

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA programa de pós-graduação em engenharia quiímica



ESTUDO CFD-DEM DE UM LEITO DE JORRO OPERANDO NOS REGIMES DENSO, DE TRANSIÇÃO E *JET SPOUTED BED*

Natália Pazin Almeida

Uberlândia – MG 2020



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA programa de pós-graduação em engenharia quiímica



ESTUDO CFD-DEM DE UM LEITO DE JORRO OPERANDO NOS REGIMES DENSO, DE TRANSIÇÃO E *JET SPOUTED BED*

Natália Pazin Almeida

Orientadores: Marcos Antonio de Souza Barrozo Cláudio Roberto Duarte

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Uberlândia – MG 2020

	Ficha Catalográfica Online do Sistema de Bibliotecas da Uf com dados informados pela própria autora.	ΞU
A447 2020	Almeida, Natalia Pazin, 1993- Estudo CFD-DEM de um leito de jorro operando nos regimes denso, de transição e jet spouted bed [recurso eletrônico] / Natalia Pazin Almeida 2020.	
	Orientador: Marcos Antonio de Souza Barrozo. Coorientador: Claudio Roberto Duarte. Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Uberlândia, Pós-graduação em Engenharia Química. Modo de acesso: Internet. Disponível em: http://doi.org/10.14393/ufu.di.2020.695 Inclui bibliografia.	
	1. Engenharia química. I. Barrozo, Marcos Antonio de Souza,1961-, (Orient.). II. Duarte, Claudio Roberto, 1975-, (Coorient.). III. Universidade Federal de Uberlândia. Pós- graduação em Engenharia Química. IV. Título.	
		CDU: 66.0

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de acordo com o AACR2:

Gizele Cristine Nunes do Couto - CRB6/2091



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química Av. João Naves de Ávila, 2121, Bloco 1K, Sala 206 - Bairro Santa Mônica, Uberlândia-MG, CEP 38400-902 Telefone: (34)3239-4249 - www.ppgeq.feq.ufu.br - secppgeq@feq.ufu.br



ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO

Programa de Pós- Graduação em:	Engenharia Química				
Defesa de:	Dissertação de Mestrado, 1	18/2020, PPGEQ			
Data:	28 de outubro 2020	Hora de início:	14:00	Hora de encerramento:	15:25
Matrícula do Discente:	11822EQU016				
Nome do Discente:	Natalia Pazin Almeida				
Título do Trabalho:	Estudo CFD-DEM de um leito de jorro operando nos regimes Denso, de Transição e Jet Spouted Bed				
Área de concentração:	Desenvolvimento de processos químicos				
Linha de pesquisa:	Processos de Separação				
Projeto de Pesquisa de vinculação:	ojeto de Pesquisa vinculação: Estudo da fluidodinâmica de leito de jorro por meio de CFD				

Reuniu-se por meio de webconferência, a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, assim composta: Professores Doutores: Kassia Graciele dos Santos - ICTE/UFTM; Danylo de Oliveira Silva - PPGEA/UFU; Claudio Roberto Duarte - PPGEQ/UFU, orientador e Marcos Antonio de Souza Barrozo - PPGEQ/UFU, orientador da candidata.

Iniciando os trabalhos o presidente da mesa, Prof. Dr. Marcos Antonio de Souza Barrozo, apresentou a Comissão Examinadora e a candidata, agradeceu a presença do público, e concedeu à Discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação da Discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

A seguir o senhor(a) presidente concedeu a palavra, pela ordem sucessivamente, aos(às) examinadores(as), que passaram a arguir o(a) candidato(a). Ultimada a arguição, que se desenvolveu dentro dos termos regimentais, a Banca, em sessão secreta, atribuiu o resultado final, considerando o(a) candidato(a):

Aprovada.

Esta defesa faz parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre.

O competente diploma será expedido após cumprimento dos demais requisitos, conforme as normas do Programa, a legislação pertinente e a regulamentação interna da UFU.

Nada mais havendo a tratar foram encerrados os trabalhos. Foi lavrada a presente ata que após lida e achada conforme foi assinada pela Banca Examinadora.



Documento assinado eletronicamente por Marcos Antonio de Souza Barrozo, Professor(a) do Magistério Superior, em 28/10/2020, às 15:49, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.



Documento assinado eletronicamente por **Claudio Roberto Duarte**, **Professor(a) do Magistério** Superior, em 28/10/2020, às 15:50, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do <u>Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015</u>.



Documento assinado eletronicamente por **Kássia Graciele dos Santos**, **Usuário Externo**, em 28/10/2020, às 15:50, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do <u>Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015</u>.



Documento assinado eletronicamente por **Danylo de Oliveira Silva**, **Professor(a) do Magistério** Superior, em 28/10/2020, às 15:56, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do <u>Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015</u>.



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <u>https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?</u> <u>acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0</u>, informando o código verificador 2354171 e o código CRC 617D28F5.

Referência: Processo nº 23117.064880/2020-92

SEI nº 2354171

"E tudo quanto fizerdes, fazei-o de todo o coração, como ao Senhor, e não aos homens."

Colossenses 3:23

"Bem-aventurado o homem que acha sabedoria, e o homem que adquire conhecimento, porque é melhor a sua mercadoria do que artigos de prata, e maior o seu lucro que o ouro mais fino."

Provérbios 3:13,14

Dedico este trabalho aos meus pais, Antonia e Elizeu (in memorian), pilares da minha formação, e ao meu marido, Henrique, meu maior incentivador.

AGRADECIMENTOS

A Deus, por me dar as mãos e trilhar comigo o caminho até aqui.

Aos meus pais, Antonia e Elizeu (*in memorian*), minha eterna gratidão por não medirem esforços para que eu atinja todos os meus objetivos.

Aos meus irmãos Adriana, Ricardo e Rita e cunhados Fábio Júnior, Luciano e Míriam, por todo o carinho e incentivo. Aos meus sobrinhos Antonio, Bruno, Francisco, Laura, Miguel e Ricardo Júnior, pelos momentos alegres a cada reunião familiar, em Campos Altos.

Ao meu marido Henrique, por todo o apoio, amor e carinho, essenciais para que eu pudesse viver a pesquisa com a tranquilidade e dedicação necessárias. Obrigada por me incentivar a perseguir meus sonhos. Essa conquista é nossa!

Aos Orientadores Marcos Antonio de Souza Barrozo e Claudio Roberto Duarte, por toda a paciência e ensinamentos, que contribuíram tão fortemente para meu crescimento profissional e pessoal. Ao Marquinhos, meu agradecimento especial por ter confiado a mim este tema de pesquisa e me incentivado a persistir no propósito deste estudo, a cada desafio encontrado.

À Professora Kássia, do DEQ/UFTM, por ter me apresentado à pesquisa científica, ainda na graduação. Sem seus ensinamentos e amizade não teria sido possível chegar até aqui, serei eternamente grata.

Aos companheiros de pós-graduação e laboratório, Ana Carolina, Ana Paula, Angélica, Argileu (*in memorian*), Daiane, Érica, Flávia, Fernanda, Geraldo, Gisele, Gláucia, Grazielle, Grégori, Jeniffer, Larissa, Marcela, Marcus Paulo, Pablo, Raíssa, Raphael, Rodolfo, Rondinelli, Thaís e Thessa, pela amizade e por toda a disposição em me ajudar. Sem vocês essa caminhada não teria sido tão prazerosa.

Aos amigos Andressa, Bruna, Eliane, Giovanna, Larissa, Raphael e Yara, pelos momentos de descontração durante esses anos, ainda que, com muitos de vocês, à distância.

À Faculdade de Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia, em especial ao Laboratório de Sistemas Particulados, por disponibilizar os equipamentos necessários à realização deste estudo.

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais pelo incentivo à pesquisa.

SUMÁRIO

RESUMOiii
ABSTRACTiv
LISTA DE FIGURASv
LISTA DE TABELASvii
LISTA DE SÍMBOLOSviii
CAPÍTULO 1 - Introdução1
1.1 Objetivos
CAPÍTULO 2 – Revisão Teórica5
2.1 Leito de jorro
2.1.1 Jet spouted bed9
2.1.2 Fluidodinâmica de diferentes regimes de leito de jorro – Análise de Barrozo et
<i>al.</i> (2010)11
2.2 Modelagem computacional17
2.2.1 Abordagem Euleriana-Euleriana18
2.2.2 Abordagem Lagrangeana19
2.2.2.1 Colisão de partículas21
2.2.2.2 Modelos de força-deslocamento
2.2.3 Acoplamento CFD-DEM (Abordagem Euler-Lagrange)26
2.2.4 Acoplamento CFD-DEM no estudo do leito de jorro

CAPÍTULO 3 – Materiais e Métodos
3.1 Condições experimentais do estudo de caso
3.2 Simulação numérica
3.3 Análise dos resultados41
3.3.1 Velocidade de partículas e porosidade do leito41
3.3.2 Contatos e colisões de partículas42
CAPÍTULO 4 – Resultados e Discussão44
4.1 Verificação da técnica CFD-DEM44
4.1.1 Velocidade de partículas46
4.1.2 Porosidade do leito50
4.2 Análise de contatos e colisões entre partículas54
4.2.1 Número de contatos/número de partículas55
4.2.2 Número de colisões/número de partículas58
4.2.3 Intensidade de colisões64
CAPÍTULO 5 – Conclusões e Sugestões69
5.1 Conclusões
5.2 Sugestões para trabalhos futuros70
Referências

RESUMO

O leito de jorro é um equipamento amplamente utilizado na indústria de processos, por promover um eficiente contato entre sólidos e fluido. Existem algumas limitações na utilização do leito de jorro no regime convencional ao se trabalhar com materiais sensíveis ao calor, como elevado tempo de permanência, e ao se utilizar materiais pegajosos, como bloqueio do leito, devido à baixa taxa de circulação de partículas na região anular. Uma opção para evitar esses problemas de fluidodinâmica é a operação do leito de jorro em fase diluída, o jet spouted bed. A modelagem numérica, em especial o acoplamento entre a Fluidodinâmica Computacional e o Método de Elementos Discretos (CFD-DEM), facilita o conhecimento do escoamento de partículas no interior de equipamentos multifásicos, tornando possível a obtenção de informações pontuais dos sólidos. Neste trabalho, foi estudada a dinâmica de esferas de vidro em um leito de jorro de acrílico operando em fase densa e diluída (jet spouted bed), bem como no regime de transição entre elas, por meio da técnica da simulação numérica CFD-DEM. Foi analisada a variação da velocidade de ascensão e de queda de partículas e da porosidade do leito, com a expansão da velocidade de alimentação do ar, bem como a variação do número e intensidade de contatos e colisões de partículas no interior do equipamento. Dados experimentais de Barrozo et al. (2010) foram utilizados com o objetivo de verificar as simulações computacionais. Os resultados da simulação CFD-DEM foram satisfatórios para prever o comportamento de velocidade de partícula e porosidade do leito. Com a expansão da velocidade de alimentação de ar, ocorreu aumento da velocidade com a qual as partículas sobem na região de jorro, e da porosidade local. A intensidade de colisões de partículas, contudo, aumenta com a velocidade de alimentação de ar. No jet spouted bed, em especial, observou-se que a porosidade local do leito se manteve próxima a 0,9 em todas as posições radiais de um mesmo plano axial. Além disso, neste regime diluído, constatou-se uma maior razão colisões/contatos de partículas em todo o equipamento, o que torna interessante estudos de aplicação do *jet spouted bed* em operações como extração mecânica, em que o choque entre partículas importa mais que o deslizamento.

Palavras-chave: jorro diluído, porosidade, velocidade de partícula, número de contatos, número de colisões, força de colisões.

ABSTRACT

The spouted bed has been widely used in industrial processes, due to the high contact reached between particles and fluid. There are some limitations to the use of the dense spouted bed. In this conventional regime, the long residence time has a disadvantageous effect on thermosensitive materials, for example, and may cause bed blockage in operations with sticky materials, as a consequence of the low particle circulation rate. An option to avoid these fluid dynamics problems is to operate a diluted-phase spouted bed, the jet spouted bed. Numerical modeling, especially the CFD-DEM, facilitates the analysis of the flow of particles inside multiphase equipment, making it possible to obtain specific information about the solids. In this work, the dynamic of glass spheres in a Plexiglas spouted bed was studied by the CFD-DEM technique in the conventional and jet spouting, besides in the transition regime between them. The upward and downward particle velocities, as well as the local bed voidages, were analyzed, with the expansion of the inlet air velocity, besides the variation in the number of contacts, number of collisions, and the intensity of collisions inside the equipment. Experimental data from the literature were used to validate the numerical simulations. The simulations' results were satisfactory to predict the behavior of particle velocities and bed voidage. With the inlet air velocity expansion, there was an increase in the upward velocities at the spouting region and the radial distribution of voidage. Also, there was a decrease in the number of contacts and collisions between particles, as the solids are distributed along the bed. The intensity of particle collisions, however, increases with the inlet air velocity expansion. In the jet spouted bed, especially, it was observed that the local bed voidage remained close to 0.9 in all the radial positions. Besides, in this diluted regime, a higher particle collision/contact ratio was observed throughout the equipment, which makes interesting to study the jet spouted bed in operations in which the collisions between particles are more important than the slip, such as mechanical extraction. It was also observed that the steady-state takes longer to reach the diluted regime.

Keywords: dilute-phase spouting, voidage, particle velocity, number of contacts, number of collisions, collision force.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Regiões fluidodinâmicas de um leito de jorro cônico-cilíndrico5
Figura 2.2: Curva característica do leito de jorro7
Figura 2.3: Regimes de escoamento11
Figura 2.4: Geometria do equipamento utilizado no estudo
Figura 2.5: Esquema de sonda de fibra óptica13
Figura 2.6: Curva característica para os regimes denso, de transição e diluído14
Figura 2.7: Algoritmo de resolução DEM21
Figura 2.8: Tipos de tratamento no acoplamento27
Figura 2.9: Algoritmo de resolução CFD-DEM
Figura 2.10: Métodos de cálculo de porosidade
Figura 3.1: Malha computacional gerada para realização das Simulações CFD-DEM38
Figura 3.2: Esquema de análise de velocidade de partículas e porosidade do leito41
Figura 3.3: Regiões delimitadas no software EDEM®43
Figura 4.1: Imagens 3D da Simulação Computacional CFD-DEM para as cinco velocidades
de alimentação de ar estudadas44
Figura 4.2: Imagens 3D da parte cônica do leito de jorro para Simulações CFD-DEM45
Figura 4.3: Imagens do perfil de partículas na região cônica para as cinco velocidades de
alimentação de ar analisadas46
Figura 4.4: Perfis de velocidade de partículas em 37 mm em mesma escala46
Figura 4.5: Perfis de velocidade de partículas em 37 mm em diferentes escalas
Figura 4.6: Comparação de velocidade de partícula entre dados experimentais e de simulações
CFD-DEM para as diferentes velocidades de alimentação de ar

Figura 4.7: Perfis de porosidade do leito em 37 mm em mesma escala
Figura 4.8: Perfis de porosidade do leito em 37 mm em diferentes escalas
Figura 4.9: Comparação de velocidade de partícula entre dados experimentais e de simulações
CFD-DEM
Figura 4.10: Número de contatos/partículas nas regiões de jorro e anular
Figura 4.11: Médias do número de contatos/partículas nas regiões de jorro e anular
Figura 4.12: Variação do nº de contatos/nº de partículas com velocidade de alimentação de ar.
Figura 4.13: Número de colisões/partículas nas regiões de jorro e anular
Figura 4.14: Médias do número de colisões/partículas nas regiões de jorro e anular61
Figura 4.15: Variação do nº de colisões/nº de partículas com velocidade de alimentação de ar.
Figura 4.16:: Variação de nº de contatos e nº de colisões
Figura 4.17: Número de colisões/número de partículas em função da altura64
Figura 4.18: Intensidade de colisões de partículas nas cinco velocidades estudadas
Figura 4.19: Média da intensidade de colisões de partículas nas cinco velocidades estudadas.
Figura 4.20: Variação da intensidade de colisões com velocidade de alimentação de ar68

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1: Características das colisões.	23
Tabela 3.1: Regimes de escoamento estudados.	37
Tabela 3.2: Parâmetros para solução CFD-DEM	39
Tabela 4.1: Soma dos quadrados dos desvios para velocidade de partícula	49
Tabela 4.2: Soma dos quadrados dos desvios para porosidade.	54

LISTA DE SÍMBOLOS

$A_{f,i} \\$	Área da face da célula da malha computacional	$[M^0L^2T^0]$
Ar	Número de Arrhenius	[-]
D _b	Diâmetro do cone na altura de leito estático	$[M^0L^1T^0]$
De	Distância efetiva entre componentes da sonda de fibra ótica	$[M^0L^1T^0]$
D _c	Diâmetro da seção cilíndrica do leito de jorro	$[M^0L^1T^0]$
D_i	Diâmetro inferior da parte cônica do leito de jorro	$[M^0L^1T^0]$
D _o	Diâmetro do orifício de entrada do leito de jorro	$[M^0L^1T^0]$
d _p	Diâmetro da partícula	$[M^0L^1T^0]$
е	Coeficiente de restituição	[-]
Е	Módulo de Young	$[M^{1}L^{-1}T^{-2}]$
E*	Módulo de Young equivalente	$[M^{1}L^{-1}T^{-2}]$
e _(p-p)	Coeficiente de restituição partícula-partícula	[-]
e _(p-w)	Coeficiente de restituição partícula-parede	[-]
\vec{F}^A	Força volumétrica de interação fluido-partícula	$[M^{1}L^{1}T^{-2}]$
\vec{F}^{f-p}	Força de interação fluido-partícula	$[M^{1}L^{1}T^{-2}]$
Fc	Força de contato resultante	$[M^{1}L^{1}T^{-2}]$
$\mathbf{f}_{\mathbf{f}}$	Fração volumétrica da fase fluida	[-]
$\mathbf{f}_{f_{exp}}$	Porosidade local coletada experimentalmente	[-]
$\mathbf{f}_{\mathrm{f_{sim}}}$	Porosidade local predita numericamente	[-]
$\vec{F}_i^{\nabla\vec{\tau}}$	Força viscosa de cisalhamento do fluido atuante sobre a partícula i	$[M^{1}L^{1}T^{-2}]$
$\vec{F}_i^{\nabla P}$	Força do gradiente de pressão atuante sobre a partícula i	$[M^{1}L^{1}T^{-2}]$
\vec{F}_i^a	Força de massa adicionada atuante sobre a partícula i	$[M^{1}L^{1}T^{-2}]$
\vec{F}_i^d	Força de arraste atuante sobre a partícula i	$[M^{1}L^{1}T^{-2}]$
$\vec{F}_i^{f\text{-}p}$	Força de interação fluido-partícula atuante sobre a partícula i	$[M^{1}L^{1}T^{-2}]$
\vec{F}_i^l	Força de levitação atuante sobre a partícula i	$[M^{1}L^{1}T^{-2}]$
\vec{F}_i^M	Força de Magnus atuante sobre a partícula i	$[M^{1}L^{1}T^{-2}]$

