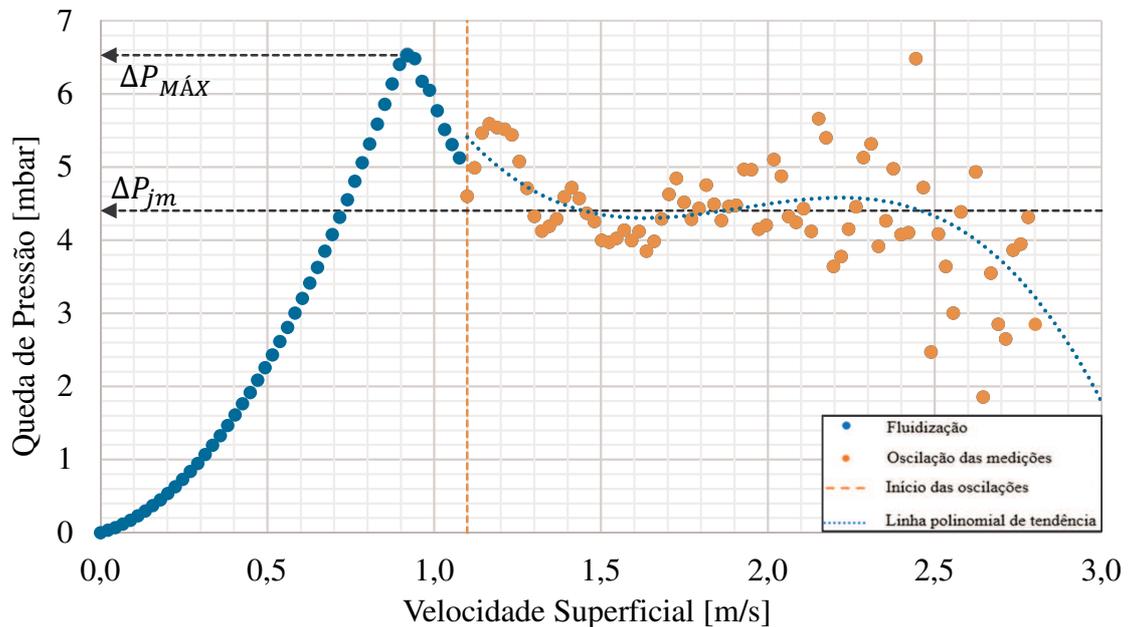


Figura 4.26 – Simulação DEM-CFD da curva de fluidização do polipropileno utilizando malha 5x.

A malha 5x forneceu um valor para a máxima queda de pressão de 6,531 mbar, e um valor aproximado de $4,404 \pm 0,819$ mbar para a queda de pressão na condição de jorro mínimo. A figura 4.27 ilustra a simulação da curva de defluidização para esta configuração.

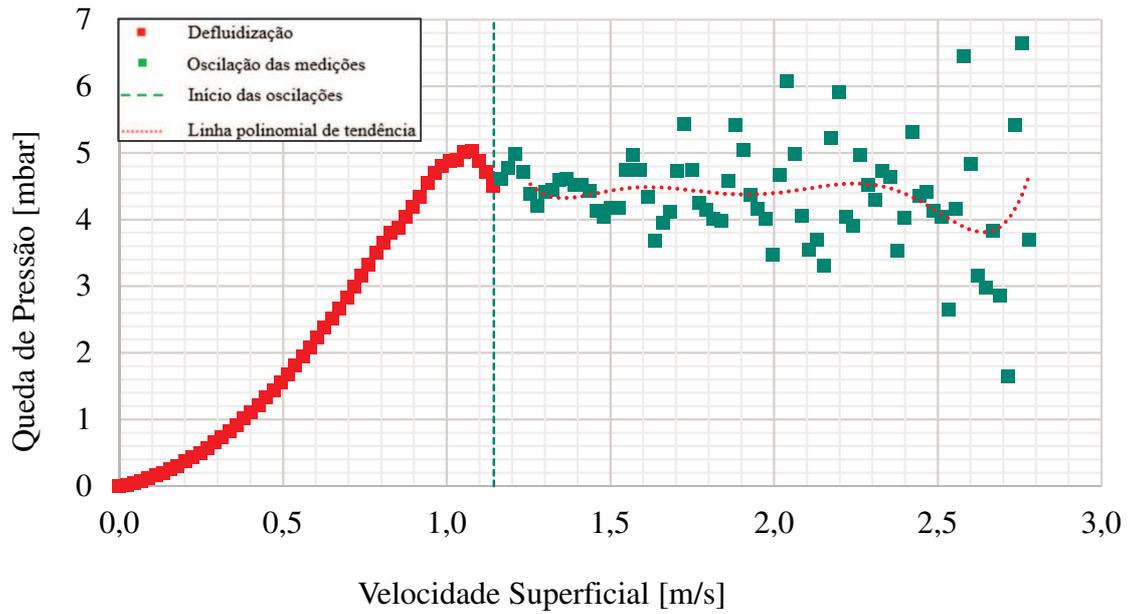


Figura 4.27 – Simulação DEM-CFD da curva de defluidização do polipropileno para a malha 5x.

A aquisição da velocidade de jorro mínimo é mostrada pela figura 4.28, através da sobreposição das curvas de fluidização e defluidização.

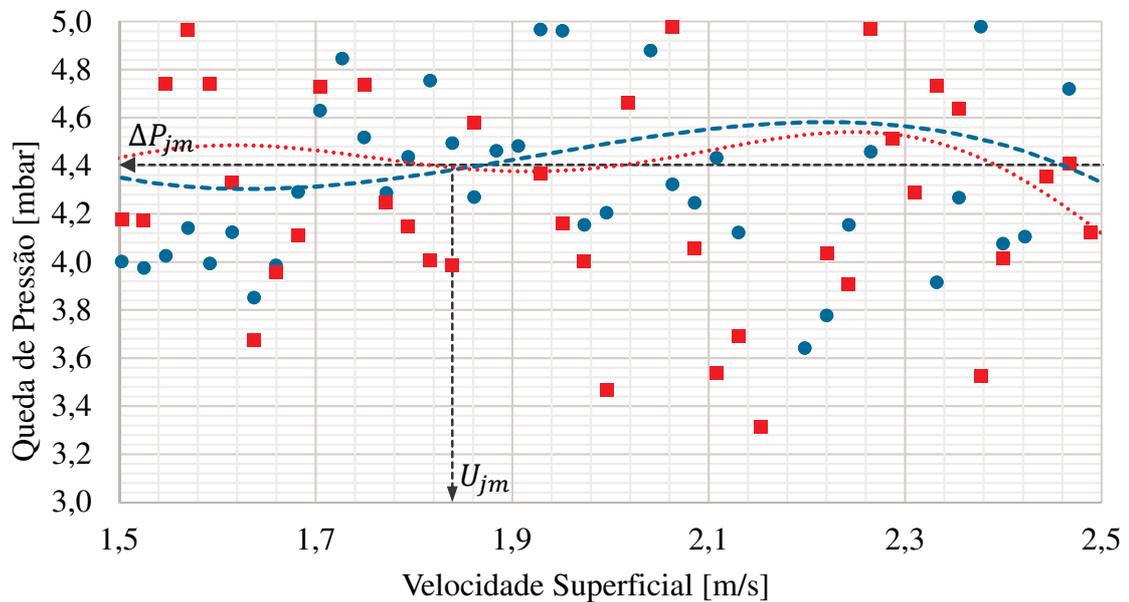


Figura 4.28 – Obtenção da velocidade de jorro mínimo utilizando a malha 5x.

