



Universidade Federal de Uberlândia
Faculdade de Engenharia Química
Programa de Pós Graduação em Engenharia Química



SIMULAÇÃO DO RECOBRIMENTO DE PARTÍCULAS EM LEITO DE JORRO USANDO MODELOS DE BALANÇO POPULACIONAL

Uberlândia - MG

2006



Universidade Federal de Uberlândia
Faculdade de Engenharia Química
Programa de Pós Graduação em Engenharia Química



SIMULAÇÃO DO RECOBRIMENTO DE PARTÍCULAS EM LEITO DE JORRO USANDO MODELOS DE BALANÇO POPULACIONAL

Danylo de Oliveira Silva

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Mestre em Engenharia Química, área de concentração em Pesquisa e Desenvolvimento de Processos Químicos.

Uberlândia - MG

2006

FICHA CATALOGRÁFICA

Elaborada pelo Sistema de Bibliotecas da UFU / Setor de Catalogação e Classificação

S586s Silva, Danylo de Oliveira, 1981-
Simulação do recobrimento de partículas em leito de jorro usando
modelos de balanço populacional / Danylo de Oliveira Silva. - Uberlândia,
2006.
110f. : il.
Orientador: Valéria Viana Murata.
Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Uberlândia, Progra-
ma de Pós-Graduação em Engenharia Química.
Inclui bibliografia.
1. Processo de leito de jorro - Teses. I. Murata, Valéria Viana. II. Univer-
sidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em Engenharia
Química. III. Título.

CDU: 66.047.79

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE DANYLO DE OLIVEIRA SILVA, SUBMETIDA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA COMO PARTE DOS REQUISITOS PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE MESTRE EM ENGENHARIA QUÍMICA, EM 30/03/2006.

BANCA EXAMINADORA:

Prof^ª. Dr^ª. Valéria Viana Murata
Orientadora – PPG – FEQUI/UFU

Prof. Dr. Marcos Antônio de Souza Barrozo
Co-Orientador – PPG – FEQUI/UFU

Prof. Dr. Adilson José de Assis
PPG – FEQUI/UFU

Prof. Dr. Luís Cláudio Oliveira Lopes
PPG – FEQUI/UFU

Prof^ª. Dr^ª. Ana Maria da Silveira
PPG – EQ/UFSCar

*Dedico esta Dissertação
à minha amada família.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente ao Autor da vida, meu Deus, que me deu a graça de chegar até aqui.

Aos meus pais, Daniel e Belozy, e meus irmãos, Daniel Filho e Murilo, que me ensinaram o que é família e sempre me incentivaram a continuar estudando. Vocês sempre foram e serão meus exemplos de vida. Amo vocês.

À minha amada esposa, Daniele, por ser meu braço forte, meu apoio, meu ombro amigo, minha auxiliadora, minha mulher virtuosa... Deus me deu o presente mais lindo desse mundo, você. Eu amo você!!!

Aos meus amigos que tanto me ajudaram durante o curso de graduação: Ballu, Bel, Bruno, Cândida e Cris. Agradeço a Deus pelo tempo que passamos juntos e desejo de todo o meu coração que Ele dê o melhor para vocês.

Aos novos amigos do curso de Pós-Graduação: Lucas, Vanessa, Reimar e Aderjane. Foi muito bom conhecê-los e compartilhar esse tempo com vocês.

Agradeço à Adriene por compartilhar o computador comigo, à Fanny por me auxiliar com as normas, ao José Luiz (Sassá) por me auxiliar com o CFD, ao Fran que tanto me ajudou com programas, e principalmente ao Cláudio (Mezenga), pelos dados experimentais; se não fosse o auxílio de vocês, talvez eu não tivesse conseguido concluir este trabalho.

Há ainda outras pessoas que sempre me ajudaram e me apoiaram e eu não poderia deixar de colocar seus nomes aqui: tia Biga e tia Lindalva, pelo amor e carinho; Ranor, Julinho, Paulão e Heloísa, amigos para toda hora; Jaime Turatti, Ivone e Ewerton, minha nova família; e em especial uma pessoa, que eu gostaria muito que tivesse vivido para ver essa conquista: minha querida avó Arminda (Mindinha).

Aos professores da FEQUI, principalmente ao Luís Cláudio pelo auxílio com as equações e ao Adilson pelas sugestões no trabalho. Ao professor Marcos Antônio (Marquinhos), meu co-orientador, por me auxiliar nas horas difíceis de decisão e por estar sempre me apoiando.

À minha orientadora Valéria, pela paciência para comigo, pela dedicação, por apontar o caminho e me mostrar que sempre há algo para melhorar.

“Ninguém pode roubar o sonho do sonhador que sonha o sonho de Deus”.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	i
LISTA DE TABELAS	v
LISTA DE SÍMBOLOS	vi
RESUMO	xiii
ABSTRACT	xiv
CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 2 – DESENVOLVIMENTO DO MODELO MATEMÁTICO DE REVESTIMENTO DE PARTÍCULAS EM LEITO DE JORRO	4
2.1 – Aspectos gerais	4
2.2 – Desenvolvimento do modelo de balanço populacional de revestimento de partículas em leito de jorro	13
2.2.1 – Balanço populacional por regiões de mistura perfeita	16
2.2.2 – Condições iniciais e de contorno	20
2.2.3 – Equações constitutivas e cálculo de propriedades	21
2.2.3.1 – Taxa de circulação de partículas (W)	21
2.2.3.2 – Dimensão das regiões de recobrimento e de secagem (α)	23
2.2.3.3 – Altura da fonte (H_f)	25
2.2.3.4 – Massa de recobrimento alimentada no leito	26
2.2.4 – Adimensionalização do modelo matemático	27
2.2.5 – Determinação de propriedades macroscópicas das distribuições	29
CAPÍTULO 3 – SIMULAÇÃO DO RECOBRIMENTO DE SEMENTES DE SOJA	32
3.1 – Aspectos gerais	32
3.2 – Solução analítica do modelo reduzido por Transformadas de Laplace	32
3.3 – Solução analítica das equações de Momentos	37
3.4 – Avaliação da solução analítica proposta por Wnukowski e Setterwall (1989)	43
3.5 – Validação do modelo matemático	44
3.5.1 – Valores médios de x para os domínios F e G	44

3.5.2 – Comparação entre a distribuição cumulativa dos dados experimentais e simulados	46
3.5.3 – Comparação entre as distribuições temporais definidas para os domínios F e G.....	64
3.5.4 – Estudo da influência da taxa de adição de massa de recobrimento	67
3.5.4.1 – Distribuições para tempo fixo de operação	67
3.5.4.2 – Distribuições para tempos variáveis de operação.....	69
CAPÍTULO 4 – CONCLUSÕES E SUGESTÕES	73
4.1 – Conclusões.....	73
4.2 – Sugestões	74
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	75
BIBLIOGRAFIA	78
ANEXO A – Dados experimentais.....	79
APÊNDICE A – Código computacional utilizado para obtenção dos resultados	83
APÊNDICE B – Curvas de distribuição para todos os experimentos e condições estudadas.....	93

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Representação esquemática de um leito de jorro. Fonte: Duarte (2002)	1
Figura 2.1 – Esquema geral para o recobrimento de partículas em leito de jorro com atomização no topo. Fonte: Duarte (2002)	13
Figura 2.2 – Representação esquemática do leito de jorro dividido em dois domínios. Fonte: Wnukowski e Setterwall (1989)	16
Figura 2.3 – Representação esquemática da massa de recobrimento depositada sobre uma partícula. Fonte: Wnukowski e Setterwall (1989)	17
Figura 2.4 – Representação do leito de jorro dividido em figuras geométricas.	24
Figura 3.1 – Valores médios de x para os domínios F e G <i>versus</i> tempo adimensional τ	45
Figura 3.2 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 2 para a_1 e α_1	52
Figura 3.3 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 2 para a_1 e α_2	52
Figura 3.4 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 2 para a_2 e α_1	53
Figura 3.5 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 2 para a_2 e α_2	53
Figura 3.6 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 10 para a_1 e α_1	57
Figura 3.7 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 10 para a_1 e α_2	57
Figura 3.8 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 10 para a_2 e α_1	58
Figura 3.9 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 10 para a_2 e α_2	58
Figura 3.10 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 11 para a_1 e α_1	62

Figura 3.11 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 11 para a_1 e a_2	62
Figura 3.12 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 11 para a_2 e a_1	63
Figura 3.13 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 11 para a_2 e a_2	63
Figura 3.14 – Distribuição de frequência no domínio F para a_2 e a_1 no experimento 11.	65
Figura 3.15 – Distribuição de frequência no domínio G para a_2 e a_1 no experimento 11.....	65
Figura 3.16 – Distribuição de frequência total para a_2 e a_1 no experimento 11.....	66
Figura 3.17 – Distribuição de frequência para diferentes valores de taxa de adição de massa de recobrimento.	68
Figura 3.18 – Distribuição de frequência cumulativa para diferentes valores de taxa de adição de massa de recobrimento.....	69
Figura 3.19 – Distribuição de frequência para diferentes valores de tempo e de taxa de adição de massa de recobrimento.....	70
Figura 3.20 – Distribuição de frequência para o menor valor de taxa de adição de massa de recobrimento testado e para o valor base.....	71
Figura 3.21 – Distribuição de frequência cumulativa para o menor valor de taxa de adição de massa de recobrimento testado e para o valor base.	72
Figura B.1 – Distribuição de frequência no domínio F no experimento 2: $a_1 = 2,1 \cdot 10^{-2}$ e $a_1 = 1,39 \cdot 10^{-2}$	94
Figura B.2 – Distribuição de frequência no domínio G no experimento 2: $a_1 = 2,1 \cdot 10^{-2}$ e $a_1 = 1,39 \cdot 10^{-2}$	94
Figura B.3 – Distribuição de frequência total no experimento 2: $a_1 = 2,1 \cdot 10^{-2}$ e $a_1 = 1,39 \cdot 10^{-2}$	95
Figura B.4 – Distribuição de frequência no domínio F no experimento 2: $a_1 = 2,1 \cdot 10^{-2}$ e $a_2 = 2,21 \cdot 10^{-2}$	95
Figura B.5 – Distribuição de frequência no domínio G no experimento 2: $a_1 = 2,1 \cdot 10^{-2}$ e $a_2 = 2,21 \cdot 10^{-2}$	96
Figura B.6 – Distribuição de frequência total no experimento 2: $a_1 = 2,1 \cdot 10^{-2}$ e $a_2 = 2,21 \cdot 10^{-2}$	96

Figura B.7 – Distribuição de frequência no domínio F no experimento 2: $a_2 = 2,56 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_1 = 1,39 \cdot 10^{-2}$	97
Figura B.8 – Distribuição de frequência no domínio G no experimento 2: $a_2 = 2,56 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_1 = 1,39 \cdot 10^{-2}$	97
Figura B.9 – Distribuição de frequência total no experimento 2: $a_2 = 2,56 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_1 = 1,39 \cdot 10^{-2}$	98
Figura B.10 – Distribuição de frequência no domínio F no experimento 2: $a_2 = 2,56 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2 = 2,21 \cdot 10^{-2}$	98
Figura B.11 – Distribuição de frequência no domínio G no experimento 2: $a_2 = 2,56 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2 = 2,21 \cdot 10^{-2}$	99
Figura B.12 – Distribuição de frequência total no experimento 2: $a_2 = 2,56 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2 = 2,21 \cdot 10^{-2}$	99
Figura B.13 – Distribuição de frequência no domínio F no experimento 10: $a_1 = 2,22 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_1 = 1,34 \cdot 10^{-2}$	100
Figura B.14 – Distribuição de frequência no domínio G no experimento 10: $a_1 = 2,22 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_1 = 1,34 \cdot 10^{-2}$	100
Figura B.15 – Distribuição de frequência total no experimento 10: $a_1 = 2,22 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_1 = 1,34 \cdot 10^{-2}$	101
Figura B.16 – Distribuição de frequência no domínio F no experimento 10: $a_1 = 2,22 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2 = 2,14 \cdot 10^{-2}$	101
Figura B.17 – Distribuição de frequência no domínio G no experimento 10: $a_1 = 2,22 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2 = 2,14 \cdot 10^{-2}$	102
Figura B.18 – Distribuição de frequência total no experimento 10: $a_1 = 2,22 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2 = 2,14 \cdot 10^{-2}$	102
Figura B.19 – Distribuição de frequência no domínio F no experimento 10: $a_2 = 2,84 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_1 = 1,34 \cdot 10^{-2}$	103
Figura B.20 – Distribuição de frequência no domínio G no experimento 10: $a_2 = 2,84 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_1 = 1,34 \cdot 10^{-2}$	103
Figura B.21 – Distribuição de frequência total no experimento 10: $a_2 = 2,84 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_1 = 1,34 \cdot 10^{-2}$	104

Figura B.22 – Distribuição de frequência no domínio F no experimento 10: $a_2 = 2,84 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2 = 2,14 \cdot 10^{-2}$	104
Figura B.23 – Distribuição de frequência no domínio G no experimento 10: $a_2 = 2,84 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2 = 2,14 \cdot 10^{-2}$	105
Figura B.24 – Distribuição de frequência total no experimento 10: $a_2 = 2,84 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2 = 2,14 \cdot 10^{-2}$	105
Figura B.25 – Distribuição de frequência no domínio F no experimento 11: $a_1 = 2,43 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_1 = 2,02 \cdot 10^{-2}$	106
Figura B.26 – Distribuição de frequência no domínio G no experimento 11: $a_1 = 2,43 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_1 = 2,02 \cdot 10^{-2}$	106
Figura B.27 – Distribuição de frequência total no experimento 11: $a_1 = 2,43 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_1 = 2,02 \cdot 10^{-2}$	107
Figura B.28 – Distribuição de frequência no domínio F no experimento 11: $a_1 = 2,43 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2 = 3,3 \cdot 10^{-2}$	107
Figura B.29 – Distribuição de frequência no domínio G no experimento 11: $a_1 = 2,43 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2 = 3,3 \cdot 10^{-2}$	108
Figura B.30 – Distribuição de frequência total no experimento 11: $a_1 = 2,43 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2 = 3,3 \cdot 10^{-2}$	108
Figura B.31 – Distribuição de frequência no domínio F no experimento 11: $a_2 = 3,6 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2 = 3,3 \cdot 10^{-2}$	109
Figura B.32 – Distribuição de frequência no domínio G no experimento 11: $a_2 = 3,6 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2 = 3,3 \cdot 10^{-2}$	109
Figura B.33 – Distribuição de frequência total no experimento 11: $a_2 = 3,6 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2 = 3,3 \cdot 10^{-2}$	110

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Índice de dispersão dos experimentos analisados.....	47
Tabela 3.2 – Valores de parâmetros dos experimentos utilizados na validação do modelo.....	47
Tabela 3.3 – Parâmetros estimados e calculados para os experimentos analisados.....	48
Tabela 3.4 – Evolução temporal da massa média e do desvio padrão para o experimento 2.....	49
Tabela 3.5 – Dados simulados <i>versus</i> experimentais no tempo final para o experimento 2.....	50
Tabela 3.6 – Evolução temporal da massa média e do desvio padrão para o experimento 10.....	55
Tabela 3.7 – Dados simulados <i>versus</i> experimentais no tempo final para o experimento 10.....	56
Tabela 3.8 – Evolução temporal da massa média e do desvio padrão para o experimento 11.....	60
Tabela 3.9 – Dados simulados <i>versus</i> experimentais no tempo final para o experimento 11.....	61
Tabela 3.10 – Massa média e desvio padrão no tempo final para diferentes valores de taxa de adição de massa de recobrimento.	67
Tabela 3.11 – Massa média e desvio padrão para diferentes valores de tempo e de taxa de adição de massa de recobrimento.	70

LISTA DE SÍMBOLOS

A	Matriz dada pela Equação (2.101), $M^0L^0T^0$
A_M	Constante, $M^0L^0T^0$
a	Taxa de circulação relativa à massa total de partículas no leito, $M^0L^0T^{-1}$
a_{ij}	Coeficiente da Equação (2.97), $M^0L^0T^0$
a_s	Taxa de circulação de partículas entre os domínios, $M^1L^0T^{-1}$
B	Razão entre o tamanho relativo dos domínios F e G , $M^0L^0T^0$
B_i	Taxa de aparecimento de partículas, $M^0L^0T^{-1}$
B_M	Constante, $M^0L^0T^0$
b	Taxa de circulação relativa à massa total de partículas, $M^0L^0T^{-1}$
b_{ij}	Coeficiente da Equação (2.97), $M^0L^0T^0$
C	Matriz dada pela Equação (2.103), $M^0L^0T^0$
CFD	Fluidodinâmica Computacional, $M^0L^0T^0$
C_M	Constante, $M^0L^0T^0$
C_{SP}	Concentração total de sólidos na suspensão, $M^1L^{-3}T^0$
c_i	Constantes, $M^0L^0T^0$
D	Matriz na Equação (3.51), $M^0L^0T^0$
D_b	Diâmetro da base do parabolóide de revolução, $M^0L^1T^0$
D_c	Diâmetro da parte cilíndrica do leito, $M^0L^1T^0$
D_e	Taxa de desaparecimento de partículas, $M^0L^0T^{-1}$
D_i	Diâmetro da entrada do leito, $M^0L^1T^0$
D_M	Constante, $M^0L^0T^0$
DTR	Distribuição de tempo de residência, $M^0L^0T^0$
d_p	Diâmetro médio da esfera de igual volume, $M^0L^1T^0$
d_t	Diâmetro do tubo <i>draft</i> , $M^0L^1T^0$
E	Domínio inativo, $M^0L^0T^0$
E	Entrada, $M^0L^0T^0$
e	Espessura da região que recebe o recobrimento, $M^0L^1T^0$

$e(x, \tau)$	Função densidade de probabilidade para as partículas do domínio E em relação às variáveis adimensionais, $M^0 L^0 T^0$
F	Domínio de secagem, $M^0 L^0 T^0$
$F(x, s)$	Transformada de Laplace de $f(x, \tau)$, $M^0 L^0 T^0$
$f(l)$	Função de distribuição, $M^0 L^0 T^0$
$f(m)$	Função densidade normalizada, $M^0 L^0 T^0$
$f(w, t)$	Função densidade de probabilidade para as partículas do domínio F , $M^0 L^0 T^0$
$f(x, \tau)$	Função densidade de probabilidade para as partículas do domínio F em relação às variáveis adimensionais, $M^0 L^0 T^0$
$f(\gamma)_{entra}$	Distribuição de idade da corrente de entrada do reator, $M^0 L^0 T^0$
$f(\gamma)_{sai}$	Distribuição de idade da corrente de saída do reator, $M^0 L^0 T^0$
G	Taxa de crescimento, $M^1 L^0 T^{-1}$
G	Domínio de atomização, $M^0 L^0 T^0$
$G(x, s)$	Transformada de Laplace de $g(x, \tau)$, $M^0 L^0 T^0$
G_c	Termo convectivo da propriedade de estado, $M^0 L^0 T^0$
$g(w, t)$	Função densidade de probabilidade para as partículas do domínio G , $M^0 L^0 T^0$
$g(x, \tau)$	Função densidade de probabilidade para as partículas do domínio G em relação às variáveis adimensionais, $M^0 L^0 T^0$
H	Altura do leito estático, $M^0 L^1 T^0$
$H(x)$	Função Heaviside de x , $M^0 L^0 T^0$
$H(z)$	Função Heaviside de z , $M^0 L^0 T^0$
H_f	Altura da fonte, $M^0 L^1 T^0$
$h(\gamma, t)$	Modelo de fertilidade, $M^0 L^0 T^1$
$h_{cilindro}$	Altura da parte cilíndrica do leito de jorro, $M^0 L^1 T^0$
h_{cone}	Altura parte cônica do leito de jorro, $M^0 L^1 T^0$
h_i	Altura inicial de sementes acima da parte cônica, $M^0 L^1 T^0$
I_0	Função de Bessel modificada de primeiro tipo de ordem zero, $M^0 L^0 T^0$
I_1	Função de Bessel modificada de primeiro tipo de primeira ordem, $M^0 L^0 T^0$
j	Função definida por $j(\tau) = \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha \end{pmatrix}$, $M^0 L^0 T^0$
K	Constante, $M^0 L^0 T^0$

K_I	Coeficiente de proporcionalidade, $M^0L^0T^{-1}$
k	Constante, $M^{-2}L^6T^0$
$k(\gamma, t)$	Função proporção de fêmeas, $M^0L^0T^1$
L	Altura do leito de jorro, $M^0L^1T^0$
L_E	Distância do tubo <i>draft</i> à base, $M^0L^1T^0$
l	Comprimento, $M^0L^1T^0$
l^*	Comprimento crítico, $M^0L^1T^0$
l'	Comprimento, $M^0L^1T^0$
l_c	Tamanho dos núcleos, $M^0L^1T^0$
M	Matriz dada pela Equação (2.102)
M_T	Massa total de partículas no leito, $M^1L^0T^0$
m	Massa, $M^1L^0T^0$
$m(t)$	Concentração de micela, $M^1L^{-3}T^0$
m_0	Massa inicial de uma partícula, $M^1L^0T^0$
m_{max}	Maior valor de massa de semente, $M^1L^0T^0$
m_{min}	Menor valor de massa de semente, $M^1L^0T^0$
m_{natura}	Massa da semente <i>in natura</i> , $M^1L^0T^0$
m_r	Massa de recobrimento depositada sobre uma partícula, $M^1L^0T^0$
$m_{sem\ rec}$	Massa da semente recoberta, $M^1L^0T^0$
N	Número de partículas, $M^0L^0T^0$
N_G	Quantidade de partículas presentes no domínio $\mathbf{G}$, $M^0L^0T^0$
N_m	Número de misturadores perfeitos, $M^0L^0T^0$
N_t	Número total de comprimidos, $M^0L^0T^0$
N_T	Quantidade total de partículas no leito, $M^0L^0T^0$
$n(l, t)$	Distribuição de partículas, $M^0L^0T^0$
$n(\gamma, t)$	Distribuição de idade das partículas, $M^0L^0T^0$
PDF	Função densidade populacional
p	Definição da Equação (3.24), $M^0L^0T^0$
$p(\gamma, t)$	Função densidade de distribuição de idade, $M^0L^{-1}T^0$
Q_a	Vazão do ar na região anular, $M^0L^3T^{-1}$
Q_e	Vazão de entrada, $M^0L^3T^{-1}$

Q_J	Vazão do ar na região de jorro, $M^0L^3T^{-1}$
Q_I	Taxa de atomização, $M^1L^0T^{-1}$
Q_s	Vazão de saída, $M^0L^3T^{-1}$
q	Definição da Equação (3.12), $M^0L^0T^0$
$q(l, l')$	Frequência de agregação, $M^0L^0T^0$
R	Região do espaço, $M^0L^3T^0$
$R(t)$	Concentração de radical, $M^1L^{-3}T^0$
R_I	Sub-região do espaço R , $M^0L^3T^0$
R_A	Taxa de adição de massa de recobrimento, $M^1L^0T^{-1}$
R_b	Raio da base das regiões I e II da Figura 2.4, $M^0L^1T^0$
R_c	Raio da parte cilíndrica na Figura 2.4, $M^0L^1T^0$
R_i	Raio menor da parte cônica na Figura 2.4, $M^0L^1T^0$
r	Taxa de adição de massa de recobrimento relativa à massa total de partículas no leite, $M^0L^0T^{-1}$
r_A	Taxa de aparecimento, $M^0L^{-4}T^0$
r_B	Taxa de desaparecimento, $M^0L^{-4}T^0$
r_{ij}	Coefficiente da Equação (2.97), $M^0L^0T^0$
r_N	Taxa de nucleação, $M^0L^0T^{-1}$
S	Saída, $M^0L^0T^0$
$S(l)$	Taxa de nucleação, $M^0L^0T^0$
S_i	Função qualquer na Equação (2.97), $M^0L^0T^0$
s	Variável no domínio de Laplace, $M^0L^0T^0$
$\bar{t}$	Tempo de residência, $M^0L^0T^1$
t	Tempo, $M^0L^0T^1$
t_F	Tempo de residência médio no domínio F , $M^0L^0T^1$
u_j	Variável dependente da Equação (2.97), $M^0L^0T^0$
V	Volume, $M^0L^3T^0$
V_{AJ}	Vazão do ar de jorro, $M^0L^3T^{-1}$
V_{AT}	Vazão do ar de atomização, $M^0L^3T^{-1}$
V_I	Volume da região I da Figura 2.4, $M^0L^3T^0$
V_{II}	Volume da região II da Figura 2.4, $M^0L^3T^0$