\vec{F}_i^S	Força de Saffman atuante sobre a partícula i	$[M^{1}L^{1}T^{-2}]$
\vec{F}_i^u	Força instável atuante sobre a partícula i	$[M^{1}L^{1}T^{-2}]$
\vec{F}_i^{ud}	Força de arraste instável atuante sobre a partícula i	$[M^{1}L^{1}T^{-2}]$
\vec{F}_{N}	Força de contato normal	$[M^{1}L^{1}T^{-2}]$
$\mathbf{f}_{\mathbf{p}}$	Fração volumétrica da fase particulada	[-]
\vec{F}_{T}	Força de contato tangencial	$[M^{1}L^{1}T^{-2}]$
ġ	Aceleração gravitacional	$[M^0L^1T^{-2}]$
G	Módulo de cisalhamento	$[M^{1}L^{-1}T^{-2}]$
G*	Módulo de cisalhamento equivalente	$[M^{1}L^{-1}T^{-2}]$
H_0	Altura de leito estático	$[M^0L^1T^0]$
H _c	Altura da região cônica do leito de jorro	$[M^0L^1T^0]$
\mathbf{k}_{N}	Coeficiente de rigidez da mola na direção normal	$[M^{1}L^{0}T^{-2}]$
\mathbf{k}_{T}	Coeficiente de rigidez da mola na direção tangencial	$[M^{1}L^{0}T^{-2}]$
k _v	Número de partículas no volume V _{cel}	[-]
m	Número de vezes que o cálculo da fase particulada é repetida	[-]
m _p	Massa de partículas	$[M^1L^0T^0]$
n_{f}	Número de faces da célula da malha computacional	[-]
n _p	Número de partículas em todo o leito de jorro	[-]
Р	Pressão	$[M^0L^{-1}T^{-2}]$
P _{ms}	Pressão de mínimo jorro	$[M^0L^{-1}T^{-2}]$
P _p	Pressão da fase sólida	$[M^0L^{-1}T^{-2}]$
R*	Raio de contato equivalente	$[M^0L^1T^0]$
^r / _R	Posição radial numa altura axial z	[-]
\mathbf{r}_{i}	Raio da partícula i durante o contato com a partícula j	$[M^0L^1T^0]$
\mathbf{r}_{j}	Raio da partícula j durante o contato com a partícula i	$[M^0L^1T^0]$
r _{min}	Raio da menor partícula do sistema	$[M^0L^1T^0]$
r _p	Raio da partícula	$[M^0L^1T^0]$
Re _{omj}	Número de Reynolds na condição de jet spouted bed	[-]
Re _{oms}	Número de Reynolds na condição de mínimo jorro	[-]
~ ~	0 1 1 1 1 1	г 1

t	tempo	$[M^0L^0T^1]$
$\overline{\overline{T}}_{\rm f}$	Tensor tensão da fase fluida	$[M^{1}L^{-1}T^{-2}]$
$\overline{\overline{T}}_P$	Tensor tensão da fase particulada	$[M^{1}L^{-1}T^{-2}]$
T _R	Número de Rayleigh	$[M^0L^0T^1]$
$\Delta t_{\rm f}$	Passo de tempo de integração da fase fluida	$[M^0L^0T^1]$
Δt_{max}	Tempo máximo do passo de tempo de integração	$[M^0L^0T^1]$
$\Delta t_{\rm p}$	Passo de tempo de integração da fase particulada	$[M^0L^0T^1]$
\vec{u}_{omj}	Velocidade de jet spouting	$[M^0L^1T^{-1}]$
\vec{u}_{oms}	Velocidade de mínimo jorro	$[M^0L^1T^{-1}]$
V _{cel}	Volume da célula da malha computacional	$[M^0L^3T^0]$
\vec{v}_{f}	Velocidade linear de fluido	$[M^0L^1T^{-1}]$
V_i	Volume da partícula i	$[M^0L^3T^0]$
$\vec{v}_N^{i\text{-}j}$	Velocidade normal resultante sobre as partículas i e j	$[M^0L^1T^{-1}]$
\vec{v}_p	Velocidade linear de partícula	$[M^0L^1T^{-1}]$
$\vec{v}_{p_{exp}}$	Velocidade axial de partícula coletada experimentalmente	$[M^0L^1T^{-1}]$
⊽ _{p_{sim}}	Velocidade axial de partícula predita numericamente	$[M^0L^1T^{-1}]$
$\vec{v}_{T}^{i - j}$	Velocidade tangencial resultante sobre as partículas i e j	$[M^0L^1T^{-1}]$
x _c	Centroide da célula no volume V _{cel}	$[M^0L^1T^0]$
x _p	Posição da partícula	$[M^0L^1T^0]$
Δx	Comprimento da célula da malha computacional	$[M^0L^1T^0]$
z	Altura axial do leito de jorro	$[M^0L^1T^0]$

Letras gregas

γ	Ângulo de inclinação da parte cônica do leito de jorro	[°]
δ_{N}	Sobreposição normal das partículas i e j	$[M^0L^1T^0]$
$\boldsymbol{\delta}_T$	Sobreposição tangencial das partículas i e j	$[M^0L^1T^0]$
θ_{c}	Parâmetro Lagrangeano de fluido no centro da célula da malha	[-]
$\theta_{f,i}$	Propriedade do fluido interpolada na fase da célula da malha	[-]
θ_p	Parâmetro Lagrangeano de fluido na posição da partícula	[-]
λ_A^N	Coeficiente normal de amortecimento	$[M^{1}L^{0}T^{-1}]$

λ_A^T	Coeficiente tangencial de amortecimento	$[M^{1}L^{0}T^{-1}]$
μ	Coeficiente de atrito	[-]
$\mu_{(p-p)}$	Coeficiente de atrito estático partícula-partícula	[-]
$\mu_{(p-w)}$	Coeficiente de atrito estático partícula-parede	[-]
μ_{f}	Viscosidade do fluido	$[M^{1}L^{-1}T^{-1}]$
μ_R	Coeficiente de atrito de rolamento	[-]
μ _{R(p-p)}	Coeficiente de rolamento partícula-partícula	[-]
μ _{R(p-w)}	Coeficiente de rolamento partícula-parede	[-]
$ ho_p$	Densidade da partícula	$[M^{1}L^{-3}T^{0}]$
$ ho_w$	Densidade do material de composição da parede do leito de jorro	$[M^{1}L^{-3}T^{0}]$
υ	Razão de Poisson	[-]
ϕ_{i}	Fração volumétrica da partícula i que pertence à célula da malha	[-]

CAPÍTULO 1

Introdução

Desenvolvido por Mathur e Gishler (1955), como alternativa à fluidização de partículas grandes, o leito de jorro é um equipamento que promove um eficiente contato entre partícula e fluido em seu interior (MATHUR, EPSTEIN, 1974).

As altas taxas de transferência de massa e de calor garantem aplicabilidade a uma grande quantidade de processos industriais, como secagem, granulação, pirólise, extração mecânica por atrito e recobrimento de sólidos.

Em um leito de jorro observa-se a formação de três regiões principais: o jorro, um núcleo central; o ânulo, uma região anular periférica; e uma zona de fonte, acima do nível do ânulo (MARKOWSKI, KAMINSKI, 1983; UEMAKI, TSUJI, 1992; DUARTE *et al.*, 2008; BREUNINGER *et al.*, 2019).

Existem algumas limitações no uso do leito de jorro convencional, por exemplo, baixa taxa de circulação de partículas na região anular. Como consequência, ocorre um elevado tempo de permanência das partículas nesta região, que pode levar ao acúmulo de partículas, induzindo ao bloqueio do leito (MARKOWSKI, KAMINSKI, 1983; UEMAKI, TSUJI, 1992). Esses aspectos reduzem a eficiência do processo e prejudicam as propriedades do material, especialmente para os mais sensíveis ao calor.

Uma opção para evitar esses problemas de dinâmica das partículas é usar um leito de jorro em fase diluída, ou *jet spouted bed*, que, comparado com o leito de jorro convencional, atinge maiores velocidades e taxas de circulação de partículas. As altas velocidades de fluido deste regime resultam, ainda, em porosidades mais elevadas em todo o equipamento, sem distinção entre jorro e ânulo (MARKOWSKI, KAMINSKI, 1983; UEMAKI, TSUJI, 1992).

O conhecimento da dinâmica da partícula e do fluido no interior do leito é bastante importante para compreender as limitações de sua utilização e para adaptar o equipamento a novas operações. Em sistemas como o leito de jorro, a obtenção de medidas experimentais precisas torna-se uma tarefa difícil, especialmente nos regimes operando em velocidades elevadas, como é o caso do *jet spouted bed*. A utilização das ferramentas de modelagem e simulação computacionais é uma excelente alternativa para a predição da dinâmica do fluido e das partículas em diferentes equipamentos. Esta técnica tem sido amplamente utilizada no projeto e otimização de equipamentos da indústria e pode também fornecer informações do escoamento em seu interior, e fornecer respostas que são difíceis de serem obtidas experimentalmente (SANTOS, 2011). Entretanto, o modelo escolhido e as simulações decorrentes devem ser verificados através de dados experimentais.

A simulação computacional do leito de jorro possibilita a previsão de seu comportamento sob diferentes conjuntos de condições operacionais, além da identificação dos regimes de escoamento (DUARTE, 2006).

A demanda da indústria por ferramentas computacionais mais eficientes e rápidas facilitou o desenvolvimento da Fluidodinâmica Computacional (CFD). Tal abordagem de simulação numérica tem se destacado como uma técnica eficaz para resolver equações de conservação de massa, movimento e energia. Os avanços nesta área de estudo permitem, atualmente, a realização de projetos e otimização de diversos processos, que abrangem desde a Engenharia Mecânica e Química, em estudos de equipamentos industriais, até a Medicina, no estudo da fluidodinâmica do sangue em artérias, por exemplo (BRAMBATTI, 2010).

Com CFD, as fases fluida e sólida podem ser modeladas pelo método Euleriano-Euleriano, abordagem que considera ambas as fases, particulada e fluida, como contínuas. Essa hipótese apresenta um bom resultado para fluidos, mas pode trazer resultados menos precisos ao considerar partículas sólidas de diâmetros maiores ou não-esféricas como fase contínua.

Para modelar adequadamente o movimento das partículas, destaca-se, como alternativa eficaz, o Método dos Elementos Discretos (DEM), no qual o movimento de cada partícula é rastreado individualmente no espaço e no tempo através da abordagem Lagrangeana. Nesta aproximação, têm-se obtido bons resultados em pesquisas envolvendo o comportamento de materiais granulares ao longo dos últimos anos. Diferentemente da modelagem Euleriana, esta metodologia permite a visualização e utilização de partículas irregulares, pois o balanço de força é realizado individualmente em cada partícula, acompanhando-as contato por contato (JUST *et al.*, 2013).

Um obstáculo da abordagem DEM convencional é a necessidade de que o tamanho das células da malha de simulação seja maior que o tamanho da partícula (GUI *et al.*, 2017). Esta exigência pode ser um empecilho nas simulações de alguns equipamentos com estreitamento na geometria, como é caso do leito de jorro, em que a região próxima à entrada de ar requer um refino de células.

Uma outra proposta de simulação vem da junção entre as modelagens Lagrangeana e Euleriana, na aproximação Euler-Lagrange, em que o fluido é tratado como contínuo e a trajetória das partículas é calculada separadamente, durante o cálculo da fase fluida, pela mecânica clássica do corpo sólido. Nesta abordagem, a fase discreta pode trocar massa, quantidade de movimento e energia com o fluido (SILVÉRIO, 2012).

Uma proposta recente da utilização da modelagem Euler-Lagrange é a técnica de CFD-DEM na simulação de problemas envolvendo o escoamento sólido-fluido. Nesta análise, através da Fluidodinâmica Computacional (CFD), as Equações de Navier-Stokes são resolvidas para a fase fluida, enquanto a trajetória das partículas é calculada através da Segunda Lei de Newton do Movimento, pelo Método dos Elementos Discretos (DEM).

Assim, o modelo CFD-DEM pode ser uma ferramenta poderosa para o projeto de leitos de jorro adequados para aplicações específicas, pois pode detalhar a dinâmica das partículas, possibilitando a coleta de informações essenciais para compreender o processo de transição entre o leito de jorro convencional e o *jet spouted bed*, como velocidade de sólidos, intensidade de contatos e de colisões entre partículas e porosidade do leito.

1.1 Objetivos

Neste sentido, o objetivo deste trabalho é investigar a dinâmica de partículas no leito de jorro operando em fase densa (convencional) e *jet spouted bed* (diluída), bem como no regime de transição entre eles, através da técnica de acoplamento CFD-DEM.

Como objetivos específicos, através da modelagem CFD-DEM:

• analisar a variação da velocidade de ascensão e de queda de esferas de vidro em um leito de jorro de acrílico, bem como a variação da porosidade local do leito, através de cinco velocidades de alimentação de ar diferentes, e verificar os resultados a partir da comparação com dados experimentais obtidos nas mesmas condições;

• prever a variação do número de contatos e de colisões entre partículas nas regiões de jorro, ânulo e interface jorro-anular, para um mesmo regime de escoamento;

• prever a variação do número de contatos e de colisões entre partículas em uma mesma região do leito de jorro, para os regimes de escoamento denso, de transição e *jet spouted bed*;

• analisar a influência das regiões de jorro, anular e interface jorro-anular na variação da força de colisão entre partículas, em um mesmo regime de escoamento;

• analisar a influência do tipo de regime de escoamento (denso, de transição e *jet spouted bed*) na variação da força de colisão entre partículas, em uma mesma região do leito de jorro.

CAPÍTULO 2

Revisão Teórica

2.1 Leito de jorro

Ao longo da pesquisa científica em Engenharia Química, o leito de jorro tem se mostrado uma excelente alternativa para diferentes operações, como revestimento, granulação, reator de pirólise, mistura e secagem de sólidos granulares, limpeza de gases, craqueamento de óleo, combustão e gaseificação de carvão, extração mecânica e secagem de sólidos, suspensões, soluções e pastas.

A grande aplicabilidade do leito de jorro se deve às altas taxas de transferência de massa e calor observadas, resultado do contato eficiente entre fluido e partícula, garantido pelo movimento cíclico dos sólidos, característico do equipamento. Na Figura 2.1 mostram-se as principais regiões fluidodinâmicas de um leito de jorro cônico-cilíndrico.



Figura 2.1: Regiões fluidodinâmicas de um leito de jorro cônico-cilíndrico. Fonte: Mathur e Epstein (1974).

A parte central do leito, chamada região de jorro, é formada pela passagem do fluxo de ar percolando os sólidos, e promove alta velocidade de partículas e consequente baixa concentração de material particulado, devido à elevada velocidade de ar circulante. As partículas sobem até uma altura máxima, formam uma fonte de sólidos, desaceleram e caem sobre uma região entre o jorro e a parede do leito, denominada região anular. Na região anular, existe uma alta concentração de material sólido, com baixa velocidade de deslocamento até a base do leito. Na base do leito as partículas retornam à região de jorro e reiniciam o movimento cíclico jorro-fonte-ânulo (VIEIRA NETO *et al.*, 2008).

O leito de jorro pode ser operado em batelada ou de forma contínua. Neste, a alimentação de sólidos pode ser realizada no topo do leito, ou junto à entrada do gás. A remoção de material particulado pode acontecer através de um orifício lateral conectado a um tubo posicionado próximo à região de fonte.

A proposta inicial de um leito de jorro foi realizada por Mathur e Gishler (1955), como alternativa à fluidização de partículas de maior diâmetro, como grãos de trigo. Em seus experimentos, Mathur e Gishler (1955) observaram que partículas grandes não apresentavam comportamento característico de fluidização. A tentativa de operar um leito fluidizado com grãos de trigo culminou no rompimento da placa de distribuição de ar do leito fluidizado, que, associado a um aumento na velocidade de alimentação de ar, permitiu que as partículas circulassem sob um comportamento fluidodinâmico cíclico e organizado.

Mathur e Epstein (1974) observaram que a operação de secagem de grãos de trigo em leito de jorro era capaz de conservar as propriedades do sólido, mesmo com elevadas vazões de alimentação de ar. Os autores citaram, ainda, a importância do conhecimento da trajetória dos sólidos e do fluido no interior do equipamento. Parte desse conhecimento (de forma empírica) pode vir da análise da curva característica do leito de jorro, como mostrado na Figura 2.2.

A curva 0ABC mostra o desenvolvimento do jorro a partir do aumento da velocidade de alimentação do fluido, e a curva DEF0 mostra o processo inverso, com redução da velocidade do fluido.

No início da operação, em (0-A), o leito se comporta como leito estático, e o fluido apenas percola as partículas, sem movimentá-las. Nesse momento, a queda de pressão aumenta à medida que a velocidade de alimentação aumenta, até o ponto A. A partir de uma determinada velocidade de alimentação, as partículas são arrastadas na região próxima à base do leito, comprimem as partículas imediatamente acima, e formam um arco de partículas, que ainda resiste ao escoamento do fluido. Nessa fase, a queda de pressão permanece aumentando, já que mesmo com a formação do arco, existe resistência ao escoamento (A-B). Em seguida, o incremento da vazão de alimentação segue aumentando a compactação das partículas no arco, alongando-o e aumentando ainda mais a queda de pressão que, nesse momento da operação, é chamada de queda de pressão máxima, em B.