O valor encontrado para a velocidade de jorro mínimo utilizando a malha mais grosseira foi de 1,839 m/s. A figura 4.29 apresenta resultados encontrados através da análise gráfica da simulação do leito utilizando a malha intermediária.

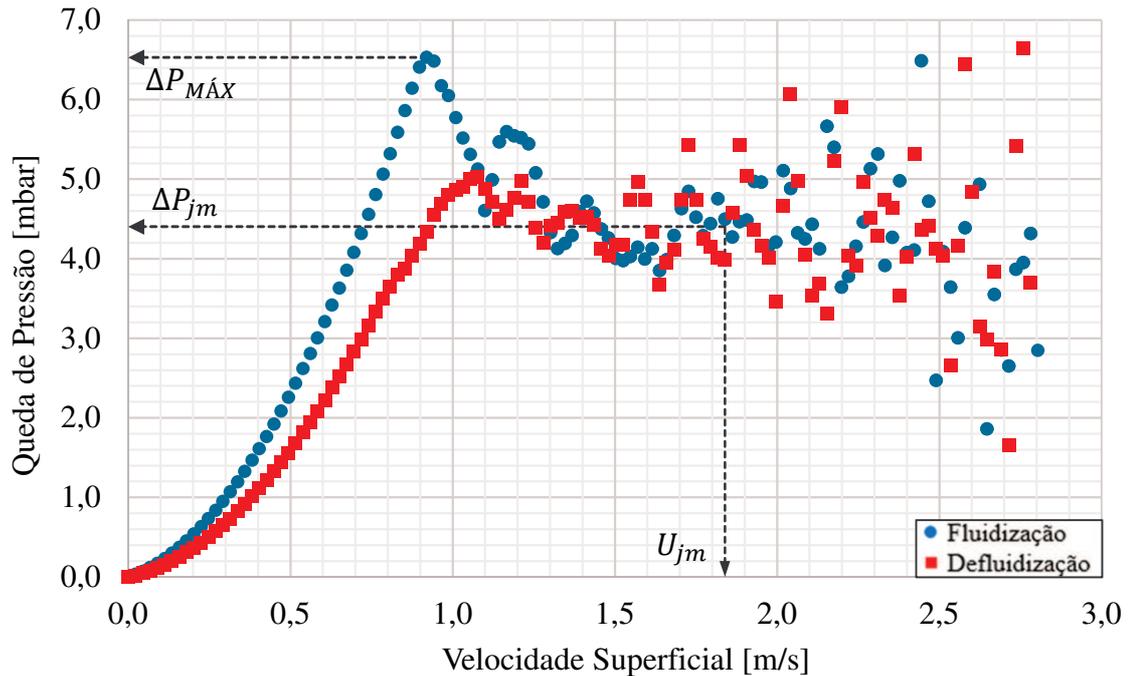


Figura 4.29 – Simulação das curvas características do polipropileno utilizando a malha grosseira 5x.

Relacionando os resultados encontrados com as fluidizações experimentais, empregando a malha mais grosseira na simulação do leito foi observado uma diferença de 1,88% para a velocidade de jorro mínimo, de 13,32% para a queda de pressão no estado de operação de jorro mínimo, e de 2,83% para máxima queda de pressão.

A tabela 4.4 traz a síntese dos resultados obtidos via análise gráfica para as três malhas numéricas empregadas.

Tabela 4.4 – Resultados encontrados para cada malha empregada.

Malha	U_{jm}	Dif. Exp.	ΔP_{jm}	Dif. Exp.	$\Delta P_{MÁX}$	Dif. Exp.
	[m/s]	[%]	[mbar]	[%]	[mbar]	[%]
2x*	1,750	3,04	3,916±0,920	0,77	6,813	7,27
3x*	1,923	6,53	4,081±0,703	5,01	6,393	0,66
5x*	1,839	1,88	4,404 ± 0,819	13,32	6,531	2,83

*Com refino de parede

Dentre as três malhas avaliadas, todas apresentaram resultados aceitáveis da simulação da fluidização e da defluidização das partículas de polipropileno, onde a que apresentou mais proximidade do resultado numérico com o experimental, referente a velocidade de jorro mínimo foi a malha 5x, conforme Tab. 4.4. Já para a queda de pressão na condição de jorro mínimo, a

malha 2x resultou em um valor mais próximo ao obtido experimentalmente, e para a máxima queda de pressão no leito, a malha 3x forneceu resultados mais próximos do experimento.

Em relação a dispersão dos valores a partir da região onde se tem o início das oscilações, verifica-se que, até o patamar de jorro mínimo, quanto mais grosseira a malha, menores são as oscilações, logo, menos sinuosa é a curva da queda de pressão em função da velocidade superficial do fluido. No entanto, em uma visão global, isto é, do início das flutuações até o estado onde a fluidização termina e dá-se início a defluidização, se observa que a malha intermediária, com tamanho de célula de 3x o tamanho das partículas, obteve maior uniformidade de medidas para o gráfico da queda de pressão em função da velocidade superficial.

Liu e Wachem (2019), realizaram a modelagem DEM-CFD de uma fluidização gás-sólido, em um leito retangular de base reta, utilizando partículas com 3,256 mm de diâmetro. Os autores compararam diferentes tipos de correlação de arrasto, e encontraram flutuações a partir de um certo ponto nas curvas de fluidização e defluidização, observando que as oscilações variam em torno de um certo valor, no qual o leito já se encontra fluidizado. Os autores relatam que as flutuações são um indicador importante da dinâmica de um leito fluidizado, causadas por uma série de fatores, por exemplo, bolhas locais de fluido, oscilações do reator e propagação de ondas de pressão, porém, a principal contribuição para a presença das flutuações é devida as formações de bolhas e erupção.

4.6 COMPORTAMENTO FLUIDODINÂMICO

A análise da fluidodinâmica do leito durante as simulações da fluidização e defluidização do polipropileno, foi realizada através da verificação da trajetória das partículas durante a fluidização e defluidização do material, bem como, o comportamento das velocidades variando da região central até as paredes do leito. As figuras 4.30, 4.31 e 4.32 mostram o perfil da velocidade das partículas de polipropileno dentro do leito durante a fluidização para os casos onde se utilizou as malhas com tamanho de célula de 2x, 3x e 5x o diâmetro das partículas, utilizando refino de parede, nos instantes de tempo de 4,08 s, 3,92 s e 4 s, respectivamente. As velocidades foram avaliadas em diferentes alturas na coluna de fluidização, variando de uma altura de 0,0688 m até 0,1188 m.