V_{III}	Volume da região III da Figura 2.4, $M^0L^3T^0$
V_{IV}	Volume da região IV da Figura 2.4, $M^0L^3T^0$
V_R	Volume do reator, $M^0L^3T^0$
V_{SP}	Vazão de suspensão, $M^0L^3T^{-1}$
V_T	Volume total da suspensão, $M^0L^3T^0$
W	Taxa de circulação de partículas, $M^1L^{-1}T^0$
w	Razão entre a massa de recobrimento e a massa inicial, $M^0L^0T^0$
w_{max}	Valor máximo da razão entre a massa de recobrimento e a massa inicial, $M^0L^0T^0$
$\langle w \rangle_F$	Valor médio da razão massa de recobrimento – massa inicial para o domínio F , $M^0L^0T^0$
$\langle w \rangle_G$	Valor médio da razão massa de recobrimento – massa inicial para o domínio G , $M^0L^0T^0$
$\langle w \rangle_T$	Valor médio da razão massa de recobrimento – massa inicial para todo o leito, $M^0L^0T^0$
w_T	Massa total de partículas, $M^1L^0T^0$
X_I	Vazão de ar de jorro codificada, $M^0L^0T^0$
X_2	Vazão de ar de atomização codificada, $M^0L^0T^0$
X_3	Vazão de suspensão de recobrimento codificada, $M^0L^0T^0$
X_S	Concentração da solução de recobrimento, $M^0L^0T^0$
x	Massa de recobrimento adimensional, $M^0L^0T^0$
x_{max}	Valor máximo da massa de recobrimento adimensional, $M^0L^0T^0$
$\langle x \rangle_F$	Valor médio de recobrimento adimensional para o domínio F , $M^0L^0T^0$
$\langle x \rangle_G$	Valor médio de recobrimento adimensional para o domínio G , $M^0L^0T^0$
$\langle x \rangle_T$	Valor médio de recobrimento adimensional para todo o leito, $M^0L^0T^0$
Y	Distribuição de frequência cumulativa, $M^0L^0T^0$
$y(w,t)$	Função densidade de probabilidade para toda a população de partículas, $M^0L^0T^0$
$y(x,\tau)$	Função densidade de probabilidade para toda a população de partículas em relação às variáveis adimensionais, $M^0L^0T^0$
z	Definição da Equação (3.20), $M^0L^0T^0$

Símbolos gregos

α	Porção de toda a população contida no domínio de atomização, $M^0L^0T^0$
β	Definição da Equação (3.6), $M^0L^0T^0$
$\beta(t)$	Taxa de fertilidade média, $M^0L^0T^0$
γ	Idade, $M^0L^0T^1$
γ_1	Idade limite do período fértil, $M^0L^0T^1$
γ_2	Idade limite do período fértil, $M^0L^0T^1$
δ	Função delta de Dirac, $M^0L^0T^0$
ΔP	Queda de pressão no leito, $M^1L^{-2}T^0$
ε	Porosidade, $M^0L^0T^0$
ε_f	Porosidade na região da fonte, $M^0L^0T^0$
ε_j	Porosidade na região de jorro, $M^0L^0T^0$
ε_{mf}	Porosidade na mínima fluidização, $M^0L^0T^0$
η	Eficiência do processo de recobrimento, $M^0L^0T^0$
Θ	Função densidade, $M^0L^0T^0$
θ	Inclinação do cone, $M^0L^0T^0$
$\kappa(x,t)$	Função distribuição de massa de recobrimento, $M^0L^0T^0$
Λ	Função densidade volumétrica, $M^0L^{-4}T^0$
λ_i	Valores característicos, $M^0L^0T^0$
μ_F^i	Momento de ordem i no domínio F , $M^iL^0T^0$
μ_G^i	Momento de ordem i no domínio G , $M^iL^0T^0$
μ_T^i	Momento de ordem i para todo o leito, $M^iL^0T^0$
v	Fração de partículas presentes no domínio E , $M^0L^0T^0$
ζ	Propriedade de estado qualquer, $M^0L^0T^0$
ρ_p	Densidade das partículas, $M^1L^{-3}T^0$
σ	Desvio padrão, $M^0L^0T^0$
σ_F^2	Variância no domínio F , $M^0L^0T^0$
σ_G^2	Variância no domínio G , $M^0L^0T^0$
σ_T^2	Variância total do processo, $M^0L^0T^0$

τ	Tempo adimensional, $M^0 L^0 T^0$
$\Phi(t)$	Termo de nascimento, $M^0 L^0 T^0$
$\varphi(\gamma, t)$	Função mortalidade, $M^0 L^0 T^0$
Ψ	Função densidade populacional, $M^0 L^{-1} T^0$
ψ_i	Variáveis auxiliares, $M^0 L^0 T^0$
ω	Massa de recobrimento, $M^1 L^0 T^0$

RESUMO

Um modelo dinâmico simplificado baseado em balanços populacionais é utilizado para calcular a função densidade populacional do processo de recobrimento de partículas em leito de jorro cônico-cilíndrico com tubo *draft* e atomização no topo, considerando o termo de crescimento da camada de revestimento independente do tamanho da partícula. O modelo considera o leito composto por dois domínios de mistura perfeita de tamanhos constantes, onde ocorrem respectivamente o recobrimento e a secagem das partículas, com recirculação entre eles. O modelo é adimensionalizado de modo que a variável independente relativa ao peso do revestimento é igual ao tempo de residência adimensional no domínio de recobrimento. Deste modo, as funções de distribuição podem ser tratadas como Distribuições de Tempo de Residência definidas para cada domínio. O modelo é formado por equações diferenciais parciais hiperbólicas, sendo resolvido analiticamente por transformadas de Laplace e pelo Método dos Momentos. Os parâmetros do modelo que definem as dimensões das regiões de recobrimento e de secagem, o perfil de porosidade na região da fonte e a taxa de recirculação de partículas são estimados através de relações geométricas e de simulações usando fluidodinâmica computacional. As curvas de distribuição de frequência experimentais relativas ao recobrimento de sementes de soja com uma mistura recobridora que contém inoculantes e micronutrientes, para diferentes condições operacionais e no tempo final de operação, foram comparadas com as simuladas pelo modelo, apresentando um bom ajuste. Os valores dos momentos, das médias e dos desvios padrão, calculados analiticamente, são apresentados para os vários casos simulados, permitindo avaliar a uniformidade do revestimento. A representação dos perfis simulados por distribuições normais não se mostrou adequada nas condições analisadas. Os efeitos da vazão da suspensão de mistura de recobrimento e do tamanho do domínio de recobrimento sobre as distribuições são analisados, permitindo identificar condições operacionais que possibilitem maior uniformidade do revestimento.

Palavras-chave: leito de jorro, recobrimento, balanço populacional, soja, modelo de mistura perfeita, revestimento.

ABSTRACT

A dynamic simplified model based on population balances is used to calculate the population density function of a particles coating process in a spouted bed with a draft tube, considering an independent size growing. The model considers the bed composed by two constant size domains of perfect mixture, where occurs coating and drying of particles, with circulation among them. The model is made dimensionless, so that the independent variable related to the coating mass is equal to the dimensionless residence time in the coating domain. This way, the distribution functions can be treated as residence time distributions, defined for each domain. The model is formed by hyperbolic partial differential equations, being analytically solved by Laplace transform and Moments Method. The model parameters that define the coating and drying domains, the porosity profile at the fountain and the particles circulation rate are obtained through geometric relationships and CFD simulations. The experimental frequency distribution curves related to the soybean seeds coating with inoculant and micronutrients, for different operational conditions and at the final operation time were compared with the simulated ones by the model, showing a good agreement. The values of moments, averages and standard deviations, analytically calculated, are presented for the several simulated cases, allowing the evaluation of the coating uniformity. The representation by normal distributions was not appropriated at the simulated conditions. The effects of the coating suspension flow rate and of the coating domain size over the distributions are analyzed, allowing the identification of operational conditions which make possible larger coating uniformity.

Keywords: spouted bed, coating, population balance, soybean, perfect mixture model.

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

O leito de jorro é um equipamento de contato fluido-sólido que pode ser utilizado nas indústrias química e farmacêutica. Ele originalmente foi concebido como uma versão modificada de um leito fluidizado, devido à qualidade pobre de fluidização encontrada com partículas grandes. No seu desenvolvimento, o leito de jorro tem exibido características especiais que o tornam capaz de executar operações de ciclo úteis com partículas sólidas que não podem ser executadas em um leito fluidizado, devido a seu movimento de partículas comparativamente aleatório (MATHUR e EPSTEIN, 1974). Em sistemas como os leitos de jorro, uma forma de intensa agitação é dada para cada partícula sólida pela ação da corrente de gás. A Figura 1.1 apresenta o leito de jorro com suas regiões características.

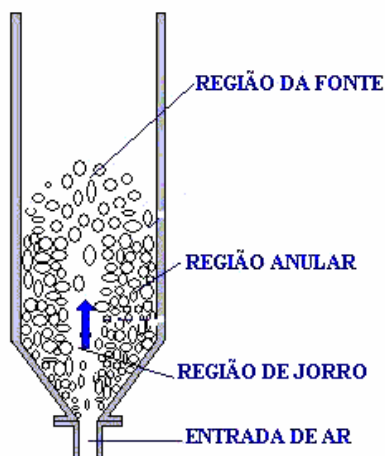


Figura 1.1 – Representação esquemática de um leito de jorro. Fonte: Duarte (2002)

As aplicações do leito de jorro podem ser para reações químicas catalíticas ou não, mistura de sólidos, mistura de gases, transferência de calor gás-sólido, secagem, aglomeração ou recobrimento. Nos processos de recobrimento, as partículas são jorradas pelo ar a uma

temperatura específica. A suspensão recobridora é pulverizada no sistema, por meio de um bico atomizador. Após a evaporação do solvente os sólidos da suspensão ficam aderidos às partículas.

O recobrimento tem incontáveis aplicações nas indústrias química, farmacêutica, agrícola e de alimentos e é dependente dos objetivos específicos de cada produto. Dentre as razões pelas quais se utiliza o recobrimento, citam-se:

- a) diminuir a taxa de dissolução de substâncias químicas;
- b) tornar o manuseio de produtos mais fácil;
- c) inibir sabores e odores desagradáveis;
- d) aumentar o volume para melhor manuseio;
- e) adicionar material para suprir futura carência deste pela partícula;
- f) proporcionar boa estética ao produto;
- g) isolar substâncias ativas e
- h) proporcionar resistência mecânica.

A seguir apresentam-se alguns exemplos de aplicação do leito de jorro para fins de recobrimento:

- a) recobrimento de sementes com fertilizantes (LIU e LISTER, 1993);
- b) recobrimento de grânulos de fertilizantes com enxofre (CHOI e MEISEN, 1997; AYUB et al., 2001);
- c) recobrimento de alumina com sucrose (OLIVEIRA et al., 1997);
- d) recobrimento de sementes de soja com micronutrientes e inoculante (LUCAS, 2000; DUARTE, 2002);
- e) recobrimento de esferas de vidro com pó de sílica (IJICHI et al., 2000; IJICHI et al., 2003) e
- f) recobrimento de partículas inertes com suspensão aquosa polimérica (VIEIRA e ROCHA, 2004).

O recobrimento de partículas em leito de jorro apresenta as seguintes vantagens, quando comparado a outros equipamentos de revestimento como, por exemplo, os tambores rotatórios (LUCAS, 2000):

- a) as partículas são simultaneamente recobertas e secas no leito de jorro;
- b) obtenção de recobrimento mais uniforme e
- c) o leito de jorro é mecanicamente simples, não possuindo partes móveis.

Considerando a simplicidade mecânica e operacional do leito de jorro, sua utilização eficiente no recobrimento de sementes de soja e que é necessário garantir a uniformidade do revestimento, o principal objetivo deste trabalho é desenvolver um modelo matemático para prever a distribuição de massa de recobrimento de partículas em leito de jorro, para fins de aplicação na otimização dinâmica do processo. Para garantir a viabilidade deste modelo de otimização, ele deve ser simples e suas variáveis de entrada devem estar relacionadas somente aos parâmetros operacionais como vazão da suspensão recobridora, taxa de recirculação, quantidade de partículas a serem recobertas e à geometria do equipamento.

O trabalho a seguir está assim estruturado: no Capítulo 2 é feito o desenvolvimento do modelo matemático, apresentando uma revisão sobre trabalhos anteriores que utilizam equações de balanço populacional; no Capítulo 3 é feita a simulação do recobrimento de partículas em leito de jorro através das equações desenvolvidas; o Capítulo 4 apresenta as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2

DESENVOLVIMENTO DO MODELO MATEMÁTICO DE REVESTIMENTO DE PARTÍCULAS EM LEITO DE JORRO

2.1 – Aspectos gerais

Os modelos de balanço populacional possuem uma ampla aplicação em vários processos, incluindo cristalização, precipitação, polimerização, revestimento de partículas, flotação, fermentação e peletização, dentre outros (DUARTE, 2002). Neste capítulo, serão brevemente apresentados modelos típicos relacionados a várias aplicações, com o objetivo de mostrar esta diversidade e os bons resultados que têm sido alcançados, apesar da baixa frequência de validação experimental dos resultados simulados.

Em Hulburt e Katz (1964), os estudos de crescimento de partículas variam de discussões da distribuição de tamanho de cristais, considerando condições de crescimento uniforme em equipamentos de fluxo contínuo, a análises detalhadas da história de crescimento difusional de partículas aerossóis. O ambiente da partícula é considerado homogêneo e a dependência da nucleação e do crescimento da partícula com seu ambiente é incorporada em equações diferenciais, mostrando como o diâmetro médio da partícula varia com a posição, na unidade de processamento sob análise.

Em 1971, Randolph e Larson publicaram o livro “Theory of Particulate Processes”, que se tornou uma referência para o desenvolvimento de vários outros trabalhos subsequentes. Neste trabalho, os autores apresentaram modelos para distribuição de tamanho de partículas, modelos de função distribuição–densidade, além do desenvolvimento detalhado da equação de balanço populacional, a partir da equação da continuidade e vários outros tópicos relacionados a processos de cristalização. A equação de balanço populacional por eles proposta é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(Nf(l)) + \frac{\partial}{\partial l}(G_c Nf(l)) + D_e - B_i = 0 \quad (2.1)$$

Os termos G_c , B_i e D_e representam, respectivamente, o termo convectivo da propriedade de estado, a taxa de aparecimento e a taxa de desaparecimento de partículas em uma faixa da

propriedade de estado¹, N é o número total de partículas e $f(l)$ a função distribuição e t o tempo de processo. Os termos B_i e D_e podem envolver aglomeração ou fragmentação de partículas.

A forma como estes eventos acontecem e se combinam em um determinado processo é que irá determinar a maior ou menor dificuldade no equacionamento, resultando em maior ou menor complexidade das equações de previsão dos referidos efeitos. Em um processo como a peletização de partículas em tambor rotatório, que envolve agregação de partículas, podem-se identificar os três fenômenos G_c , B_i e D_e , simultaneamente.

Um exemplo de aplicação onde os termos B_i e D_e são nulos é descrito em Himmelblau e Kenneth (1967) *apud* Duarte (2002), cujo objetivo foi determinar a distribuição de tempo de residência de elementos de fluido em diferentes reatores, como mostra a seguinte equação:

$$\frac{\partial}{\partial t}(Nf(\gamma)) + \frac{\partial}{\partial \gamma}(G_c Nf(\gamma)) = \frac{1}{V} [Q_e f(\gamma)_e - Q_s f(\gamma)_s] \quad (2.2)$$

Neste caso, a propriedade de estado de interesse é a idade do elemento de fluido (γ), sendo $G_c = d\gamma/dt$. Os termos $f(\gamma)_e$ e $f(\gamma)_s$ correspondem, respectivamente, à distribuição de idade das correntes de entrada e saída do reator.

A evolução da distribuição de tamanho de cristais foi simulada para um processo de cristalização, através da solução de uma equação de balanço populacional por Muhr et al. (1996). A equação é dada por:

$$\frac{1}{V(t)} \frac{\partial (V(t)\Psi(l,t))}{\partial t} + \frac{\partial (G(l,t)\Psi(l,t))}{\partial l} = r_N(t) \delta(l-l^*) \quad (2.3)$$

em que G é a taxa de crescimento, l o tamanho característico dos cristais, l^* o comprimento crítico, r_N é a taxa de nucleação primária, t é o tempo, V o volume da suspensão, δ é a função delta de Dirac e Ψ a função densidade populacional dos cristais.

A literatura apresenta também alguns estudos sobre o controle de sistemas descritos por equações de balanço populacional. Semino e Ray (1995) estudaram o controle da dinâmica da população humana, da polimerização e da cristalização, através da manipulação de variáveis concentradas. O controle estudado é exemplificado da seguinte forma: supõe-se que se quer controlar os atributos de uma população e estabilizar o comportamento dinâmico com um

¹ Uma propriedade de estado designa qualitativa ou quantitativamente uma propriedade física ou química da partícula, como o tamanho, a atividade catalítica de partículas de catalisador, a massa de uma semente em processos de revestimento, o tempo de residência de elementos de fluido no interior de reatores, o diâmetro de bolhas em processos de flotação. A propriedade de estado utilizada foi o comprimento l dos cristais.

controlador, ou seja, obter, por exemplo, uma população humana de um determinado tamanho com um apropriado número de indivíduos em cada intervalo de idade, ou alternativamente controlar a distribuição de tamanho de partículas saindo de um cristalizador industrial.

As seguintes equações representam, respectivamente, o balanço populacional para a população humana e as condições de contorno e inicial.

$$\frac{\partial p(\gamma, t)}{\partial t} + \frac{\partial p(\gamma, t)}{\partial \gamma} = -\varphi(\gamma, t) p(\gamma, t) \quad (2.4)$$

$$p(0, t) = \Phi(t) = \beta(t) \int_{\gamma_1}^{\gamma_2} h(\gamma, t) k(\gamma, t) p(\gamma, t) d\gamma \quad (2.5)$$

$$p(\gamma, 0) = p_0(\gamma) \quad (2.6)$$

em que γ representa a idade, γ_1 e γ_2 representam as idades limites do período fértil, $h(\gamma, t)$ o modelo de fertilidade, $k(\gamma, t)$ a função proporção de fêmeas, $p(\gamma, t)$ a função densidade de distribuição de idade, $\beta(t)$ a taxa de fertilidade média, $\Phi(t)$ o termo de nascimento. O autor aplica o método das linhas características para resolver a equação de população humana no caso em que a mortalidade é apenas uma função da idade e que não há eventos irregulares como guerras ou pragas afetando uma grande fração da população.

A Equação (2.7) representa a equação de balanço populacional para o processo de polimerização, considerando a idade da partícula como variável interna, acoplada à Equação (2.8) – termo de contorno, relacionado às concentrações de micela e radical, equações estas apresentadas a seguir:

$$\frac{\partial (V_R n(\gamma, t))}{\partial t} = - \frac{\partial (V_R n(\gamma, t))}{\partial \gamma} - Q_s n(\gamma, t) \quad (2.7)$$

$$n(0, t) = kR(t)m(t) \quad (2.8)$$

Neste caso, k é uma constante apropriada, $n(\gamma, t)$ a taxa de distribuição de idade das partículas, Q_s a vazão de saída, $R(t)$ e $m(t)$ são concentrações de radical e micela no reator, V_R o volume do reator e γ a idade das partículas. Após adotar algumas hipóteses simplificadoras os autores encontram uma solução semi-analítica em termos de variáveis adimensionais.

Crowley et al. (2000) estudaram o controle da distribuição de tamanho de partículas em um processo de polimerização, utilizando-se de um modelo fundamental de balanço populacional e consideraram a taxa de alimentação de surfactante e a concentração de surfactante livre como

variáveis de controle alternativas e faz uma comparação das duas abordagens. Para resolver as equações é utilizado o método de colocação ortogonal em elementos finitos.

Com relação aos métodos de solução das equações de balanço populacional, a literatura apresenta soluções analíticas e numéricas, baseadas nos métodos dos momentos (SHERONY, 1981; WNUKOWSKI e SETTERWALL, 1989; ALEXIADIS et al., 2004; BRIESEN, 2006), bem como na discretização das equações por intervalos de classes (MARCHAL et al., 1988, MUHR et al., 1996) e no método das características (SEMINO e RAY, 1995; MARONGA e WNUKOWSKI, 1997, KUMAR e RAMKRISHNA, 1997).

Kumar e Ramkrishna (1997) estudaram a solução de equações de balanço populacional para nucleação, crescimento e agregação de partículas, que caracterizam processos como precipitação, cristalização, formação de aerossol, dentre outros. A equação geral é dada a seguir:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(l,t)}{\partial t} + \frac{\partial [G(l)n(l,t)]}{\partial l} = & \frac{1}{2} \int_0^\infty n(l-l',t)n(l',t)q(l-l',l)dl' + \\ & -n(l,t) \int_0^\infty n(l',t)q(l,l')dl' + S(l) \end{aligned} \quad (2.9)$$

em que $G(l)$ é a taxa de crescimento de partículas de tamanho l , $n(l,t)$ o número de densidade de partículas no intervalo de tamanho l a $l+dl$ no tempo t , $q(l,l')$ é a frequência de agregação, $S(l)$ é a taxa de nucleação, t é o tempo, l e l' são tamanhos de partículas. Foi utilizado o método das características para transformar a equação diferencial parcial em um conjunto de equações diferenciais ordinárias, combinado com um método de discretização derivado por Kumar e Ramkrishna (1996), para resolver a Equação (2.9) eficiente e precisamente. Segundo Kumar e Ramkrishna (1997), a população é representada através de um volume denominado pivô e as características da técnica são: (i) formulação de equações discretas para obter diretamente as propriedades da distribuição de tamanho ao invés de estimativas muito precisas do número de densidade, que pode ser computacionalmente intensa, (ii) flexibilidade para trabalhar com uma malha arbitrária, que permite que ela possa ser otimizada com relação a resolução e precisão, e (iii) é computacionalmente eficiente. O ponto crucial da técnica é derivado do conceito de consistência interna, que requer que o conjunto de equações discretas produza expressões corretas para, pelo menos, as propriedades desejadas (das quais os momentos são casos especiais). A consistência interna com respeito às propriedades escolhidas é assegurada garantindo que as

mesmas propriedades escolhidas das novas partículas (formadas devido a quebra ou agregação) sejam exatamente preservadas.

Marchal et al. (1988) propuseram um método para resolver equações de balanço populacional em cristalização no caso mais geral: estado não-estacionário, tamanho dependente da taxa de crescimento e quebra ou aglomeração de cristais. Utilizaram-se do modo clássico de transformação de uma equação diferencial parcial em um sistema de equações diferenciais lineares, pela discretização do intervalo de variação da variável L . O modelo foi capaz de prover simulações com boa adequação aos dados experimentais. A equação não discretizada é representada por:

$$\frac{1}{V_T} \frac{\partial(\Lambda V_T)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial l}(\Lambda G) + \frac{Q_s \Lambda - Q_e \Lambda_e}{V_T} = r_N \delta(l - l_0) + r_A - r_B \quad (2.10)$$

sendo G a taxa de crescimento, l o tamanho característico dos cristais, l_0 o tamanho dos núcleos, Q_e e Q_s são fluxos volumétricos de entrada e saída, r_A e r_B são taxas de aparecimento e desaparecimento de cristais, r_N é a taxa de nucleação, t é o tempo, V_T o volume total da suspensão, δ é a função delta de Dirac e Λ a função densidade volumétrica.

Ramkrishna (2000) apresenta uma excelente revisão sobre as várias aplicações das equações de modelo de balanço populacional, além de métodos estatísticos utilizados para desenvolver os termos de aglomeração, fragmentação e crescimento da equação de balanço, bem como métodos de solução analítica e numérica.

Considerando-se os estudos voltados especificamente ao recobrimento, Sherony (1981) desenvolveu um modelo para previsão da distribuição de massa de recobrimento de partículas em leito fluidizado, que considera a circulação de partículas entre dois domínios de mistura perfeita, formados pelo seguinte sistema de equações diferenciais parciais:

$$\frac{\partial f(w, t)}{\partial t} = -a_s \left[\frac{f(w, t)}{(1 - \alpha) w_T} - \frac{g(w, t)}{\alpha w_T} \right] \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial g(w, t)}{\partial t} + \frac{R_A}{\alpha w_T} \frac{\partial g(w, t)}{\partial w} = a_s \left[\frac{f(w, t)}{(1 - \alpha) w_T} - \frac{g(w, t)}{\alpha w_T} \right] \quad (2.12)$$

$$f(w, 0) = 0; \quad w > 0 \quad (2.13)$$

$$g(w, 0) = 0; \quad w > 0 \quad (2.14)$$

$$g(0, t) = \alpha w_T \delta(t = 0); \quad t > 0 \quad (2.15)$$

em que a_s é a taxa de circulação de partículas entre os domínios, $f(w,t)$ e $g(w,t)$ representam funções de distribuição, R_A representa a taxa de adição de massa de recobrimento, w a massa de recobrimento por partícula, w_T é a massa total de partículas no leito, α a fração de partículas presentes no domínio de recobrimento. As equações (2.13) e (2.14) representam as condições iniciais e a Equação (2.15) a condição de contorno.