Figura 2.2: Curva característica do leito de jorro. Fonte: Adaptado de Bacelos (2016).

A partir da queda de pressão máxima, um discreto aumento na velocidade de alimentação do fluido é capaz de diminuir a pressão, até o ponto C, devido à elevada altura do jorro interno, frente ao empacotamento de sólidos acima dele, que diminui a resistência ao escoamento do fluido. Dessa forma, os sólidos são deslocados e o leito se expande. Nesse ciclo da operação, um pequeno aumento na velocidade do fluido quebra o jorro interno e a concentração de sólidos acima dele diminui, causando uma grande redução na queda de pressão, até o ponto D. A partir desse momento, chamado jorro incipiente, o leito deixa de ser estático e o movimento de jorro (circulação das partículas), característico desse equipamento, se inicia.

Um aumento contínuo da velocidade de alimentação pode, então, aumentar a altura da fonte de partículas, sem afetar significativamente a queda de pressão do equipamento.

A velocidade de jorro incipiente é de difícil reprodução no decorrer da operação, já que a porosidade inicial do leito não é obtida ao longo do processo. Dessa forma, a diminuição lenta da velocidade de alimentação do fluido, a partir do leito em estado de jorro (D-E), permite atingir novamente o leito fixo e a velocidade do ar na intersecção entre o leito fixo e de jorro estável (obtida em vazões de ar decrescentes), é chamada velocidade de jorro mínimo (u_{oms}). (MATHUR e EPSTEIN, 1974). Nesse momento, a queda de pressão observada é a chamada queda de pressão de jorro mínimo (P_{ms}).

Apesar da alta aplicabilidade do leito de jorro em diversas operações da indústria química, alguns estudos mostram certas limitações associadas à sua utilização na configuração clássica. Strumillo *et. al* (1977) *apud* Markowski e Kaminski (1983) e Markowski *et al.* (1981) *apud* Markowski e Kaminski (1983) em seus estudos, observaram, por exemplo, o retorno de sólidos da interface jorro-ânulo para a região de jorro, antes que o movimento cíclico seja concluído, fenômeno denominado curto-circuito. O resultado deste evento é uma diferença no tempo de residência nas regiões anular e de jorro, o que pode ocasionar a formação de um produto heterogêneo. Faixas maiores de tempos de residência elevados têm, ainda, um efeito adverso nas propriedades do material, principalmente para aqueles sensíveis ao calor (MARKOWSKI; KAMINSKI, 1983). Além disso, a eficiência do processo pode ser reduzida devido à baixa taxa de circulação de partículas, principalmente na região anular, e compactação do leito de sólidos (JÚNIOR *et al.*, 2015).

As condições fluidodinâmicas do processo influenciam consideravelmente a transferência de massa e calor em leitos de jorro. Para promover uma recirculação de partículas intensa, algumas modificações operacionais podem ser efetuadas de forma a garantir um regime favorável às trocas térmicas e de massa, com alta turbulência, baixo tempo de residência e alta interação de partículas.

Diante disso, torna-se importante o conhecimento das diferentes possibilidades operacionais em relação aos equipamentos convencionais, como é o caso do *jet spouted bed*, ou leito de jorro em fase diluída, uma alternativa à operação do leito de jorro tradicional, abordado na próxima seção deste capítulo.

2.1.1 Jet spouted bed

Para promover maiores taxas de recirculação de sólidos, algumas modificações operacionais em leitos de jorro podem ser efetuadas, preservando a estabilidade da movimentação das partículas, promovendo elevada interação entre sólidos, garantindo um regime favorável às trocas térmicas e de massa, com baixo tempo de residência. O regime, estudado inicialmente por Markowski e Kaminski (1983), e que foi denominado *jet spouted bed*, ou leito de jorro em fase diluída (EPSTEIN, 1991) tem estas características e pode ser considerado como uma expansão do leito de jorro tradicional.

Segundo Markowski e Kaminski (1983), reduzir a profundidade do leito (altura do leito estático) e aumentar a velocidade de alimentação do ar (u_o) são alterações que permitem atingir este regime de escoamento. Posteriormente, Uemaki e Tsuji (1992) observaram que em leitos de jorro cônico-cilíndricos, a formação deste comportamento fluidodinâmico é facilitada, quando comparada a outras configurações de equipamento.

Olazar *et al.* (1992) observaram que o ângulo da parte cônica deve estar entre 28 e 45° e que a relação entre diâmetro de entrada (D_o) e diâmetro da partícula (d_p) deve variar entre 1 e 80, para operações em *jet spouted bed*. Epstein e Grace (1995) observaram que uma relação entre altura de leito estático (H_o) e diâmetro de entrada (D_o) compreendida entre 2 e 5 favorece a obtenção do regime diluído.

Para leitos de jorro com baixa altura de leito estático (H_0), ângulo de cone entre 28 e 45° e relação entre diâmetro de entrada do leito e diâmetro inferior do cone (${}^{D_0}/{}_{D_i}$) entre 0,5 e 1, Olazar *et al.* (1993) propuseram correlações para o cálculo da velocidade mínima de jorro em fase densa (u_{oms}) e a velocidade mínima de jorro em fase diluída (u_{omj}), como mostram, respectivamente, as Equações 2.1 e 2.2

$$Re_{oms} = 0.126 Ar^{0.5} \left(\frac{D_b}{D_o}\right)^{1.68} \left[\tan\left(\frac{\gamma}{2}\right)\right]^{-0.57} = \frac{\rho_p u_{oms} d_p}{\mu}$$
(2.1)

$$Re_{omj} = 6,89 Ar^{1,46} \left[tan \left(\frac{\gamma}{2}\right) \right]^{-0,53} = \frac{\rho_p u_{omj} d_p}{\mu}$$
(2.2)

Markowski e Kaminski (1983) estudaram o *jet spouted bed*, através de um leito de jorro operando com velocidade de alimentação de ar elevadas (acima de 1,7 u_{oms}) e altura de leito estático H_o cerca de duas vezes maior que o diâmetro de entrada do ar no leito de jorro (H_o \approx 2D_o). Comparados com leitos de jorro tradicionais, foram observadas por estes autores diferenças na estrutura do leito de partículas, no movimento dos sólidos e nas características fluidodinâmicas no interior do equipamento, mas com preservação do padrão cíclico.

Tsuji *et al.* (1989) *apud* Olazar *et al.* (1994) obtiveram bons resultados na gaseificação de carvão sob altas temperaturas e Bilbao *et al.* (1987, 1989), na polimerização de álcool benzílico, ao utilizar o *jet spouted bed,* devido à melhor distribuição de sólidos no equipamento e ao menor tempo de residência de partículas.

Bilbao *et al.* (1987) utilizaram o *jet spouted bed* como reator catalítico em reações rápidas e observaram que é uma configuração eficiente o bastante para competir com reatores mais complexos e mais dispendiosos.

Epstein e Grace (1997) observaram que o *jet spouted bed* permite tempos de residência baixos e alta velocidade relativa entre sólido e fluido, o que torna esse regime de jorro eficiente na secagem de produtos termossensíveis, Além disso, observaram que a porosidade na região anular do jorro em regime diluído chegou a 0,9, contra 0,4 do jorro tradicional (Epstein e Grace, 1997).

San Jose *et al.* (1993) reportaram que na condição de leito de jorro diluído não foi possível observar uma altura máxima de leito, ao contrário do que ocorre no regime denso. A existência de uma altura máxima que permite jorro estável é uma limitação importante da configuração convencional, que não existe no *jet spouted bed*.

O *jet spouted bed* tem outras vantagens, como sua capacidade de operação numa grande distribuição de tamanho de partícula e pequena queda de pressão (Olazar *et al.*, 1993) e alta transferência de massa e calor entre fases. A alta velocidade de alimentação de fluido utilizada nesse regime de escoamento garante um curto tempo de residência de sólidos e permite a operação de sólidos pequenos, como alguns catalisadores.

Olazar *et al.* (1992) observaram a existência de um regime estável intermediário entre o regime tradicional de jorro e *jet spouted bed*, chamado de regime de transição, como mostrado na Figura 2.3.



Figura 2.3: Regimes de escoamento. Fonte: Olazar *et al.* (1992).

É possível observar na Figura 2.3, que o movimento cíclico das partículas, característico do leito de jorro convencional, também pode ser observado no *jet spouted bed*, porém, os limites entre as regiões anular e de jorro não são bem definidos. Portanto, a variação característica da porosidade do leito em diferentes posições, caracterizando as regiões típicas do leito de jorro convencional, não são observadas no *jet spouted bed* (Bilbao *et al.*, 1993).

2.1.2 Fluidodinâmica de diferentes regimes de leito de jorro – Análise de Barrozo *et al.* (2010)

Neste tópico será apresentada uma síntese da metodologia e análise dos resultados do trabalho de Barrozo *et al.* (2010), que serão utilizados para a verificação da modelagem e das simulações realizadas na presente dissertação.

Algumas características importantes na compreensão das diferenças entre estes três regimes de escoamento do leito de jorro (denso, transição e *jet spouted bed*) não são facilmente observadas em estudos experimentais e são poucos os trabalhos encontrados na literatura que detalham essas diferenças.

No estudo de Barrozo *et al.* (2010), foram identificados os regimes fluidodinâmicos de escoamento do leito de jorro: convencional, em fase densa; diluído, *jet spouted bed*; e transição entre convencional e diluído. Este estudo compreendeu uma parte experimental, em que foram obtidos dados de queda de pressão, velocidade da partícula e porosidade nas diversas regiões destes três estáveis regimes, bem como um estudo de simulação pela técnica da fluidodinâmica computacional (CFD).

Na análise experimental de Barrozo *et al.* (2010), foi construída uma unidade experimental, no Centro de Pesquisa em Fluidização da *University of British Columbia*, composta por um leito de jorro de Plexiglass, uma placa de orificio, dois transdutores de pressão, sondas de fibra ótica e um computador. Foram utilizadas esferas de vidro nos diâmetros de 1,16 mm, 1,55 mm e 2,12 mm, com densidade de 2500 kg/m³ e esfericidade igual a 1,0 e empacotamento de 0,61.

O leito de jorro cônico-cilíndrico, conforme a Figura 2.4, foi construído com ângulo de cone (γ) de 45°, diâmetro do orifício de entrada do leito (D_0) de 0,019 m, diâmetro inferior de cone (D_i) de 0,038 m, altura de cone (H_c) de 0,50 m e diâmetro de seção cilíndrica (D_c) de 0,45 m.



Figura 2.4: Geometria do equipamento utilizado no estudo. Fonte: Barrozo *et al.* (2010).

Foi utilizado ar proveniente de um compressor como fluido para o jorro. Através de uma placa de orifício com dois transdutores de pressão, mediu-se a diferença de pressão na placa de

orifício, e consequentemente a vazão de alimentação de ar. Na análise da pressão local no leito de jorro, sondas de pressão estáticas foram inseridas ao longo da parede da coluna do leito. Todas as informações dos transdutores de pressão foram armazenadas em um computador, através de um sistema de aquisição de dados.

As medidas de velocidade da partícula e de porosidade do leito foram realizadas por meio de um sistema de sondas de fibra ótica (*Particle velocity meter* PV-4A), desenvolvido no Instituto de Metalurgia Química da Academia Chinesa de Ciências e seu esquema encontra-se na Figura 2.5. O sistema é composto por uma sonda, uma fonte de luz, dois foto-multiplicadores e um conjunto de aquisição de dados de alta velocidade conectado a um computador. A sonda contém três grupos de fibras ópticas alinhadas: um central, emissor de luz, e dois periféricos, receptores. Quando uma partícula se aproxima da ponta da sonda, ela reflete a luz emitida pela fibra central. A luz refletida é coletada continuamente pelos dois conjuntos de fibras. Com o objetivo de eliminar a influência da zona cega, observada por Liu *et al.* (2003) e Wang (2006), uma janela de vidro foi colocada na ponta da sonda.



Figura 2.5: Esquema de sonda de fibra óptica. Fonte: Barrozo *et al.* (2010).

Através do tempo que a partícula leva para percorrer a distância efetiva (De), a velocidade da partícula (\vec{v}_p) foi calculada ($\vec{v}_p = \frac{De}{t}$). Pelos valores médios dos sinais oriundos dos receptores A e B, a porosidade foi também obtida baseada em uma relação entre a porosidade e a amplitude do sinal.

Para cada velocidade de alimentação de ar estudada, a queda de pressão foi calculada considerando-se a diferença entre a queda de pressão na presença e na ausência de um leito de partículas, conforme indicação de Mathur e Epstein (1974). A queda de pressão na condição de jorro mínimo no regime denso foi definida, graficamente, através da curva característica do jorro, sendo considerada a velocidade de jorro mínimo (u_{oms}), a velocidade no ponto em que ocorre o colapso do jorro em vazões decrescentes do ar de alimentação. Uma vez que o regime em fase diluída (*jet spouted* bed) é atingido, ele permanece estável com o aumento da velocidade de alimentação do ar, com queda de pressão constante. Dessa forma, a velocidade de jorro mínimo na condição diluída (u_{omj}), também foi determinada através da curva característica, a partir da interseção entre a linha de queda de pressão constante e a linha descendente do regime de transição.

Três regimes de leito de jorro podem ser reconhecidos a partir da Figura 2.6. O regime de jorro convencional, em (a), o regime de transição, em (b), com diminuição na queda de pressão ao longo da velocidade de alimentação de ar, o regime de *jet spouted bed*, em (c), em que um aumento na vazão de alimentação não é capaz de promover variação significativa na queda de pressão.



Figura 2.6: Curva característica para os regimes denso, de transição e diluído. Fonte: Barrozo *et al.* (2010).

Os dados experimentais obtidos através da curva característica foram comparados com os valores calculados pelas correlações de Olazar *et al.* (1993), conforme as Equações 2.1 e 2.2. Os desvios médios obtidos para a esfera de vidro de diâmetro 1,55 mm foram iguais a +20,8% para a velocidade de jorro mínimo (u_{oms}) e +9,1% para a velocidade mínima de jorro em fase diluída (u_{omj}). Para as partículas de diâmetro 2,12 mm os desvios foram iguais a +10.3% e +7.7%, respectivamente para u_{oms} e u_{omj} . Wang (2006) também observou uma melhor aproximação pelas correlações de Olazar *et al.* (1993) para partículas grandes.

A análise de porosidade de leito e velocidade de partículas foi realizada em diferentes velocidades de alimentação de ar. Para esferas de vidro de 1,16 mm, empacotadas em altura de leito estático de 62 mm, foram analisados os regimes a velocidades de ar correspondentes a 1,5; 3,0; 6,0 e 8,0 vezes a velocidade de jorro mínimo (u_{oms}). Para esferas de vidro de 1,55 mm, empacotadas em altura de leito estático de 52 mm, foi estudado o comportamento para as velocidades de 1,6; 2,8; 4,2; 5,4 e 6,9 vezes u_{oms}.

Os autores observaram que no regime de jorro convencional, operando com 1,5 u_{oms}, para a esfera de 1,16 mm e com 1,6 u_{oms}, para as partículas de 1,55 mm, existe uma clara distinção entre a porosidade do leito para a região anular e a região de jorro. A porosidade é alta na região de jorro e permanece uniforme até atingir a interface jorro-anular, quando diminui rapidamente. Na região anular, onde as partículas estão muito próximas umas das outras, a porosidade é uniforme e quase igual à porosidade do leito empacotado.

Já para o regime *jet spouted bed,* com uma velocidade de alimentação do ar igual a $8,0 u_{oms}$, para a esfera de 1,16 mm, e de $6,9 u_{oms}$, para a de 1,55 mm, a porosidade na região anular é bastante próxima à da região de jorro, e com isso, não é possível fazer distinção entre estas zonas.

Para o regime de transição, em condições de velocidade de alimentação do ar igual a 3,0 u_{oms} e 6,0 u_{oms}, para a esfera de 1,16 mm, e de 2,8 u_{oms}; 4,2 u_{oms} e 5,4 u_{oms}, para a de 1,55 mm, as porosidades são maiores que o regime convencional, e a diferença entre a região de jorro e anular é reduzida com o aumento da velocidade de alimentação de ar.

A análise de velocidade de partículas no regime convencional mostrou que as partículas caem com baixas velocidades na região anular, e na região de jorro as velocidades ascendentes são maiores, com um máximo no centro (r=0). Além disso, Barrozo *et al.* (2010) observaram

que a velocidade ascendente das partículas na região de jorro aumenta consideravelmente com o aumento da velocidade do gás, atingindo uma máxima velocidade no regime diluído. A velocidade descendente das partículas para o *jet spouted bed* também excede em magnitude aos valores observados no regime convencional, devido ao quase livre movimento de queda de partículas na região anular do leito neste regime diluído.

A modelagem numérica do trabalho de Barrozo *et al.* (2010) foi realizada através da Fluidodinâmica Computacional, por meio do modelo Euleriano-Euleriano, que considera tanto a fase fluida (ar) quanto a fase particulada (esferas de vidro) como um meio contínuo. O modelo, detalhado na seção 2.2.1, resolve a equação da continuidade para a fase fluida e para a fase particulada através de técnicas numéricas de discretização, realizadas sob uma malha computacional gerada com as dimensões do leito de jorro utilizado experimentalmente.

Os resultados das simulações de porosidade para a esfera de vidro de 1,55 mm e altura de leito estático de 52 mm apresentaram boa concordância com os resultados experimentais, no regime denso. Para as esferas de vidro de 1,16 mm e altura de leito estático de 62 mm, a porosidade no regime de transição foi subestimada pelas simulações, mas qualitativamente, a modelagem numérica previu satisfatoriamente o comportamento observado. No *jet spouted bed*, a simulação por CFD foi capaz de prever o comportamento praticamente estável de porosidade, ao longo de todas as posições radiais, para todos os diâmetros de partícula estudados.

Com relação à distribuição radial de velocidade de partículas, as simulações CFD também previram de forma satisfatória o comportamento para os regimes denso, de transição e diluído.