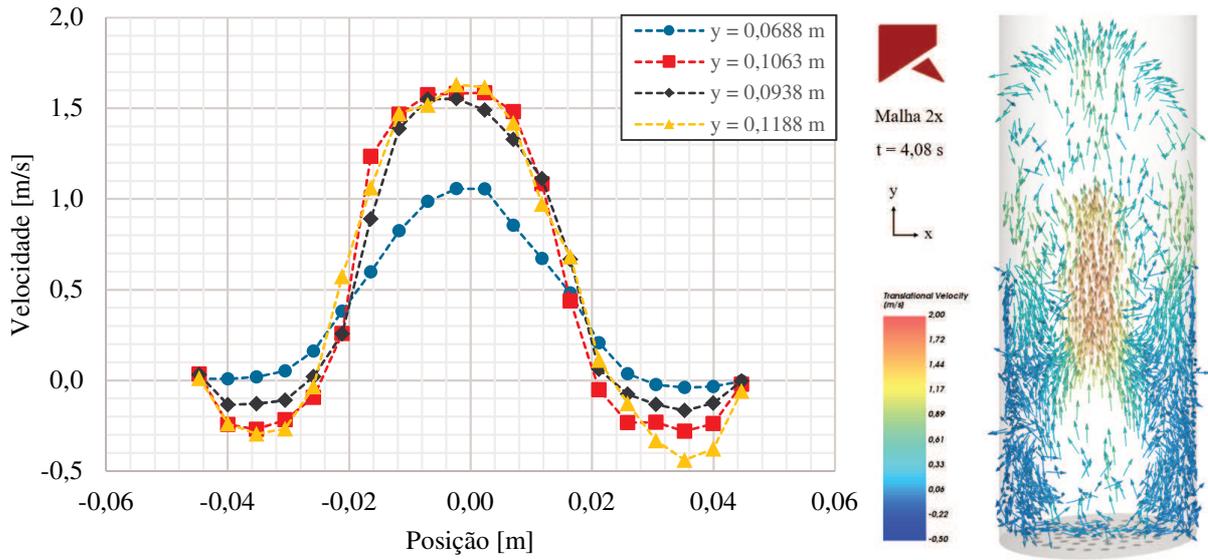


Figura 4.30 – Comportamento da velocidade das partículas em função da posição dentro do leito para a malha 2x.

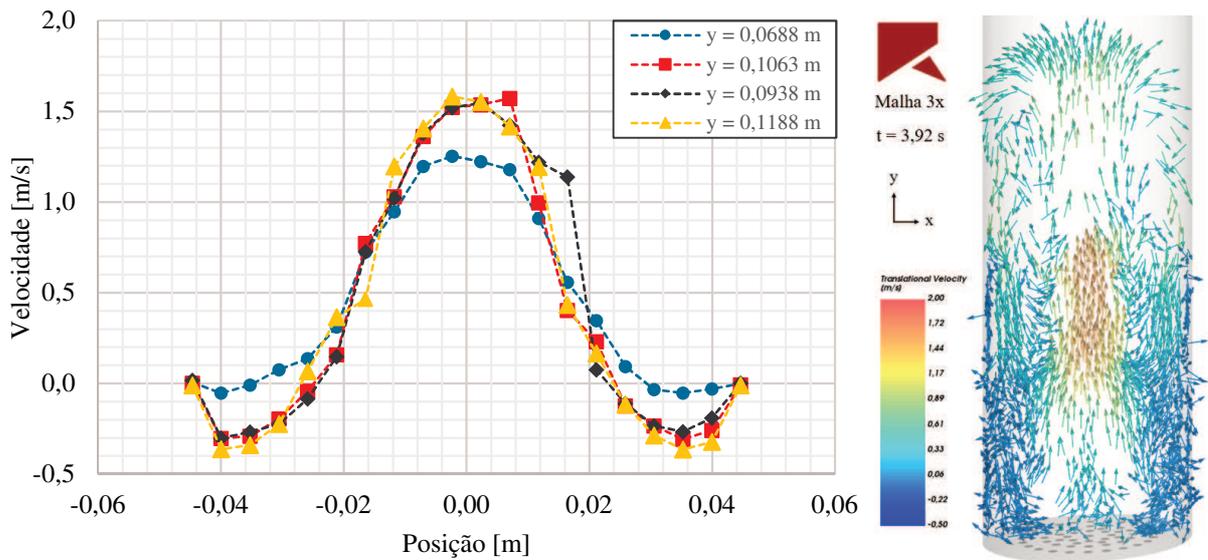


Figura 4.31 – Comportamento da velocidade das partículas em função da posição dentro do leito para a malha 3x.

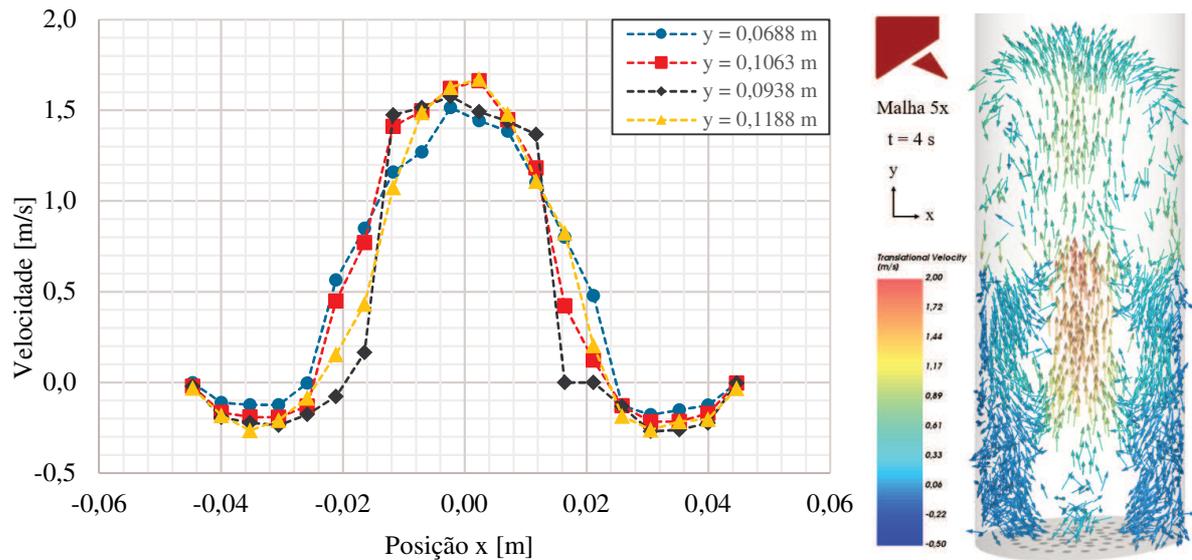


Figura 4.32 – Comportamento da velocidade das partículas em função da posição dentro do leito para a malha 5x.