As principais hipóteses adotadas por Sherony (1981) são: as partículas no domínio **G** são recobertas em qualquer instante de tempo; os domínios **F** e **G** têm tamanho constante; a probabilidade de uma partícula com massa de recobrimento entre w e $w+dw$ deixar o domínio **G** (ou **F**) é proporcional ao número de partículas no domínio **G**, com massa de recobrimento $w+dw$; a massa de recobrimento de uma partícula não pode diminuir por transferência com outras partículas. A solução das equações foi obtida através da transformada de Laplace. Não houve uma comparação do modelo com dados experimentais.

Wnukowski e Setterwall (1989) também desenvolveram um modelo para o recobrimento em leito fluidizado, aplicando um conceito de renovação randômica de superfície para descrever a troca de partículas entre duas zonas do leito, consideradas ativa e inativa. Três diferentes métodos de solução das equações de balanço populacional foram apresentados: (i) uma solução analítica através de transformada de Laplace, (ii) uma transformação das equações nos momentos de funções de densidade populacional, e (iii) uma simulação numérica. As equações são dadas por:

$$\frac{\partial f(w,t)}{\partial t} = -a \left[\frac{f(w,t)}{(1-\alpha)} - \frac{g(w,t)}{\alpha} \right] \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial g(w,t)}{\partial t} + \frac{r}{\alpha} \frac{\partial g(w,t)}{\partial w} = a \left[\frac{f(w,t)}{(1-\alpha)} - \frac{g(w,t)}{\alpha} \right] \quad (2.17)$$

$$f(w,0) = (1-\alpha)\delta(w); \quad w > 0 \quad (2.18)$$

$$g(w,0) = \alpha\delta(w); \quad w > 0 \quad (2.19)$$

$$g(0,t) = 0; \quad t > 0 \quad (2.20)$$

em que a é a taxa de circulação de partículas entre os domínios, r representa a taxa de adição de massa de recobrimento relativa à massa total no leito, as equações (2.18) e (2.19) representam as condições iniciais e a Equação (2.20) a condição de contorno. Wnukowski e Setterwall (1989) examinaram a solução de Sherony (1981) e afirmaram haver inconsistências em sua solução.

Segundo Wnukowski e Setterwall (1989) há inconsistências na definição das funções densidade e nas condições de contorno; eles afirmaram que, de acordo com as definições de Sherony (1981), os picos em $t=0$ são omitidos e a condição de contorno para $w=0$ (Equação (2.15)) é artificial. As funções delta realmente aparecem no modelo, mas devem ser definidas para a variável w (ou x) e não para o tempo. Entretanto, assim como Sherony (1981), eles não apresentaram uma validação experimental do modelo postulado.

Maronga e Wnukowski (1997) estenderam a aplicação do trabalho anteriormente citado, em leito fluidizado, para três domínios. O modelo é usado para avaliar o efeito de regiões de estagnação, leitos volumosos e diferentes taxas de transferência entre os domínios na distribuição de recobrimento. As equações na forma adimensional são apresentadas a seguir:

$$\frac{\partial g}{\partial \tau} + \frac{\partial g}{\partial x} = A_M f - C_M g \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} = C_M g + B_M e - f \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial e}{\partial \tau} = D_M f - B_M e \quad (2.23)$$

$$g(x, 0) = \nu \alpha \delta(x) \quad (2.24)$$

$$f(x, 0) = \nu (1 - \alpha) \delta(x) \quad (2.25)$$

$$e(x, 0) = (1 - \nu) \delta(x) \quad (2.26)$$

$$g(0, \tau) = 0 \quad (2.27)$$

em que a é a taxa de circulação de partículas entre os domínios **F** e **G**, b a taxa de circulação entre os domínios **E** e **F**, $e(x, \tau)$, $f(x, \tau)$ e $g(x, \tau)$ representam funções de distribuição dos domínios, ν a fração de partículas presente no domínio **E**. As equações (2.24) a (2.26) são as condições iniciais e a Equação (2.27) a condição de contorno.

As principais hipóteses adotadas por Maronga e Wnukowski (1997) são: as partículas dentro de um mesmo domínio estão perfeitamente misturadas; os tamanhos relativos de cada domínio são constantes; as partículas gastam pelo menos uma unidade de tempo no domínio em que estão entrando; não há atrito, elutriação ou dispersão de partículas; as partículas estão próximas o suficiente para evitar segregação; todo o *spray* é depositado sobre as partículas; a massa de recobrimento depositada sobre uma partícula é relativamente pequena comparada com a massa da partícula. Para resolver o sistema de equações os autores utilizaram o método das

características, junto com a regra trapezoidal. Entretanto, eles também não validaram seus resultados.

A maioria dos modelos descritos na literatura para revestimento em leito de jorro é baseada em crescimento linear e independente do tamanho. Um trabalho pioneiro, considerando-se o termo de crescimento dependente do tamanho, foi desenvolvido por Liu e Lister (1993), no qual estudaram a distribuição de massa de recobrimento de fertilizantes em três tipos de sementes, sendo que o modelo foi apresentado na forma de um balanço populacional conforme proposto por Randolph e Larson (1988). Os resultados encontrados evidenciaram o efeito da distribuição inicial de tamanho das sementes na distribuição de massa de revestimento de fertilizante e os resultados da simulação apresentaram boas aproximações com os resultados experimentais.

Duarte (2002) apresentou um estudo da utilização do leito de jorro para o recobrimento de sementes de soja com uma mistura formada por inoculantes e micronutrientes, desenvolvendo um modelo para representação da distribuição da massa de recobrimento em diferentes condições operacionais, considerando o termo de crescimento dependente do tamanho das partículas, conforme as seguintes equações:

$$\frac{\partial}{\partial t}(Nf(m)) = -\frac{\partial}{\partial m}(GNf(m)) \quad (2.28)$$

$$G = K_1 m \quad (2.29)$$

$$K_1 = \frac{V_{SP} C_{SP} t \eta}{\int_{m_{\min}}^{m_{\max}} Nf(m) m dm} \quad (2.30)$$

em que C_{SP} é a concentração da suspensão, $f(m)$ a função densidade normalizada, G a taxa de crescimento por camada dada pela Equação (2.29), K_1 um coeficiente de proporcionalidade dado pela Equação (2.30), m a massa da semente de soja, $m_{\max}$ o maior valor de massa de semente *in natura*, $m_{\min}$ o menor valor de massa de semente *in natura*, N o número total de sementes de soja, V_{SP} a vazão de suspensão e η a eficiência do processo.

A solução foi obtida através de uma discretização da equação, conforme descrito por Liu e Lister (1993), que aplicaram o método de discretização de Hounslow et al. (1988), o qual é baseado em uma discretização geométrica com uma razão entre intervalos sucessivos dada por $r=2^{1/3}$. A validação de seu modelo é feita através de um lote de experimentos, conduzidos em leito de jorro com tubo *draft* e *spray* no topo. A simulação numérica do revestimento baseada no

modelo de balanço populacional apresentou resultados satisfatórios, quando comparados aos resultados experimentais. Uma expressão para a eficiência do processo em função das vazões de ar de jorro, ar de atomização e de suspensão também foi obtida.

Segundo Wang et al. (2006), o método de discretização de Hounslow et al. (1988) apresenta duas vantagens principais, a saber: (i) é fácil de entender e simples de implementar; e (ii) permite uma discretização com um pequeno número de tamanho de classes. Entretanto, há duas limitações com este método tão aceito: (i) pode levar a erro significativo em tamanhos de classes maiores; e (ii) o tratamento do termo de crescimento é muito simples para evitar dispersão numérica.

Denis (2003) estudou o recobrimento de comprimidos em tambores rotatórios, considerando o termo de crescimento independente do tamanho das partículas. O leito de comprimidos foi dividido em dois domínios separados: num deles as partículas foram recobertas pela atomização de uma solução aquosa polimérica (zona ativa – domínio 1) e no outro ocorreu a secagem e a mistura das partículas (domínio 2). O processo foi representado pelas seguintes equações:

$$\frac{\partial \kappa_i^1}{\partial t} = -\frac{\partial(G\kappa_i^1)}{\partial \omega} - \frac{a(\kappa_s^1 - \kappa_e^1)}{\alpha N_t} \quad (2.31)$$

$$G = \frac{Q_l X_s}{\alpha N_t} \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial \kappa_i^k}{\partial t} = -\frac{a(\kappa_s^1 - \kappa_e^1)}{\left(\frac{1-\alpha}{N_m - 1}\right) N_t} \quad (2.33)$$

em que a Equação (2.31) representa o balanço populacional para o domínio de recobrimento (domínio 1), a Equação (2.33) representa o balanço populacional para o domínio de secagem (domínio 2), G é a taxa de crescimento dada pela Equação (2.32), N_m o número de misturadores perfeitos, N_t o número total de comprimidos, X_s a concentração da solução de recobrimento, $\kappa(x,t)$ a função distribuição de massa de recobrimento, ω a massa de recobrimento por comprimido.

Com base nestas referências destacadas da literatura, fica clara a vasta aplicação de equações de balanço populacional na modelagem de diferentes processos. No caso específico do

revestimento de partículas, as equações geralmente são utilizadas com o objetivo de prever a distribuição de tamanho ou de massa, a partir de uma determinada distribuição.

2.2 – Desenvolvimento do modelo de balanço populacional de revestimento de partículas em leito de jorro

Um esquema de um leito de jorro com atomização superior e tubo *draft*, para fins de recobrimento de partículas é representado na Figura 2.1.

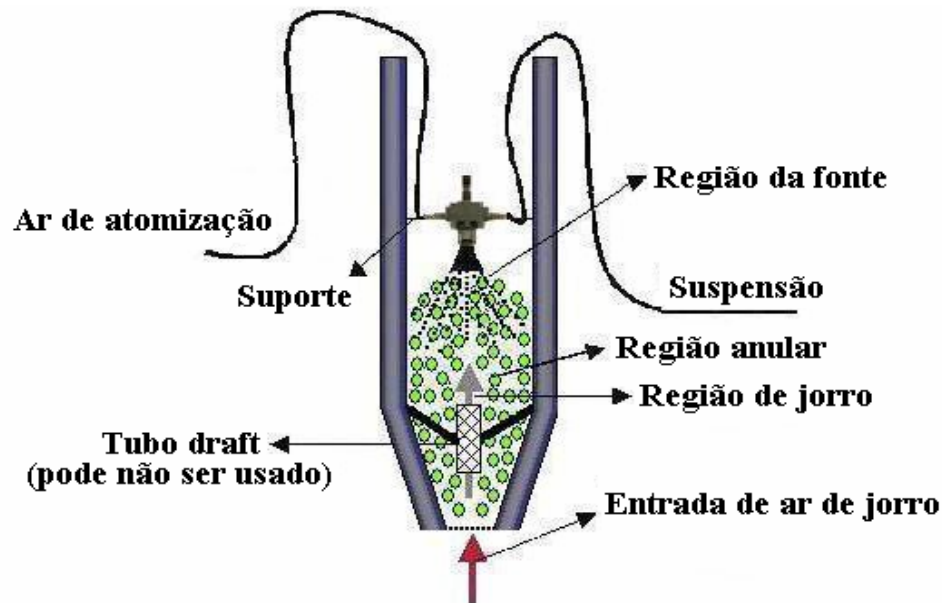


Figura 2.1 – Esquema geral para o recobrimento de partículas em leito de jorro com atomização no topo. Fonte: Duarte (2002)

Conforme apresentado por Randolph e Larson (1988), o balanço populacional para partículas em um elemento de volume arbitrário pode ser dado por:

$$\text{Acúmulo} = \text{Geração líquida} \quad (2.34)$$

Assim:

$$\frac{d}{dt} \int_R \Theta dR = \int_R (B_i - D_e) dR \quad (2.35)$$

em que os termos B_i e D_e referem-se, respectivamente, às taxas de nascimento ou aparecimento e morte ou desaparecimento de novas partículas, dR é um elemento de volume arbitrário e Θ é

uma função densidade de distribuição genérica. Especifica-se o estado de uma partícula em um processo pelos valores do número de coordenadas externas (x,y,z) que se relacionam à posição, e de coordenadas internas $(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m)$, que se relacionam ao estado da partícula, logo:

$$dR = dx dy dz d\xi_1 \dots d\xi_m \quad (2.36)$$

e

$$\int_R = \int_x \int_y \int_z \int_{\xi_1} \dots \int_{\xi_m} \quad (2.37)$$

O lado esquerdo da Equação (2.35) pode ser modificado usando a forma geral de Leibnitz, pela diferenciação da integral definida:

$$\frac{d}{dt} \int_{R_l} \Theta dR = \int_{R_l} \left[\frac{\partial \Theta}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial \Theta}{\partial l} \left(\frac{dl}{dt} \Theta \right) \right] dR \quad (2.38)$$

em que R_l é uma sub-região arbitrária do espaço R .

Para as variáveis externas pode-se definir a velocidade geométrica usual $V_x = dx/dt$, $V_y = dy/dt$, $V_z = dz/dt$ e definir como $V_i = d\xi_i/dt$ a taxa de mudança na propriedade de estado. Substituindo as definições de velocidade e a Equação (2.38) na Equação (2.35) e rearranjando-a, chega-se à equação:

$$\int_{R_l} \left[\frac{\partial \Theta}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (V_x \Theta) + \frac{\partial}{\partial y} (V_y \Theta) + \frac{\partial}{\partial z} (V_z \Theta) + \sum_{i=1}^m \frac{\partial}{\partial \xi_i} (V_i \Theta) + D_e - B_i \right] dR = 0 \quad (2.39)$$

Como a região R_l é arbitrária e não-nula, o integrando deve ser igual a zero, assim:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (V_x \Theta) + \frac{\partial}{\partial y} (V_y \Theta) + \frac{\partial}{\partial z} (V_z \Theta) + \sum_{i=1}^m \frac{\partial}{\partial \xi_i} (V_i \Theta) + D_e - B_i = 0 \quad (2.40)$$

Segundo Duarte (2002), no processo de revestimento de partículas em leito de jorro, existe uma movimentação muito boa das partículas, o que permite considerar nulas as taxas de variação das propriedades de espaço em x , y e z . Logo, a Equação (2.40) pode ser reduzida à Equação (2.41), em que o termo v_i representa a taxa de crescimento de massa das sementes.

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} + \sum_{i=1}^m \frac{\partial}{\partial \xi_i} (v_i \Theta) + D_e - B_i = 0 \quad (2.41)$$

Como o interesse é estudar a distribuição de massa de recobrimento nas sementes, a propriedade Θ para este caso, é a função distribuição de massa de semente, $N_f(m)$ é a coordenada de estado, ξ é a massa de semente de soja. Logo, a Equação (2.41) pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t}[Nf(m)] + \frac{\partial}{\partial m}[\nu_i Nf(m)] + D_e - B_i = 0 \quad (2.42)$$

Considerando-se o leito como um todo, segundo Liu e Lister (1993), no processo de revestimento de sementes não há aglomeração ou fragmentação de partículas, assim os termos B_i e D_e são nulos. Para termo de crescimento dependente da massa da partícula, o crescimento é caracterizado pela sobreposição de camadas de massa de revestimento e é denominado crescimento por camada. A taxa de crescimento por camada é dada por:

$$\nu_i = G = \frac{dm}{dt} \quad (2.43)$$

Assim, a Equação (2.42) se reduz à seguinte equação:

$$\frac{\partial}{\partial t}[Nf(m)] = -\frac{\partial}{\partial m}(GNf(m)) \quad (2.44)$$

O modelo representado pela Equação (2.44) é dinâmico e distribuído e constitui uma equação diferencial parcial não linear. Vale ressaltar que fenômenos de elutriação, fragmentação ou aglomeração de partículas não são considerados.

Se o leito for dividido em regiões, os termos de nascimento e morte podem ser considerados como termos de entrada e saída. E ainda, se o termo de crescimento for considerado independente da massa da partícula, chega-se à seguinte equação:

$$\frac{\partial}{\partial t}[Nf(m)] + G \frac{\partial}{\partial m}[Nf(m)] = E - S \quad (2.45)$$

Segundo Wnukowski e Setterwall (1989), a hipótese de termo de crescimento independente do tamanho, torna o modelo completamente aplicável somente a processos em que a massa de recobrimento total depositada não excede a uma pequena porcentagem da massa total de sementes.

A seguir será apresentado o conjunto de equações para o leito de jorro dividido em dois domínios, conforme a Equação (2.45), bem como as definições básicas, hipóteses do modelo, condições iniciais necessárias à solução do sistema de equações formado, cálculo de propriedades, adimensionalização do modelo para tornar a solução mais fácil, sendo também demonstradas as propriedades macroscópicas do modelo.

2.2.1 – Balanço populacional por regiões de mistura perfeita

O modelo desenvolvido nesta dissertação utiliza a abordagem utilizada por Sherony (1981) na modelagem de um leito fluidizado, e considera que o leito de jorro é constituído por dois domínios de mistura perfeita, conforme apresentado na Figura 2.2.

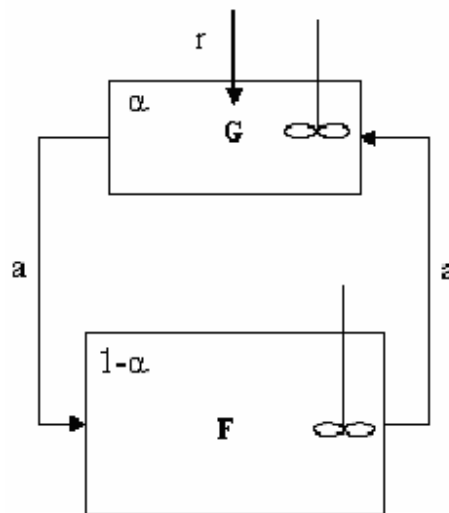


Figura 2.2 – Representação esquemática do leito de jorro dividido em dois domínios. Fonte: Wnukowski e Setterwall (1989)

- Domínio **F**: domínio em que ocorre mistura e secagem das partículas. Admite-se que a mistura no domínio é perfeita e que ocorre secagem efetiva de todas as partículas nele presentes.
- Domínio **G**: ou domínio de atomização, no qual as partículas recebem a solução de recobrimento.

Fazendo uma equivalência com as regiões descritas na Figura 2.1, o domínio **G** representa a região da fonte no leito de jorro e o domínio **F** representa as regiões anular e de jorro.

As Funções de Densidade Populacional (PDF) das partículas com determinada massa nos domínios **F** e **G** são definidas como:

- $f(w, t)dw$ é a porção de toda a população que está presente no domínio **F** e tem uma massa de recobrimento $w \pm dw/2$;

- $g(w, t)dw$ é a porção de toda a população que está presente no domínio $\mathbf{G}$ e tem uma massa de recobrimento $w \pm dw/2$ e
- $y(w, t) = f(w, t) + g(w, t)$ é a função densidade populacional para todas as partículas do leito.

Durante o processo de recobrimento, o tamanho relativo dos domínios é variável, pois assim que o processo se inicia as partículas ainda estão sem recobrimento, a altura da fonte atinge seu valor máximo e a quantidade de partículas expostas ao revestimento é igualmente máxima; mas à medida que o processo segue, as partículas são recobertas e ficam mais pesadas, diminuindo a altura da fonte e, conseqüentemente a quantidade de partículas expostas à atomização. Logo, a fração das partículas na região de recobrimento ativa é uma função do tempo. Entretanto, para facilitar os cálculos, admite-se que os tamanhos dos domínios $\mathbf{F}$ e $\mathbf{G}$ não variam com o tempo e a razão entre esses tamanhos, definida pelo parâmetro B , é representada pela equação:

$$B = \mathbf{F}/\mathbf{G} = (1 - \alpha)/\alpha \quad (2.46)$$

em que α é a porção de toda a população presente no leito contida no domínio $\mathbf{G}$, dado pela razão entre o número de partículas presentes no domínio $\mathbf{G}$ (N_G) e o número total de partículas no leito (N_T), como mostra a equação:

$$\alpha = N_G / N_T \quad (2.47)$$

Considera-se que cada um dos N_T grânulos esféricos presentes no leito tem massa m_0 e que a massa de recobrimento depositada sobre uma única partícula é m_r , conforme ilustrado na Figura 2.3.

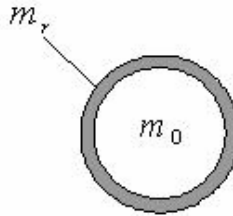


Figura 2.3 – Representação esquemática da massa de recobrimento depositada sobre uma partícula. Fonte: Wnukowski e Setterwall (1989)

Desta forma, define-se a massa de recobrimento adimensional por partícula, dada pela equação:

$$w = m_r / m_0 \quad (2.48)$$

A taxa de adição de massa de recobrimento adimensional relativa à quantidade total de partículas no leito é dada pela equação:

$$r = \frac{1}{N_T} \frac{dw}{dt} = \frac{\frac{dm_r}{dt}}{m_0 N_T} \quad (2.49)$$

Da Equação (2.49) tem-se que:

$$\frac{dw}{dt} = r N_T \quad (2.50)$$

Então, a taxa de crescimento médio para as partículas no domínio **G** é dada pela equação:

$$\left(\frac{dw}{dt} \right)_G = \frac{r N_T}{N_G} \quad (2.51)$$

Da Equação (2.47), tem-se que:

$$\left(\frac{dw}{dt} \right)_G = \frac{r}{\alpha} \quad (2.52)$$

Como se admite que o crescimento de partículas ocorra somente no domínio **G**, tem-se que:

$$\left(\frac{dw}{dt} \right)_F = 0 \quad (2.53)$$

O movimento aleatório de partículas entre os dois domínios se dá a uma taxa de recirculação constante a , que é igual à porção de toda a população de partículas que atravessa as fronteiras do domínio **G** por unidade de tempo e é dada pela equação:

$$a = \frac{d}{dt} \left(\frac{N}{N_T} \right) \quad (2.54)$$

O valor máximo de recobrimento possível para uma partícula, que indica o recobrimento que uma partícula pode receber se ela passar todo o tempo no domínio de recobrimento, é representado por:

$$w_{\max} = \frac{rt}{\alpha} \quad (2.55)$$

Consideram-se agora as seguintes hipóteses simplificadoras:

- o leito é representado por dois domínios **F** e **G** perfeitamente misturados e de tamanhos constantes com o tempo;
- o leito consiste de N_T grânulos esféricos de massas individuais iguais m_0 ;
- a taxa de circulação a entre os domínios **F** e **G** é constante;
- o crescimento das partículas ocorre somente no domínio **G** e é independente do tamanho da partícula;
- as dimensões do domínio **G** são dadas pela altura de penetração do *spray* de recobrimento e pelo tamanho da superfície exposta ao revestimento.

O processo de recobrimento pode ser representado pelo seguinte balanço populacional, conforme Hulburt e Katz (1964):

$$\frac{\partial f(w,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial w} \left[\left(\frac{dw}{dt} \right)_F f(w,t) \right] = F_{entra} - F_{sai} \quad (2.56)$$

$$\frac{\partial g(w,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial w} \left[\left(\frac{dw}{dt} \right)_G g(w,t) \right] = G_{entra} - G_{sai} \quad (2.57)$$

$$F_{entra} = G_{sai} = a \frac{g(w,t)}{\alpha} \quad (2.58)$$

$$G_{entra} = F_{sai} = a \frac{f(w,t)}{1-\alpha} \quad (2.59)$$

As equações (2.58) e (2.59) se devem à hipótese de mistura perfeita. Substituindo as Equações (2.52), (2.53), (2.58) e (2.59) nas Equações (2.56) e (2.57), após rearranjo, encontram-se as equações:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -a \left(\frac{f}{1-\alpha} - \frac{g}{\alpha} \right) \quad (2.60)$$

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \frac{r}{\alpha} \frac{\partial g}{\partial w} = a \left(\frac{f}{1-\alpha} - \frac{g}{\alpha} \right) \quad (2.61)$$

que representam o conjunto de equações para o modelo.

É importante ressaltar neste modelo formado pelas Equações (2.60) e (2.61), a taxa de crescimento da partícula no domínio **G** é admitida independente da massa da partícula e estabelecida pela quantidade de suspensão recobridora alimentada no leito e alocada nesse domínio. A este sistema de equações diferenciais parciais do tipo hiperbólico, linear e de primeira

ordem nas variáveis independentes w e t , devem estar associadas duas condições iniciais e uma condição de contorno.