Existem algumas limitações da técnica CFD aplicada ao estudo de equipamentos que operam com fase particulada, como é o caso quando se tem interesse em quantificar o número e intensidade de colisões, visto que, neste tipo de abordagem, a fase sólida não é analisada discretamente. Neste sentido, a próxima seção deste capítulo apresentará o equacionamento da técnica CFD, utilizada por Barrozo *et al.* (2010) e o equacionamento de uma modelagem alternativa para escoamentos multifásicos, o acoplamento CFD-DEM, que adiciona, à Fluidodinânica Computacional (CFD), o cálculo da trajetória das partículas através do Método

de Elementos Discretos (DEM). Este acoplamento tem se mostrado eficiente na análise de sistemas em que a obtenção de informações mais específicas de partículas seja de interesse.

2.2 Modelagem computacional

Apesar da simulação numérica ter surgido como uma alternativa à análise de problemas físicos em pesquisas científicas, com o avanço Engenharia de Computação, e criação de máquinas computacionais mais robustas e com boa capacidade de processamento, a modelagem numérica tornou-se uma técnica importante na resolução de problemas de Engenharia (MALISKA, 2004).

No estudo numérico, a descrição do sistema é realizada através de um modelo matemático, que caracteriza todos os fenômenos e leis envolvidos na operação. Através de um *software* computacional, métodos numéricos são utilizados para resolver o conjunto de equações que retrata tais fenômenos (SANTOS, 2008).

Law e Kelton (1991) ressaltam que dentre as principais vantagens da modelagem computacional estão a eliminação de problemas técnicos e de viabilidade econômica de experimentos em laboratório, a representação de sistemas difíceis de serem testados experimentalmente e a obtenção de informações importantes da operação em regiões de difícil medição experimental. Como desvantagens, os autores salientam a necessidade da comparação das simulações com dados experimentais e a dependência dos resultados com o modelo matemático escolhido, que deve representar fidedignamente os fenômenos envolvidos no problema estudado.

Na Engenharia Química, o conhecimento detalhado do escoamento no interior dos equipamentos pode ser muito útil para o projeto de equipamentos e otimização de processos, bem como para solução de problemas (BIÇER *et al.*, 2020). Embora essa compreensão possa ser alcançada, em sua maioria, através de experimentos, a modelagem é uma eficiente ferramenta neste processo, pois permite a alteração de condições operacionais e da geometria do equipamento de forma menos dispendiosa em comparação com técnicas experimentais.
O comportamento do escoamento das partículas e do fluido no interior de leitos de jorro pode ser analisado através da modelagem multifásica. São duas as principais abordagens para a modelagem de escoamentos multifásicos: Euler-Euler e Euler-Lagrange (DUARTE, 2006).

Na abordagem Euler-Euler, considera-se que as fases do sistema são interpenetrantes e contínuas. O conjunto fluido-partícula é tratado de maneira similar ao fluido puro sob a ótica Euleriana, como um meio contínuo, não sendo considerados os espaços intermoleculares. (DUARTE, 2006). Na modelagem Euler-Euler, a fase particulada pode ser conceituada como um pseudofluido, por ser considerada um meio contínuo (VIEIRA NETO, 2007).

Na abordagem Euler-Lagrange, a fase fluida é observada sob a abordagem Euleriana e a fase particulada, sob a Lagrangeana, que discretiza cada partícula pelas equações do movimento de Newton (DUARTE, 2006). Estas duas aproximações serão detalhadas nas seções a seguir.

2.2.1 Abordagem Euleriana-Euleriana

Na abordagem Euler-Euler, as fases fluida e sólida são analisadas como um meio contínuo e interpenetrante. Esta modelagem é a base da Fluidodinâmica Computacional (CFD), que vem sendo cada vez mais aplicada à resolução de problemas industriais.

Na compreensão da modelagem Euleriana, considera-se que a soma das frações volumétricas das fases fluida e particulada é unitária, como mostra a Equação 2.3, em que f_p representa a fração volumétrica da fase particulada e, f_f , a fração volumétrica da fase fluida.

$$f_p + f_f = 1 \tag{2.3}$$

Na técnica CFD, um conjunto de equações diferenciais parciais de conservação de massa, de momento e de energia é resolvido num volume de controle ocupado por ambas as fases. As Equações 2.4 e 2.5 correspondem à conservação de massa das fases particulada e fluida, respectivamente, e as equações de conservação da quantidade de movimento para a fase sólida e fluida são apresentadas nas Equações 2.6 e 2.7, respectivamente.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(f_p \rho_p \right) + \nabla (f_p \rho_p \vec{v}_p) = 0$$
(2.4)

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(f_{f} \rho_{f} \right) + \nabla . \left(f_{f} \rho_{f} \vec{v}_{f} \right) = 0$$
(2.5)

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(f_p \rho_p \vec{v}_p \right) + \nabla (f_p \rho_p \vec{v}_p \vec{v}_p) = -\nabla P_p - \nabla .\overline{\overline{T}}_p + f_p \rho_p \vec{g} - \vec{F}^{f \cdot p}$$
(2.6)

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(f_{f} \rho_{f} \vec{v}_{f} \right) + \nabla \left(f_{f} \rho_{f} \vec{v}_{f} \vec{v}_{f} \right) = -\nabla P - \nabla \left(\overline{\overline{T}}_{f} + f_{f} \rho_{f} \vec{g} - \vec{F}^{f \cdot p} \right)$$
(2.7)

As densidades do sólido e do fluido são, respectivamente, $\rho_p e \rho_f$; os vetores velocidade da fase particulada e fluida são $\vec{v}_p e \vec{v}_f$, nesta ordem; P_p representa a pressão da fase sólida; P, a pressão; os tensores tensão da fase particulada e fluida são, respectivamente, $\overline{T}_P e \overline{T}_f$; \vec{g} é a aceleração da gravidade e \vec{F}^{f-p} , a força de interação fluido-partícula.

Apesar da abordagem Euleriana-Euleriana ser uma metodologia consagrada na literatura na modelagem de escoamentos em equipamentos industriais, existem algumas limitações na obtenção de informações da fase sólida nos regimes de fluxo multifásico. Não é possível prever, através dessa modelagem, a dinâmica de cada partícula de forma individual. Uma alternativa para se obter informações mais profundas sobre a fase sólida é realizar seu estudo pela abordagem Lagrangeana, através do Método dos Elementos Discretos (DEM), em que as partículas são rastreadas no espaço e no tempo, e utilizar a abordagem Euleriana para obter informações apenas da fase fluida do sistema.

O Método de Elementos Discretos (DEM) puro é comumente utilizado para análise de sistemas granulares, incluindo misturadores, tambores, moinhos e silos; enquanto a técnica CFD-DEM é utilizada no estudo de sistemas fluido-partícula, como leitos fluidizados, leitos de jorro e transportadores pneumáticos.

A próxima seção trata da Abordagem Lagrangeana, utilizada na fase sólida do estudo Euler-Lagrangeano de sistemas multifásicos.

2.2.2 Abordagem Lagrangeana

Na abordagem Lagrangeana, cada partícula do fluxo multifásico é analisada individualmente e seu conjunto não é mais compreendido como um meio contínuo, como na

abordagem Euleriana. Esta modelagem é a base do Método de Elementos Discretos (DEM), que permite obter informações mais específicas sobre trajetória, contatos e colisões de partículas.

No Método dos Elementos Discretos (DEM), proposto inicialmente por Cundall e Strack (1979), as equações governantes do movimento da partícula são baseadas na Segunda Lei de Newton do Movimento, conforme a Equação 2.8 (NOROURZI *et al.*, 2016).

$$m_{p}\frac{d\vec{v}_{p}}{dt} = \sum_{i=i}^{J} \vec{F} + m_{p}\vec{g}$$
(2.8)

A massa da partícula é dada por m_p , a velocidade linear da partícula é \vec{v}_p ; \vec{F} é a força atuante sobre as partículas, que inclui a força do gradiente de pressão, forças entre partículas e a força de arraste entre fluido e partícula; \vec{g} , a aceleração gravitacional.

No DEM, as forças de contato entre partículas também são quantificadas, podendo ser incluídos modelos para forças de atrito, forças de campo eletrostático, gravitacional e magnético e para pressão (SANTOS, 2015).

O algoritmo do Método de Elementos Discretos é apresentado na Figura 2.7. No algoritmo de cálculo DEM, as informações das partículas são atualizadas a cada passo de tempo de integração. Alguns parâmetros da partícula são importantes na escolha do passo de tempo de integração, a fim de garantir que não ocorra perturbação das partículas com consequente instabilidade do sistema e resultados inconsistentes (SANTOS, 2015; THORNTON, 2015).



Figura 2.7: Algoritmo de resolução DEM.

Fonte: Da Autora.

Além da Segunda Lei de Newton do Movimento e das forças de contato entre partículas, o Método de Elementos Discretos inclui uma lei de força-deslocamento de partículas, que leva em consideração os parâmetros de colisão entre as partículas no cálculo. Os dois principais modelos de força deslocamento e os conceitos dos parâmetros de colisão entre partículas são abordados nas próximas subseções.

2.2.2.1 Colisão de partículas

Quando duas ou mais partículas entram em contato por um curto espaço de tempo, ocorre colisão entre elas. A colisão entre partículas pode ser plástica, ou inelástica, quando toda a energia do sistema é dissipada; parcialmente elástica, quando parte da energia é dissipada; ou elástica, quando nenhuma energia é perdida. Não se considera possível, contudo, a existência de colisões perfeitamente elásticas, já que a dissipação de energia, ainda que pequena, deve ocorrer na forma de som, calor ou deformação das partículas que participaram do evento (STRONGE, 2000).

Quando se trabalha com operações de transferência de massa e calor, deve-se levar em consideração a importância da análise de colisões de partículas no interior do equipamento a depender do processo que nele ocorre. Para a extração mecânica, por exemplo, a frequente colisão entre partículas é um dos fatores importantes na eficiência da operação, bem como sua intensidade.

• Parâmetros de colisão

No estudo da colisão entre duas partículas, é necessário o conhecimento de alguns parâmetros que definem a inelasticidade do fenômeno e a resistência ao movimento ao qual os corpos serão submetidos após a colisão. Nesta seção serão abordados três parâmetros essenciais neste estudo: Coeficiente de Restituição (e), Coeficiente de Atrito Estático (μ), e Coeficiente de Atrito de Rolamento (μ_R).

• *Coeficiente de restituição (e)*

Durante a colisão de duas partículas, ocorre dissipação de energia cinética através de propagação de ondas elásticas e/ou deformação plástica. As ondas elásticas provocam deformações elásticas nas partículas (portanto reversíveis e momentâneas), e parte dessas ondas se propaga através dos corpos, até atingir a interface oposta, e depois retornam ao ponto de impacto, onde causam dissolução adicional de energia (MUELLER *et al.*, 2015). A deformação plástica ocorre quando as tensões produzidas pelo impacto são maiores que a tensão de escoamento das partículas, devido a um elevado valor de energia cinética antes de a colisão ocorrer. Dessa forma, a deformação dos corpos ocorre de forma irreversível e permanente.

O coeficiente de restituição é uma medida da quantidade de energia cinética que é conservada depois do choque entre partículas. Sendo assim, é uma razão entre a energia cinética dos corpos antes e após a colisão e, por isso, assume valor entre 0 e 1, como mostrado na Tabela 2.1.

Coeficiente de Restituição	Tipo de colisão	Energia cinética após colisão
<u>e = 1</u>	Perfeitamente elástica	Totalmente conservada
e = 0	Perfeitamente inelástica	Totalmente dissipada
0 < e < 1	Parcialmente elástica	Parcialmente dissipada

Tabela 2.1: Características das colisões.

Fonte: Da Autora.

• *Coeficiente de atrito estático (μ)*

A força de atrito pode ser descrita como a resistência ao movimento iminente de um corpo, quando uma força externa é aplicada. Já o coeficiente de atrito estático, μ , pode ser entendido como a razão entre a força de resistência ao movimento e a força normal que pressiona o corpo contra uma superfície.

• *Coeficiente de atrito de rolamento (* μ_R *)*

De maneira semelhante ao coeficiente de atrito estático, o coeficiente de atrito de rolamento também representa a resistência ao movimento de um corpo, especificamente, do rolamento de partículas esféricas. Similarmente, seu cálculo é dado pela relação entre a força de resistência ao rolamento e a força normal que pressiona a esfera contra uma superfície.

2.2.2.2 Modelos de força-deslocamento

Existem dois tipos principais de modelos aplicados ao DEM: o modelo linear molaamortecedor e o modelo não-linear de Hertz-Mindlin. Eles se diferem pela forma em que relacionam a força de contato e a deformação da partícula.

• Modelo linear mola-amortecedor:

Este é o modelo mais simplificado da relação força-deslocamento e foi proposto inicialmente por Cundall e Strack (1979). O modelo mola-amortecedor relaciona de maneira linear o deslocamento das partículas e suas forças de contato.

A força de contato resultante ($\vec{F}c$) é dada pela Equação 2.9, que relaciona as forças de colisão normal (\vec{F}_N) e tangencial (\vec{F}_T) que atuam sobre a partícula. A força de colisão normal é dada pela Equação 2.10 e a força de colisão tangencial pode ser expressa pela Equação 2.11 ou pela 2.12, a depender da relação existente entre as forças e o coeficiente de atrito (μ).

$$\vec{F}c = \vec{F}_N + \vec{F}_T \tag{2.9}$$

$$\vec{F}_{N} = \lambda_{A}^{N} \vec{v}_{N}^{i-j} - k_{N} \delta_{N}$$
(2.10)

$$\vec{F}_{T} = \mu \vec{F}_{N}$$
, se $\left| \vec{F}_{T} \right| \le \mu \left| \vec{F}_{N} \right|$ (2.11)

$$\vec{F}_{T} = \lambda_{A}^{T} \vec{v}_{T}^{i-j} - k_{T} \delta_{T} , \text{ se } \left| \vec{F}_{T} \right| > \mu \left| \vec{F}_{N} \right|$$
(2.12)

sendo λ_A^N , o coeficiente de amortecimento normal; \vec{v}_N^{i-j} , a velocidade normal relativa entre as partículas i e j; k_N é o coeficiente de rigidez da mola na direção normal; δ_N , a sobreposição normal das partículas i e j; λ_A^T , o coeficiente de amortecimento tangencial; \vec{v}_T^{i-j} , a velocidade tangencial relativa entre as partículas i e j; k_T , o coeficiente de rigidez da mola na direção tangencial e δ_T , a sobreposição tangencial das partículas i e j.

Para partículas esféricas, mesmo sendo uma modelagem matemática simples, o modelo linear mola-amortecedor é capaz de representar bem colisões com deformações elásticas e pequenas, como as que ocorrem entre as partículas e geometria do equipamento, embora para partículas não esféricas o modelo não seja capaz de representar de forma significativa o contato entre os sólidos (PENG, 2014). Além disso, Di Maio e Di Renzo (2005) e Kruggel-Emden *et al.* (2007) mostraram que o coeficiente de restituição, e a duração do contato são dependentes da força de contato, o que pode tornar não satisfatória a aproximação do modelo linear mola-amortecedor, que considera esses parâmetros constantes.

Com base nisso, Di Maio e Di Renzo (2005) propuseram a junção de dois outros modelos mais complexos de força-deslocamento, que consideram a variação do coeficiente de restituição e da duração do contato entre partículas e é capaz, ainda, de representar o contato de partículas não-esféricas, o denominado Modelo Hertz-Mindlin.

• Modelo de Hertz-Mindlin

O modelo de Hertz-Mindlin é a união dos modelos desenvolvido por Hertz (1882) e por Mindlin e Deresiewicz (1953). Ao contrário do modelo mola-amortecedor, que relaciona de forma linear o deslocamento das partículas e suas forças de contato, neste modelo a relação é efetuada através das propriedades e do formato dos sólidos em contato.

Apesar de complexo, o modelo de Hertz (1882) inclui na análise o formato dos sólidos, então torna-se uma interessante alternativa no estudo de partículas não-esféricas. Já o modelo de Mindlin e Deresiewicz (1953) é baseado numa condição de não-deslizamento de partículas. Dessa forma, o Modelo de Hertz-Mindlin faz a análise de Hertz na direção normal e a análise de Mindlin na direção tangencial (THORNTON, 2015).

Assim como no modelo linear mola-amortecedor, a força de contato resultante ($\vec{F}c$) é dada pela Equação 2.9, que relaciona as forças de colisão normal (\vec{F}_N) e tangencial (\vec{F}_T) que atuam sobre a partícula. A força de colisão normal, contudo, é função do módulo de Young equivalente (E*), da sobreposição normal (δ_N), do raio de contato equivalente (R*), como mostra a Equação 2.13.

$$\vec{F}_{N} = \frac{4}{3} E^{*} \delta_{N}^{\frac{3}{2}} \sqrt{R^{*}}$$
(2.13)

O módulo de Young equivalente (E*) e o raio de contato equivalente (R*) têm relação com a rigidez do material de composição das partículas e são definidas pelas Equações 2.14 e 2.15, respectivamente.

$$\frac{1}{E^*} = \frac{(1 - v_i)^2}{E_i} + \frac{(1 - v_j)^2}{E_j}$$
(2.14)

$$R^* = \frac{r_i r_j}{r_i + r_j} \tag{2.15}$$

O módulo de Young equivalente (E*) é uma função da razão de Poisson (v), que mede a deformação do material de composição das partículas com base na força de tensão aplicada. Nas Equações 2.14 e 2.15, r representa o raio das partículas durante o contato. No modelo de Hertz-Mindlin, a força de colisão tangencial (\vec{F}_T) é função da sobreposição tangencial (δ_T), do módulo de cisalhamento equivalente (G*), do raio de contato equivalente (R*) e da sobreposição normal (δ_N), conforme a Equação 2.16.

$$\vec{F}_{\rm T} = -8\delta_{\rm T}G^*\sqrt{R^*\delta_{\rm N}} \tag{2.16}$$

Assim como o módulo de Young equivalente (E*), utilizado no cálculo da força de colisão normal, o módulo de cisalhamento equivalente (G*) tem relação com o material de composição das partículas e é uma função da razão de Poisson (v), como mostra a Equação 2.17.

$$\frac{1}{G^*} = \frac{2 - v_i}{G_i} + \frac{2 - v_j}{G_j}$$
(2.17)

2.2.3 Acoplamento CFD-DEM (Abordagem Euler-Lagrange)

Na simulação numérica de fluxos multifásicos, a utilização de uma abordagem Euler-Lagrange pode se dar de duas maneiras: a primeira, para sistemas diluídos, em que a fração volumétrica ocupada pela fase particulada é baixa e a segunda, para sistemas densos, com concentração de partículas superior a 10% (SILVÉRIO, 2012).