Nas figuras 4.30 a 4.32 é possível verificar o comportamento característico de jorro para as malhas estudadas, onde na região central do leito encontram-se as partículas com maior velocidade, diminuindo à medida que se aproxima da região periférica da coluna de fluidização. Além disso, através dos vetores de velocidade se observa o fenômeno característico de um leito de jorro, no qual ocorre a ascensão das partículas de polipropileno na região central do leito retornando pelas extremidades.

Mahmoodi et al. (2019) encontraram resultados similares em seu trabalho, através da análise do comportamento fluidodinâmico de um reator de leito fluidizado de base cônica, carregado com particulados Geldart-D com 6 mm de diâmetro. Os autores realizaram um estudo numérico DEM-CFD utilizando o software OpenFOAM, confrontando os resultados via bancada experimental, e verificaram dentre as suas análises que a fluidização apresentou um comportamento característico de jorro, com projeção das partículas pela região central-anular do leito, onde estão localizadas as maiores velocidades, diminuindo à medida que se aproxima das paredes do reator, região na qual ocorre o retorno do material particulado.

Utilizando da simulação computacional de leitos fluidizados tridimensionais é possível uma observação rica em detalhes do interior do reator, mapeando o comportamento individual e coletivo das partículas. As figuras 4.33, 4.34 e 4.35 demonstram o comportamento do leito em relação a trajetória e mistura de material particulado durante a fluidização para as três malhas simuladas, na qual o montante de partículas foi dividido em 5 regiões com cores distintas, a fim de obter uma melhor visualização de cada região analisada.

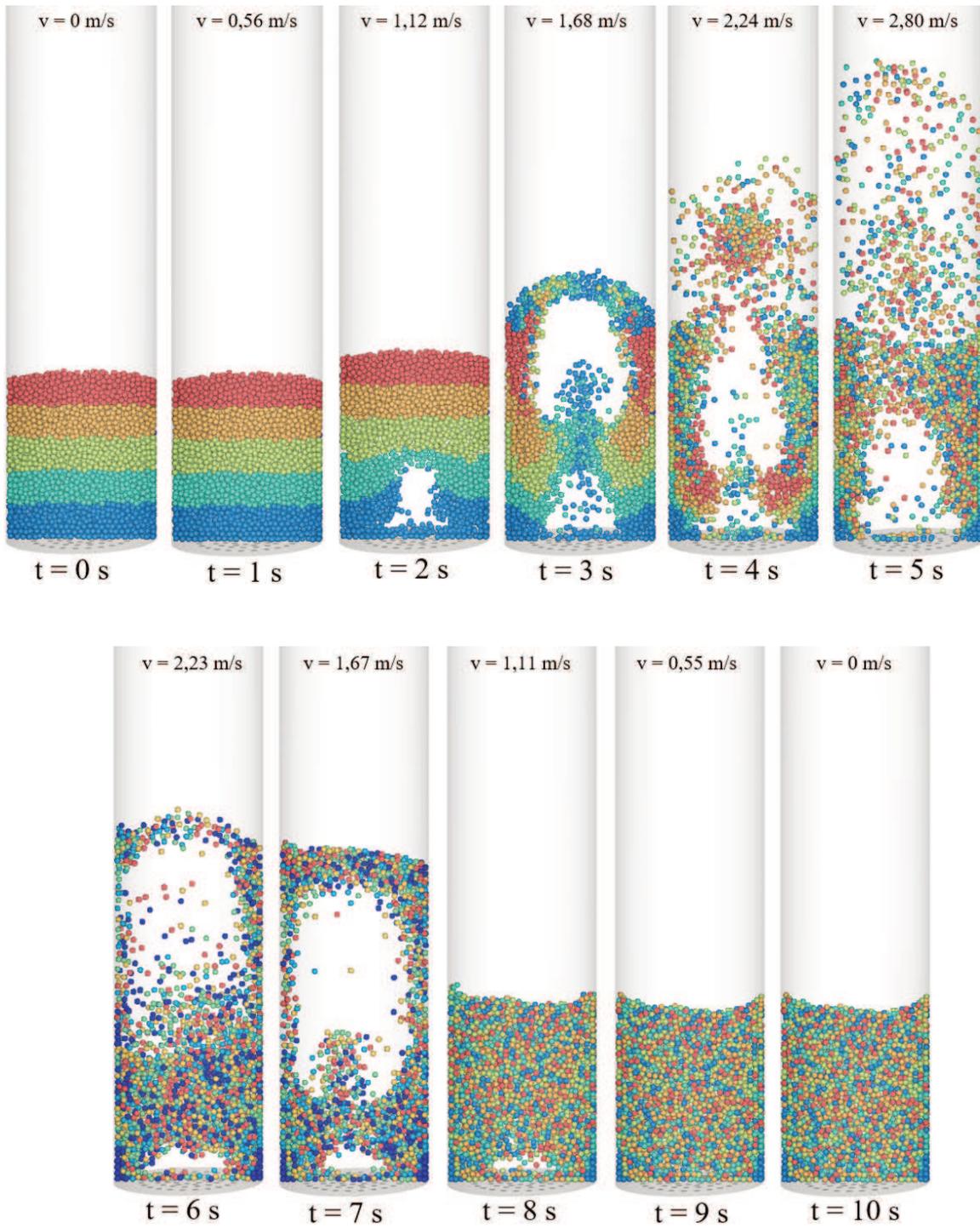


Figura 4.33 – Comportamento fluidodinâmico do leito utilizando a malha 2x.