2.2.2 – Condições iniciais e de contorno

As condições iniciais para as Equações (2.60) e (2.61) são dadas, respectivamente por:

$$f(w, 0) = (1 - \alpha) \delta(w); \quad w > 0 \quad (2.62)$$

$$g(w, 0) = \alpha \delta(w); \quad w > 0 \quad (2.63)$$

sendo que $\delta(w)$ representa a função Delta de Dirac ou função pulso unitário. Esta função representa uma ação súbita e localizada no tempo que indica a partida da operação de recobrimento:

$$\delta(w) = \begin{cases} \infty & \text{se } w = 0 \\ 0 & \text{outros casos} \end{cases} \quad (2.64)$$

A condição de contorno é definida para $g(w, t)$ em $w=0$, isto é, quando nenhuma partícula foi recoberta:

$$g(0, t) = 0; \quad t > 0 \quad (2.65)$$

O modelo final é formado pelas Equações (2.60), (2.61), (2.62), (2.63) e (2.65).

A condição de contorno dada pela Equação (2.65) aplicada às Equações (2.60) e (2.61) leva à equação:

$$\frac{\partial f(0, t)}{\partial t} = -a \frac{f(0, t)}{1 - \alpha} \quad (2.66)$$

Esta condição estabelece que se não há revestimento, a função de densidade populacional $g(0, t)$ deve ser nula e que embora nenhuma partícula tenha saído revestida do domínio **G**, pode sair de **F** para iniciar o revestimento.

O valor máximo possível de recobrimento, dado pela Equação (2.55), conduz a:

$$\frac{\partial g(w_{\max}, t)}{\partial t} = -a \frac{g(w_{\max}, t)}{\alpha} \quad (2.67)$$

$$f(w_{\max}, t) = 0 \quad (2.68)$$

o que significa que se a partícula alcançou o revestimento máximo ela não estará submetida a mais crescimento e não entrará novamente no domínio **G** vinda do domínio **F**.

Para resolver as Equações (2.60) e (2.61) são necessárias três condições: duas condições iniciais e uma condição de contorno. Assim, serão adotadas as condições iniciais dadas pelas Equações (2.62) e (2.63), e a condição de contorno dada pela Equação (2.65).

2.2.3 – Equações constitutivas e cálculo de propriedades

O leito de jorro do tipo cônico-cilíndrico com tubo *draft* e atomização pelo topo, na configuração utilizada por Duarte (2002) é utilizado neste trabalho para fins de validação do modelo. A sua geometria é dada por:

- diâmetro da região cônica: $D_c = 0,21$ m;
- diâmetro interno: $D_i = 0,035$ m;
- altura do cilindro: $h_{cilindro} = 0,70$ m;
- altura do cone: $h_{cone} = 0,15$ m;
- ângulo: $\theta = 60^\circ$;
- diâmetro do tubo *draft*: $d_t = 0,035$ m e
- distância do tubo *draft* à base do leito: $L_E = 0,05$ m.

2.2.3.1 – Taxa de circulação de partículas (W)

Uma revisão da literatura apontou poucos trabalhos voltados ao cálculo da taxa de circulação de partículas em leito de jorro. Yang e Keairns (1983) desenvolvem estudos em leito de jorro com aeração complementar (entradas de ar na região cônica), com tubo *draft*, para determinação experimental da taxa de circulação de partículas. Seus estudos mostraram que a taxa de circulação é fortemente afetada pela configuração do tubo *draft* na base. Entretanto eles não fornecem uma correlação para obtenção da taxa de circulação.

Waldie e Wilkinson (1986) desenvolveram uma técnica experimental para medir tempos de circulação de partículas, tempos de ocorrência de partículas em diferentes níveis e velocidades de partículas na região de jorro. Uma partícula magnetizada e bobinas de busca foram aplicadas juntamente com um microprocessador para facilitar a coleta e o processamento de dados. As partículas magnéticas têm diâmetro, densidade e textura na superfície, similares às das partículas no leito, para assegurar uma representação apropriada. O equipamento estudado era o leito de

gorro convencional (sem o tubo *draft*) e eles não apresentaram correlação para estimativa da taxa de circulação.

Berruti et al. (1988) estudaram os efeitos das condições de operação e configuração geométrica na taxa de circulação de sólidos em um leito de jorro com aeração complementar. A taxa de circulação de sólidos era medida através da coleta de sólidos emergindo do topo do tubo *draft*, em uma tela móvel horizontal designada para se ajustar à região anular da coluna do leito. Além disso, desenvolveram uma equação que relaciona a taxa de circulação com a aeração auxiliar nas paredes cônicas do leito de jorro. Contudo eles não apresentaram uma correlação para estimar a taxa de circulação de partículas no leito de jorro sem aeração.

Day (1990) desenvolveu uma correlação para estimativa da taxa de circulação de partículas em um leito de jorro convencional (sem tubo *draft*) baseada nas propriedades das partículas e características do equipamento.

Freitas e Freire (1997) desenvolveram uma equação empírica para calcular a taxa de circulação de partículas em um leito de jorro com alimentação de sólidos pela base, em função do fluxo mássico de entrada de partículas, da altura do leito de partículas e da vazão volumétrica do ar.

Thorley et al. (1959) desenvolveram a seguinte relação entre o fluxo do ar na região de jorro (Q_j) e a taxa de circulação de partículas (W), admitindo que a queda de pressão (ΔP) no leito de jorro é determinada em função da densidade da partícula (ρ_p):

$$\Delta P = (1 - \varepsilon_j) \rho_p L \quad (2.69)$$

em que L é a altura das partículas no leito. O leito em questão não possuía tubo *draft*.

A porosidade (ε_j), segundo Thorley et al. (1959), pode ser expressa como:

$$\varepsilon_j = \frac{Q_j}{Q_j + W / \rho_p} \quad (2.70)$$

Substituindo a Equação (2.70) na Equação (2.69) e rearranjando chega-se à expressão para a taxa de circulação de partículas:

$$W = \frac{\Delta P \rho_p}{\rho_p L - \Delta P} Q_j \quad (2.71)$$

sendo que Q_j (vazão na região de jorro) é a diferença entre a vazão do ar de jorro (V_{AJ}) e a vazão de ar na região anular (Q_a), conforme mostrado a seguir:

$$Q_j = V_{AJ} - Q_a \quad (2.72)$$

Claflin e Fane (1984) desenvolveram uma correlação para o cálculo da taxa de circulação de partículas em leito de jorro convencional com 0,3 m de diâmetro da parte cilíndrica, cone de 60°, diâmetro de entrada de 0,05 m e com tubo *draft*. As partículas utilizadas foram sementes de trigo com $d_p = 3,5$ mm. A correlação é a seguinte:

$$W = 224,2 \left(L_E V_{AJ} \right)^{0,7} M_T^{0,3} d_t^{1,22} \quad (2.73)$$

em que d_t é o diâmetro do tubo *draft* (m), L_E a distância do tubo à base (m), M_T a massa total de partículas no leito (kg), V_{AJ} a vazão volumétrica total do ar (m^3/s) e W a taxa de circulação de partículas (kg/s).

O parâmetro a , necessário no presente trabalho é dado pela razão entre a taxa de circulação de partículas (W) e a massa total de partículas no leito (M_T), conforme a seguinte equação:

$$a = \frac{W}{M_T} \quad (2.74)$$

Valores de taxa de circulação de partículas também podem ser obtidos através de simulação em *software* de fluidodinâmica computacional (*Computational fluid dynamics* – CFD). Duarte (2006) fez um estudo de simulação da fluidodinâmica de sementes de soja em leito de jorro, utilizando o *software* CFD Fluent 6.1.18 e mostrou que os dados experimentais são muito bem representados pela simulação.

No presente trabalho serão apresentados resultados obtidos através da correlação de Claflin e Fane (1984) e dados oriundos de simulação em CFD.

2.2.3.2 – Dimensão das regiões de recobrimento e de secagem (α)

Denis (2003) desenvolveu um método para determinar experimentalmente a fração de partículas na zona de atomização para o recobrimento de comprimidos em tambor rotatório. O princípio consiste em determinar de modo instantâneo o número de comprimidos localizados na zona de atomização. De acordo com a técnica aplicada, uma pequena quantidade de um líquido fortemente colorido é atomizada no leito de comprimidos, de acordo com um pulso Dirac. Essa quantidade foi fixada em 1 mL. Os comprimidos foram introduzidos no tambor, o qual foi posto em rotação. O líquido foi mantido a 5 bar em um vaso cônico pressurizado. A pressão imposta

sobre o líquido foi tal que o tempo de atomização pode ser considerado menor que 0,2 s. No fim da atomização, todos os comprimidos foram extraídos do tambor e contados os coloridos e os que não apresentavam coloração. A fração de partículas expostas ao recobrimento foi definida como a razão entre o número de comprimidos coloridos e o número total.

No presente trabalho, o parâmetro α é estimado de acordo com as formas geométricas apresentadas na Figura 2.4.

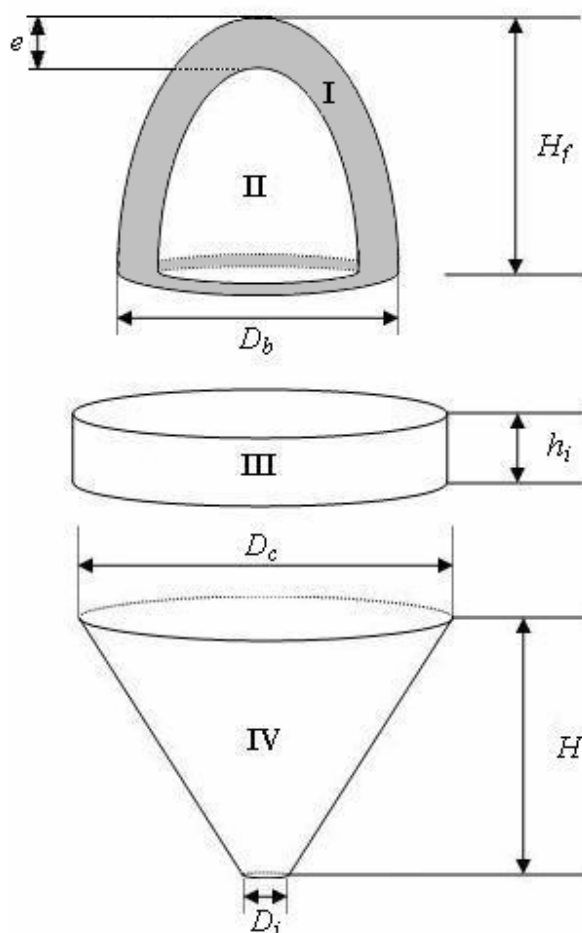


Figura 2.4 – Representação do leito de jorro dividido em figuras geométricas.

No processo de recobrimento ocorre a formação da região da fonte, que é aproximada por um parabolóide de revolução de diâmetro D_b . Admite-se que uma pequena calota, de espessura e , dessa região recebe o recobrimento e que o valor dessa espessura deve obedecer às seguintes restrições:

$$e \leq R_i \quad (2.75)$$

$$e \leq H_f \quad (2.76)$$

Os volumes das regiões I a IV, representados na figura são dados, respectivamente, por:

$$V_I = \frac{\pi R_b^2 e}{2} + \pi R_b e H_f - \pi R_b e^2 - \frac{\pi e^2 H_f}{2} + \frac{\pi e^3}{2} \quad (2.77)$$

$$V_{II} = \frac{\pi (R_b - e)^2 (H_f - e)}{2} \quad (2.78)$$

$$V_{III} = \pi R_c^2 h_i \quad (2.79)$$

$$V_{IV} = \frac{\pi H (R_c^2 + R_i^2 + R_c R_i)}{3} \quad (2.80)$$

sendo: e a espessura da camada exposta ao recobrimento; h_i a altura inicial de sementes acima da parte cônica; H a altura do leito estático; H_f a altura da fonte; R_b o raio da base das regiões I e II, dado por $D_b/2$; R_c o raio da parte cilíndrica, dado por $D_c/2$; R_i o raio menor da parte cônica, dado por $D_i/2$.

Logo, α é dado por:

$$\alpha = \frac{V_I (1 - \varepsilon_f)}{(V_I + V_{II}) (1 - \varepsilon_f) + (V_{III} + V_{IV}) (1 - \varepsilon_{mf})} \quad (2.81)$$

em que ε_f é a porosidade na região da fonte e ε_{mf} é a porosidade na mínima fluidização.

O raio da região de recobrimento R_b foi obtido através da proporção geométrica do leito apresentado em Duarte (2006). A relação utilizada é dada pela seguinte equação:

$$R_b = 2R_i \quad (2.82)$$

Os valores de porosidade utilizados para estimar o parâmetro α são: porosidade na mínima fluidização $\varepsilon_{mf} = 0,37$ (DUARTE, 2002) e porosidade na região da fonte (ε_f), que é obtida através de um perfil de volume de sólidos apresentado por Duarte (2006).

2.2.3.3 – Altura da fonte (H_f)

A altura da fonte é dada pelo valor máximo alcançado pelas partículas durante o processo em um leito de jorro. Para o processo de recobrimento, seu valor não é constante e diminui com o passar do tempo; entretanto, será admitida na simulação do presente trabalho que a altura da fonte é dada pelo valor máximo, antes de iniciar o processo de recobrimento.

Day (1990) desenvolveu uma correlação para estimativa da altura da fonte em um leito de jorro como uma função das propriedades fluido-partícula e da geometria do leito, mas sem tubo *draft*.

Não foram encontrados trabalhos que fornecessem a altura da fonte para um leito de jorro com tubo *draft*, como o caso dos dados experimentais de Duarte (2002), os quais, como mencionado anteriormente, serão utilizados para validação do presente trabalho.

Os dados de altura da fonte para o recobrimento de sementes de soja em leito de jorro com tubo *draft* foram baseados no trabalho de Duarte (2002), podendo também ser obtidos por meio de simulação em CFD.

Neste trabalho foram feitas simulações em CFD em três experimentos de Duarte (2002), que foram selecionados para a validação do modelo proposto neste trabalho.

2.2.3.4 – Massa de recobrimento alimentada no leito

Em Duarte (2002), a taxa de adição de massa de recobrimento r relativa à massa total de partículas presentes no leito é dada pela equação:

$$r = \frac{\eta V_{SP} C_{SP}}{M_T} \quad (2.83)$$

sendo: V_{SP} a vazão de suspensão, C_{SP} a concentração de suspensão, M_T a massa total de partículas no leito.

O parâmetro η é a eficiência do processo, que é definida pela percentagem da massa de recobrimento alimentada efetivamente aderida à superfície das partículas. Este parâmetro foi correlacionado por Duarte (2002) como uma função das condições operacionais do equipamento, como mostra a seguinte equação:

$$\eta = 77,96 - 5,14X_1 + 1,72X_2 + 6,15X_3 - 3,6X_2^2 - 2,41X_3^2 + 2,39X_2X_3 \quad (2.84)$$

sendo:

$$X_1 = \frac{V_{AJ} - 32,9}{2,5} \quad (2.85)$$

$$X_2 = \frac{V_{AT} - 1500}{400} \quad (2.86)$$

$$X_3 = \frac{V_{SP} - 15}{3} \quad (2.87)$$

em que V_{AJ} é a vazão do ar de jorro (em L/s), V_{AT} é a vazão do ar de atomização (em L/h) e V_{SP} é a vazão de suspensão (em mL/min).

2.2.4 – Adimensionalização do modelo matemático

A adimensionalização do modelo é executada utilizando os parâmetros adimensionais propostos por Wnukowski e Setterwall (1989). Define-se a variável tempo adimensional τ , baseada no tempo de residência médio no domínio **F** dado por:

$$t_F = \frac{1 - \alpha}{a} \quad (2.88)$$

Segundo Fogler (1992), a definição de tempo de residência médio é baseada na distribuição de tempo de residência (DTR) de um reator contínuo de mistura perfeita (*Continuous Stirred Tank Reactor* – CSTR), dada pela equação:

$$\bar{t} = \frac{\text{volume do reator}}{\text{vazão volumétrica do efluente}} \quad (2.89)$$

Assim:

$$\tau = \frac{t}{t_F} = \frac{at}{1 - \alpha} \quad (2.90)$$

A variável massa de recobrimento adimensional x é definida de modo que a taxa de crescimento no domínio **G** seja dada por $(dx/d\tau)_G = 1$, que está relacionado às características do domínio, conforme a seguinte equação:

$$x = \frac{wa}{rB} \quad (2.91)$$

De acordo com a Equação (2.55), $x_{\max} = \tau$, o que significa que a máxima massa de recobrimento recebida por uma partícula é igual ao tempo de residência médio da partícula no leito em termos das novas variáveis adimensionais.

Portanto, o sistema de equações na forma adimensional é dado por:

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} = -(f - Bg) \quad (2.92)$$

$$\frac{\partial g}{\partial \tau} + \frac{\partial g}{\partial x} = f - Bg \quad (2.93)$$

Com as condições iniciais dadas por:

$$f(x, 0) = (1 - \alpha)\delta(x); \quad x > 0 \quad (2.94)$$

$$g(x, 0) = \alpha\delta(x); \quad x > 0 \quad (2.95)$$

E a condição de contorno dada por:

$$g(0, \tau) = 0; \quad \tau > 0 \quad (2.96)$$

Faz-se agora a classificação das equações do modelo. Considerando um sistema geral *quasilinear* de n equações diferenciais parciais de primeira ordem (disponível em: <http://www.phy.ornl.gov/csep/CSEP/PDE/NODE5.html>. Acesso em: 04 jan. 2006):

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x} + \sum_{j=1}^n b_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial t} = \sum_{j=1}^n r_{ij} u_j + S_i \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.97)$$

No caso em estudo, o sistema consiste de duas equações ($n = 2$):

$$a_{11} \frac{\partial u_1}{\partial x} + a_{12} \frac{\partial u_2}{\partial x} + b_{11} \frac{\partial u_1}{\partial t} + b_{12} \frac{\partial u_2}{\partial t} = r_{11} u_1 + r_{12} u_2 + S_1 \quad (2.98)$$

$$a_{21} \frac{\partial u_1}{\partial x} + a_{22} \frac{\partial u_2}{\partial x} + b_{21} \frac{\partial u_1}{\partial t} + b_{22} \frac{\partial u_2}{\partial t} = r_{21} u_1 + r_{22} u_2 + S_2 \quad (2.99)$$

Comparando as Equações (2.98) e (2.99) com as Equações (2.92) e (2.93), para $f(x, \tau) = u_1(x, t)$ e $g(x, \tau) = u_2(x, t)$: $a_{11} = a_{12} = b_{12} = S_1 = a_{21} = b_{21} = S_2 = 0$; $b_{11} = a_{22} = b_{22} = r_{21} = 1$; $r_{11} = -1$; $r_{12} = B$; $r_{22} = -B$. Logo:

$$Au_x + Mu_y = C \quad (2.100)$$

em que:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.101)$$

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.102)$$

$$C = \begin{bmatrix} -u_1 + Bu_2 \\ u_1 - Bu_2 \end{bmatrix} \quad (2.103)$$

$$u = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} \quad (2.104)$$

Da Equação (2.102) conclui-se que $\det(M) = 1 \neq 0$. Associado ao sistema dado pela Equação (2.100) está um polinômio característico, definido por:

$$F(\lambda) = \det(A - \lambda M) \quad (2.105)$$

Se as raízes do polinômio característico forem reais e distintas, o sistema é classificado como hiperbólico. O sistema também é chamado hiperbólico se $F(\lambda)$ tem n raízes reais e o problema de autovalor generalizado $(A - \lambda M)u = 0$, tem n soluções linearmente independentes. Se $F(\lambda)$ não tem raízes reais, o sistema é chamado elíptico. Se $F(\lambda)$ tem n raízes reais, mas $(A - \lambda M)u = 0$ não tem n soluções linearmente independentes, então o sistema é classificado como parabólico.

Da Equação (2.105), chega-se a: $F(\lambda) = \lambda(\lambda - 1)$, cujas raízes são reais e distintas, a saber: $\lambda_1 = 0$ e $\lambda_2 = 1$. Resolvendo o problema de autovalor generalizado, chega-se a duas soluções linearmente independentes. Portanto, conclui-se que o sistema de equações representado por (2.92) e (2.93) é um sistema hiperbólico.

2.2.5 – Determinação de propriedades macroscópicas das distribuições

No desenvolvimento de processos de cristalização, o tamanho médio dos cristais e a variância podem ser informações suficientes para caracterizar a qualidade dos cristais obtidos. O mesmo se aplica aos processos de recobrimento, onde características como uniformidade e espessura da camada de revestimento devem ser controladas. Neste caso, podem ser calculados somente os momentos da função de distribuição (HIMMELBLAU e BISCHOFF, 1967).

Os momentos de ordem i para os domínios **F** e **G** são apresentados a seguir:

$$\mu_F^i = \int_0^\infty w^i f(w, t) dw \quad (2.106)$$

$$\mu_G^i = \int_0^\infty w^i g(w, t) dw \quad (2.107)$$

e para o leito como um todo:

$$\mu_T^i = \mu_F^i + \mu_G^i \quad (2.108)$$

Logo, os momentos de ordem zero são dados pelas equações:

$$\mu_F^0 = \int_0^\infty f(w, t) dw = 1 - \alpha \quad (2.109)$$

$$\mu_G^0 = \int_0^\infty g(w, t) dw = \alpha \quad (2.110)$$

$$\mu_T^0 = \mu_F^0 + \mu_G^0 = 1 - \alpha + \alpha \Rightarrow \mu_T^0 = 1 \quad (2.111)$$

Com isso, valores médios de massa de recobrimento podem ser calculados para cada domínio, de acordo com as equações:

$$\mu_F^{1,0} = \langle w \rangle_F = \frac{\mu_F^1}{\mu_F^0} = \frac{\int_0^\infty wf(w, t) dw}{1 - \alpha} \quad (2.112)$$

$$\mu_G^{1,0} = \langle w \rangle_G = \frac{\mu_G^1}{\mu_G^0} = \frac{\int_0^\infty wg(w, t) dw}{\alpha} \quad (2.113)$$

$$\mu_T^{1,0} = \langle w \rangle_T = \frac{\mu_T^1}{\mu_T^0} = \mu_T^1 = \int_0^\infty wy(w, t) dw \quad (2.114)$$

Logo,

$$\langle w \rangle_T = \mu_T^1 \quad (2.115)$$

Analisando-se as equações (2.108) e (2.115), considerando-se $\alpha \neq 0$ e $\alpha \neq 1$, tem-se que:

$$\langle x \rangle_T = \mu_T^1 = \mu_F^1 + \mu_G^1 = \mu_F^0 \frac{\mu_F^1}{\mu_F^0} + \mu_G^0 \frac{\mu_G^1}{\mu_G^0} \quad (2.116)$$

Portanto, a partir das equações (2.112) e (2.113), conclui-se que:

$$\langle x \rangle_T = (1 - \alpha) \langle x \rangle_F + \alpha \langle x \rangle_G \quad (2.117)$$

Logo, quanto maior o tamanho do domínio **G**, isto é, quanto maior o valor de α , maior será sua contribuição na massa média total e menor será a contribuição do domínio **F** e vice-versa.

A variância é calculada através dos momentos de segunda ordem e seu cálculo é apresentado na sequência para cada domínio e para o leito como um todo.

$$\begin{aligned} \sigma_F^2 &= \int_0^\infty (w - \langle w \rangle_F)^2 f(w, t) dw = \int_0^\infty (w^2 - 2w\langle w \rangle_F + \langle w \rangle_F^2) f(w, t) dw = \\ &= \int_0^\infty w^2 f(w, t) dw - 2\langle w \rangle_F \int_0^\infty wf(w, t) dw + \langle w \rangle_F^2 \int_0^\infty f(w, t) dw \\ \therefore \sigma_F^2 &= \mu_F^2 - 2\langle w \rangle_F \mu_F^1 + \langle w \rangle_F^2 \mu_F^0 \end{aligned} \quad (2.118)$$

$$\begin{aligned}
\sigma_G^2 &= \int_0^\infty (w - \langle w \rangle_G)^2 g(w, t) dw = \int_0^\infty (w^2 - 2w\langle w \rangle_G + \langle w \rangle_G^2) g(w, t) dw = \\
&= \int_0^\infty w^2 g(w, t) dw - 2\langle w \rangle_G \int_0^\infty w g(w, t) dw + \langle w \rangle_G^2 \int_0^\infty g(w, t) dw \\
\therefore \sigma_G^2 &= \mu_G^2 - 2\langle w \rangle_G \mu_G^1 + \langle w \rangle_G^2 \mu_G^0
\end{aligned} \tag{2.119}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_T^2 &= \int_0^\infty (w - \langle w \rangle_T)^2 y(w, t) dw = \int_0^\infty (w^2 - 2w\langle w \rangle_T + \langle w \rangle_T^2) y(w, t) dw = \\
&= \int_0^\infty w^2 y(w, t) dw - 2\langle w \rangle_T \int_0^\infty w y(w, t) dw + \langle w \rangle_T^2 \int_0^\infty y(w, t) dw = \\
&= \mu_T^2 - 2\langle w \rangle_T \mu_T^1 + \langle w \rangle_T^2 \mu_T^0 = \\
&= \mu_T^2 - 2\langle w \rangle_T \langle w \rangle_T + \langle w \rangle_T^2 = \\
&= \mu_T^2 - 2\langle w \rangle_T^2 + \langle w \rangle_T^2 \\
\therefore \sigma_T^2 &= \mu_T^2 - \langle w \rangle_T^2
\end{aligned} \tag{2.120}$$

Neste capítulo foi obtido um sistema de equações hiperbólicas, representado pelas equações (2.92) e (2.93), as quais, juntamente com as condições iniciais e de contorno, serão resolvidas analiticamente, através de transformada de Laplace, no próximo capítulo. As expressões para cálculo dos momentos de ordens um e dois serão obtidas, para posteriormente calcular os valores de média e variância. A solução analítica obtida, bem como os valores de média e desvio padrão, serão confrontados com dados experimentais de recobrimento de sementes de soja em leito de jorro com micronutrientes e inoculante, para validação do modelo.