Em sistemas multifásicos diluídos, as interações entre as partículas podem ser desprezadas, pois o volume ocupado por elas é consideravelmente pequeno, e o conceito da fração volumétrica, apresentado na seção 2.2.1 não precisa ser incluído nas equações de transferência de massa e quantidade de movimento da fase fluida para contabilizar a presença dos sólidos no sistema (NOROURZI *et al.*, 2016).

No caso de sistemas multifásicos densos, em que a fase particulada representa mais de 10% do volume total, não se pode desconsiderar as interações entre as partículas. Assim, o conceito de fração volumétrica precisa ser incluído nas equações governantes. Nessas situações, a abordagem Euleriana é utilizada na fase fluida, enquanto a fase particulada é analisada sob a ótica Lagrangeana (NOROURZI *et al.*, 2016).

O CFD-DEM possibilita a aplicação da modelagem Euler-Lagrange em praticamente todos os sistemas que envolvam escoamento sólido-fluido, em vários campos da ciência, engenharia e tecnologia, como na indústria química, alimentícia, farmacêutica, na engenharia de processos, bioquímica, mecânica, energética, de materiais e de minas (NOROURZI *et al.,* 2016). Castelo Branco Júnior (2013) utilizou esta abordagem em seu estudo de fluidização de alumina, através de acoplamento entre a Fluidodinâmica Computacional (CFD) e o Método dos Elementos Discretos (DEM). O autor ressalta que, apesar de ainda possuir natureza Euleriana-Lagrangeana, esta metodologia pode ser chamada de abordagem híbrida.

A diferença entre o tamanho da partícula estudada e tamanho da célula do volume de controle utilizado nos cálculos da fase fluida, determina duas abordagens de acoplamento possíveis no estudo CFD-DEM (NOROURZI *et al.*, 2016). Na Figura 2.8 apontam-se as diferenças entre as duas possibilidades.



(a) Superfície não-resolvida



Figura 2.8: Tipos de tratamento no acoplamento. Fonte: Adaptado de Norouzi *et al.* (2016).

Pela ótica da Fluidodinâmica Computacional, as características do fluido são analisadas em cada célula da malha computacional, de dimensão Δx . No CFD-DEM de superfície nãoresolvida, a célula da malha computacional é maior que o diâmetro da partícula, o que possibilita o estudo de sistemas com quantidade elevada de sólidos. Já no CFD-DEM de superfície resolvida, a célula da malha computacional é menor que o diâmetro da partícula, o que permite obter um perfil detalhado de circulação de fluido em torno dos sólidos (NOROURZI et al., 2016).

A partir da integração dos perfis fluidodinâmicos, são obtidas as forças que atuam sobre cada partícula. Este processo é computacionalmente dispendioso, porque todas as equações governantes da fase fluida são calculadas para cada volume de controle da malha computacional (NOROURZI *et al.*, 2016).

Algumas simplificações adotadas na resolução das equações governantes também categorizam as simulações no acoplamento CFD-DEM. As possibilidades são o modelo original, A e B (CASTELO BRANCO JÚNIOR, 2013), detalhados na sequência.

• O modelo original resolve, para a fase fluida, a Equação de Navier Stokes, definida como a Equação da conservação da Quantidade de Movimento, aplicada a um meio contínuo, descrito pelo modelo Euleriano, para fluidos incompressíveis; enquanto que para a fase particulada, é resolvida a Segunda Lei de Newton do Movimento, que leva em consideração a influência de forças externas na velocidade das partículas. A primeira integração da Segunda Lei do Movimento de Newton fornece a nova velocidade da partícula e a segunda integração, a nova posição da partícula.

- O modelo A adiciona ao modelo original a utilização do acoplamento da pressão entre as fases fluida e particulada.
- O modelo B considera a pressão apenas para a fase fluida.

Estudos de Feng *et al.* (2004), Di Renzo e Di Maio (2007) e Zhou *et al.* (2010) testaram os modelos original, A e B para diferentes fluxos multifásicos, entre eles hidrociclones e leitos fluidizados. Os autores observaram que o modelo A representa bem, fluidodinamicamente, todos os equipamentos estudados, enquanto o modelo B é satisfatório apenas para sistemas com baixa turbulência.

Como a construção de malhas computacionais pouco refinadas dificulta a obtenção de simulações computacionais estáveis, esta seção abrange a modelagem matemática do acoplamento CFD-DEM de superfície não resolvida, que permite que a menor partícula seja algumas vezes maior que a menor célula da malha computacional. Além disso, devido à boa representação do modelo A para uma grande quantidade de equipamentos, através do

acoplamento de pressão entre as fases fluida e sólida, suas particularidades também serão abordadas nesta seção.

Como mostrado na seção 2.2.2, as equações da Segunda Lei de Newton do Movimento levam em consideração a influência das forças de contato partícula-partícula e fluido-partícula na análise do deslocamento de sólidos (NOROURZI *et al.*, 2016). Uma das forças de interesse no estudo CFD-DEM é a força de interação fluido-partícula (\vec{F}_i^{f-p}), que exprime a força que o fluido impõe sobre a superfície da partícula. Essa grandeza é dada pela Equação 2.18.

$$\vec{F}_i^{f-p} = \vec{F}_i^d + \vec{F}_i^u + \vec{F}_i^{\nabla p} + \vec{F}_i^{\nabla t} + \vec{F}_i^l$$
(2.18)

sendo a força de arraste representada por \vec{F}_i^d ; a força instável por \vec{F}_i^u ; a força do gradiente de pressão por $\vec{F}_i^{\nabla p}$; a força viscosa causada pelo cisalhamento do fluido por $\vec{F}_i^{\nabla t}$ e a força de levitação por \vec{F}_i^l . A equação pode ainda ter cada um de seus termos ampliados, conforme a Equação 2.19.

$$\vec{F}_i^{f-p} = \vec{F}_i^d + \vec{F}_i^{ud} + \vec{F}_i^a + V_i \nabla P - V_i \nabla \overline{\overline{T}}_f + \vec{F}_i^S + \vec{F}_i^M$$
(2.19)

em que \vec{F}_i^{ud} é a força de arraste instável; \vec{F}_i^a , a força de massa adicionada; V_i é o volume da partícula i; *P*, a pressão; \overline{T}_f é o tensor de cisalhamento do fluido; \vec{F}_i^S é a força de Saffman e \vec{F}_i^M é a força de Magnus.

A força \vec{F}_i^{f-p} é calculada em cada célula da malha computacional, como mostra a Equação 2.20.

$$\vec{F}^{f\text{-}p} = \frac{1}{V_{cel}} \sum_{i=1}^{k_v} \vec{F}_i^{f\text{-}p} = \frac{1}{V_{cel}} \sum_{i=1}^{k_v} \left(\vec{F}_i^d + \vec{F}_i^u + \vec{F}_i^{\nabla p} + \vec{F}_i^{d} + \vec{F}_i^l \right)$$
(2.20)

em que V_{cel} representa o volume da célula da malha de controle e k_v é o número de partículas em cada volume de controle. O somatório das forças é realizado para todas as partículas dentro da célula.

Na resolução das equações governamentais do acoplamento CFD-DEM, o modelo A se caracteriza por decompor a força de interação fluido-partícula (\vec{F}^{f-p}) em tensor de tensão do fluido, força de arraste e outras forças restantes, de acordo com a Equação 2.21 (NOROURZI *et al.*, 2016).

$$\vec{F}^{f\text{-}p} = -f_p \nabla P - f_p \nabla \overline{\overline{T}}_f + \vec{F}^A$$
(2.21)

em que \vec{F}^{A} é a força volumétrica de interação fluido-partícula, definida pela Equação 2.22.

$$\vec{F}^{A} = \frac{1}{V_{cel}} \sum_{i=1}^{k_{v}} \left(\vec{F}_{i}^{d} + \vec{F}_{i}^{u} + \vec{F}_{i}^{l} \right)$$
(2.22)

Dessa forma, substituindo-se a Equação 2.21 na Equação de Navier Stokes (Equação 2.7), tem-se a Equação da Conservação de Movimento da fase fluida para o modelo A, conforme a Equação 2.23.

$$\frac{\partial}{\partial t}(f_{f}\rho_{f}\vec{v}_{f}) + \nabla .(f_{f}\rho_{f}\vec{v}_{f}\vec{v}_{f}) = -f_{f}\nabla p - f_{f}\nabla .\overline{\overline{T}}_{f} - \overrightarrow{F}^{A} + f_{f}\rho_{f}g$$
(2.23)

Na análise das forças de interação fluido partícula, é essencial a utilização de alguns parâmetros Lagrangeanos, como a velocidade do fluido em um volume de controle na posição que a partícula ocupa na célula. Esses parâmetros podem ser obtidos através de uma aproximação dos parâmetros Eulerianos, conforme a Equação 2.24 (WU *et al.*, 2009).

$$\theta_{p} = \theta_{c} + \left(x_{p} + x_{c}\right) \frac{\sum_{i=1}^{n_{f}} \left(\theta_{f,i} A_{f,i}\right)}{V_{cel}}$$
(2.24)

em que θ_p representa o parâmetro Lagrangeano de fluido na posição da partícula; θ_c é o parâmetro Lagrangeano de fluido no centro da célula; x_p e x_c são a posição da partícula e o centroide da célula, respectivamente; $\theta_{f,i}$, é o valor da propriedade do fluido interpolado na face da célula; $A_{f,i}$ representa a área da face da célula e n_f o número de faces da célula.

O acoplamento CFD-DEM parte da inicialização de todos os elementos da simulação, como mostrado no algoritmo da Figura 2.9. Primeiramente, o acoplamento realiza o cálculo da fração volumétrica de fluido em cada célula, com base nas posições das partículas no início do processo. Esse cálculo pode ser feito por uma abordagem analítica ou não-analítica.



Figura 2.9: Algoritmo de resolução CFD-DEM.

Fonte: Adaptado de Norouzi et al. (2016).

A metodologia analítica de cálculo de porosidade utiliza métodos geométricos exatos para calcular o volume de cada partícula na célula. A Equação 2.25 traz a equação de Hoomans

et al. (1996), que calcula a exata fração volumétrica de fluido (f_f) em uma célula computacional, em que o número de partículas dentro da célula em análise é dado por k_v e a fração volumétrica da partícula i que pertence à célula é dada por ϕ_i . A eficiência deste método depende de quão acurada é a estimativa de ϕ_i .

$$f_{f}=1-\frac{1}{V_{cel}}\sum_{i=1}^{k_{v}} (\phi_{i}V_{i})$$
 (2.25)

Embora o método analítico seja preciso, sua aplicação a malhas não-estruturadas ou a partículas não-esféricas não é satisfatória (ZHU *et al.*, 2007). Contudo, os métodos não-analíticos podem ser utilizados em qualquer tipo de malha e formato de partícula.

Uma abordagem não-analítica bastante simples é o método do centro da partícula (PCM), que define a partícula como pertencente à célula computacional, aquela que possui seu centro no interior dos limites da célula (NOROURZI *et al.*, 2016). A Equação 2.26 traz o cálculo de porosidade para esta técnica, em que k_c é o número de partículas com centros de massa localizados dentro dos limites da célula computacional.

$$f_f = 1 - \frac{1}{V_{cel}} \sum_{i=1}^{k_c} V_i$$
 (2.26)

Na Figura 2.10 mostra-se um esquema da abordagem analítica e não-analítica PCM.



Figura 2.10: Métodos de cálculo de porosidade. Fonte: Adaptado de Norouzi *et al.* (2016).

Após o cálculo da porosidade, o acoplamento CFD-DEM resolve as equações de força de interação fluido-partícula utilizando velocidade das partículas e do fluido, pressão e tensor de tensões do fluido, no passo de tempo de integração do fluido.

Em seguida, a força volumétrica de interação fluido-partícula em cada célula (\vec{F}^A) é calculada. Terminada esta etapa, as iterações do Método de Elementos Discretos têm início, calculando as novas posições e velocidades translacionais e rotacionais das partículas envolvidas no escoamento, sob influência dos parâmetros obtidos nos passos anteriores. O *loop* de iterações do Método de Elementos Discretos (DEM) é repetido m vezes.

Segundo Norourzi *et al.* (2016), o tempo de integração das equações que regem o fluido (Δt_f) não pode exceder em 100 vezes o tempo de integração das equações que regem as partículas (Δt_p) . Como o número de vezes que o *loop* de integração do DEM (m) se repete é dado por m= $\Delta t_f/\Delta t_p$, m não deve ser maior que 100.

Finalizado o *loop* de cálculos do DEM, as novas velocidades e posições de partículas são associadas à porosidade e interação volumétrica fluido-partícula para resolução das equações da fase fluida, através do CFD. Para tal, serão utilizados métodos numéricos para resolução de equações.

As novas informações são enviadas ao acoplamento enquanto o tempo de simulação não tiver sido finalizado, e o ciclo de acoplamento CFD-DEM se reinicia.

2.2.4 Acoplamento CFD-DEM no estudo do leito de jorro

Um elevado número de estudos de leitos de jorro através da modelagem CFD é encontrado na literatura e a técnica tem se mostrado bastante eficiente na descrição do comportamento fluidodinâmico no equipamento. Contudo, observações especificamente sobre sólidos não são obtidas através deste método. Como alternativa, estudos através do DDPM e CFD-DEM são uma alternativa na obtenção dessas informações.

Chen e Wang (2014) analisaram a diferença entre as simulações CFD, CFD-DEM e DDPM (Dense Discrete Phase Model) na descrição do movimento fluido-partícula em um

canal. Os autores ressaltam que no caso das simulações DDPM, o modelo B é utilizado na resolução das equações governantes. Devido a menor exigência computacional, as simulações CFD e DDPM têm mais potencial industrial, quando comparado ao CFD-DEM, mas limitações na predição da trajetória das partículas foram observadas. O modelo CFD não é capaz de prever as colisões entre partículas e o DDPM, por sua simplificação na interação partícula-partícula não fornece de forma tão realista o movimento de sólidos. Em seu estudo, os dados obtidos através da técnica CFD-DEM foram utilizados como dados de referência nas comparações entre CFD e DDPM.

Moliner *et al.* (2018) analisaram a diferença entre as simulações CFD e CFD-DEM em leito de jorro. Os autores concluíram, através da análise do tempo computacional necessário para simular 1 segundo de operação, que a técnica CFD-DEM é uma ferramenta eficiente, capaz de fornecer informações mais detalhadas sobre o sistema com custo computacional semelhante, desde que o sistema não contenha número elevado de partículas. A complexidade computacional das simulações CFD-DEM aumenta com o aumento do número de partículas e a técnica pode se tornar inviável quando se trabalha com partículas muito pequenas ou com número total de partículas elevado. Na técnica CFD, os requisitos computacionais dependem do tamanho da malha computacional e não do tamanho da partícula de estudo e, além disso, um maior número de parâmetros de ajuste é necessário para obter uma solução precisa, enquanto o CFD-DEM depende de menos suposições numéricas. Ainda, algumas informações são particulares de cada simulação computacional, como a temperatura granular, para o CFD e as trajetórias de sólidos, para o CFD-DEM. A comparação de dados experimentais e simulados para as duas técnicas mostrou que o CFD-DEM reproduziu com mais precisão os perfis de porosidade e de velocidade de sólidos, quando comparado à técnica CFD.

Marchelli *et al.* (2019) estudaram o leito de jorro por meio do acoplamento CFD-DEM e observaram que para as simulações em pseudo-2D o modelo de arraste de Halder e Levenspiel é satisfatório, enquanto para as simulações 3D o modelo Gidaspow é mais adequado para descrever o movimento das partículas, ainda que este superestime o movimento de partículas nas simulações pseudo-2D.

Através do acoplamento CFD-DEM, Hu *et al.* (2019) analisaram a influência dos parâmetros de colisão de partículas na transferência de calor em um leito de jorro. Os resultados mostraram que o aumento dos coeficientes de restituição, atrito estático e atrito de rolamento

partícula-partícula dificultam o movimento translacional das partículas e afetam principalmente a transferência de calor por condução, quando comparada à por convecção.

Marchelli *et al.* (2020a) estudaram a adequação de diferentes modelos de arraste para diferentes velocidades de alimentação de leito de jorro variando entre $1u_{oms}$ e $2u_{oms}$ e observaram que o Modelo de arraste de Gidaspow foi o único modelo eficaz na predição da fluidização de partículas, para toda a faixa de velocidades estudada.

A influência do formato da partícula na velocidade de circulação de sólidos e na taxa de circulação foi estudada por Liu *et al.* (2020). Os autores concluíram que para partículas esféricas é observada maior força de arraste e velocidades de partículas mais altas, quando comparadas às partículas cilíndricas.

Marchelli *et al.* (2020b) analisaram o tempo de residência de partículas no interior de um leito de jorro de base quadrangular contendo partículas de polietileno. Os autores concluíram que esta característica é principalmente afetada pelo tempo de residência na região anular, que é a região onde as partículas residem durante a maior parte do ciclo. Além disso, observaram que a região anular contém cerca de 83% das partículas de todo o equipamento, uma vez que este operava em fase densa.

Contudo, dentre os estudos listados na literatura que aplicam a técnica CFD-DEM ao leito de jorro, não são encontrados trabalhos que tragam a análise do comportamento de sólidos no *jet spouted bed* ou no regime de transição entre o leito de jorro convencional e o diluído. Desta forma, a proposta deste trabalho é de grande relevância no preenchimento desta lacuna científica.