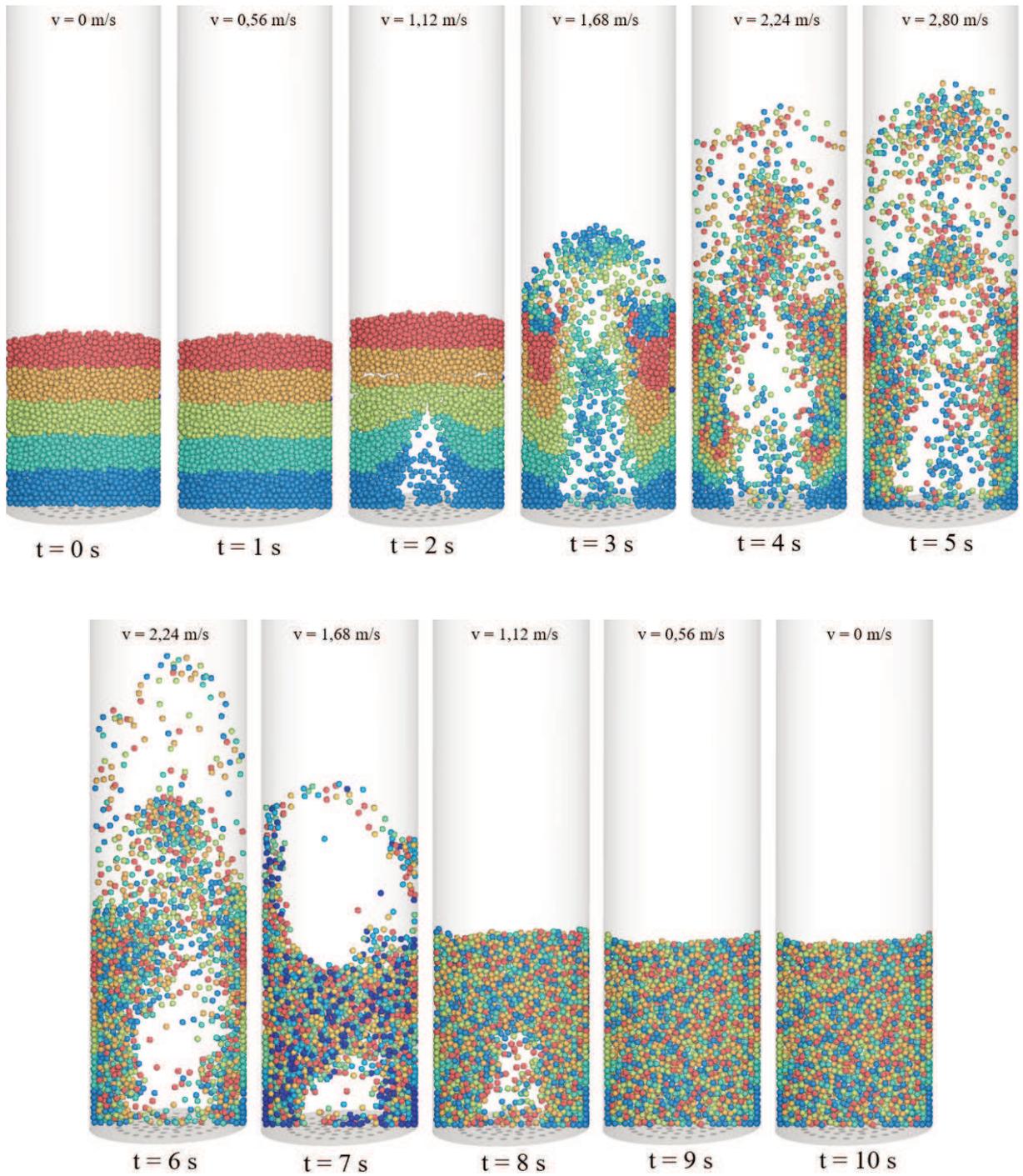


Figura 4.34 – Comportamento fluidodinâmico do leito utilizando a malha 3x.

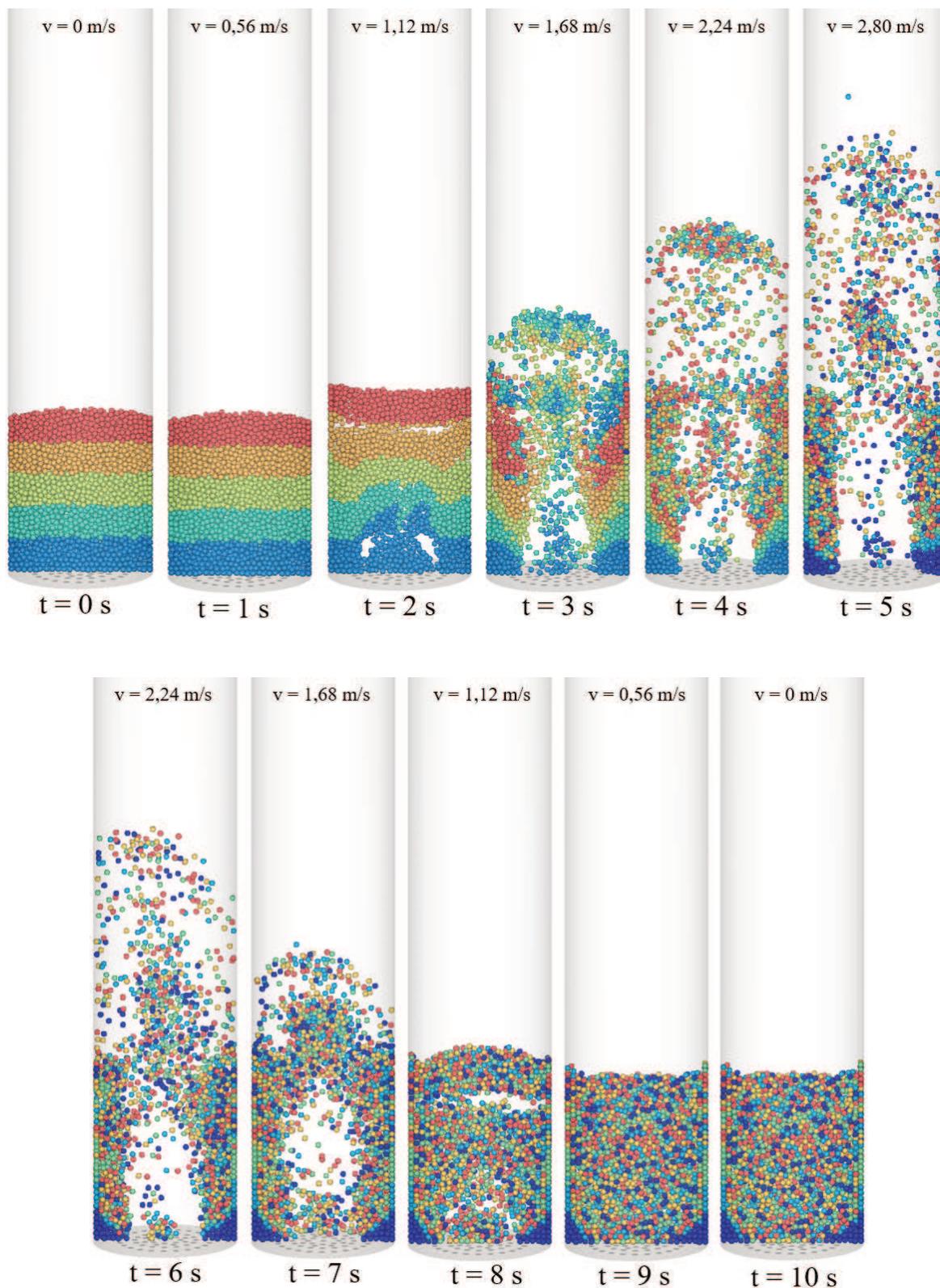


Figura 4.35 – Comportamento fluidodinâmico do leito utilizando a malha 5x.