CAPÍTULO 3

SIMULAÇÃO DO RECOBRIMENTO DE SEMENTES DE SOJA

3.1 – Aspectos gerais

Duarte (2002) apresenta dados de massa de semente recoberta e *in natura* para amostras de 100 partículas em um processo de recobrimento de soja em leito de jorro. Foram selecionados três experimentos de Duarte (2002) para a validação do modelo proposto neste trabalho, cujos dados são apresentados no Anexo A. Nos experimentos selecionados, a variável w , do modelo proposto, foi calculada conforme a equação:

$$w = \frac{m_{sem.rec} - m_{natura}}{m_{natura}} \quad (3.1)$$

em que $m_{sem.rec}$ é a massa da semente recoberta e m_{natura} a massa da semente *in natura*.

A seguir são apresentados a solução analítica do modelo, a solução dos momentos, uma comparação do modelo com dados experimentais e alguns testes da solução analítica.

3.2 – Solução analítica do modelo reduzido por Transformadas de Laplace

As equações (2.92) e (2.93) apresentadas na forma adimensional representam o sistema de equações do modelo e são reescritas a seguir, juntamente com as equações (2.94) a (2.96), que representam as condições iniciais e de contorno:

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} = -(f - Bg) \quad (2.92)$$

$$\frac{\partial g}{\partial \tau} + \frac{\partial g}{\partial x} = f - Bg \quad (2.93)$$

$$f(x, 0) = (1 - \alpha)\delta(x); \quad x > 0 \quad (2.94)$$

$$g(x, 0) = \alpha\delta(x); \quad x > 0 \quad (2.95)$$

$$g(0, \tau) = 0; \quad \tau > 0 \quad (2.96)$$

Aplicando-se a transformada de Laplace às Equações (2.92) e (2.93):

$$sF - f(x, 0) = BG - F \quad (3.2)$$

$$sG - g(x, 0) + \frac{\partial G}{\partial x} = -(BG - F) \quad (3.3)$$

em que $F = F(x, s) = \mathcal{L}[f(x, \tau)]$ e $G = G(x, s) = \mathcal{L}[g(x, \tau)]$.

Substituindo a Equação (2.94) na Equação (3.2) e rearranjando:

$$F = \frac{B}{s+1} G + \frac{(1-\alpha)}{s+1} \delta(x) \quad (3.4)$$

Substituindo as Equações (2.95) e (3.4) na Equação (3.3) e rearranjando:

$$\frac{dG}{dx} + \beta G = \frac{\alpha\beta}{s} \delta(x) \quad (3.5)$$

sendo:

$$\beta = \left(s + \frac{sB}{s+1} \right) \quad (3.6)$$

e, de acordo com a definição de β , $\frac{\alpha\beta}{s} = \frac{\alpha s + 1}{s + 1}$, o que pode ser provado como segue:

$$\begin{aligned} \frac{\alpha\beta}{s} &= \frac{\alpha}{s} \cdot \left(s + \frac{sB}{s+1} \right) = \frac{\alpha}{s} \cdot \frac{s(s+1+B)}{s+1} = \\ &= \frac{\alpha \left(s+1 + \frac{1-\alpha}{\alpha} \right)}{s+1} = \frac{\alpha s + \alpha + 1 - \alpha}{s+1} \\ &\therefore \frac{\alpha\beta}{s} = \frac{\alpha s + 1}{s+1} \end{aligned}$$

A solução geral para a Equação (3.5) no domínio de Laplace é dada por:

$$G(x, s) = e^{-\beta x} \left[\frac{\alpha\beta}{s} H(x) + K \right] \quad (3.7)$$

sendo $H(x)$ a função Heaviside e K uma constante.

Verificando a solução:

$$\frac{\partial G}{\partial x} = -\beta e^{-\beta x} \left[\frac{\alpha\beta}{s} H(x) + K \right] + \frac{\alpha\beta}{s} e^{-\beta x} \delta(x) \quad (3.8)$$

Substituindo as Equações (3.7) e (3.8) na Equação (3.5), chega-se a:

$$\frac{\alpha\beta}{s} e^{-\beta x} \delta(x) = \frac{\alpha\beta}{s} \delta(x) \quad (3.9)$$

Portanto, a Equação (3.7) é solução da Equação (3.5) para qualquer valor da constante K . Arbitrando-se o valor de K como sendo igual a zero a solução é agora dada por:

$$G(x, s) = e^{-\beta x} \frac{\alpha \beta}{s} H(x) \quad (3.10)$$

Então, substituindo a Equação (3.10) na Equação (3.4) e simplificando pela substituição do valor de β no termo do numerador chega-se à equação:

$$F(x, s) = (1 - \alpha) e^{-\beta x} H(x) \left[\frac{1}{s+1} + \frac{B}{(s+1)^2} \right] + \frac{(1 - \alpha)}{s+1} \delta(x) \quad (3.11)$$

Pode-se agora fazer o retorno das expressões de f e g do domínio de Laplace para o domínio original. Primeiramente, a fim de facilitar o retorno, faz-se:

$$q = s + 1 \quad (3.12)$$

Com isso, β pode ser dado por:

$$\beta = (B - 1) + q - \frac{B}{q} \quad (3.13)$$

portanto

$$e^{-\beta x} = e^{-(B-1)x} e^{-qx} e^{\frac{Bx}{q}} \quad (3.14)$$

Aplicando a transformada inversa à Equação (3.10) e efetuando as simplificações necessárias com a utilização das definições acima se chega à equação:

$$g(x, \tau) = \alpha e^{-Bx} H(x) \left\{ \mathcal{L}^{-1} \left[e^{-xs} e^{\frac{Bx}{s+1}} \right] + B \mathcal{L}^{-1} \left[e^{-xs} \frac{e^{\frac{Bx}{s+1}}}{s+1} \right] \right\} \quad (3.15)$$

A respeito de transformadas de Laplace faz-se necessário a utilização de uma propriedade, a saber:

$$\mathcal{L}^{-1} \left[e^{-as} F(s) \right] = f(t-a) H(t-a) \quad (3.16)$$

Fazendo as transformadas inversas:

$$\mathcal{L}^{-1} \left[e^{\frac{Bx}{s+1}} \right] = e^{-\tau} \left[\sqrt{\frac{Bx}{\tau}} I_1(2\sqrt{Bx\tau}) + \delta(\tau) \right] \quad (3.17)$$

$$\mathcal{L}^{-1} \left[\frac{e^{\frac{Bx}{s+1}}}{s+1} \right] = e^{-\tau} I_0(2\sqrt{Bx\tau}) \quad (3.18)$$

em que I_0 e I_1 são funções de Bessel modificadas de primeiro tipo.

Aplicando a propriedade dada pela Equação (3.16) às Equações (3.17) e (3.18), substituindo as equações resultantes na Equação (3.15) chega-se a:

$$g(x, \tau) = \alpha e^{-Bx-z} H(x) H(z) \left[\sqrt{\frac{Bx}{z}} I_1(2\sqrt{Bxz}) + \delta(z) + B I_0(2\sqrt{Bxz}) \right] \quad (3.19)$$

em que:

$$z = \tau - x \quad (3.20)$$

Aplicando a transformada inversa à Equação (3.11) e efetuando as simplificações necessárias com a utilização da Equação (3.14), chega-se à equação:

$$f(x, \tau) = (1-\alpha) \left\{ e^{-Bx} H(x) \mathcal{L}^{-1} \left\{ \left[e^{-xs} \frac{e^{\frac{Bx}{s+1}}}{s+1} \right] + B \mathcal{L}^{-1} \left[e^{-xs} \frac{e^{\frac{Bx}{(s+1)^2}}}{(s+1)^2} \right] \right\} + \delta(x) \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{1}{s+1} \right] \right\} \quad (3.21)$$

Sabe-se que:

$$\mathcal{L}^{-1} \left[\frac{e^{\frac{Bx}{s+1}}}{(s+1)^2} \right] = e^{-\tau} \sqrt{\frac{\tau}{Bx}} I_1(2\sqrt{Bx\tau}) \quad (3.22)$$

Aplicando a propriedade dada pela Equação (3.16) às Equações (3.18) e (3.22), substituindo as equações resultantes na Equação (3.21) chega-se à equação:

$$f(x, \tau) = (1-\alpha) \left\{ e^{-Bx-z} H(x) H(z) \left[I_0(2\sqrt{Bxz}) + B \sqrt{\frac{z}{Bx}} I_1(2\sqrt{Bxz}) \right] + \delta(x) e^{-\tau} \right\} \quad (3.23)$$

A função de distribuição para toda a população do leito é dada por:

$$y(x, \tau) = f(x, \tau) + g(x, \tau) \quad (3.24)$$

Definindo-se:

$$p = \sqrt{Bxz} \quad (3.25)$$

substituindo-se as Equações (3.19) e (3.23) na Equação (3.25) e utilizando a definição dada pela Equação (3.24), obtém-se a equação:

$$\begin{aligned}
y(x, \tau) = e^{-\frac{p^2}{z}\tau} H(x) H(z) & \left\{ \alpha \left[\frac{p}{z} I_1(2p) + B I_0(2p) + \delta(z) \right] + \right. \\
& \left. + (1-\alpha) \left[B \frac{z}{p} I_1(2p) + I_0(2p) \right] \right\} + (1-\alpha) \delta(x) e^{-\tau}
\end{aligned} \quad (3.26)$$

que é a solução analítica do modelo para toda a população de partículas no leito.

Nesta equação, função Heaviside é definida tal que:

$$H(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0 \\ 1/2 & \text{se } x = 0 \\ 1 & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (3.27)$$

Logo,

$$H(z) = H(\tau - x) = \begin{cases} 0 & \text{se } \tau < x \\ 1/2 & \text{se } \tau = x \\ 1 & \text{se } \tau > x \end{cases} \quad (3.28)$$

A função delta de Dirac é definida por:

$$\delta(w) = \begin{cases} \infty & \text{se } w = 0 \\ 0 & \text{outros casos} \end{cases} \quad (3.29)$$

tal que

$$\delta(z) = \delta(\tau - x) = \begin{cases} \infty & \text{se } \tau = x \\ 0 & \text{outros casos} \end{cases} \quad (3.30)$$

Retornando as $f(x, \tau)$, $g(x, \tau)$ e $y(x, \tau)$ para as variáveis originais em função de w e t :

$$\begin{aligned}
f(w, t) = \frac{a}{rB} (1-\alpha) \exp \left[\frac{(2\alpha-1)wa - art}{r(1-\alpha)} \right] & \left\{ B \sqrt{\frac{rt - \alpha w}{w(1-\alpha)}} I_1 \left[2 \sqrt{\frac{wa^2(rt - \alpha w)}{r^2(1-\alpha)}} \right] + \right. \\
& \left. + I_0 \left[2 \sqrt{\frac{wa^2(rt - \alpha w)}{r^2(1-\alpha)}} \right] \right\}
\end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned}
g(w, t) = \frac{a}{rB} \alpha \exp \left[\frac{(2\alpha-1)wa - art}{r(1-\alpha)} \right] & \left\{ \sqrt{\frac{w(1-\alpha)}{rt - \alpha w}} I_1 \left[2 \sqrt{\frac{wa^2(rt - \alpha w)}{r^2(1-\alpha)}} \right] + \right. \\
& \left. + B I_0 \left[2 \sqrt{\frac{wa^2(rt - \alpha w)}{r^2(1-\alpha)}} \right] \right\}
\end{aligned} \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned}
y(w, t) = & \frac{a}{rB} \exp \left[\frac{(2\alpha - 1)wa - art}{r(1 - \alpha)} \right] \left\{ (1 - \alpha) \left\{ B \sqrt{\frac{rt - \alpha w}{w(1 - \alpha)}} I_1 \left[2 \sqrt{\frac{wa^2(rt - \alpha w)}{r^2(1 - \alpha)}} \right] + \right. \right. \\
& + I_0 \left[2 \sqrt{\frac{wa^2(rt - \alpha w)}{r^2(1 - \alpha)}} \right] \left. \right\} + \alpha \left\{ \sqrt{\frac{w(1 - \alpha)}{rt - \alpha w}} I_1 \left[2 \sqrt{\frac{wa^2(rt - \alpha w)}{r^2(1 - \alpha)}} \right] + \right. \\
& \left. \left. + BI_0 \left[2 \sqrt{\frac{wa^2(rt - \alpha w)}{r^2(1 - \alpha)}} \right] \right\} \right\} \quad (3.33)
\end{aligned}$$

que é a solução analítica do modelo para toda a população de partículas do leito, nas variáveis originais, considerando $a > 0$, $r > 0$, $t > 0$, $w > 0$ e $0 < \alpha < 1$.

3.3 – Solução analítica das equações de Momentos

Para obter a expressão para o i -ésimo momento da função de densidade populacional (PDF), a Equação (2.92) é multiplicada por x^i e integrada de zero a infinito, obtendo-se a equação:

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty x^i \frac{\partial f}{\partial \tau} dx &= - \int_0^\infty x^i f dx + B \int_0^\infty x^i g dx \\
\therefore \frac{\partial}{\partial \tau} \int_0^\infty x^i f dx &= - \int_0^\infty x^i f dx + B \int_0^\infty x^i g dx \quad (3.34)
\end{aligned}$$

Pela definição de momento de ordem i de uma função, tem-se que:

$$\mu_F^i = \int_0^\infty x^i f(x, \tau) dx \quad (3.35)$$

$$\mu_G^i = \int_0^\infty x^i g(x, \tau) dx \quad (3.36)$$

Assim, a Equação (3.34) se reduz a:

$$\frac{\partial \mu_F^i}{\partial \tau} = -(\mu_F^i - B\mu_G^i) \quad (3.37)$$

Fazendo o mesmo procedimento para a Equação (2.93), tem-se:

$$\int_0^\infty x^i \frac{\partial g}{\partial \tau} dx + \int_0^\infty x^i \frac{\partial g}{\partial x} dx = \int_0^\infty x^i f dx - B \int_0^\infty x^i g dx \quad (3.38)$$

Sabe-se que:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}(gx^i) &= x^i \frac{\partial g}{\partial x} + ix^{i-1}g \\ \therefore x^i \frac{\partial g}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x}(gx^i) - ix^{i-1}g\end{aligned}\quad (3.39)$$

Substituindo a Equação (3.39) na Equação (3.38), obtém-se:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \tau} \int_0^\infty x^i g dx + \int_0^\infty \left[\frac{\partial}{\partial x}(gx^i) - ix^{i-1}g \right] dx &= \int_0^\infty x^i f dx - B \int_0^\infty x^i g dx \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial \tau} \int_0^\infty x^i g dx + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^\infty gx^i dx - i \int_0^\infty x^{i-1} g dx &= \int_0^\infty x^i f dx - B \int_0^\infty x^i g dx\end{aligned}\quad (3.40)$$

Substituindo as Equações (3.35) e (3.36), a Equação (3.40) se reduz à equação:

$$\frac{\partial \mu_G^i}{\partial \tau} - i\mu_G^{i-1} + \frac{\partial \mu_G^i}{\partial x} = \mu_F^i - B\mu_G^i \quad (3.41)$$

Como μ_G^i não varia com x , o termo $\frac{\partial \mu_G^i}{\partial x}$ é igual a zero; logo:

$$\frac{\partial \mu_G^i}{\partial \tau} - i\mu_G^{i-1} = \mu_F^i - B\mu_G^i \quad (3.42)$$

Aplicando a Equação (3.35) à condição inicial dada pela Equação (2.94), chega-se à seguinte equação:

$$\begin{aligned}\mu_F^i &= \int_0^\infty x^i f(x, 0) dx = \int_0^\infty x^i (1 - \alpha) \delta(x) dx \\ \therefore \mu_F^i &= (1 - \alpha) \int_0^\infty x^i \delta(x) dx\end{aligned}\quad (3.43)$$

Da Equação (3.43) conclui-se que:

$$\mu_F^i = \begin{cases} 1 - \alpha & \text{se } i = 0 \\ 0 & \text{se } i \neq 0 \end{cases} \quad \text{para } \tau = 0 \quad (3.44)$$

Aplicando a Equação (3.36) à condição inicial dada pela Equação (2.95):

$$\begin{aligned}\mu_G^i &= \int_0^\infty x^i g(x, 0) dx = \int_0^\infty x^i \alpha \delta(x) dx \\ \therefore \mu_G^i &= \alpha \int_0^\infty x^i \delta(x) dx\end{aligned}\quad (3.45)$$

Da Equação (3.45) conclui-se que:

$$\mu_G^i = \begin{cases} \alpha & \text{se } i = 0 \\ 0 & \text{se } i \neq 0 \end{cases} \quad \text{para } \tau = 0 \quad (3.46)$$

Para $i = 1$, que corresponde ao momento de ordem 1, a Equação (3.37) é representada por:

$$\frac{\partial \mu_F^1}{\partial \tau} = -(\mu_F^1 - B\mu_G^1) \quad (3.47)$$

e a Equação (3.42) é dada por:

$$\frac{\partial \mu_G^1}{\partial \tau} = \mu_F^1 - B\mu_G^1 - \mu_G^0 \quad (3.48)$$

Substituindo a Equação (2.110) na Equação (3.48) chega-se ao sistema de equações diferenciais ordinárias, heterogêneo e com coeficientes constantes, representado por:

$$\begin{cases} \frac{\partial \mu_F^1}{\partial \tau} = -(\mu_F^1 - B\mu_G^1) \\ \frac{\partial \mu_G^1}{\partial \tau} = \mu_F^1 - B\mu_G^1 + \alpha \end{cases} \quad (3.49)$$

A fim de simplificar a representação, o termo μ_F^1 será substituído por ψ_1 e o termo μ_G^1 será substituído por ψ_2 . Assim, o sistema é dado por:

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi_1}{\partial \tau} = -(\psi_1 - B\psi_2) \\ \frac{\partial \psi_2}{\partial \tau} = (\psi_1 - B\psi_2) + \alpha \end{cases} \quad (3.50)$$

Ou pela equação:

$$\psi' = D(\tau) \cdot \psi + j(\tau) \quad (3.51)$$

em que $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$, $D = \begin{pmatrix} -1 & B \\ 1 & -B \end{pmatrix}$ e $j(\tau) = \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha \end{pmatrix}$.

O primeiro passo para a solução é resolver o sistema homogêneo dado pela equação:

$$\psi_h' = D \cdot \psi_h \quad (3.52)$$

em que $\psi_h = \begin{pmatrix} \psi_{h1} \\ \psi_{h2} \end{pmatrix} \cdot (c_1 \quad c_2)$.

A solução a ser encontrada é do tipo $\psi_h = ke^{\lambda \tau}$ e para isso deve-se resolver o problema de valor característico dado por:

$$\det(D - \lambda I) = 0 \quad (3.53)$$

A solução da Equação (3.53) leva aos seguintes valores característicos: $\lambda_1 = 0$ e $\lambda_2 = -(B+1)$. Com esses valores característicos, encontra-se a solução do problema homogêneo dada a seguir:

$$\psi_h = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1/B \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{-\tau/\alpha} \quad (3.54)$$

Encontrando agora a solução particular: $\psi_p = \Psi \int \Psi^{-1} j(\tau) d\tau$; na qual $\Psi = (\psi_{h1} \ \psi_{h2})$.

Assim:

$$\psi_p = \frac{\alpha}{(1+1/B)} \begin{pmatrix} \tau - \alpha \\ \tau/B + \alpha \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

A solução completa é dada por $\psi = \psi_h + \psi_p$. Assim:

$$\psi = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1/B \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{-\tau/\alpha} + \frac{\alpha}{(1+1/B)} \begin{pmatrix} \tau - \alpha \\ \tau/B + \alpha \end{pmatrix} \quad (3.56)$$

Utilizando as Equações (3.44) e (3.46) na Equação (3.56), encontram-se os valores de c_1 e c_2 . Após rearranjar e retornando às variáveis originais, encontra-se que:

$$\mu_F^1 = B\alpha^3 (e^{-\tau/\alpha} + \tau/\alpha - 1) \quad (3.57)$$

$$\mu_G^1 = -B\alpha^3 (e^{-\tau/\alpha} - \tau/B\alpha - 1) \quad (3.58)$$

Da Equação (2.108) tem-se que:

$$\mu_T^1 = \langle x \rangle_T = \alpha\tau \quad (3.59)$$

Para $i = 2$, que corresponde ao momento de ordem 2, a Equação (3.37) é dada por:

$$\frac{\partial \mu_F^2}{\partial \tau} = -(\mu_F^2 - B\mu_G^2) \quad (3.60)$$

e a Equação (3.42) é representada pela equação:

$$\frac{\partial \mu_G^2}{\partial \tau} = \mu_F^2 - B\mu_G^2 + 2\mu_G^1 \quad (3.61)$$

Substituindo a Equação (3.58) na Equação (3.61) chega-se ao sistema de equações diferenciais ordinárias, heterogêneo e com coeficientes constantes, representado por:

$$\begin{cases} \frac{\partial \mu_F^2}{\partial \tau} = -(\mu_F^2 - B\mu_G^2) \\ \frac{\partial \mu_G^2}{\partial \tau} = \mu_F^2 - B\mu_G^2 + 2[-B\alpha^3(e^{-\tau/\alpha} - \tau/B\alpha - 1)] \end{cases} \quad (3.62)$$

A fim de simplificar a representação, o termo μ_F^2 será substituído por ψ_3 e o termo μ_G^2 será substituído por ψ_4 . Assim, o sistema é dado por:

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi_3}{\partial \tau} = -(\psi_3 - B\psi_4) \\ \frac{\partial \psi_4}{\partial \tau} = (\psi_3 - B\psi_4) + 2[-B\alpha^3(e^{-\tau/\alpha} - \tau/B\alpha - 1)] \end{cases} \quad (3.63)$$

A solução do problema homogêneo dada por:

$$\psi_h = c_3 \begin{pmatrix} 1 \\ 1/B \end{pmatrix} + c_4 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{-\tau/\alpha} \quad (3.64)$$

Encontrando agora a solução particular: $\psi_p = \Psi \int \Psi^{-1} j(\tau) d\tau$; na qual $\Psi = (\psi_{h3} \quad \psi_{h4})$.