CAPÍTULO 3

Materiais e Métodos

Neste capítulo serão apresentadas as condições operacionais, bem como os parâmetros utilizados na Solução do Modelo escolhido para representar o comportamento fluido-partícula no interior do leito de jorro.

3.1 Condições experimentais do estudo de caso

Como parâmetro de verificação da Modelagem Numérica realizada neste trabalho, foi utilizado uma divisão de estudo do trabalho de Barrozo *et al.* (2010). Esta seção compreende as condições experimentais utilizadas na análise da velocidade de partículas e da porosidade do leito.

Barrozo et al. (2010) analisaram a variação radial da velocidade de partículas e a porosidade local, em diferentes alturas axiais (z = 37, 88 e 139 mm), por meio da inserção de uma sonda de fibra óptica. O comportamento foi observado para diferentes diâmetros de esfera $(d_p = 1,15; 1,55 e 2,12 mm)$ de vidro e diferentes alturas de leito estático $(H_0 = 22, 32, 52 e 82 mm)$. Para cada conjunto operacional, a velocidade de jorro mínimo (u_{oms}) foi avaliada por meio do estudo da curva característica. Para sua construção, a Equação 2.1 foi utilizada como parâmetro para o cálculo da velocidade de jorro mínimo e, com o aumento da velocidade de alimentação de ar, a queda de pressão foi medida.

Neste trabalho, escolheu-se uma das condições estudadas por Barrozo *et al.* (2010), que compreende um leito de jorro de acrílico preenchido por esferas de vidro de diâmetro (d_p) de 1,55 mm, altura de leito estático (H_0) de 52 mm e altura axial de leitura de resultados (z) de 37 mm.

Foram analisados os regimes denso, de transição e diluído, através das cinco velocidades de alimentação de ar propostas por Barrozo *et al.* (2010), na caracterização dos sistemas, conforme a Tabela 3.1.

Múltiplo da velocidade de jorro mínimo (u _{oms})	Velocidade de alimentação de ar [m/s]	Regime
1,6u _{oms}	8,5	Denso
2,4u _{oms}	14,8	Denso
4,2u _{oms}	22,3	Transição
5,4u _{oms}	28,6	Transição
6,9u _{oms}	36,5	Jet Spouted Bed ou Diluído

 Tabela 3.1: Regimes de escoamento estudados.

Fonte: Da Autora

3.2 Simulação numérica

No presente estudo, para realização da modelagem numérica foi escolhida a abordagem Euler-Lagrange, que resolve, para a fase fluida, a Equação de Navier Stokes, e para a fase particulada, a Segunda Lei de Newton do Movimento.

A resolução do acoplamento CFD-DEM ou Euler-Lagrange, sofre influência da malha computacional gerada para que sejam realizados os cálculos de integração. Como discutido na seção 2.2.3, a diferença entre o tamanho da partícula estudada e o tamanho da célula do volume de controle da malha determina o tipo de abordagem de acoplamento: de superfície resolvida ou de superfície não-resolvida. Além disso, a utilização ou não da conexão de pressão das fases fluida e sólida define o modelo utilizado na resolução das Equações de Navier-Stokes e da Segunda Lei do Movimento de Newton: modelo original, A ou B.

Como este trabalho analisa uma ampla faixa de velocidades de alimentação de ar no leito de jorro e, apesar de o movimento cíclico ordenado ser observado também no *jet spouted bed*, a velocidade de alimentação muito acima da velocidade de jorro mínimo torna inviável a utilização do modelo B para descrever o comportamento fluido-particulado no interior do equipamento, já que neste é considerada apenas a influência da pressão da fase sólida. Além

disso, as dimensões do equipamento, com diferença acentuada entre diâmetro de entrada e diâmetro da parte cilíndrica, dificultam a utilização de uma malha computacional que seja maior que o diâmetro da partícula de estudo ($d_p = 1,55$ mm). Assim, neste trabalho foi utilizado o acoplamento CFD-DEM de superfície não resolvida e modelo A.

Para as Simulações Numéricas, uma malha computacional com geometria equivalente à do leito de jorro utilizado nos estudos experimentais de Barrozo *et al.* (2010) foi construída com 18 mil células totalmente hexaédricas, conforme mostrado na Figura 3.1, através do *software* GAMBIT®.



Figura 3.1: Malha computacional gerada para realização das Simulações CFD-DEM. Fonte: Da Autora.

A resolução da Equação de Navier-Stokes foi realizada através do algoritmo SIMPLE (*Semi implicit method for pressure linked equation*). O modelo de arraste utilizado foi o de Gidaspow (1992). O modelo não-linear de Hertz-Mindlin foi escolhido como modelo de forçadeslocamento de partículas para a etapa Lagrangeana.

Como abordado na seção 2.2.2, na utilização da abordagem Lagrangeana, é necessário o conhecimento de alguns parâmetros de colisão, como o Módulo de Young (E) e o coeficiente de Poisson (υ), nos cálculos do modelo de força-deslocamento (Equações 2.9 a 2.17), e os coeficientes de restituição (e), atrito estático (μ) e atrito de rolamento (μ_R), que influenciam no cálculo de atualização de posição e velocidade de partículas, segundo a Lei de Newton do Movimento. Os parâmetros de simulação estão dispostos na Tabela 3.2.

Símbolo	Parâmetro	Valor do parâmetro
ρ_{f}	Densidade do fluido (kg/m)	1,225
μ_{f}	Viscosidade do fluido (kg/m.s)	1,789.10-5
Δt_{f}	Passo de tempo de integração da fase fluida (s)	2.10-4
n _p	Número de partículas	40701
d _p	Diâmetro de partícula (mm)	1,55
$ ho_p$	Densidade de partícula (kg/m ³)	2500
Ρ _w	Densidade da parede (kg/m ³)	1170
Е	Módulo de Young (GPa)	10^{8}
υ	Razão de Poisson	0,25
e _(p-p)	Coeficiente de restituição partícula-partícula	0,62
e _(p-w)	Coeficiente de restituição partícula-parede	0,75
$\mu_{R(p-p)}$	Coeficiente. de rolamento partícula-partícula	0,294
$\mu_{R(p-w)}$	Coeficiente de rolamento partícula-parede	0,011
$\mu_{(p-p)}$	Coeficiente de atrito estático partícula-partícula	0,3
$\mu_{(p-w)}$	Coeficiente de atrito estático partícula-parede	0,3
Δt_p	Passo de tempo de integração da fase sólida (s)	2.10 -6
D_0	Diâmetro do orifício de entrada do leito (m)	0,019
D _i	Diâmetro inferior de cone (m)	0,038
H _c	Altura de cone (m)	0,50
D _c	Diâmetro de seção cilíndrica (m)	0,45

 Tabela 3.2: Parâmetros para solução CFD-DEM

Os coeficientes de restituição (e) e atrito estático (μ) nos contatos vidro-acrílico e vidrovidro utilizados nas simulações numéricas deste trabalho foram oriundos das medidas realizadas por González-Montellano *et al.* (2011).

Assumindo-se que o coeficiente de rolamento partícula-parede $(\mu_{R(p-w)})$ para o sistema vidro-acrílico pode ser aproximado pelo sistema vidro-vidro, os coeficientes de atrito de rolamento partícula-partícula e partícula-parede utilizados no presente trabalho foram oriundos das medidas realizadas por Lima (2017).

Para o passo de tempo de integração da modelagem da fase particulada foi adotado um valor abaixo de 20% do tempo de Rayleigh, para garantir a estabilidade numérica. O número de Rayleigh (T_R) é definido como o tempo que uma onda cisalhante leva para se dispersar através de um sólido, é utilizado como parâmetro na escolha do passo de tempo. A Equação 3.1 exibe o cálculo do passo de tempo de integração máximo, com base no número de Rayleigh, seguindo a recomendação da literatura, de utilização de um passo de tempo de integração inferior a 0,2T_R (LIMA, 2017).

$$\Delta t_{\text{max}} = 0.2T_{\text{R}} = 0.2 \frac{\pi r_{\text{min}}^2 \sqrt{\frac{\rho_{\text{P}}}{G}}}{0.1613 \nu + 0.8766}$$
(3.1)

em que Δt_{max} é o tempo máximo recomendado para o passo de tempo de integração; T_R é o número de Rayleigh; r_{min} é o raio da menor partícula do sistema; ρ_p é a densidade da partícula; G, o módulo de cisalhamento e v a razão de Poisson.

Já o passo de tempo da fase fluida foi escolhido de forma a não ultrapassar em 100 vezes o da fase particulada, como sugerido por Norourzi *et al. (*2016).

Na resolução do modelo Euler-Lagrange, foram utilizados os *softwares* FLUENT®, para os cálculos da fase fluida, e EDEM®, para os cálculos da fase sólida, através do Algoritmo de Acoplamento CFD-DEM, conforme visto na seção 2.2.3, detalhado na Figura 2.7.

Para execução das simulações numéricas, foram injetadas na geometria de estudo esferas de vidro de 1,55 mm de diâmetro ocupando uma altura de leito estático de 52 mm. O ar em temperatura de 25°C foi utilizado como fluido de alimentação na análise.

No algoritmo, através da Fluidodinâmica Computacional (CFD), é realizada a integração das equações de conservação massa e movimento em cada célula da malha, até que que a solução se torne estável. Em seguida, a velocidade relativa entre partícula e fluido é utilizada para que a força de arraste seja obtida. Com isso, as velocidades e posições das partículas são calculadas e a nova porosidade das células da malha computacional é atualizada.

3.3 Análise dos resultados

3.3.1 Velocidade de partículas e porosidade do leito

Com o objetivo de analisar os resultados, criou-se um plano axial na altura de 37 mm, no qual foram obtidos os contornos dos perfis de velocidade de partícula e porosidade do leito, no *software* FLUENT®, após 9 segundos de simulação numérica.

Com o auxílio dos *softwares* Meazure e Adobe® Photoshop CS6, foi possível obter os valores de velocidade de partículas e porosidade nas mesmas posições radiais (r/R) estudadas por Barrozo *et al.* (2010), através da análise de cor no padrão RGB da escala do perfil estudado, conforme a Figura 3.2.



Figura 3.2: Esquema de análise de velocidade de partículas e porosidade do leito. Fonte: Da Autora.

Nesta análise, as posições radiais de coleta de dados foram selecionadas com base na relação entre número de pixels e diâmetro do plano de corte, através do Meazure. A partir da seleção do ponto de análise no Adobe® Photoshop CS6, o código RGB é gerado e sua leitura na escala de cores da imagem retorna o valor da velocidade de partícula ou porosidade, naquela posição radial.

As análises foram feitas para as cinco velocidades de alimentação de ar estudadas, de $1,6u_{oms}, 2,4u_{oms}, 4,2u_{oms}, 5,4u_{oms}, e 6,9u_{oms}$. De posse dos resultados, foram plotados os gráficos comparativos entre os dados experimentais de Barrozo *et al.* (2010) e os resultados numéricos deste trabalho.

Para quantificar os desvios dos dois grupos de dados, o método dos mínimos quadrados foi utilizado, conforme as Equações 3.1 e 3.2.

$$SQ = \sum_{(r/R=0)}^{(r/R=1)} (\overrightarrow{v_{p}}_{exp} - \overrightarrow{v_{p}}_{sim})^{2}$$
(3.1)

$$SQ = \sum_{(r/R=0)}^{(r/R=1)} (f_{f_{exp}} - f_{f_{sim}})^2$$
(3.2)

em que r/R é a posição radial de coleta de dados, $\overrightarrow{v_{p}}_{exp}$ é a velocidade experimental da partícula na posição r/R, $\overrightarrow{v_{p}}_{sim}$ é a velocidade da partícula na posição r/R obtida através das simulações, $f_{f_{exp}}$ é a porosidade local experimental da partícula na posição r/R, $f_{f_{sim}}$ é a porosidade local na posição r/R, $f_{f_{sim}}$ é a porosidade local na posição r/R, $f_{f_{sim}}$ é a porosidade local experimental da partícula na posição r/R, $f_{f_{sim}}$ é a porosidade local na posição r/R obtida através das simulações.

3.3.2 Contatos e colisões de partículas

Para a análise do número de contatos e colisões de partículas, três geometrias de análise foram delimitadas no software EDEM®: a região de jorro, a região anular e a interface entre essas duas regiões, conforme a Figura 3.3.



Figura 3.3: Regiões delimitadas no *software* EDEM®. Fonte: Da Autora.

Após a finalização das simulações, as informações sobre número de contatos, número de colisões e intensidade de colisões foram colhidas para as três regiões analisadas (jorro, ânulo e interface jorro-anular) através de um arquivo de saída de dados no EDEM®, para as cinco velocidades de estudo, com intervalo de tempo de 0,05 s, de 0 a 9 segundos de simulação.

CAPÍTULO 4

Resultados e Discussão

4.1 Verificação da técnica CFD-DEM

Na Figura 4.1 mostram-se os resultados das simulações para as cinco velocidades de alimentação de ar estudadas, em que é possível observar que as partículas ocupam de forma mais acentuada a região cilíndrica do equipamento, com o aumento da velocidade.



Figura 4.1: Imagens 3D da Simulação Computacional CFD-DEM para as cinco velocidades de alimentação de ar estudadas.

As imagens das simulações apresentadas na Figura 4.1, obtidas através do *software* EDEM®, estão dispostas na Figura 4.2, com ampliação próximo à base do leito e com destaque para a altura z=37 mm, região em que foram coletadas as informações de velocidade de partículas e porosidade.







Figura 4.2: Imagens 3D da parte cônica do leito de jorro para Simulações CFD-DEM. Fonte: Da Autora.

Através das imagens da Figura 4.2, obtida através do EDEM®, a visualização do espalhamento de partículas pelo equipamento, que ocorre à medida que a vazão de alimentação de ar aumenta, torna-se mais clara. É possível observar ainda, que a altura de leito estático também diminui com o aumento da velocidade de alimentação ar no leito de jorro e que diferença entre a concentração de partículas nas regiões de jorro e anular diminui, sugerindo que com o aumento da velocidade do leito aumenta, comportamento previsto pelo estudo de Epstein e Grace (1997) do *jet spouted bed*.

Na Figura 4.3 apresentam-se as simulações visualizadas através do FLUENT®, em que é possível caracterizar a transição entre leito de jorro convencional (a-b), em que há distinção entre as regiões de jorro e anular; o regime de transição (c-d), em que as partículas ainda estão concentradas na base, mas mais difusas do que no regime convencional; e o *jet spouted bed* (e), no qual não há distinção entre jorro e ânulo.



Figura 4.3: Imagens do perfil de partículas na região cônica para as cinco velocidades de alimentação de ar analisadas.

Fonte: Da Autora.

4.1.1 Velocidade de partículas

Os perfis de velocidade de partícula na altura axial de 37 mm, a partir da base do equipamento, foram coletados, em mesma escala, conforme disposto na Figura 4.4. As informações foram coletadas nesta posição axial, pois ela corresponde à posição onde foram realizadas medidas no trabalho experimental de Barrozo *et al.* (2010).



Figura 4.4: Perfis de velocidade de partículas em 37 mm em mesma escala. Fonte: Da Autora.

É possível observar que com o aumento da velocidade de alimentação de ar e consequente aumento de velocidade de partículas na região de jorro, a diferença entre velocidades de ascensão (no jorro) e queda de partículas (no ânulo) é acentuada, uma vez que elas continuam caindo em velocidades próximas, nas cinco vazões de ar estudadas, porém com movimentos ascendentes mais rápidos para os regimes de transição e *jet spouted bed*.Na Figura 4.5 encontram-se os perfis de velocidade de partículas em diferentes escalas, para facilitar a visualização da região de interface jorro-anular (z= 37 mm).

Ainda, é possível verificar que para velocidades de alimentação de ar mais baixas, a transição de velocidade de partícula na interface jorro-ânulo ocorre de maneira mais suave e para as velocidades de alimentação mais altas, com o aumento da vazão de ar, a mudança na velocidade de partículas na interface jorro-ânulo passa a ser mais acentuada.



Figura 4.5: Perfis de velocidade de partículas em 37 mm em diferentes escalas.

Para verificar as simulações CFD-DEM, os resultados experimentais de Barrozo *et al.* (2010) e os dados da simulação numérica foram comparados e encontram-se plotados na Figura 4.6 para as cinco velocidades do ar utilizadas neste trabalho.



(e) 6,9u_{oms} (36,5 m/s, *jet spouted bed*)

Figura 4.6: Comparação de velocidade de partícula entre dados experimentais e de simulações CFD-DEM para as diferentes velocidades de alimentação de ar.

A mudança abrupta de velocidade na interface jorro-ânulo, citada anteriormente através da análise da Figura 4.5, é observada mais facilmente na Figura 4.6.

A comparação entre os resultados experimentais e simulados demonstrou uma boa concordância para a distribuição radial da velocidade das partículas.

As velocidades ascendentes das partículas no *jet spouted bed* (e) foram maiores que as observadas no regime denso (a-b) e de transição (c-d). As velocidades de queda das partículas, na região anular, para o leito de jorro de fase diluída, excederam as da fase densa, experimental e numericamente. Além disso, para os regimes de transição e diluídos, a velocidade de queda das partículas predita numericamente é menor que a experimental, provavelmente devido à maior dissipação de energia por colisões nas regiões de jorro e fonte desses dois regimes, quando comparados ao regime denso.

Quanto aos desvios entre dados experimentais e simulados, é possível verificar que estes se tornam maiores conforme a velocidade de alimentação de ar aumenta, observação reiterada ao se analisar numericamente, através da Tabela 4.1 a soma dos quadrados dos desvios. Nos regimes de jorro denso (Fig. 4.6 a-b), os dados da simulação CFD-DEM se encontram ainda dentro do limite de barras de erro dos dados experimentais. Já nos regimes de transição e diluídos (c-e), os dados obtidos através das simulações numéricas se distanciam, de forma mais acentuada, dos experimentais, principalmente nas regiões da interface jorro-ânulo e anular, em que as partículas não mais são apenas arrastadas pelo fluido.