Nas figuras 4.33, 4.34 e 4.35, foi observado que a cerca de 1 segundo de simulação, com uma velocidade de fluido média de 0,56 m/s, o leito permanece fixo e em estado de fluidização incipiente, sem alteração na altura do leito. Aproximadamente após 2 segundos de simulação,

ocorre a expansão do leito, para uma velocidade superficial de fluido em torno de 1,12 m/s, para os três casos analisados com os diferentes refinamentos de malha. Também foi constatado que a formação do jorro se dá a partir de 3 segundos de simulação, com velocidade superficial acima de 1,68 m/s, onde com o aumento gradual da velocidade superficial tem-se o avanço do processo de fluidização até o tempo de 5 segundos. Já na etapa de defluidização do leito, foi averiguado que o jorro de material tem seu encerramento abaixo de 1,68 m/s, como mostrado nas figuras 4.33 a 4.35 a contar do tempo 7 segundos de simulação, voltando a condição de leito fixo, porém agora expandido, a contar dos 8 segundos de simulação, com uma velocidade de fluido baixo de 1,12 m/s.

Através da divisão em cores das partículas de polipropileno depositadas no leito, foi possível verificar o comportamento característico de jorro durante a fluidização, onde as camadas inferiores são projetadas para cima pela região central do leito, como também, vislumbrar o fenômeno da intensa mistura do material particulado. Os resultados encontrados neste trabalho referentes a análise fluidodinâmica vão de encontro ao obtido por Almeida (2018), que encontrou fenômenos similares para a simulação DEM-CFD 3D de um leito fluidizado utilizando partículas Geldart-D.

Então, verifica-se que a análise fluidodinâmica do leito pode ser utilizada em conjunto com a análise gráfica, ilustrando o comportamento do leito tanto na fluidização como na defluidização das partículas.

5 CONCLUSÕES

Este trabalho apresentou uma modelagem experimental e computacional DEM-CFD da fluidização de partículas de polipropileno Geldart-D com formato de esferas irregulares, utilizando os softwares Rocky DEM e ANSYS Fluent. A partir da fluidização de um reator de leito fluidizado cilíndrico de base plana, utilizando uma placa distribuidora perfurada, foram determinadas as curvas características de fluidização e defluidização, das quais, via análise gráfica obteve-se a velocidade de jorro mínimo, a queda de pressão nesta condição e a máxima queda de pressão no leito. Foi possível observar claramente, a fluidodinâmica do leito durante as fluidizações, onde o comportamento característico verificado foi do tipo jorro.

A metodologia aplicada na caracterização do material particulado, resultou nos reais valores de cada propriedade física, como a massa específica real e de carga, o diâmetro médio, a esfericidade, o ângulo de repouso e o ângulo drawdown. A metodologia experimental empregada para obtenção dos valores dos coeficientes de interação partícula-parede, como os coeficientes de atrito estático, atrito dinâmico e coeficiente de restituição, mostrou-se adequada para este propósito, fornecendo resultados com boa exatidão, representando a física de cada experimento. A técnica de otimização empregada na determinação da resistência ao rolamento e dos coeficientes de interação partícula-partícula (atrito estático, atrito dinâmico e coeficiente de restituição) gerou valores acurados em relação a referência experimental, mostrando-se uma boa ferramenta para quando se deseja obter valores restritos, a partir de combinações de parâmetros. Com base na análise de sensibilidade realizada nos coeficientes obtidos via otimização, foi verificado que a resistência ao rolamento é o parâmetro que mais influencia na fluidez de material particulado, afetando fortemente os valores de ângulo de repouso e ângulo drawdown.

Em relação à qualidade da malha numérica, averiguou-se que, através do refino da malha nas regiões próximas da parede do leito, obtém-se resultados melhores quando comparados com a condição sem o refino de parede, onde a ausência deste acarreta a subpredição dos valores da velocidade de jorro mínimo e a produção maiores flutuações nos valores de queda de pressão. Os valores numéricos para a velocidade de jorro mínimo, para a queda de pressão na condição de jorro mínimo e para a máxima queda de pressão, foram obtidos via análise gráfica das curvas simuladas, igualmente realizado no procedimento experimental. Também foi analisada a fluidodinâmica do leito, observando o interior do reator com uma grande riqueza de detalhes, vislumbrando o comportamento característico de jorro durante a

fluidização via estudo da trajetória individual e coletiva das partículas, bem como, das suas velocidades.

A comparação dos resultados numéricos da fluidização do polipropileno com os dados experimentais mostrou boa concordância para as três malhas avaliadas, com uma diferença relativa em torno de 1,88% para a velocidade de jorro mínimo, 0,77% para queda de pressão na condição de jorro mínimo e de 0,66% para a máxima queda de pressão. Foram observadas oscilações para os valores de queda de pressão, utilizando o acoplamento DEM-CFD, que podem estar relacionadas a duas hipóteses iniciais, uma devido à utilização de malhas grosseiras para análises CFD, ocasionando ruídos, e a outra relacionada a raiz do experimento, onde as flutuações percebidas são físicas, porém não foram pegas pelo experimento, devido ao tempo de resposta do sensor, que acaba amortizando-as.

Como sugestão para futuros trabalhos nesta linha de pesquisa, destaca-se a utilização de outros formatos de material particulado, tais como partículas cilíndricas e elipsoides, outros tipos de materiais, empregar partículas menores, tornando possível assim, utilizar malhas mais refinadas, realizar uma análise de sensibilidade dos parâmetros DEM sobre a velocidade de mínima fluidização e investigar as instabilidades geradas no campo de pressão.

Então, em termos gerais, a utilização dos métodos DEM e CFD acoplados via softwares Rocky DEM e ANSYS Fluent foi capaz de fornecer resultados numéricos para a fluidização de partículas com excelente resposta, em comparação aos resultados obtidos experimentalmente, e devido à carência de trabalhos que utilizam uma modelagem numérica DEM-CFD em conjunto com um planejamento experimental na fluidização de materiais particulados Geldart-D com formato irregular; este estudo vem a corroborar para futuras pesquisas desta espécie.