Assim:

$$\psi_p = 2B\alpha^4 \begin{bmatrix} e^{-\tau/\alpha} (1 - \alpha + \tau/\alpha - \tau) + \tau \left(\frac{\tau}{2\alpha} + 1/\alpha - 2 \right) + 2\alpha - 1 \\ e^{-\tau/\alpha} (\alpha - \tau/\alpha + \tau) + \tau \left(\frac{\tau}{2(1-\alpha)} + 2 \right) - 2\alpha + 1 \end{bmatrix} \quad (3.65)$$

A solução completa é dada por $\psi = \psi_h + \psi_p$. Assim:

$$\begin{aligned} \psi = c_3 \begin{pmatrix} 1 \\ 1/B \end{pmatrix} + c_4 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{-\tau/\alpha} + \\ + 2B\alpha^4 \begin{bmatrix} e^{-\tau/\alpha} (1 - \alpha + \tau/\alpha - \tau) + \tau \left(\frac{\tau}{2\alpha} + 1/\alpha - 2 \right) + 2\alpha - 1 \\ e^{-\tau/\alpha} (\alpha - \tau/\alpha + \tau) + \tau \left(\frac{\tau}{2(1-\alpha)} + 2 \right) - 2\alpha + 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.66)$$

Utilizando as Equações (3.44) e (3.46) na Equação (3.66), encontram-se os valores de c_1 e c_2 . Após rearranjar e retornando às variáveis originais, encontra-se que:

$$\mu_F^2 = B\alpha^4 \left[e^{-\tau/\alpha} \left(4 - 5\alpha + \frac{2\tau}{\alpha} - 2\tau \right) + \tau \left(\frac{\tau + 2}{\alpha} - 4 \right) + 6\alpha - 4 \right] \quad (3.67)$$

$$\mu_G^2 = B\alpha^4 \left[e^{-\tau/\alpha} \left(-2 + 5\alpha - \frac{2\tau}{\alpha} + 2\tau \right) + \tau \left(\frac{\tau}{1-\alpha} + 4 \right) - 6\alpha + 2 \right] \quad (3.68)$$

Da Equação (2.108) tem-se que:

$$\mu_T^2 = \alpha^2 \tau^2 + 2B\alpha^4 \left(e^{-\tau/\alpha} + \frac{\tau}{\alpha} - 1 \right) \quad (3.69)$$

A variância total é dada pelo momento de ordem dois em relação à média, conforme a seguinte equação:

$$\sigma_T^2 = \int_0^\infty (x - \langle x \rangle_T)^2 y(x, \tau) dx \Rightarrow \sigma_T^2 = \mu_T^2 - \langle x \rangle_T^2$$

$$\sigma_T^2 = 2B\alpha^4 \left(e^{-\tau/\alpha} + \frac{\tau}{\alpha} - 1 \right) \quad (3.70)$$

Da Equação (2.91) tem-se que:

$$\frac{w}{x} = \frac{rB}{a} \quad (3.71)$$

Substituindo a Equação (2.90) na Equação (3.57) e multiplicando pela Equação (3.71), obtém-se a expressão para o momento de ordem 1 na variável w . Utilizando-se a Equação (2.112) e lembrando que B é dado pela Equação (2.46), chega-se à expressão para a média no domínio $\mathbf{F}$:

$$\langle w \rangle_F = \frac{\alpha(1-\alpha)r}{a} \left[e^{\frac{-at}{\alpha(1-\alpha)}} + \frac{at}{\alpha(1-\alpha)} - 1 \right] \quad (3.72)$$

Substituindo a Equação (2.90) na Equação (3.58) e multiplicando pela Equação (3.71), obtém-se a expressão para o momento de ordem 1 na variável w . Utilizando-se a Equação (2.113) e utilizando-se a expressão para o cálculo de B , chega-se à expressão para a média no domínio $\mathbf{G}$:

$$\langle w \rangle_G = -\frac{(1-\alpha)^2 r}{a} \left[e^{\frac{-at}{\alpha(1-\alpha)}} + \frac{at}{(1-\alpha)^2} - 1 \right] \quad (3.73)$$

Substituindo a Equação (2.90) na Equação (3.59) e multiplicando pela Equação (3.71), chega-se à expressão para a média total na variável w :

$$\langle w \rangle_T = rt \quad (3.74)$$

Substituindo a Equação (2.90) na Equação (3.67) e multiplicando pelo quadrado da Equação (3.71), chega-se à expressão para o momento de ordem 2 na variável w para o domínio

F. Utilizando-se a Equação (2.118) e as definições de momento de ordem zero e um, chega-se à expressão para o cálculo da variância no domínio **F**:

$$\sigma_F^2 = -\frac{r^2}{a^2} \left[e^{\frac{-2at}{\alpha(1-\alpha)}} (\alpha^2 + 3\alpha^4 - 3\alpha^3 - \alpha^5) + e^{\frac{-at}{\alpha(1-\alpha)}} (-4\alpha - 2at - 3\alpha^5 + 15\alpha^2 - 21\alpha^3 + \right. \\ \left. + 13\alpha^4 - 10ata^2 + 4ata^3 + 8ata\alpha) + 4\alpha + 27\alpha^3 - 17\alpha^2 - 6ata^2 - 19\alpha^4 + 5\alpha^5 + \right. \\ \left. + 6ata\alpha - 2at + 2ata^3 \right] \quad (3.75)$$

Substituindo a Equação (2.90) na Equação (3.68) e multiplicando pelo quadrado da Equação (3.71), chega-se à expressão para o momento de ordem 2 na variável w para o domínio **G**. Utilizando-se a Equação (2.119) e as definições de momento de ordem zero e um, chega-se à expressão para o cálculo da variância no domínio **G**:

$$\sigma_G^2 = -\frac{(1-\alpha)r^2}{a^2} \left[e^{\frac{-2at}{\alpha(1-\alpha)}} (-\alpha^4 + \alpha + 3\alpha^3 - 3\alpha^2) + e^{\frac{-at}{\alpha(1-\alpha)}} (6\alpha^3 - 3\alpha^4 + \right. \\ \left. - 6ata\alpha + 4ata^2 - 3\alpha^2 + 2at) - 2ata\alpha + 5\alpha^4 + 2ata^2 + 7\alpha^2 - 11\alpha^3 - \alpha \right] \quad (3.76)$$

Substituindo a Equação (2.90) na Equação (3.70) e multiplicando pelo quadrado da Equação (3.71), chega-se a:

$$\sigma_{T_w}^2 = \frac{2(1-\alpha)^3 r^2 \alpha}{a^2} \left[e^{\frac{-at}{\alpha(1-\alpha)}} + \frac{at}{\alpha(1-\alpha)} - 1 \right] \quad (3.77)$$

que é a expressão para o cálculo da variância total nas variáveis originais.

3.4 – Avaliação da solução analítica proposta por Wnukowski e Setterwall (1989)

Somando-se as Equações (2.92) e (2.93) chega-se à seguinte equação:

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} + \frac{\partial g}{\partial \tau} + \frac{\partial g}{\partial x} = 0 \quad (3.78)$$

Portanto, para que uma solução seja verdadeira, a Equação (3.78) deve ser satisfeita.

Wnukowski e Setterwall (1989) apresentaram a seguinte solução para o mesmo sistema de equações objeto deste estudo, aplicado na modelagem de recobrimento de partículas em leito fluidizado, válido para o intervalo $0 < x < \tau$:

$$f(x, \tau) = (1-\alpha) e^{-Bx-z} \left[B \sqrt{\frac{Bx}{z}} I_1(2\sqrt{Bxz}) + I_0(2\sqrt{Bxz}) \right] \quad (3.79)$$

$$g(x, \tau) = \alpha e^{-Bx-z} \left[\sqrt{\frac{Bx}{z}} I_1(2\sqrt{Bxz}) + BI_0(2\sqrt{Bxz}) \right] \quad (3.80)$$

As Equações (3.23) e (3.19) que estabelecem a solução proposta no presente trabalho, quando restritas ao intervalo $0 < x < \tau$, fornecem as Equações (3.81) e (3.82):

$$f(x, \tau) = (1 - \alpha) e^{-Bx-z} \left[B \sqrt{\frac{z}{Bx}} I_1(2\sqrt{Bxz}) + I_0(2\sqrt{Bxz}) \right] \quad (3.81)$$

$$g(x, \tau) = \alpha e^{-Bx-z} \left[\sqrt{\frac{Bx}{z}} I_1(2\sqrt{Bxz}) + BI_0(2\sqrt{Bxz}) \right] \quad (3.82)$$

A Equação (3.82), obtida no presente estudo em nada difere da Equação (3.80), obtida por Wnukowski e Setterwall (1989). A diferença se encontra entre as Equações (3.79) e (3.81). As Equações (3.81) e (3.82) satisfazem à Equação (3.78), enquanto que para a solução de Wnukowsky e Setterwall (1989) resulta em:

$$\begin{aligned} & e^{\left(\frac{2x\alpha - x - \alpha\tau}{\alpha}\right)} \frac{1}{pz^2\alpha^2} \left[\alpha\tau^2 I_1(2p) + \alpha^3\tau^2 I_1(2p) - 2\alpha^2\tau^2 I_1(2p) - x\tau I_1(2p) + \right. \\ & + 2p\alpha^2\tau I_0(2p) - p\alpha^3\tau I_0(2p) - x\alpha^3\tau I_1(2p) - p\alpha\tau I_0(2p) + \\ & + x\alpha^2\tau I_1(2p) + x\alpha\tau I_1(2p) - xI_1(2p) + x^2 I_1(2p) + \\ & + x\alpha^3 I_1(2p) + 3x\alpha I_1(2p) - 3x\alpha^2 I_1(2p) - 2x^2\alpha I_1(2p) + \\ & \left. + px^2 I_0(2p) - 2px^2\alpha I_0(2p) + px^2\alpha^2 I_0(2p) + x^2\alpha^2 I_1(2p) \right] \end{aligned} \quad (3.83)$$

Assim, conclui-se que a solução obtida por Wnukowski e Setterwall (1989) para o sistema de equações é inconsistente, ao passo que a solução do presente trabalho é solução do sistema dado pelas Equações (2.92) e (2.93).

3.5 – Validação do modelo matemático

3.5.1 – Valores médios de x para os domínios F e G

A Figura 3.1 apresenta a variação de $\langle x \rangle_F$ e $\langle x \rangle_G$ com o tempo adimensional para três valores diferentes de α .

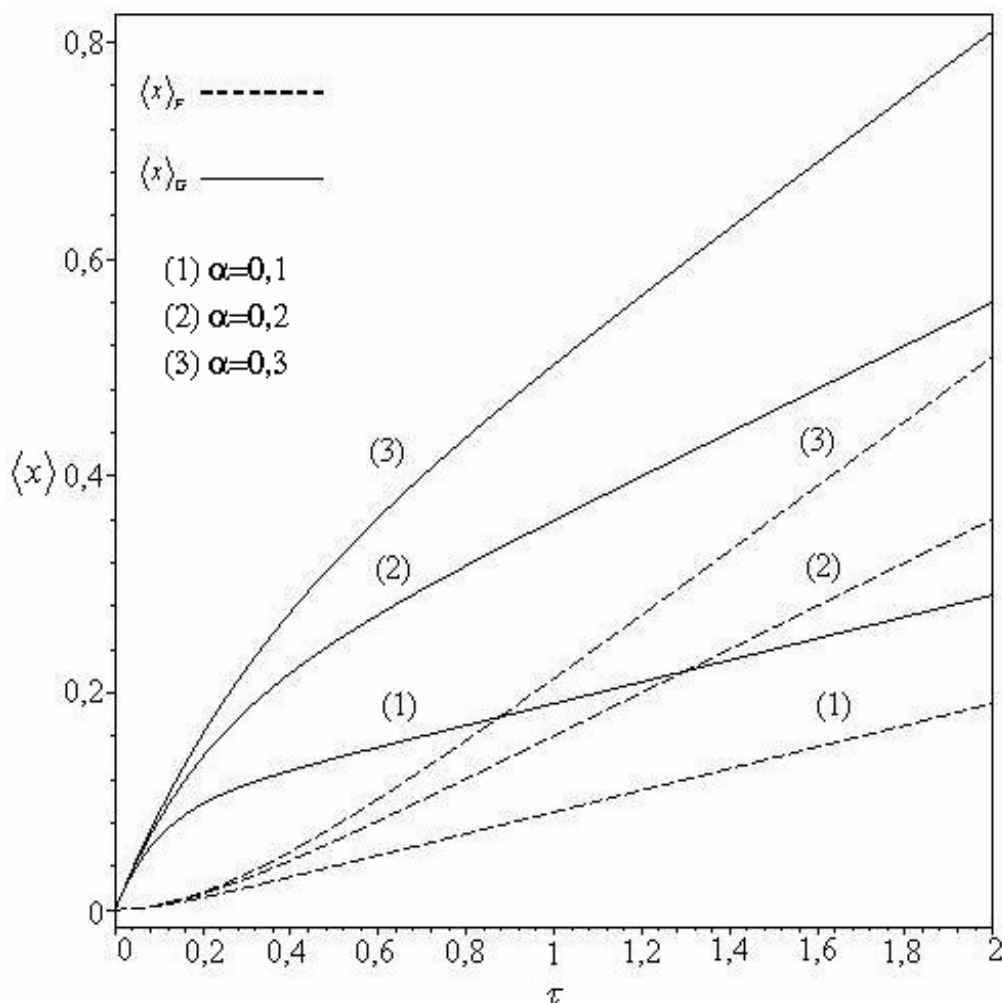


Figura 3.1 – Valores médios de x para os domínios **F** e **G** *versus* tempo adimensional τ .

Analisando a Figura 3.1, nota-se a massa de recobrimento adimensional (x) média é maior no domínio **G** em relação ao domínio **F** para os mesmos valores de α e tempo adimensional (τ); isto se deve ao fato de o domínio **G** estar recebendo a atomização de recobrimento, conferindo-lhe uma massa de recobrimento maior quando comparada à do domínio **F**. Percebe-se também que à medida que o tempo adimensional (τ) aumenta os valores de massa de recobrimento adimensional (x) média também aumentam para ambos os domínios e qualquer valor de α ; isto se explica porque quanto maior o tempo, mais recobrimento as partículas receberão. Além disso, quanto maior é o valor de α , maior o valor médio nos domínios **F** e **G**, pois, se o tamanho do domínio que recebe o recobrimento é maior (domínio **G**), haverá uma maior quantidade de partículas com uma determinada massa de recobrimento x , o que leva a um

aumento na massa média. Vale ressaltar que, no caso de recobrimento de sementes de soja com micronutrientes, as camadas muito espessas prejudicam a germinação das sementes por impedirem as trocas gasosas, enquanto as muito finas não garantem a atividade ideal da bactéria no processo de fixação de nitrogênio e podem não conter a quantidade ideal de micronutrientes.

De acordo com a Equação (2.53), não há variação de massa de recobrimento no domínio **F**, entretanto, na Figura 3.1 as curvas desse domínio têm uma inclinação. Isso se explica pelo fato de a massa média no domínio aumentar por estar ocorrendo circulação de partículas entre **F** e **G**, causando um aumento na massa média de ambos os domínios.

3.5.2 – Comparação entre a distribuição cumulativa dos dados experimentais e simulados

Para obtenção da distribuição de frequência cumulativa experimental a partir dos dados apresentados em Duarte (2002), o conjunto de 100 valores experimentais de w , disponíveis em cada ensaio, foi colocado em ordem crescente e a integração foi obtida através da aplicação da Regra dos Trapézios, considerando pequenos intervalos: $[0, w_1, w_2, w_3, \dots, w_{max}]$.

Para obtenção da distribuição de frequência cumulativa simulada a função $y(w,t)$ foi integrada de acordo com a equação:

$$Y = \int_{w_{i-1}}^{w_i} y(w,t) dw \quad (3.84)$$

Observou-se que o valor previsto pela equação de Duarte (2002) superestima a eficiência. Sendo assim, utilizou-se nesta equação um fator de correção de 0,942 para melhor adequação das simulações aos dados experimentais, e a eficiência é calculada conforme a equação a seguir:

$$\eta = 0,942(77,96 - 5,14X_1 + 1,72X_2 + 6,15X_3 - 3,6X_2^2 - 2,41X_3^2 + 2,39X_2X_3) \quad (3.85)$$

Conforme já mencionado, foram selecionados três experimentos de Duarte (2002) para validação do modelo proposto e Duarte (2006) calculou o índice de dispersão dos dados experimentais, que fornece o grau de heterogeneidade do material estudado. A Tabela 3.1 apresenta os valores de índice de dispersão dos experimentos 2, 10 e 11.

Tabela 3.1 – Índice de dispersão dos experimentos analisados.

Experimento	Índice de dispersão
2	0,000140
10	0,000100
11	0,000091

Fonte: Duarte (2006).

Portanto, entre os experimentos analisados, o experimento 2 é o que apresenta um maior grau de heterogeneidade e o experimento 11 o menor.

A Tabela 3.2 apresenta os valores obtidos por medidas diretas, de parâmetros dos experimentos de Duarte (2002), denominados por 2, 10 e 11, que foram utilizados para a validação do modelo proposto.

Tabela 3.2 – Valores de parâmetros dos experimentos utilizados na validação do modelo.

Parâmetro	Experimento 2	Experimento 10	Experimento 11
C_{SP} [g/mL]	0,13	0,13	0,13
d_p [m]	0,006	0,006	0,006
H [m]	0,15	0,15	0,15
M_T [g]	2500	2500	2500
R_c [m]	0,105	0,105	0,105
R_i [m]	0,0175	0,0175	0,0175
t [min]	20	20	20
V_{AJ} [L/s]	30,4	32,9	37,3
V_{AT} [L/h]	1900	1500	1500
V_{SP} [mL/min]	18	15	15
ε_{mf}	0,37	0,37	0,37
η_{exp}	86,40%	77,93%	57,80%

Fonte: Duarte (2002).

Valores de taxa de circulação de partículas (W) foram obtidos, para fins de comparação, pela correlação de Claflin e Fane (1984), à qual se associam W_I e a_I , e por simulação em CFD, ao

qual se associam W_2 e a_2 . Valores para tamanho do domínio de atomização (α) foram obtidos considerando dois valores da espessura e da calota que recebe a atomização da suspensão recobridora, conforme apresentado na Figura 2.4, a saber: $e_1=2d_p$, ao qual se associa α_1 , e $e_2=5d_p$, ao qual se associa α_2 . A Tabela 3.3 apresenta valores de parâmetros estimados e as respectivas formas de obtenção.

Tabela 3.3 – Parâmetros estimados e calculados para os experimentos analisados.

Parâmetro	Forma de obtenção	Experimento 2	Experimento 10	Experimento 11
a_1 [1/s]	Equação (2.74)	$2,1 \cdot 10^{-2}$	$2,22 \cdot 10^{-2}$	$2,43 \cdot 10^{-2}$
a_2 [1/s]	Equação (2.74)	$2,56 \cdot 10^{-2}$	$2,84 \cdot 10^{-2}$	$3,6 \cdot 10^{-2}$
H_f [m]	CFD	$1,04 \cdot 10^{-1}$	10^{-1}	$1,57 \cdot 10^{-1}$
r [1/s]	Equação (2.83)	$1,28 \cdot 10^{-5}$	$9,55 \cdot 10^{-6}$	$8,44 \cdot 10^{-6}$
R_b [m]	Equação (2.82)	$3,5 \cdot 10^{-2}$	$3,5 \cdot 10^{-2}$	$3,5 \cdot 10^{-2}$
W_1 [g/s]	Claflin e Fane (1984) Equação (2.73)	52,61	55,60	60,71
W_2 [g/s]	CFD	64	71	90
α_1 ($e=2d_p$)	Equação (2.81)	$1,39 \cdot 10^{-2}$	$1,34 \cdot 10^{-2}$	$2,02 \cdot 10^{-2}$
α_2 ($e=5d_p$)	Equação (2.81)	$2,21 \cdot 10^{-2}$	$2,14 \cdot 10^{-2}$	$3,3 \cdot 10^{-2}$
ε_f	CFD	$8,5 \cdot 10^{-1}$	$8,5 \cdot 10^{-1}$	$8,5 \cdot 10^{-1}$
η	Equação (3.85)	82,28%	73,44%	64,92%

Pode-se notar na Tabela 3.3 que, como o experimento 11 tem um maior valor de vazão de ar de jorro, este apresentou os maiores valores de taxa de circulação de partículas (W), tanto pela correlação de Claflin e Fane (1984), como por simulação em CFD, sendo estes maiores que os da correlação. Além disso, com uma vazão de ar de jorro mais alta, o valor de altura da fonte também é o mais alto, o que influencia diretamente os valores de tamanho do domínio de atomização (α), que foram maiores para o experimento 11.

A Tabela 3.4 apresenta a variação temporal dos valores de massa de recobrimento média e desvio padrão por domínio e para o leito todo, no experimento 2.

Tabela 3.4 – Evolução temporal da massa média e do desvio padrão para o experimento 2.

Parâmetro		Tempo			
		$t_1 = 300s$	$t_2 = 600s$	$t_3 = 900s$	$t_4 = t_f = 1200s$
a_1	α_1	$\langle w \rangle_F = 3,842 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 7,693 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 1,154 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_F = 1,539 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_G = 4,444 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 8,295 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 1,215 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_G = 1,6 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_T = 3,851 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 7,702 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 1,155 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,54 \cdot 10^{-2}$
	α_2	$\sigma_F = 2,118 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,998 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 3,674 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 4,243 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_G = 2,607 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 3,623 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 4,412 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 5,079 \cdot 10^{-4}$
		$\sigma_T = 2,135 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 3,021 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 3,701 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 4,274 \cdot 10^{-3}$
a_2	α_1	$\langle w \rangle_F = 3,838 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 7,689 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 1,154 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_F = 1,539 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_G = 4,434 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 8,285 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 1,214 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_G = 1,599 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_T = 3,851 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 7,702 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 1,155 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,54 \cdot 10^{-2}$
	α_2	$\sigma_F = 2,089 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,959 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 3,626 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 4,188 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_G = 3,258 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 4,533 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 5,521 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 6,357 \cdot 10^{-4}$
		$\sigma_T = 2,116 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,995 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 3,669 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 4,237 \cdot 10^{-3}$
a_1	α_1	$\langle w \rangle_F = 3,844 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 7,695 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 1,155 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_F = 1,54 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_G = 4,338 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 8,189 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 1,204 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_G = 1,589 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_T = 3,851 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 7,702 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 1,155 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,54 \cdot 10^{-2}$
	α_2	$\sigma_F = 1,921 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,719 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 3,331 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 3,847 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_G = 2,349 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 3,275 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 3,992 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 4,598 \cdot 10^{-4}$
		$\sigma_T = 1,936 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,739 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 3,355 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 3,875 \cdot 10^{-3}$
a_2	α_1	$\langle w \rangle_F = 3,84 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 7,691 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 1,154 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_F = 1,539 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_G = 4,33 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 8,181 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 1,203 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_G = 1,588 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_T = 3,851 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 7,702 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 1,155 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,54 \cdot 10^{-2}$
	α_2	$\sigma_F = 1,895 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,684 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 3,288 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 3,798 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_G = 2,937 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 4,097 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 4,995 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 5,755 \cdot 10^{-4}$
		$\sigma_T = 1,919 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,716 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 3,327 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 3,842 \cdot 10^{-3}$

$a_1 = 2,1 \cdot 10^{-2}$, $a_2 = 2,56 \cdot 10^{-2}$, $\alpha_1 = 1,39 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2 = 2,21 \cdot 10^{-2}$

Analisando a Tabela 3.4 pode-se notar que, conforme mencionado durante a discussão a respeito da Figura 3.1, a massa de recobrimento média é maior no domínio **G** quando comparada ao domínio **F**, independente do valor de taxa de circulação (α) e do tamanho do domínio **G** (α) e o desvio padrão é menor no domínio **G**. Nota-se também que, à medida que o tempo passa, a massa média aumenta em ambos os domínios, bem como o desvio padrão. Para um mesmo valor de taxa de circulação, a massa média nos domínios foi maior para menores valores de α , mas a massa média total ficou inalterada. Vale lembrar que, de acordo com a Equação (3.74), a massa média total é uma função apenas do tempo e da taxa de adição de massa de recobrimento, ao passo que os domínios apresentam uma dependência com o valor de α . O fato de o valor da massa média total estar mais próximo daquele do domínio **F** se explica pelo fato do valor de α ser muito pequeno, diminuindo a contribuição do domínio **G** na média final, conforme a Equação (2.117).

O desvio padrão aumenta com o tempo e é um pouco menor para um valor de α maior, para o mesmo tempo e mesma taxa de circulação. Entretanto os valores de desvio padrão se mostraram muito sensíveis à taxa de circulação, apresentando menores desvios para os dados simulados em CFD.

Na sequência, também para o experimento 2, a Tabela 3.5 apresenta uma comparação entre os dados experimentais e os dados simulados no tempo final, para valores de média e desvio padrão, bem como os desvios entre experimental e simulado.

Tabela 3.5 – Dados simulados *versus* experimentais no tempo final para o experimento 2.

Parâmetro		Experimental	Simulado	Desvio
$\alpha_I = 2,1 \cdot 10^{-2}$ [s ⁻¹]	$\alpha_I = 1,39 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,482 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,54 \cdot 10^{-2}$	3,96%
		$\sigma_T = 3,602 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 4,274 \cdot 10^{-3}$	18,64%
	$\alpha_2 = 2,21 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,482 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,54 \cdot 10^{-2}$	3,96%
		$\sigma_T = 3,602 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 4,237 \cdot 10^{-3}$	17,63%
$\alpha_2 = 2,56 \cdot 10^{-2}$ [s ⁻¹]	$\alpha_I = 1,39 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,482 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,54 \cdot 10^{-2}$	3,96%
		$\sigma_T = 3,602 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 3,875 \cdot 10^{-3}$	7,57%
	$\alpha_2 = 2,21 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,482 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,54 \cdot 10^{-2}$	3,96%
		$\sigma_T = 3,602 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 3,842 \cdot 10^{-3}$	6,65%

Na Tabela 3.5 pode-se perceber que o desvio da média entre os dados simulados e experimentais é sempre o mesmo, o que se explica pela Equação (3.74), conforme já mencionado. Já o erro do desvio padrão é menor para o maior valor de taxa de circulação, que é obtido através de simulação em CFD, e para o maior valor de α , considerando a espessura da região de recobrimento equivalente a 5 vezes o diâmetro d_p da partícula. Vale lembrar que a correlação de Claflin e Fane (1984) foi obtida para um leito de jorro com dimensões e partículas diferentes daquelas do equipamento utilizado por Duarte (2002), o que justifica um maior erro associado ao parâmetro a_1 no cálculo do desvio padrão. Os melhores resultados, quando comparados com os dados experimentais, portanto, são para a_2 e α_2 .