Velocidade de alimentação	SQ	
1,6u _{oms} (8,5 m/s)	0,203	
2,4u _{oms} (14,8 m/s)	0,473	
4,2u _{oms} (22,3 m/s)	1,452	
5,4u _{oms} (28,6 m/s)	3,288	
6,9u _{oms} (36,5 m/s)	13,08	

Tabela 4.1: Soma dos quadrados dos desvios para velocidade de partícula.

O comportamento pode ser explicado pela utilização do mesmo conjunto de parâmetros de contato entre partículas para as fases densa e diluída. À medida que a fluidodinâmica do equipamento se aproxima do regime *jet spouted bed*, a dissipação de energia cinética e as tensões de impacto podem apresentar comportamento distinto àquele observado nos regimes convencionais de escoamento multifásico e a calibração de parâmetros pode ter que ser novamente realizada para as novas condições de operação. Contudo, este trabalho foi realizado com base em calibrações da literatura, que não contemplam as variações que podem ocorrer em diferentes regimes de operação.

Apesar da utilização dos mesmos parâmetros de colisão para fases densa, de transição e diluída, os resultados da simulação CFD-DEM apontam para uma boa previsão comportamental de distribuição radial de velocidades de partícula.

4.1.2 Porosidade do leito

Os perfis de porosidade do leito na altura axial de 37 mm a partir da base do equipamento foram coletados, em mesma escala, conforme apresentado na Figura 4.4. É possível observar que com o aumento da velocidade de alimentação de ar, a diferença de porosidade nas regiões de jorro e ânulo diminui, já que, como mostrado nas Figuras 4.1 a 4.3, ocorre maior propagação de partículas por todo o equipamento e deixa de existir acúmulo de sólidos no leito estático.



Figura 4.7: Perfis de porosidade do leito em 37 mm em mesma escala. Fonte: Da Autora.

Na Figura 4.8 mostram-se, ainda na posição axial de 37 mm, os perfis de porosidade em diferentes escalas, para facilitar a visualização do comportamento no regime diluído.

É possível observar que no *jet spouted bed*, assim como acontece no regime denso e de transição, a região central do equipamento concentra uma maior fração de vazios, devido ao arco de partículas ali formado característico da região de jorro. Contudo, em todas as posições radiais a porosidade é muito próxima a 0,9 na fase diluída, o que está coerente com o relatado na literatura para o *jet spouted bed* (EPSTEIN; GRACE, 1997).



Figura 4.8: Perfis de porosidade do leito em 37 mm em diferentes escalas.

Para verificar a modelagem utilizada nas simulações CFD-DEM, os resultados experimentais de Barrozo *et al.* (2010) e os dados da simulação numérica foram plotados na Figuras 4.9. Assim como para a análise de velocidade de partículas, é possível observar que a simulação CFD-DEM previu qualitativamente bem o comportamento nos regimes denso (a-b) e diluído (c-e).

Com relação ao regime de transição, na velocidade de 22,3 m/s, houve uma maior variação principalmente na interface jorro-anular, região em que as simulações preveem uma região anular mais diluída, com menor empacotamento que o observado experimentalmente.

Os valores preditos de porosidade na região de jorro foram mais precisos quando comparados aos da interface jorro-ânulo e da região e anular, para as cinco velocidades estudadas. Esse comportamento é acentuado com o aumento da velocidade de alimentação de ar.

Nas posições da interface jorro-ânulo e anular, as partículas não são somente arrastadas pelo fluido e uma análise do número e intensidade de contato e colisões de partículas nessas duas regiões também ajuda a explicar este comportamento e reforça a ideia de que os parâmetros de contato de partículas devem ser revistos para as condições de regime de transição e *jet spouted bed*. A análise de contatos e colisões será discutida na seção 4.2. De forma geral, contudo, houve uma boa adequação entre os resultados simulados e experimentais.

O comportamento praticamente constante de porosidade, em diferentes posições radiais, no regime *jet spouted bed* (e), previsto por Epstein e Grace (1997) e observado por Barrozo *et al.* (2010), foi também obtido através das simulações CFD-DEM, conforme a Figura 4.9 (e).

A Tabela 4.2 apresenta a análise da soma dos quadrados dos desvios e a comparação entre dados experimentais e simulados. Observa-se que o CFD-DEM previu numericamente bem a porosidade do leito, para os regimes denso, de transição e diluído, sendo a maior SQ observada no regime de transição, Figura 4.9 (c), como esperado.



Figura 4.9: Comparação de velocidade de partícula entre dados experimentais e de simulações CFD-DEM.
Velocidade de alimentação	SQ
1,6u _{oms} (8,5 m/s)	0,016
2,4u _{oms} (14,8 m/s)	0,026
4,2u _{oms} (22,3 m/s)	0,108
5,4u _{oms} (28,6 m/s)	0,022
6,9u _{oms} (36,5 m/s)	0,023

Tabela 4.2: Soma dos quadrados dos desvios para porosidade.

Fonte: Da Autora.

4.2 Análise de contatos e colisões entre partículas

Partindo da verificação dos modelos utilizados nas simulações computacionais através da comparação com os dados experimentais de velocidade de partícula e porosidade, é possível realizar outras análises importantes acerca do escoamento de partículas no interior do leito de jorro nos regimes denso, de transição e diluído, por meio das simulações realizadas nesta dissertação.

Como discutido na seção 4.1, à medida que o comportamento fluidodinâmico do equipamento se aproxima do regime *jet spouted bed*, a dissipação de energia cinética na colisão de partículas e as tensões desse impacto podem sofrer alterações e uma nova calibração de parâmetros de contato pode ser necessária.

Neste sentido, uma análise de número de contatos e de colisões e suas intensidades se torna interessante não somente pela aplicabilidade do leito de jorro em operações que exijam contato eficiente entre sólidos, mas também para definir a necessidade de calibração de parâmetros no caso particular do regime *jet spouted bed*.

Um estudo mais preciso de contatos e colisões deve levar em conta o número de partículas compreendidas em cada região do equipamento, já que com a expansão do ar no leito de jorro ocorre uma mudança na distribuição de partículas nas diversas regiões do jorro. Além disso, o

estado estacionário deve ter sido atingido para que dados possam ser coletados. Dessa forma, foram desconsiderados os dois primeiros segundos de simulação numérica nas análises.

4.2.1 Número de contatos/número de partículas

Na Figura 4.10 mostra-se a variação da razão número de contatos/número de partículas nas regiões de jorro e anular para as cinco velocidades de alimentação de ar estudadas.

A região da interface jorro-anular não foi considerada nessa análise por não terem sido observados contatos entre partículas nesta região. Nesta delimitação geométrica do leito, todas as partículas estão em movimento no estado estacionário.

Na Figura 4.10 (a), (b) e (c), é possível observar que o número de contatos/partículas é maior na região anular, quando comparado à região de jorro. Uma análise da escala dos gráficos mostra ainda que a diferença entre o número de contatos/partícula no jorro e no ânulo diminui à medida que a velocidade de alimentação de ar aumenta, aproximando as duas curvas.

Na Figura 4.10 (d) e (e), nas condições mais diluídas, o número de contatos/partícula nas regiões de jorro e ânulo é bastante próximo, o que mais uma vez reforça a ideia de que no regime *jet spouted bed*, a distinção entre as regiões do leito não é tão evidente, como no jorro convencional.







Para facilitar a visualização do comportamento de número de contatos/partículas nas condições mais diluídas de operação, os gráficos da Figura 4.10 foram plotados sem oscilações, a partir das médias para cada intervalo de tempo, e com ampliação.





Figura 4.11: Médias do número de contatos/partículas nas regiões de jorro e anular. Fonte: Da Autora.

É possível observar mais facilmente que no *jet spouted bed* há uma inversão das curvas de número de contatos/número de partículas para jorro e ânulo.

Ainda no regime diluído, o estado estacionário leva mais tempo para ser atingido. Nos primeiros segundos de simulação do *jet spouted bed* (Fig. 4.11 (e)), o número de contatos na região anular ainda é maior que na região de jorro, porque, nesse primeiro momento, o comportamento permanece semelhante ao do leito denso. Quando atinge o estado estacionário, ocorre espalhamento de partículas e a porosidade do leito passa a ser muito similar nas regiões anular e de jorro, dessa forma, as partículas têm mais espaço para circular e não deslizam umas sobre as outras com a frequência anterior.

A Figura 4.12 apresenta a variação da razão número de contatos/número de partículas nas regiões de jorro e anular para as cinco velocidades de alimentação de ar estudadas. Nota-se que, à medida que se aumenta a velocidade de alimentação de ar, o número de contatos/partículas cai tanto para a região anular quanto para a região de jorro. Esse comportamento reforça a ideia de que com o espalhamento de partículas ao longo do equipamento com a expansão do ar, as partículas se encontram com menos frequência.



Figura 4.12: Variação do nº de contatos/nº de partículas com velocidade de alimentação de ar. Fonte: Da Autora.

4.2.2 Número de colisões/número de partículas

Na Figura 4.13 mostra-se a variação da razão número de colisões/número de partículas nas regiões de jorro, anular e interface jorro-anular para as cinco velocidades de alimentação de ar.



(e) 6,9u_{oms}(36,5 m/s, *jet spouted bed*)

Figura 4.13: Número de colisões/partículas nas regiões de jorro e anular.

Fonte: Da Autora.

Para as condições densa e de transição, Figura 4.13 (a), (b) e (c), é possível verificar que assim como o número de contatos, o número de colisões/partículas é maior na região anular, quando comparado à região de jorro.

À medida que a vazão de alimentação de ar aumenta, a diferença entre o número de colisões/partícula no jorro e no ânulo diminui. Nas condições mais diluídas (Fig. 4.10 (d) e (e)), a diferença entre regiões do leito diminui, devido ao espalhamento de partículas por todo o equipamento.

Adicionalmente, é possível observar que para todas as velocidades estudadas, o número de colisões na região da interface jorro-anular é maior que o da região de jorro, visto que nesta posição ocorre colisão entre partículas com velocidades de ascensão, da região de jorro, e de queda, da região anular. Ainda, a diminuição da altura de leito estático nos regimes mais diluídos faz com que a região com maior número de colisões seja a interface jorro-anular e não mais a região anular, como observado no regime denso. Este comportamento é observado nos regimes de transição e diluído.

Para melhor observação do comportamento nas condições diluídas, plotaram-se os gráficos anteriores sem oscilações (médias para cada intervalo de tempo), conforme a Figura 4.14.

Para as velocidades de alimentação mais diluídas ((d) e (e)), ocorre inversão das curvas de número de colisões/partículas e, nesses regimes, a região de jorro passa a sofrer mais colisões que a região anular.

É possível verificar ainda, que nos primeiros segundos de simulação do *jet spouted bed* (Fig. 4.14 (e)), o número de colisões da região anular é maior que na região de jorro, o que sugere que a condição diluída leva mais tempo de simulação para atingir o estado estacionário.



Figura 4.14: Médias do número de colisões/partículas nas regiões de jorro e anular.

Fonte: Da Autora

A variação do número de colisões/partículas com o aumento da velocidade de alimentação de ar no leito de jorro encontra-se na Figura 4.15. É possível observar que, assim como ocorre com o número de contatos/partículas, a expansão da velocidade de alimentação de ar diminui o número de colisões/partículas para as regiões de jorro e anular, bem como na interface entre elas.



Figura 4.15: Variação do nº de colisões/nº de partículas com velocidade de alimentação de ar. Fonte: Da Autora.

As informações das Figuras 4.12 e 4.15 são dispostas nas Figura 4.16, com o objetivo de facilitar a compreensão da diferença entre o número de contatos e o número de colisões em uma mesma região do leito de jorro. Essa análise é importante na compreensão das aplicabilidades dos diferentes regimes de operação do equipamento. Um maior número de contatos em determinada região do equipamento sugere que, naquela posição, o deslizamento de partículas é majoritário quando comparado à dissipação de energia cinética, que ocorre no momento da colisão.

Para as cinco velocidades estudadas, a frequência de colisões é maior que a frequência de contatos em uma mesma região do equipamento. As escalas da Figura 4.16 mostram que o número de colisões/partículas é cerca de 37 vezes maior que o número de contatos/partículas na região anular, e cerca de 151 vezes maior na região de jorro para o regime denso, na velocidade de 8,5 m/s. À medida que se aumenta a velocidade de alimentação de ar, a frequência do número de colisões em relação ao número de contatos aumenta. Para a condição de *jet spouted bed*, na velocidade de 36,5 m/s, o número de colisões/partículas é cerca de 99 vezes maior que o número de contatos/partículas na região anular, e cerca de 193 vezes maior na região de jorro.

A análise não foi feita para a interface jorro-anular, porque não foi possível contabilizar contatos nesta região do equipamento, apenas colisões.



Figura 4.16:: Variação de nº de contatos e nº de colisões. Fonte: Da Autora.

Dessa forma, do ponto de vista de interações entre partículas, de fato, o *jet spouted bed* favorece operações que exijam maior número de choques entre partículas, como é o caso da extração mecânica, quando comparado ao regime convencional de escoamento. Isso quer dizer que as partículas se chocam com mais frequência do que entram em contato, em todas as velocidades estudadas, e ao se aumentar a velocidade, esse efeito é acentuado.

Ademais, é possível inferir, através da Figura 4.16, que a variação do número de contatos e do número de colisões na região anular é muito mais expressiva com o aumento da velocidade de alimentação de ar, quando comparada à variação que ocorre na região de jorro. Adicionalmente à análise de número de colisões nas posições de jorro, anular e na interface jorro-anular, foram coletadas informações da região anular em diferentes alturas de leito, no estado estacionário, conforme a Figura 4.17. Observou-se que a variação de colisões por altura é maior para a simulação com velocidades de alimentação mais baixas, no regime denso. À medida que a velocidade de alimentação aumenta, essa diferença torna-se menos acentuada. Todavia, para as cinco vazões de ar estudadas, observou-se um maior número de colisões para alturas mais baixas de análise, o que corrobora a ideia de que a existência do leito estático implica em maior número de colisões nessa região, entre partículas que se encontram próximas ao leito estático e partículas que caem da fonte na região anular.



Figura 4.17: Número de colisões/número de partículas em função da altura. Fonte: Da Autora.

4.2.3 Intensidade de colisões

Uma observação interessante para garantir que a colisão de partículas ocorreu de forma efetiva, é analisar a intensidade dos choques entre elas. Na Figura 4.18 analisa-se a força das colisões entre partículas, nas regiões de jorro e anular, e entre partícula e parede, na região anular.

A intensidade das colisões na região de jorro é maior que na região anular para as cinco velocidades estudadas. Além disso, com o aumento da velocidade de alimentação de ar, a diferença de intensidade de colisões entre partículas das regiões de jorro e anular se torna mais pronunciada, enquanto para as regiões anular e de interface jorro-anular se torna mais discreta. Já a intensidade de colisões partícula-parede aumenta com o aumento da vazão de ar. No *jet spouted bed*, observa-

se que a intensidade de colisões partícula-parede é bastante próxima à intensidade de colisões partícula-partícula na região de jorro.



Figura 4.18: Intensidade de colisões de partículas nas cinco velocidades estudadas. Fonte: Da Autora.

Na Figura 4.19 estão dispostas as imagens da Figura 4.18 sem oscilações, através das médias para cada intervalo de tempo.



Figura 4.19: Média da intensidade de colisões de partículas nas cinco velocidades estudadas.

Fonte: Da Autora.

A Figura 4.19 reitera que o estado estacionário leva mais tempo para ser atingido no *jet spouted bed*. No início da operação, a diferença entre a intensidade de colisão na região anular e de jorro, no regime diluído, é menos acentuada que no estado estacionário.

Na região de jorro, numa condição já desenvolvida, as partículas colidem com maior intensidade, quando comparado à região anular, porque são arrastadas com maior velocidade relativa entre si. Já na região anular, a intensidade das colisões é menor, porque as partículas deslizam umas sobre as outras. Na interface jorro-anular, observa-se uma intensidade de colisões menor que a da região anular, ainda que o número de colisões/partículas seja maior nessa região, conforme mostrado nas Figuras 4.13 e 4.14. Além disso, pode-se observar que, com o aumento da velocidade, a intensidade de colisões entre partículas aumenta para as três regiões analisadas, bem como entre partícula-parede.

Na Figura 4.20 é possível notar mais uma vez que, com a expansão da velocidade, independentemente da região do equipamento, a intensidade de colisões aumenta. Para a condição *jet spouted bed*, o comportamento da intensidade de colisões leva mais tempo para atingir o estado estacionário, cerca de 4,5 segundos. Antes de atingir a constância do estado estacionário, nas regiões anular e jorro-anular, a intensidade das colisões partícula-partícula diminui e na região de jorro a intensidade das colisões aumenta, bem como a intensidade de colisões partícula-partícula-partécul

O comportamento peculiar do leito de jorro operando nos regimes denso, de transição e *jet spouted bed*, observado neste capítulo, corrobora a ideia de que as condições operacionais diluídas favoreçam operações específicas. A elevada circulação de partículas provocada pela alta velocidade de ascensão de partículas, por exemplo, pode favorecer operações de secagem de pastas, impedindo o bloqueio do leito. Devido à elevada porosidade do leito, o *jet spouted bed* pode favorecer operações como revestimento de partículas, já que com maior espaçamento entre sólidos, garante-se maior tempo de contato entre fluido e partícula. Já a intensidade de colisões superior àquelas observadas no regime de escoamento denso, torna interessante a alternativa de utilização do regime *jet spouted bed* em estudos de extração mecânica.



Capítulo 4 – Resultados e Discussão



Além disso, a inversão de comportamentos como número de contatos/partículas, mostrada na seção 4.2.1 e da intensidade de colisões no regime de *jet spouted bed*, quando comparado ao regime denso, sugere que a realização de calibração de parâmetros especificamente para este regime pode trazer resultados mais acurados acerca do comportamento da dinâmica das partículas no equipamento.

CAPÍTULO 5

Conclusões e Sugestões

Este capítulo compreende as conclusões obtidas através deste estudo após a verificação das simulações computacionais realizadas, por meio dos dados experimentais da literatura, e as sugestões de aprimoramento deste trabalho.