REFERÊNCIAS

- ABDULLAH, E. C.; GELDART, D. The use of bulk density measurements as flowability indicators. **Powder Technology**, v. 102, n. 2, p. 151–165, 1999.
- ALMEIDA, L. C. (PROGRAMA DE P. EM E. N. **Simulação Acoplada CFD-DEM de Reatores Nucleares de Leito Fluidizado**. 2018. 148 f. Tese (Doutorado em Engenharia Nuclear), Pós-Graduação em Engenharia Nuclear - COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro. 2018.
- AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS (ASTM). **ASTM C604**: Standard Test Method for True Specific Gravity by Gas-Comparison Pycnometer. West Conshohocken, 2012.
- AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS (ASTM). **ASTM D6761**: Standard Test Method for Determination of the Total Pore Volume of Catalysts and Catalyst Carriers. West Conshohocken, 2012.
- ANSYS. **Introduction to ANSYS Meshing**. Release 14.5. Inc., Canonsburg, PA, 2014.
- BASU, P. **Combustion and Gasification in Fluidized Beds**. Boca Raton: CRC Press, 2006. 496 p.
- BEAKAWI AL-HASHEMI, H. M.; BAGHABRA AL-AMOUDI, O. S. A review on the angle of repose of granular materials. **Powder Technology**, v. 330, p. 397–417, 2018.
- BECKER, H. A. An investigation of laws governing the spouting of coarse particles. **Chemical Engineering Science**, v. 13, n. 4, p. 245–262, 1961.
- COCCO, R.; KARRI, S. B. R.; KNOWLTON, T. Circulating Fluidized Beds. In: Pannala, S.; Syamlal, M. e O'Brien, T. **Computational Gas-Solids Flow and Reacting Systems: Theory, Methods and Practice**. New York: Engineering Science Reference, 2011. cap. 10. p. 316 – 356.
- COETZEE, C. J. Calibration of the discrete element method and the effect of particle shape. **Powder Technology**, v. 297, p. 50–70, 2016.
- COETZEE, C. J. Review: Calibration of the discrete element method. **Powder Technology**, v. 310, p. 104–142, 2017.
- CREMASCO, M. A. **Operações Unitárias em Sistemas Particulados e Fluidomecânicos**. São Paulo: Blucher, 2014. 423 p.
- CUNDALL, P. A.; STRACK, O. D. L. A discrete numerical model for granular assemblies. **Géotechnique**, v. 29, n. 1, p. 47–65, 1979.
- DEEN, N. G.; SINT ANNALAND, M. VAN; HOEF, M. A. VAN DER; KUIPERS, J. A. M. Review of discrete particle modeling of fluidized beds. **Chemical Engineering Science**, v. 62, n. 1–2, p. 28–44, 2007.

DING, S.; BAI, L.; YAO, Y.; et al. Discrete element modelling (DEM) of fertilizer dual-banding with adjustable rates. **Computers and Electronics in Agriculture**, v. 152, n. March, p. 32–39, 2018.

ESSS. **Workshop 02: Angle of Repose and Drawdown Angle Verification**. 2018.

ELSKAMP, F.; KRUGGEL-EMDEN, H. DEM simulations of screening processes under the influence of moisture. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 136, p. 593–609, 2018.

ERGUN, S. Fluid Flow Through Packed Columns. **Chemical Engineering Progress**, v. 48, p. 89–94, 1952.

FARIAS, F. O. M. **Caracterização de biomassas brasileiras para fins de aproveitamento energético**. 2012. 113 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas. 2012.

FONTE, C. B.; JR, J. A. A. O.; ALMEIDA, L. C. DE. Dem-Cfd Coupling : Mathematical Modelling and Case Studies Using Rocky-Dem[®] and Ansys Fluent[®]. **Eleventh International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries**, p. 1–7, 2015.

GELDART, D. Types of Gas Fluidization. **Powder Technology**, v. 7, p. 285–292, 1973.

GELDART, D.; ABDULLAH, E. C.; HASSANPOUR, A.; NWOKE, L. C.; WOUTERS, I. Characterization of Powder Flowability Using Measurement of Angle of Repose. **China particulology**, v. 4, n. 1990, p. 104–107, 2006.

GENEHR, G. A. **Caracterização da Fluidização de Biomassas de Casca de Madeiras em Leitos Fluidizados**. 2015. 92 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade do Vale do Rio dos Sinos. 2015.

GIDASPOW, D. Hydrodynamics of fluidization and heat transfer: Supercomputer modeling. **Screen**, v. 39, n. 1, p. 1–23, 1986.

GRIMA, A.; WYPYCH, P. W. Discrete Element Simulation Validation : Impact Plate Transfer Station. **BulkSolids Europe 2010**, v. 2010, p. 1–17, 2010.

GRIMA, B. A.; HASTIE, D.; CURRY, D.; WYPYCH, P.; LAROCHE, R. The beginning of a new era in design : calibrated discrete element modelling. , , n. October, 2011.

GUPTA, P.; SUN, J.; OOI, J. Y. DEM-CFD simulation of a dense fluidized bed: Wall boundary and particle size effects. **Powder Technology**, v. 293, p. 37–47, 2014.

HUILIN, L.; GIDASPOW, D. Hydrodynamics of binary fluidization in a riser: CFD simulation using two granular temperatures. **Chemical Engineering Science**, v. 58, n. 16, p. 3777–3792, 2003.

KUNII, D.; LEVENSPIEL, O. **Fluidization Engineering**. 2. ed. Massachusetts: Butterworth-Heinemann, 1991. 491 p.

LEE, J. LE; LIM, E. W. C. Comparisons of Eulerian-Eulerian and CFD-DEM simulations of mixing behaviors in bubbling fluidized beds. **Powder Technology**, v. 318, p. 193–205, 2017.

LIU, D.; WACHEM, B. VAN. Comprehensive assessment of the accuracy of CFD-DEM simulations of bubbling fluidized beds. **Powder Technology**, v. 343, p. 145–158, 2019.

LOURENÇO, J. B. **Estudo das Características Fluidodinâmicas de Misturas da Madeira de Eucalipto e do Carço do Fruto do Tucumã com Inerte Visando Aplicação em Processos de Termoconversão**. 2012. 174 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Programa de Pós-Graduação da Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas. 2012.

M. SYAMLAL; T.J. O'BRIEN. The Derivation of a Drag Coefficient Formula from Velocity-Voidage Correlations. , 1987.

MALEK, M. A.; LU, B. C. Y. Pressure drop and spoutable bed height in spouted beds. **Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development**, v. 4, n. 1, p. 123–128, 1965.

MAHMOODI, B.; HOSSEINI, S. H.; AHMADI, G. Particulate CFD – DEM simulation of a pseudo-two-dimensional spouted bed comprising coarse particles. **Particulate**, v. 43, p. 171–180, 2019.

MELO, K. P. **Secagem de biomassa de levedura (*Saccharomyces cerevisiae*) em um secador atmosférico condutivo com agitação mecânica: Caracterização e avaliação do produto seco como bioadsorvente e complemento nutricional**. 2010. 136 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química), Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas. 2010.

MICHELOTTO, D. D. A. **Análise Fluidodinâmica da Variação da Razão de Aspecto de Partículas Cilíndricas em Leito Fluidizado**. 2018. 54 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade do Vale do Rio dos Sinos. 2018.

NOROUZI, H. R.; ZARGHAMI, R.; MOSTOUFI, N. New hybrid CPU-GPU solver for CFD-DEM simulation of fluidized beds. **Powder Technology**, v. 316, p. 233–244, 2017.