Pode-se notar que os valores de desvio padrão simulados foram sempre maiores, comparados aos experimentais no tempo final. Além disso, à medida que o valor de α aumenta, o desvio padrão simulado diminui e, para a_2 , se aproxima do experimental. Sob este aspecto, para o experimento 2, se o valor de α fosse ainda maior, o erro do desvio padrão simulado em relação ao experimental seria menor. Isto sugere que o valor do parâmetro α deve ser maior.

Procede-se agora à análise gráfica dos dados das Tabelas 3.4 e 3.5. As Figuras 3.2 a 3.5 apresentam uma comparação entre os dados experimentais e os simulados a partir do início do processo até o tempo final ($t=1200s$) para o experimento 2. Se os dados experimentais tivessem uma distribuição normal, poder-se-ia obter a curva cumulativa normal a partir da média e da variância dos dados, que também é apresentada para fins de comparação para os dados experimentais no tempo final. As curvas experimentais devem ser comparadas com as curvas simuladas para o tempo final, no qual os dados experimentais são coletados. As curvas simuladas são dadas para diferentes tempos para avaliação do processo de recobrimento até o tempo final e são obtidas conforme a Equação (3.84). Vale lembrar que, para esse experimento, os valores de taxa de circulação e tamanho do domínio de atomização (α) são: $a_1=2,1 \cdot 10^{-2}$, $a_2=2,56 \cdot 10^{-2}$, $\alpha_1=1,39 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2=2,21 \cdot 10^{-2}$.

Para obtenção das curvas simuladas e experimentais foi utilizado o programa Maple 8, cujo código computacional é apresentado no Apêndice A, para os dados do experimento 2.

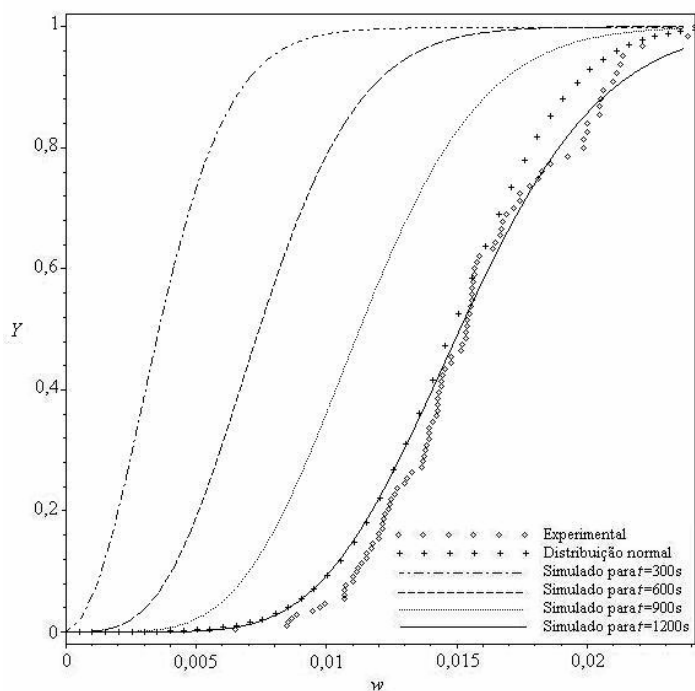


Figura 3.2 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 2 para a_1 e α_1 .

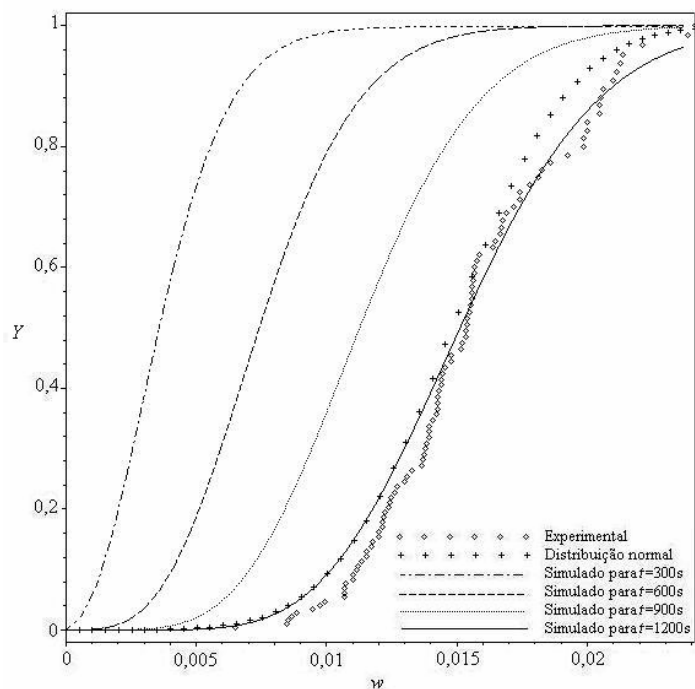


Figura 3.3 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 2 para a_1 e α_2 .

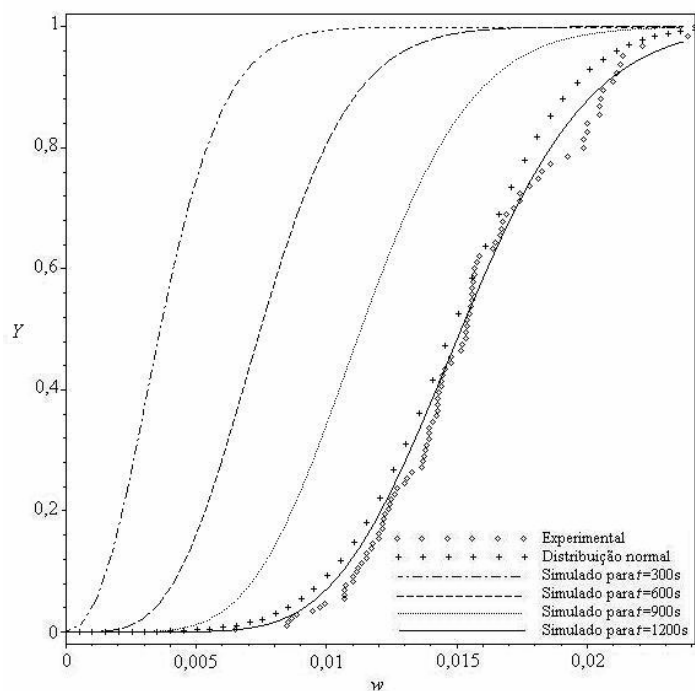


Figura 3.4 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 2 para a_2 e α_1 .

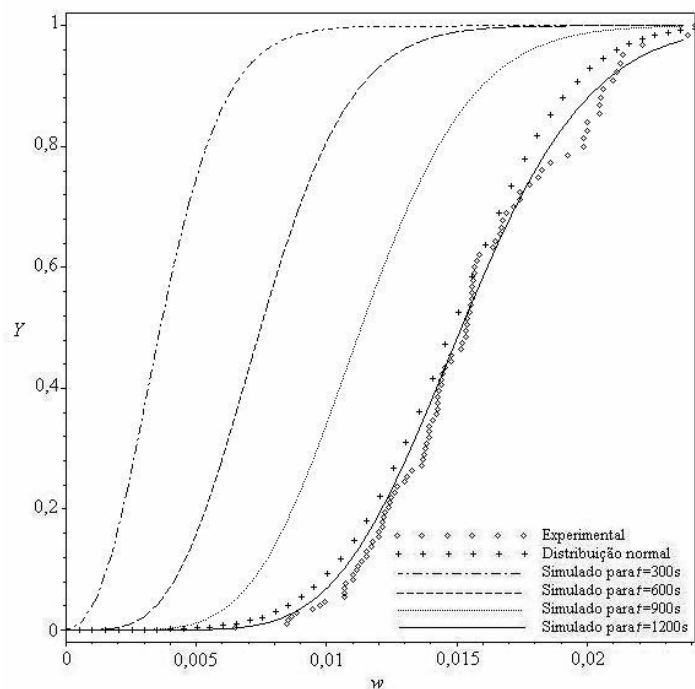


Figura 3.5 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 2 para a_2 e α_2 .

Analisando as Figuras 3.2 a 3.5 pode-se notar que os dados experimentais não são muito bem representados por uma distribuição normal. A curva que melhor se ajustou aos dados experimentais foi a da Figura 3.5 que, conforme apresentado na Tabela 3.5, apresentou o menor erro do desvio padrão para a_2 e α_2 .

A Tabela 3.6 apresenta a variação temporal dos valores de massa de recobrimento média e desvio padrão por domínio e para o leito todo, no experimento 10.

Tabela 3.6 – Evolução temporal da massa média e do desvio padrão para o experimento 10.

Parâmetro		Tempo			
		$t_1 = 300s$	$t_2 = 600s$	$t_3 = 900s$	$t_4 = t_f = 1200s$
a_1	α_1	$\langle w \rangle_F = 2,858 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 5,722 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 8,587 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 1,145 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_G = 3,282 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 6,146 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 9,01 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 1,187 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_T = 2,864 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 5,728 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 8,592 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 1,146 \cdot 10^{-2}$
	α_2	$\sigma_F = 1,568 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,269 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,837 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 3,342 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_G = 4,209 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 7,531 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 1,084 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_G = 1,414 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_T = 1,545 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,187 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,679 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 3,093 \cdot 10^{-3}$
a_2	α_1	$\langle w \rangle_F = 2,855 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 5,719 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 8,583 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 1,145 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_G = 3,275 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 6,139 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 9,003 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 1,187 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_T = 2,864 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 5,728 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 8,592 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 1,146 \cdot 10^{-2}$
	α_2	$\sigma_F = 1,569 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,297 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,905 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 3,456 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_G = 5,271 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 9,443 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 1,36 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_G = 1,774 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_T = 1,532 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,168 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,657 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 3,068 \cdot 10^{-3}$
a_1	α_1	$\langle w \rangle_F = 2,86 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 5,724 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 8,588 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 1,145 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_G = 3,191 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 6,055 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 8,919 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 1,178 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_T = 2,864 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 5,728 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 8,592 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 1,146 \cdot 10^{-2}$
	α_2	$\sigma_F = 1,397 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,031 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,553 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 3,021 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_G = 4,019 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 7,333 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 1,064 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_G = 1,394 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_T = 1,368 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 1,935 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,371 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,737 \cdot 10^{-3}$
a_2	α_1	$\langle w \rangle_F = 2,857 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 5,721 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 8,585 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 1,145 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_G = 3,186 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 6,05 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 8,914 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 1,178 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_T = 2,864 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 5,728 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 8,592 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 1,146 \cdot 10^{-2}$
	α_2	$\sigma_F = 1,402 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,07 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,636 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 3,154 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_G = 5,036 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 9,197 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 1,335 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_G = 1,749 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_T = 1,356 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 1,919 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,351 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,715 \cdot 10^{-3}$

$$a_1 = 2,22 \cdot 10^{-2}, a_2 = 2,84 \cdot 10^{-2}, \alpha_1 = 1,34 \cdot 10^{-2} \text{ e } \alpha_2 = 2,14 \cdot 10^{-2}$$

A Tabela 3.6 apresenta resultados para o experimento 10 similares àqueles para o experimento 2, na Tabela 3.4. Entretanto, os valores médios de massa de recobrimento e de desvio padrão foram menores. A Tabela 3.7 apresenta uma comparação entre os dados experimentais e os dados simulados no tempo final, para valores de média e desvio padrão, bem como os desvios entre experimental e simulado.

Tabela 3.7 – Dados simulados *versus* experimentais no tempo final para o experimento 10.

Parâmetro		Experimental	Simulado	Desvio
$a_1 = 2,22 \cdot 10^{-2}$ [s ⁻¹]	$\alpha_1 = 1,34 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,06 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,146 \cdot 10^{-2}$	8,08%
		$\sigma_T = 2,559 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 3,093 \cdot 10^{-3}$	20,89%
	$\alpha_2 = 2,14 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,06 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,146 \cdot 10^{-2}$	8,08%
		$\sigma_T = 2,559 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 3,068 \cdot 10^{-3}$	19,90%
$a_2 = 2,84 \cdot 10^{-2}$ [s ⁻¹]	$\alpha_1 = 1,34 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,06 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,146 \cdot 10^{-2}$	8,08%
		$\sigma_T = 2,559 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,737 \cdot 10^{-3}$	6,99%
	$\alpha_2 = 2,14 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,06 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,146 \cdot 10^{-2}$	8,08%
		$\sigma_T = 2,559 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,715 \cdot 10^{-3}$	6,12%

Os resultados demonstrados na Tabela 3.7, para o experimento 10 são similares aos resultados da Tabela 3.5. De igual modo, os melhores resultados, quando comparados aos dados experimentais foram para a_2 e α_2 .

Assim como no experimento 2, os valores de desvio padrão simulados foram sempre maiores, comparados aos experimentais no tempo final. Além disso, à medida que o valor de α aumenta, o desvio padrão simulado diminui e, para a_2 , se aproxima do experimental. Logo, se o valor de α fosse ainda maior, o erro do desvio padrão simulado em relação ao experimental seria menor. Isto sugere que o valor do parâmetro α para este experimento também deve ser maior.

As Figuras 3.6 a 3.9 apresentam uma comparação entre os dados experimentais e os simulados a partir do início do processo até o tempo final ($t=1200s$) para o experimento 10. Lembrando que: $a_1=2,22 \cdot 10^{-2}$, $a_2=2,84 \cdot 10^{-2}$, $\alpha_1=1,34 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2=2,14 \cdot 10^{-2}$.

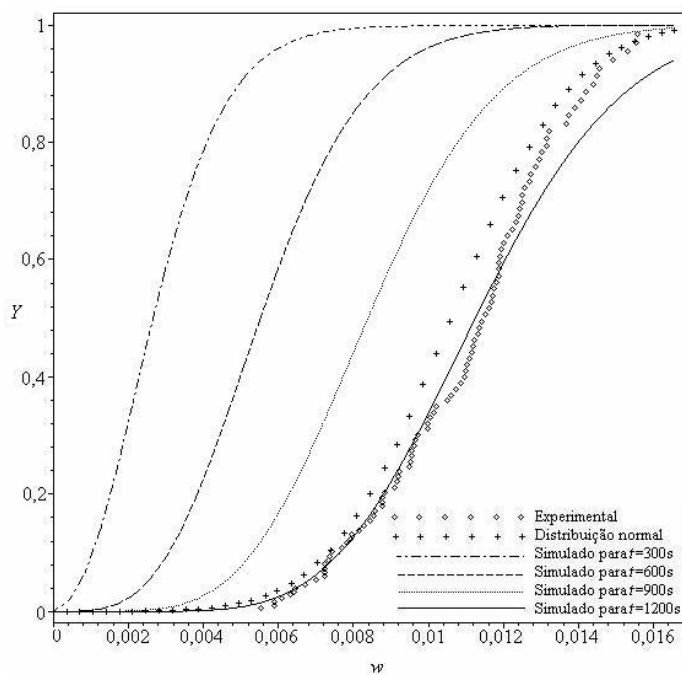


Figura 3.6 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 10 para a_1 e α_1 .

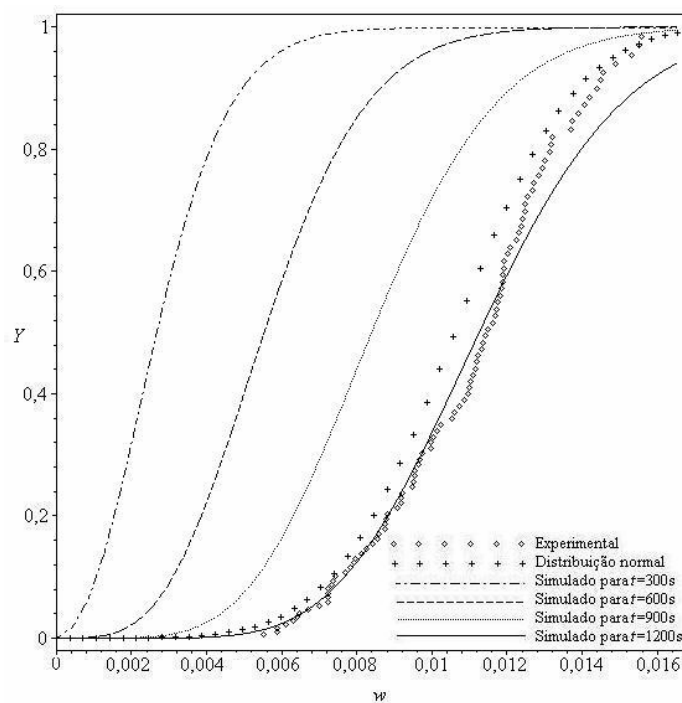


Figura 3.7 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 10 para a_1 e α_2 .

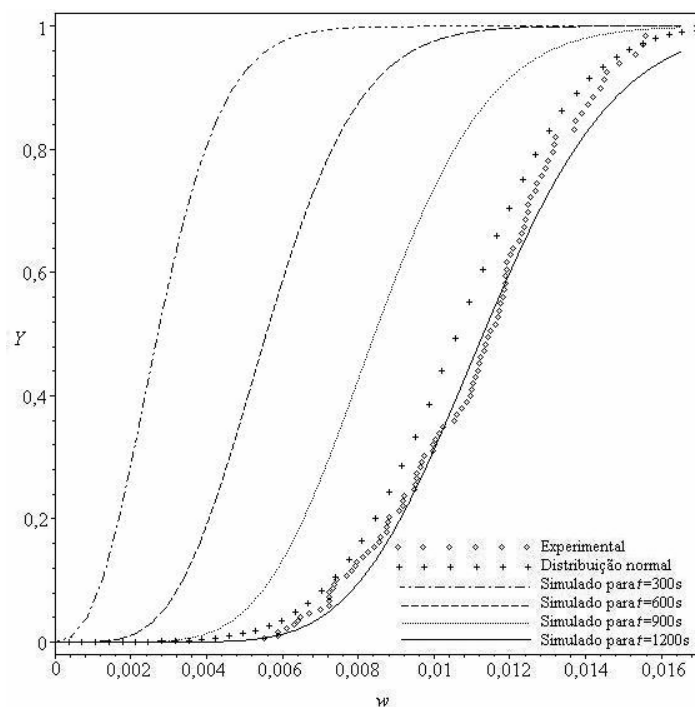


Figura 3.8 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 10 para a_2 e a_1 .

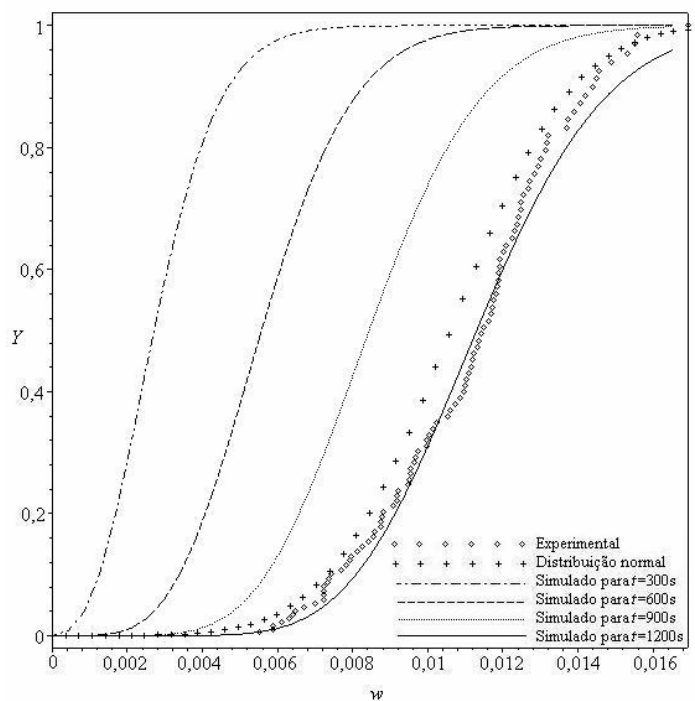


Figura 3.9 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 10 para a_2 e a_2 .

Analisando as Figuras 3.6 a 3.9 pode-se notar que os dados experimentais não são muito bem representados por uma distribuição normal. A curva que melhor se ajustou aos dados experimentais foi a da Figura 3.9 que, conforme apresentado na Tabela 3.7, apresentou o menor erro do desvio padrão para a_2 e α_2 .

A Tabela 3.8 apresenta a variação temporal dos valores de massa de recobrimento média e desvio padrão por domínio e para o leito todo, no experimento 11.

Tabela 3.8 – Evolução temporal da massa média e do desvio padrão para o experimento 11.

Parâmetro		Tempo			
		$t_1 = 300s$	$t_2 = 600s$	$t_3 = 900s$	$t_4 = t_f = 1200s$
a_1	α_1	$\langle w \rangle_F = 2,525 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 5,057 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 7,588 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 1,012 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_G = 2,865 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 5,397 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 7,929 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 1,046 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_T = 2,532 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 5,063 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 7,595 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 1,013 \cdot 10^{-2}$
	α_1	$\sigma_F = 1,331 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 1,951 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,469 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,939 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_G = 4,458 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 8,043 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 1,161 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_G = 1,518 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_T = 1,298 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 1,837 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,25 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,599 \cdot 10^{-3}$
	α_2	$\langle w \rangle_F = 2,521 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 5,052 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 7,584 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_F = 1,012 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_G = 2,857 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 5,388 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 7,92 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_G = 1,045 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_T = 2,532 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 5,063 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 7,595 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,013 \cdot 10^{-2}$
a_2	α_1	$\sigma_F = 1,334 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 1,996 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,568 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 3,102 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_G = 5,641 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 1,02 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_G = 1,473 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_G = 1,927 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_T = 1,28 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 1,812 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,22 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,564 \cdot 10^{-3}$
	α_1	$\langle w \rangle_F = 2,527 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 5,059 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 7,591 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_F = 1,012 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_G = 2,757 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 5,288 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 7,82 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_G = 1,035 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_T = 2,532 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 5,063 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 7,595 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,013 \cdot 10^{-2}$
	α_2	$\sigma_F = 1,113 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 1,654 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,118 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,547 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_G = 4,176 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 7,75 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 1,132 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_G = 1,488 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_T = 1,066 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 1,509 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 1,848 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,134 \cdot 10^{-3}$
a_2	α_2	$\langle w \rangle_F = 2,524 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 5,056 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_F = 7,588 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_F = 1,012 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_G = 2,751 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 5,283 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_G = 7,814 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_G = 1,035 \cdot 10^{-2}$
		$\langle w \rangle_T = 2,532 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 5,063 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 7,595 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 1,013 \cdot 10^{-2}$
	α_2	$\sigma_F = 1,127 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 1,72 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,248 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_F = 2,749 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_G = 5,290 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 9,831 \cdot 10^{-4}$	$\sigma_G = 1,436 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_G = 1,889 \cdot 10^{-3}$
		$\sigma_T = 1,052 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 1,489 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 1,824 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,106 \cdot 10^{-3}$

$$a_1 = 2,43 \cdot 10^{-2}, a_2 = 3,6 \cdot 10^{-2}, \alpha_1 = 2,02 \cdot 10^{-2} \text{ e } \alpha_2 = 3,3 \cdot 10^{-2}$$

A Tabela 3.8 apresenta resultados para o experimento 11 similares àqueles para os experimentos 2 e 10. Os valores médios de massa de recobrimento e de desvio padrão foram os menores dentre todos os experimentos analisados. A Tabela 3.9 apresenta uma comparação entre os dados experimentais e os dados simulados no tempo final, para valores de média e desvio padrão, bem como os desvios entre experimental e simulado.

Tabela 3.9 – Dados simulados *versus* experimentais no tempo final para o experimento 11.

Parâmetro		Experimental	Simulado	Desvio
$a_1 = 2,43 \cdot 10^{-2}$ [s ⁻¹]	$\alpha_1 = 2,02 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 9,393 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 1,013 \cdot 10^{-2}$	7,82%
		$\sigma_T = 2,178 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,599 \cdot 10^{-3}$	19,30%
	$\alpha_2 = 3,3 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 9,393 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 1,013 \cdot 10^{-2}$	7,82%
		$\sigma_T = 2,178 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,564 \cdot 10^{-3}$	17,71%
$a_2 = 3,6 \cdot 10^{-2}$ [s ⁻¹]	$\alpha_1 = 2,02 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 9,393 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 1,013 \cdot 10^{-2}$	7,82%
		$\sigma_T = 2,178 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,134 \cdot 10^{-3}$	2,01%
	$\alpha_2 = 3,3 \cdot 10^{-2}$	$\langle w \rangle_T = 9,393 \cdot 10^{-3}$	$\langle w \rangle_T = 1,013 \cdot 10^{-2}$	7,82%
		$\sigma_T = 2,178 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 2,106 \cdot 10^{-3}$	3,31%

Os resultados mostrados na Tabela 3.9, para o experimento 11 são similares aos dos outros experimentos. Entretanto, os melhores resultados, quando comparados aos dados experimentais foram para a_2 e α_1 , pois para α_2 , o desvio padrão simulado foi menor que o experimental. Este fato pode ser explicado pela influência do parâmetro α , ou seja, há um valor ótimo desse parâmetro para cada experimento.