5.1 Conclusões

Acerca da verificação das simulações através do acoplamento CFD-DEM, pode-se concluir que os resultados das simulações foram satisfatórios na investigação da dinâmica de partículas no leito de jorro operando em fase densa (convencional) e *jet spouted bed* (diluída) e na predição do comportamento de velocidade de partícula e porosidade do leito de jorro nos três regimes.

Com o aumento da velocidade de alimentação de ar, observou-se que:

a) as velocidades de partícula e a porosidade do leito aumentam;

b) o número de contatos/número de partículas e o número de colisões/número de partículas diminui, tanto na região anular, quanto na região de jorro;

c) a diferença entre regiões de jorro e anular, no que diz respeito ao número de contatos/número de partículas e número de colisões/número de partículas, diminui, devido à maior dispersão de sólidos;

d) a região com maior número de colisões/número de partículas passa a ser a região de interface jorro-anular e não mais a região anular;

e) a variação do número de colisões/número de partículas em função da altura de análise diminui;

f) a intensidade de colisões partícula-partícula e partícula-parede aumenta;

g) a diferença entre regiões de jorro e anular, no que se refere à intensidade de colisões, aumenta.

No jet spouted bed é observado que:

 a) a velocidade de circulação dos sólidos é a maior, portanto, a aplicação do leito de jorro em fase diluída a operações como secagem de pastas é uma boa alternativa à utilização do leito de jorro convencional, pois a alta taxa de circulação de partículas reduz as chances de ocorrer, por exemplo, o bloqueio do leito;

b) a porosidade do leito em mesma altura axial se mantém próxima a 0,9, não sendo possível fazer distinção visual entre as regiões anular e de jorro;

c) ocorre um menor número de contatos e de colisões/partícula na região de jorro, quando comparado à região anular do mesmo regime, devido ao espalhamento de partículas em todo o equipamento;

d) operações como revestimento de sólidos podem ser favorecidas ao serem operadas em regime de *jet spouted bed*, já que a elevada porosidade do leito, com consequente diminuição da frequência de contato entre partículas, favorece o tempo de contato entre fluido e sólido;

e) aumenta a relação número de colisões/número de contatos, quando comparado ao regime denso, o que garante que a operação é adequada para processos como a extração mecânica, em que os choques entre partículas importam mais que o simples deslizamento entre elas;

 f) apesar de a frequência de contatos e colisões ser menor, a força de colisões entre partículas e entre partículas e parede do equipamento é maior neste regime de escoamento;

g) na região de jorro, o impacto das colisões é maior que na região anular;

h) o estado estacionário leva mais tempo para ser atingido no regime jet spouted bed.

5.2 Sugestões para trabalhos futuros

a) Realizar a calibração de parâmetros de colisão para os regimes mais diluídos.

b) Realizar as simulações numéricas para os demais diâmetros de partícula e alturas de leito estático estudados por Barrozo *et al.* (2010), contemplando, ainda, a variação do número de colisões com estes parâmetros operacionais.

c) Estudar o acoplamento CFD-DEM em leitos de jorro operando com partículas não-esféricas, como biomassas.

Referências

ANSYS, ANSYS FLUENT Guide, 2015.

BACELOS, Marcelo S. Análise do comportamento da fluidodinâmica do leito de jorro com misturas de tamanho de partículas. 2006. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2016.

BARROZO, Marcos Antonio de Souza; DUARTE, Cláudio Roberto; EPSTEIN, Norman; GRACE, John R.; LIM, C. Jim. Experimental and computational fluid dynamics study of dense-phase, transition region, and dilute-phase spouting. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 49, p. 5102–5109, 2010. https://doi.org/10.1021/ie9004892

BRAMBATTI, Valdirene Morais. Utilização da técnica de CFD para simulação do escoamento de sangue em artéria humana. 2010. Dissertação (Mestrado em Engenharia Aeronáutica e Mecânica) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Aeronáutica e Mecânica, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, 2010.

BIÇER, Nihat; ENGIN, Tahsin; YAŞAR, Halit; BÜYÜKKAYA, Ekrem; AYDIN, Ahment; TOPUZ, Adnan. Design optimization of a shell-and-tube heat exchanger with novel three-zonal baffle by using CFD and taguchi method. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 155, 2020.

https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2020.106417

BILBAO, Javier *et al.* Optimization of the operation in a reactor with continuous catalyst circulation in the gaseous benzyl alcohol polymerization. **Chemical Engineering Communications**, v. 75, p. 121–134, 1989.

https://doi.org/10.1080/00986448908940672

BILBAO, Javier; OLAZAR, Martin; ROMERO, Arturo; ARANDES, Jose M. Design and operation of a jet spouted bed reactor with continuous catalyst feed in the benzyl alcohol polymerization. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 26, p. 1297-1304, 1987. https://doi.org/10.1021/ie00067a007

BORTOLOTTI, Carolina T.; SANTOS, Kassia G.; FRANCISQUETTI, Mariele C.C.; DUARTE, Claudio R., BARROZO, Marcos A.S. Hydrodynamic study of a mixture of West Indian cherry residue and soybean grains in a spouted bed. **Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 91, p. 1871-1880, 2013.

https://doi.org/10.1002/cjce.21870

BREUNINGER, Paul; WEIS, Dominik; BEHRENDT, Isabell; GROHN, Philipp; KRULL, Fabian. CFD–DEM simulation of fine particles in a spouted bed apparatus witha Wurster tube. **Particuology**, v. 42, p.114-125, 2019.

https://doi.org/10.1016/j.partic.2018.03.015

CASTELO BRANCO JÚNIOR, Alan Mota. **Interação CFD-DEM em fluidização:** aplicação para o setor mineral. 2013. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Instituto de Tecnologia, Universidade Federal do Pará, Belém, 2013.

CHEN, Xizhong; WANG, Junwu. A comparison of two-fluid model, dense discrete particle model and CFD-DEM method for modeling impinging gas-solid flows. **Powder Technology**, v. 254, p. 94–102, 2014.

https://doi.org/10.1016/j.powtec.2013.12.056

CLEARY, P. W., SAWLEY, M. L., DEM modelling of industrial granular flows: 3D case studies and the effect of particle shape on hopper discharge, Applied Mathematical Modelling, vol. 26, p. 89-111, 2002.

https://doi.org/10.1016/S0307-904X(01)00050-6

CUNDALL, Peter A.; STRACK, Otto D. L. A discrete numerical model for granular assemblies. **Geotechnique**, v. 29, p. 47–65, 1979. <u>https://doi.org/10.1680/geot.1979.29.1.47</u>

DI MAIO, Francesco P.; DI RENZO, Alberto. Modelling particle contacts in distinct element simulations: Linear and non-linear approach. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 83, p. 1287-1297, 2005. https://doi.org/10.1205/cherd.05089

DI RENZO, Alberto; DI MAIO, Francesco P.; Comparison of contact-force models for the simulation of collisions in DEM-based granular flow codes. **Chemical Engineering Science**, v. 59, p. 525–541, 2004.

https://doi.org/10.1016/j.ces.2003.09.037

DUARTE, Cláudio Roberto. **Estudo experimental e de simulação da fluidodinâmica e recobrimento em leito de jorro**. 2006. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2006.

DUARTE, Cláudio Roberto; MURATA, Valéria Viana; BARROZO, Marcos Antonio S. Experimental and numerical study of spouted bed fluid dynamics. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 25, p. 95-107, 2008. https://doi.org/10.1590/S0104-66322008000100011

<u>mups.//doi.org/10.1590/50104/00522000000100011</u>

EDEM SIMULATION. Help EDEM. DEM Solutions, Edinburgh, UK, 2016.

EPSTEIN, Norman. Introduction and Overview. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v.70, 1992. https://doi.org/10.1002/cjce.5450700502

EPSTEIN, Norman; GRACE, J. R. **Spouting of particule solids.** In: Hanbook of Powder, Science and Technology, 2 ed., p.532-567. New York: Chapman & Hall, 1997. https://doi.org/10.1007/978-1-4615-6373-0_10 FENG, Yuqing Q. *et al.* Discrete particle simulation of gas fluidization of particle mixtures, **AIChE Journal**, v. 50, p. 1713–1728, 2004. <u>https://doi.org/10.1002/aic.10169</u>

GIDASPOW, Dimitri; BEZBARUAH, Rukmini; DING, J. Hydrodynamics of circulating fluidized beds, kinetic theory approach in fluidization. **Proceedings of the 7th Fluidization Conference**, Brisbane, Australia, 3 May 1992.

GONZÁLEZ-MONTELLANO, Carlos; RAMÍREZ, Álvaro; GALLEGO, Eutiquio; AYUGA, Francisco; Validation and experimental calibration of 3D Discrete Element Models for the simulation of the discharge flow in silos. **Chemical Engineering Science**, v. 66, p. 5116-5126, 2011.

https://doi.org/10.1016/j.ces.2011.07.009

GUI, Nan; YANG, Xingtuan; TU, Jiyuan; JIANG, Shengyao. A fine LES-DEM coupled simulation of gas-large particle motion in spouted bed using a conservative virtual volume fraction method. **Powder Technology**, v. 330, p. 174-189, 2017. https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.02.012

HERTZ, H., J. Reine Angew. Math. 92, 1882. (Traduzido e reimpresso em inglês em Hertz's Miscellaneous Papers. Londres: Macmillan & Co, 1896).

HOOMANS, B. P. B.; KUIPERS, J. A. M.; BRIELS, W. J.; VAN SWAAIJ, W. P. M. Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidised bed: A hard-sphere approach. **Chemical Engineering Science**, v. 51, p.99–118, 1996. https://doi.org/10.1016/0009-2509(95)00271-5

HU, Chenshu; LUO, Kun; WANG, Shuai; JUNJIE, Lin; FAN, Jianren. The effects of collisional parameters on the hydrodynamics and heat transfer in spouted bed: A CFD-DEM study. **Powder Technology**, v. 353, p. 132-144, 2019. https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.05.020 JÚNIOR, Irineu Petri; SANTOS, Dyrney Araújo dos; DUARTE, Cláudio Roberto. Estudo experimental e de simulação da fluidodinâmica de um leito de jorro operando em fase diluída. **Horizonte Científico**, v. 9, n. 1, 2015.

JUST, Sarah; TOSCHKOFF, Gregor; FUNKE, Adrian; DJURIC, Dejan; SCHARRER, Georg; KHINAST, Johannes; KNOP, Klaus; KLEINEBUDDE, Peter. Experimental analysis of tablet properties for discrete element modeling of an active coating process. **AAPS PharmSciTech**, v. 14, p. 402–11, 2013. https://doi.org/10.1208/s12249-013-9925-5

KRUGGEL-EMDEN, Harald; SIMSEK, Erdem; RICKELT, S.; WIRTZ, S.; SCHERER, V. Review and extension of normal force models for the Discrete Element Method. **Powder Technology**, v. 171, p. 157–173, 2007. https://doi.org/10.1016/j.powtec.2006.10.004

LAW, Averill M.; KELTON, David W. Simulation modeling and analysis. 2 ed. New York: McGraw-Hill, 1991.

LIMA, Rondinelli M. Estudo da dinâmica de partículas em tambores rotatórios empregando a abordagem numérica Lagrangeana. 2017. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2017.

LIU, Jinzhong Z.; GRACE, John R.; BI., Xiaotao T. Novel Multifunctional Optical-Fiber Probe: I. Development and Validation. **AIChE Journal**, v. 49, p. 1405-1420, 2004. https://doi.org/10.1002/aic.690490607

LIU, Xuejiao; GAN, Jieqing; ZHONG, Wenqi; YU, Aibing. Particle shape effects on dynamic behaviors in a spouted bed: CFD-DEM study. **Powder Technology**, v. 361, p. 349-362, 2020.

https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.07.099

MALISKA, Clóvis Raimundo. Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004.

MARCHELLI, Filippo; MOLINER, Cristina; BOSIO, Barbara; ARATO, Elisabetta. A CFD–DEM study of the behaviour of single-solid and binarymixtures in a pyramidal spouted bed. **Particuology**,v. 42, p,79-91, 2019.

https://doi.org/10.1016/j.partic.2018.03.017

MARCHELLI, Filippo; HOU, Qinfu; BOSIO, Barbara; ARATO, Elisabetta; YU, Aibing. Comparison of different drag models in CFD-DEM simulations of spouted beds. **Powder Technology**, v. 360, p. 1253-1270, 2020a.

https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.10.058

MARCHELLI, Filippo; MOLINER, Cristina; CURTI, Massimo; ; BOSIO, Barbara; ARATO, Elisabetta. CFD-DEM simulations of a continuous square-based spouted bed and evaluation of the solids residence time distribution. **Powder Technology**, v. 365, p. 840-858, 2020b.

https://doi.org/10.1016/j.powtec.2020.03.017

MARKOWSKI, Adam; KAMINSKI, Wladyslaw. Hydrodynamic characteristics of jet spouted beds. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 61, 1983. <u>https://doi.org/10.1002/cjce.5450610318</u>

MATHUR, Kishan B.; EPSTEIN, Norman. A technique for contacting gases with coarse solid particles. AIChE Journal, v. 1, p.157-164, 1955.

MATHUR, Kishan B.; EPSTEIN, Norman. **Spouted Beds.** New York: Academic Press, 1974.

MINDLIN, Raymond D.; DERESIEWICZ, H. Elastic spheres in contact under varying oblique forces. Journal of Applied Mechanics, v. 20, 1953.

MOLINER, Cristina; MARCHELLI, Filippo; SPANACHI, Nayia; MARTINEZ-FELIPE, Alfonso; BOSIO, Barbara; ARATO, Elisabetta. CFD simulation of a Spouted Bed: comparison between the Discrete Element Method (DEM) and the Two Fluid Method (TFM), **Chemical Engineering Journal**, v. 377, 2018.

https://doi.org/10.1016/j.cej.2018.11.164

NOROURZI, Hamid R.; ZARGHAMI, Reza; SOTUDEH-GHAREBAGHS, Rahmat; MOSTOUFI, Navid. **Coupled CFD-DEM modeling:** formulation, implementation and application to multiphase flows. Wiley, 2016. https://doi.org/10.1002/9781119005315

OLAZAR, Martin; SAN JOSE, Maria J.; AGUAYO, Andres T.; ARANDES, Jose M.; BILBAO, Javier. Design factors of conical spouted beds and jet spouted beds. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 32, 1245, 1993.

https://doi.org/10.1021/ie00018a034

OLAZAR, Martin; SAN JOSE, Maria J.; AGUAYO, Andres T.; ARANDES, Jose M.; BILBAO, Javier. Stable operational conditions for gas-solid contact regimes in conical spouted beds. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 31, n. 7, 1784–1792 ,1992. <u>https://doi.org/10.1021/ie00007a025</u>

PATANKAR, Suhas V., Numerical heat transfer and fluid flow. Hemisphere Publishing Corporation, 1980.

PENG, B. Discrete Element Method (DEM) contact models applied to pavement simulation. 2014. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) – Virginia Polytechnic Institute, Virginia, 2014.

SAN JOSE, Maria J.; OLAZAR, Martin; AGUAYO, Andres T; ARANDES, Jose M.; BILBAO, Javier. Expansion of spouted beds in conical contactors. **Chemical Engineering** Journal, v. 51, p. 45–52, 1993.

https://doi.org/10.1016/0300-9467(93)80007-B

SAN JOSE, Maria J.; OLAZAR, Martin; PEÑAS, Francisco J.; AGUAYO, Andres T., ARANDES, Jose M.; BILBAO, Javier. Correlation for calculation of the gas dispersion coefficient in conical spouted beds. **Chemical Engineering Science**, v. 50, 2161–2172, 1995. https://doi.org/10.1016/0009-2509(95)00079-K

SANTOS, Dyrney Araújo. Estudo experimental e numérico da dinâmica de partículas em um tambor rotatório. 2015. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2015.

SANTOS, Kassia Graciele dos. **Estudo da fluidodinâmica do leito de jorro por CFD com malhas tridimensionais**. 2008. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2008.

SANTOS, Kassia Graciele. Aspectos fundamentais da pirólise de biomassa em leito de jorro: fluidodinâmica e cinética do processo. 2011. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2011.

SILVÉRIO, Beatriz Cristina. Estudos fluidodinâmicos e de secagem de fertilizantes em secadores rotatórios concorrentes. 2012. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2012.

THORNTON, Colin. Granular dynamics, contact mechanics and particle system simulations: DEM study. Springer, v. 24, 2015. https://doi.org/10.1007/978-3-319-18711-2

UEMAKI, Osamu.; TSUJI, Toshiro. Particle velocity and solids circulation rate in a jetspouted bed. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**. v. 70, 1992. <u>https://doi.org/10.1002/cjce.5450700514</u> VIEIRA NETO, José Luiz. **Estudo experimental e de simulação da fluidodinâmica de um leito de jorro com tubo d***raft***.** 2007. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2007.

VIEIRA NETO, José Luiz; DUARTE, Cláudio Roberto; MURATA, Valéria Viana; BARROZO, Marcos Antonio de Souza. Effect of a draft tube on the fluid dynamics of a spouted bed: experimental and CFD studies. **Drying Technology**, v. 26, p. 299-307, 2008. <u>https://doi.org/10.1080/07373930801897994</u>

WANG, Zhiguo. Experimental Studies and CFD Simulations of Conical Spouted Bed Hydrodynamics. **Ph.D. Thesis**, University of British Columbia, Vancouver, Canada, 2006.

WU, Jintao; BINBO, Jiang; CHEN, Jizhong; YANG, Yongrong. Multi-scale study of particle flow in silos. Advanced Powder Technology, v. 20, n. 1, p. 62–73, 2009. https://doi.org/10.1016/j.apt.2008.02.003

ZHOU, Zongyan; YU, Aibing; ZULLI, Paul. A new computational method for studying heat transfer in fluid bed reactors, **Powder Technology**, v.197, p. 102–110, 2010. https://doi.org/10.1016/j.powtec.2009.09.002

ZHU, H.P.; ZHOU, Z.Y.; YANG, R.Y.; YU, A.B. Discrete particle simulation of particulate systems: Theoretical developments. **Chemical Engineering Science**, v. 62, p. 3378-3396, 2007.

https://doi.org/10.1016/j.ces.2006.12.089