OCANHA, E. S. **Estudo de Fluidização de Biomassas Lignocelulósicas e de suas Características Físicas, Químicas e Morfológicas**. 2018. 113 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade do Vale do Rio dos Sinos. 2018.

OKA, S. N. **Fluidized Bed Combustion**. New York: Marcel Dekker, 2004. 580 p.

OWEN, P. J.; CLEARY, P. W. Prediction of screw conveyor performance using the Discrete Element Method (DEM). **Powder Technology**, v. 193, n. 3, p. 274–288, 2009.

PANNALA, S.; SYAMLAL, M. Multiphase Continuum Formulation for Gas-Solids Reacting Flows. In: Pannala, S.; Syamlal, M. e O'Brien, T. **Computational Gas-Solids Flow and Reacting Systems: Theory, Methods and Practice**. New York: Engineering Science Reference, 2011. cap. 1. p. 1 - 65.

PASSALACQUA, A.; VEDULA, P.; FOX, R. O. Quadrature-Based Moment Methods for Polydisperse Gas-Solids Flows. In: Pannala, S.; Syamlal, M. e O'Brien, T. **Computational**

Gas-Solids Flow and Reacting Systems: Theory, Methods and Practice. New York: Engineering Science Reference, 2011. cap. 7. p. 221 - 244.

PEPIOT, P.; DESJARDINS, O. Numerical analysis of the dynamics of two- and three-dimensional fluidized bed reactors using an Euler – Lagrange approach. **Powder Technology**, v. 220, p. 104–121, 2012.

RAHMAN, M.; KATTERFELD, A.; SCHOTT, D.; LODEWIJKS, G.; MAGDEBURG, U. Influence of the Software on the Calibration process of DEM simulations. **bulk Solids Handling**, p. 1–8, 2011.

SINNOTT, M. D.; CLEARY, P. W. The effect of particle shape on mixing in a high shear mixer. **Computational Particle Mechanics**, v. 3, n. 4, p. 477–504, 2016.

WALTON, O. Numerical simulation of inelastic, frictional particle-particle interactions. In: ROCO, M. C. **Particulate Two-Phase Flow**. Butterworth-Heinemann, 1993. Cap. 25. p. 884 - 907.

WANG, W.; ZHANG, J.; YANG, S.; et al. Experimental study on the angle of repose of pulverized coal. *Particuology*, v. 8, n. 5, p. 482–486, 2010.

WEN, C. Y.; YU, Y. H. Mechanics of fluidization. **Chemical Engineering Progress Symposium Series**, v. 62, p. 100-111, 1966.

XU, H.; ZHONG, W.; YUAN, Z.; YU, A. B. CFD-DEM study on cohesive particles in a spouted bed. , v. 314, p. 377–386, 2017.

YAN, Z.; WILKINSON, S. K.; STITT, E. H.; MARIGO, M. Discrete element modelling (DEM) input parameters: understanding their impact on model predictions using statistical analysis. **Computational Particle Mechanics**, v. 2, n. 3, p. 283–299, 2015.

ZHONG, W. Q.; ZHANG, Y.; JIN, B.; ZHANG, M. Discrete element method simulation of cylinder-shaped particle flow in a gas-solid fluidized bed. **Chemical Engineering and Technology**, v. 32, n. 3, p. 386–391, 2009.

ZHOU, H.; CHEN, Y.; SADEK, M. A. Modelling of soil-seed contact using the Discrete Element Method (DEM). **Biosystems Engineering**, v. 121, p. 56–66, 2014.

ZHOU, Y. C.; XU, B. H.; YU, A. B.; ZULLI, P. An experimental and numerical study of the angle of repose of coarse spheres. , v. 125, p. 45–54, 2002.

ZINANI, F.; PHILIPPSEN, C. G.; INDRUSIAK, M. L. S. Numerical study of gas–solid drag models in a bubbling fluidized bed. **Particulate Science and Technology**, v. 36, n. 1, p. 1–10, 2016.

APÊNDICE A – CÁLCULO DAS INCERTEZAS

- **Queda de Pressão**

O cálculo da incerteza das medições para a queda de pressão na condição de jorro mínimo e para a máxima queda de pressão no leito, é realizado em função da exatidão do equipamento de medição da pressão diferencial, que é de 2,3%. Sendo assim, a incerteza de medição $\sigma_{\Delta P}$ para a queda de pressão é dada pela equação A.1.

$$\sigma_{\Delta P} = \Delta P \cdot E_{\Delta P}, \quad (\text{A.1})$$

onde ΔP é o valor da queda de pressão medido e $E_{\Delta P}$ é o valor da exatidão do equipamento.

- **Velocidade Superficial**

A incerteza para a velocidade de jorro mínimo σ_v é calculada pelo método de propagação das incertezas, conforme equação A.2.

$$\sigma_v = \left(\sqrt{\left(\frac{\partial v}{\partial Q}\right)^2 \sigma_Q^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial A}\right)^2 \sigma_A^2} \right), \quad (\text{A.2})$$

em que σ_Q e σ_A são as incertezas das medições, referentes à vazão volumétrica e área da seção transversal do leito, respectivamente. A incerteza da medição da vazão volumétrica é dada pela equação A.3.

$$\sigma_Q = Q \cdot E_Q, \quad (\text{A.3})$$

onde Q é o valor medido para a vazão volumétrica e E_Q é o valor da exatidão do equipamento, que é de $\pm 1,5\%$.

A incerteza de medição σ_A é dada conforme equação A.4.

$$\sigma_A = \left(\sqrt{\left(\frac{\partial A}{\partial D}\right)^2 \sigma_D^2} \right), \quad (\text{A.4})$$

onde D é o diâmetro da coluna de fluidização do leito e σ_D é a incerteza da medição referente ao diâmetro do leito, dada conforme equação A.5.

$$\sigma_D = \frac{E_D}{2}, \quad (\text{A.5})$$

em que E_D é a exatidão do paquímetro utilizado da marca Mitutoyo, com escala de 150 mm e resolução de 0,02 mm. Logo, a incerteza da medida é dada pela metade da menor divisão da escala do instrumento, sendo 0,01 mm.

Como as curvas de fluidização e defluidização foram obtidas em triplicata, a incerteza da média das medidas da velocidade de jorro mínimo σ_{jm} é dada pela equação A.6.

$$\sigma_{jm} = \left(\sqrt{\sigma_m^2 + \sigma_v^2} \right), \quad (\text{A.6})$$

em que σ_m é o desvio padrão do valor médio das medições, definido pela equação A.7.

$$\sigma_m = \frac{\sigma}{\sqrt{n}} = \sqrt{\frac{1}{(n-1)n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})^2}, \quad (\text{A.7})$$

onde σ é o desvio padrão das medições, n é o número de medições, x_i é a medida individual e \bar{X} é a média das medições.