As Figuras 3.10 a 3.13 apresentam uma comparação entre os dados experimentais e os simulados a partir do início do processo até o tempo final ($t=1200s$) para o experimento 11. Lembrando que: $a_1=2,43 \cdot 10^{-2}$, $a_2=3,6 \cdot 10^{-2}$, $\alpha_1=2,02 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_2=3,3 \cdot 10^{-2}$.

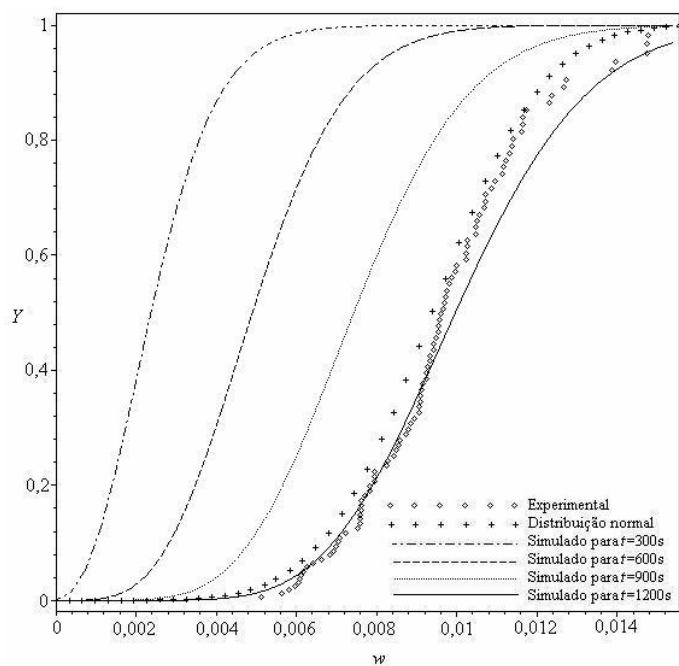


Figura 3.10 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 11 para a_1 e a_1 .

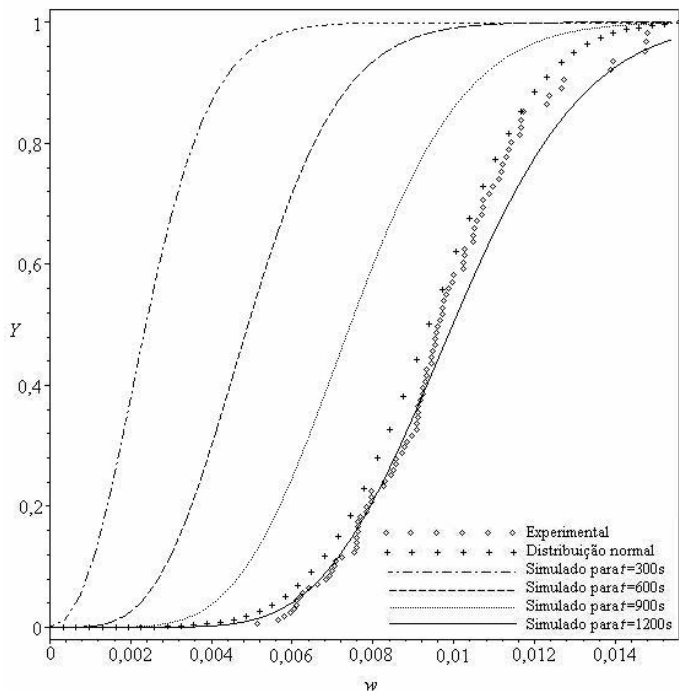


Figura 3.11 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 11 para a_1 e a_2 .

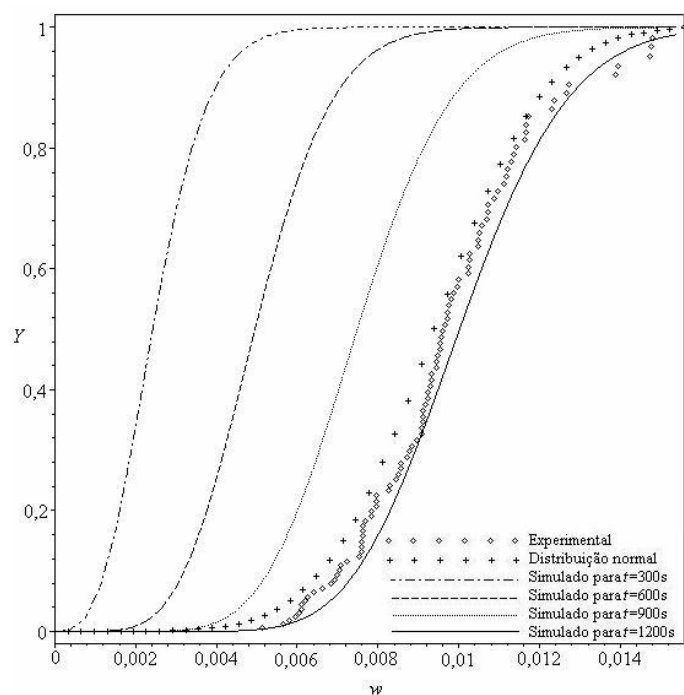


Figura 3.12 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 11 para a_2 e a_1 .

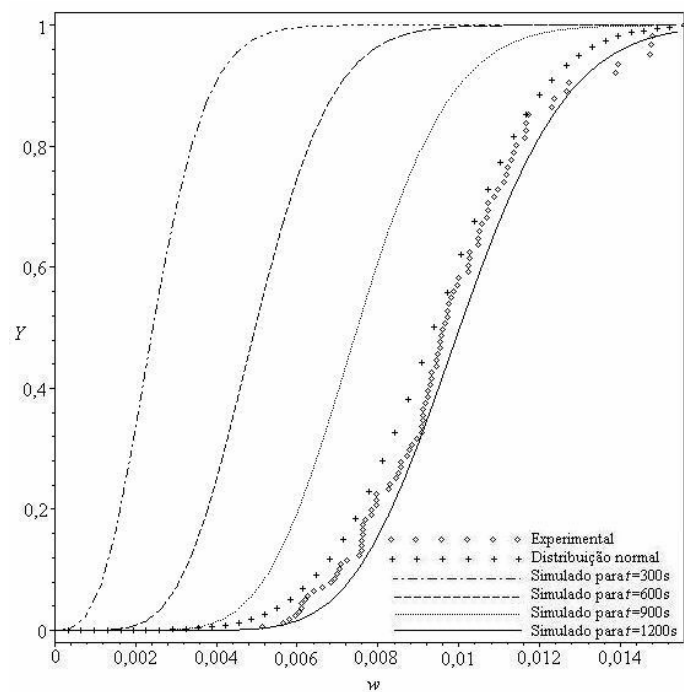


Figura 3.13 – Distribuições de frequência cumulativa experimental e simulada para o experimento 11 para a_2 e a_2 .

Analisando as Figuras 3.10 a 3.13 pode-se notar que os dados experimentais não são muito bem representados por uma distribuição normal. A curva que melhor se ajustou aos dados experimentais foi a da Figura 3.12 que, conforme apresentado na Tabela 3.9, apresentou o menor erro do desvio padrão para a_2 e α_1 .

O modelo considera que não há uma distribuição inicial de massa de recobrimento, mas logo que o processo se inicia, pode-se notar nas figuras que as curvas simuladas já apresentam a mesma tendência das curvas experimentais.

Nota-se também que os dados do experimento 2 apresentam massa de recobrimento adimensional (w) maior que dos experimentos 10 e 11 e estão mais distantes de uma representação normal.

3.5.3 – Comparação entre as distribuições temporais definidas para os domínios F e G

As Figuras 3.14 a 3.16 a seguir apresentam as distribuições temporais nos domínios **F**, **G** e total, para a_2 e α_1 no experimento 11; lembrando que $a_2=3,6 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_1=2,02 \cdot 10^{-2}$. Analisando-se as distribuições nota-se que à medida que o tempo passa as distribuições, para cada domínio e total, se deslocam para a direita, o que indica um aumento na massa de recobrimento média por partícula; observa-se também um maior espalhamento dos dados, o que indica um aumento no desvio padrão. Os valores máximos de cada curva representam a quantidade de partículas (na abscissa) que possuem massa de recobrimento médio (na ordenada) em cada domínio para os valores de tempo apresentados nas figuras. Os valores médios para este experimento são apresentados na Tabela 3.8.

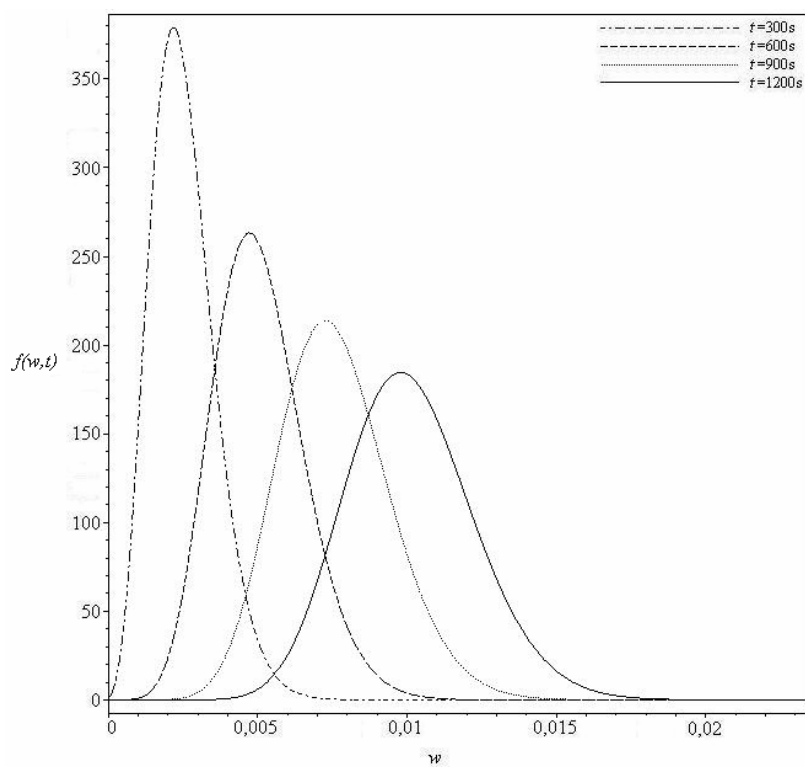


Figura 3.14 – Distribuição de frequência no domínio $\mathbf{F}$ para a_2 e α_1 no experimento 11.

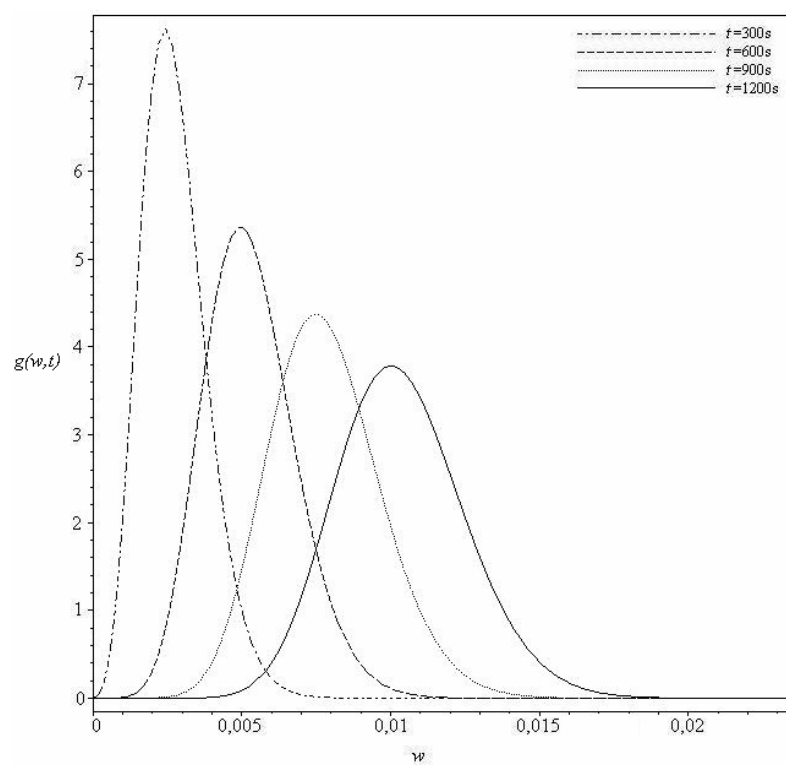


Figura 3.15 – Distribuição de frequência no domínio $\mathbf{G}$ para a_2 e α_1 no experimento 11.

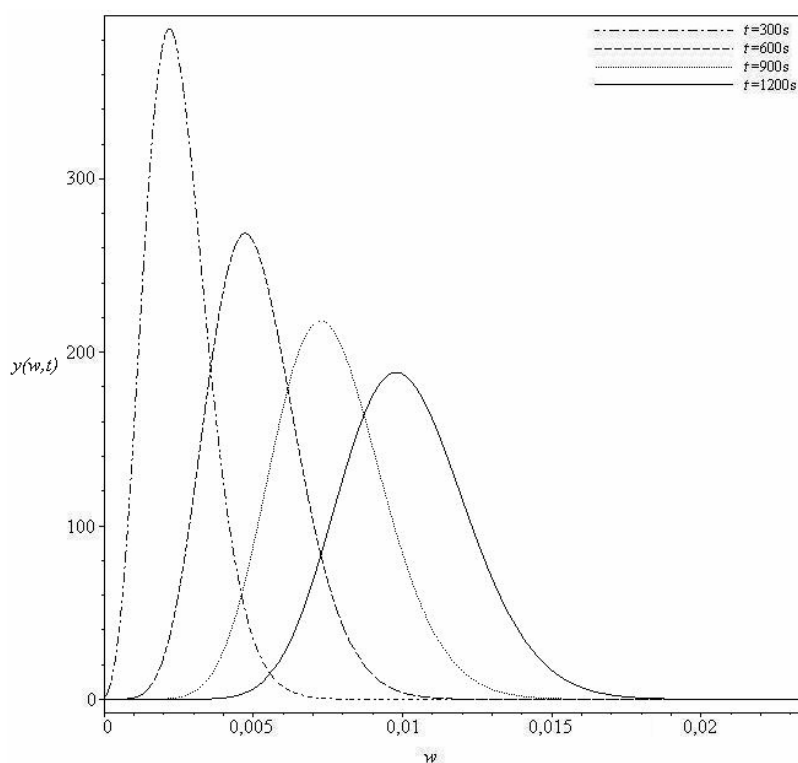


Figura 3.16 – Distribuição de frequência total para a_2 e α_1 no experimento 11.

Conforme apresentado nas hipóteses do modelo, a variação da massa de recobrimento ocorre somente no domínio **G**, mas analisando-se as Figuras 3.14 a 3.16 nota-se que a densidade populacional neste domínio é quase que insignificante quando comparada com a do domínio **F**. Isto se deve ao fato de que o tamanho do domínio **G**, conforme mostrado na Tabela 3.3, representa apenas 2,02% de toda a população do leito, cujo valor não se altera durante o processo de recobrimento, conforme hipótese já estabelecida.

Os comportamentos apresentados nestas figuras, no experimento 11 para $a_2=3,6 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_1=2,02 \cdot 10^{-2}$ são igualmente observados para os demais valores de taxa de circulação e tamanho do domínio **G** no mesmo experimento, bem como para os experimentos 2 e 10. O que difere os experimentos, conforme apresentado anteriormente, são os valores médios de massa de recobrimento e de desvio padrão.

As demais figuras, para todos os valores de taxa de circulação e tamanho do domínio de atomização do experimento 11, bem como dos experimentos 2 e 10, são apresentadas no Apêndice B.

3.5.4 – Estudo da influência da taxa de adição de massa de recobrimento

A taxa de adição de massa de recobrimento (r) é uma das variáveis operacionais mais importantes do processo, pois sem ela haveria tão somente a agitação de partículas dentro do leito de jorro, o que não caracterizaria o processo como recobrimento de partículas.

A fim de avaliar a influência da taxa de circulação de partículas no processo de recobrimento, escolheram-se as condições operacionais do experimento 11, para $a_2=3,6 \cdot 10^{-2}$ e $\alpha_1=2,02 \cdot 10^{-2}$, que apresentaram o menor erro de desvio padrão dentre os experimentos analisados.

3.5.4.1 – Distribuições para tempo fixo de operação

Primeiramente, faz-se a avaliação no tempo final do processo, de acordo com os dados experimentais, que é de 1200s (ou 20 min), variando a taxa de adição de massa de recobrimento (r) em quatro valores diferentes: 40%, 60%, 80% e 100% do valor original para o experimento. Os valores de r estão apresentados na Tabela 3.10, juntamente com os valores de massa de recobrimento média e desvio padrão.

Tabela 3.10 – Massa média e desvio padrão no tempo final para diferentes valores de taxa de adição de massa de recobrimento.

Valor de r [s^{-1}]	Massa de recobrimento média	Desvio padrão
$3,38 \cdot 10^{-6}$	$\langle w \rangle_T = 4,051 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 8,538 \cdot 10^{-4}$
$5,06 \cdot 10^{-6}$	$\langle w \rangle_T = 6,076 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 1,281 \cdot 10^{-3}$
$6,75 \cdot 10^{-6}$	$\langle w \rangle_T = 8,102 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_T = 1,708 \cdot 10^{-3}$
$8,44 \cdot 10^{-6}$	$\langle w \rangle_T = 1,013 \cdot 10^{-2}$	$\sigma_T = 2,134 \cdot 10^{-3}$

Analizando-se esta tabela, pode-se notar que quanto menor o valor da taxa de adição de massa de recobrimento (r), menor o valor da massa média e do desvio padrão. Quanto menor o valor do desvio padrão, mais uniforme será a distribuição final das partículas. O comportamento

apresentado na referida tabela pode ser identificado também nas curvas de distribuição de frequência, apresentadas nas Figuras 3.17 e 3.18.

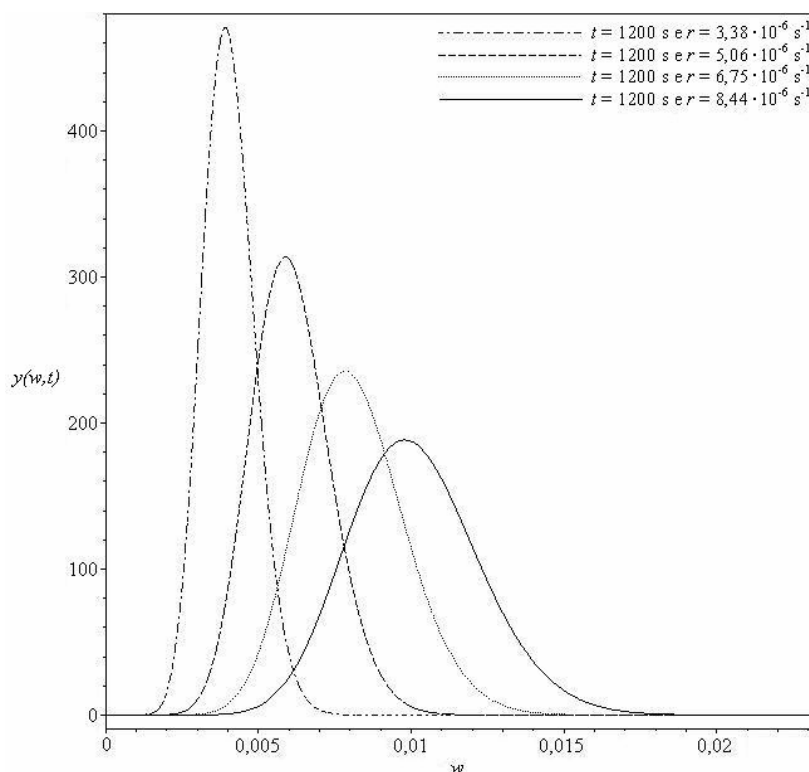


Figura 3.17 – Distribuição de frequência para diferentes valores de taxa de adição de massa de recobrimento.

Conforme já mencionado, com o aumento do r , ocorre um aumento dos valores médios de massa de recobrimento e do desvio padrão. Como o tempo de processo analisado é o mesmo para todas as curvas da Figura 3.17, espera-se que a simulação com o maior valor de r se encontre mais à direita, pois recebe maior quantidade de massa de recobrimento.

A Figura 3.18 apresenta a distribuição de frequência cumulativa para os diferentes valores de r e tempo final igual a 1200 s.

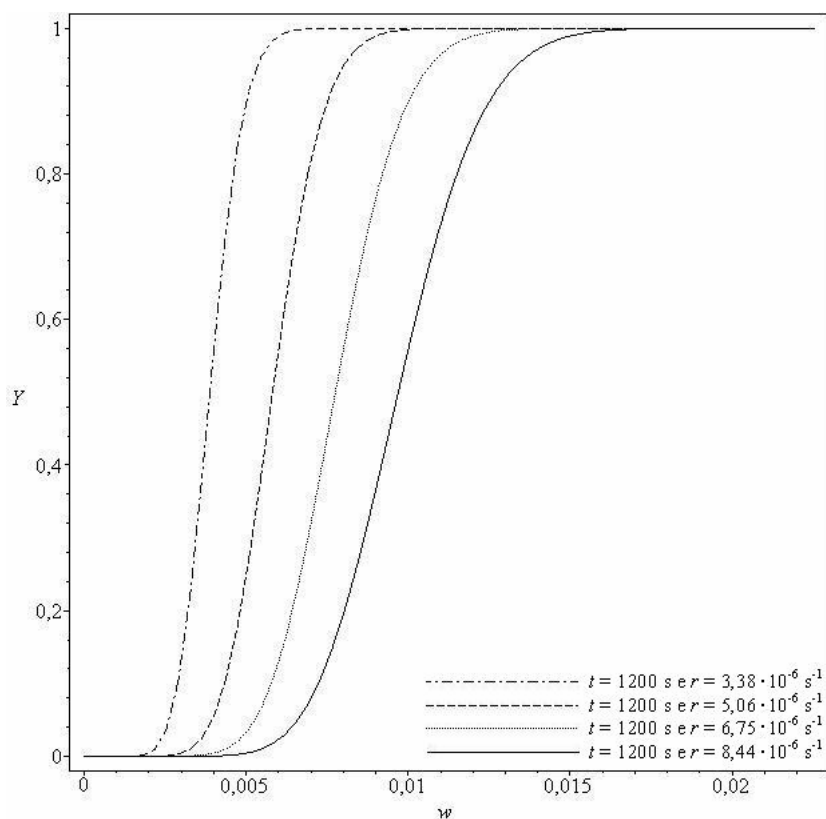


Figura 3.18 – Distribuição de frequência cumulativa para diferentes valores de taxa de adição de massa de recobrimento.

Com base nestes dados, pode-se afirmar que, de acordo com o modelo proposto, valores menores de taxa de adição de massa de recobrimento fornecem uma distribuição final mais homogênea, quando comparada a valores mais altos.

3.5.4.2 – Distribuições para tempos variáveis de operação

De acordo com a Equação (3.74), a massa de recobrimento média é dada pelo produto da taxa de adição de massa de recobrimento (r) pelo tempo (t). O valor encontrado para a simulação do experimento 11 é $\langle w \rangle_T = 1,013 \cdot 10^{-2}$, apresentado na Tabela 3.9. Esse mesmo valor pode ser obtido para os diferentes valores de r da Tabela 3.10 em diferentes valores de tempo final, obtendo diferentes resultados para o desvio padrão, conforme mostra a Tabela 3.11.

Tabela 3.11 – Massa média e desvio padrão para diferentes valores de tempo e de taxa de adição de massa de recobrimento.

Valor de r [s^{-1}]	Tempo [s]	Massa de recobrimento média	Desvio padrão
$3,38 \cdot 10^{-6}$	3000	$\langle w \rangle_T = 1,013 \cdot 10^{-2}$	$\sigma_T = 1,35 \cdot 10^{-3}$
$5,06 \cdot 10^{-6}$	2000	$\langle w \rangle_T = 1,013 \cdot 10^{-2}$	$\sigma_T = 1,653 \cdot 10^{-3}$
$6,75 \cdot 10^{-6}$	1500	$\langle w \rangle_T = 1,013 \cdot 10^{-2}$	$\sigma_T = 1,909 \cdot 10^{-3}$
$8,44 \cdot 10^{-6}$	1200	$\langle w \rangle_T = 1,013 \cdot 10^{-2}$	$\sigma_T = 2,134 \cdot 10^{-3}$

Portanto, pode-se obter uma distribuição final mais homogênea, para o mesmo valor de massa média, através da diminuição da taxa de adição de massa de recobrimento e do aumento do tempo de operação, como mostra a Figura 3.19.

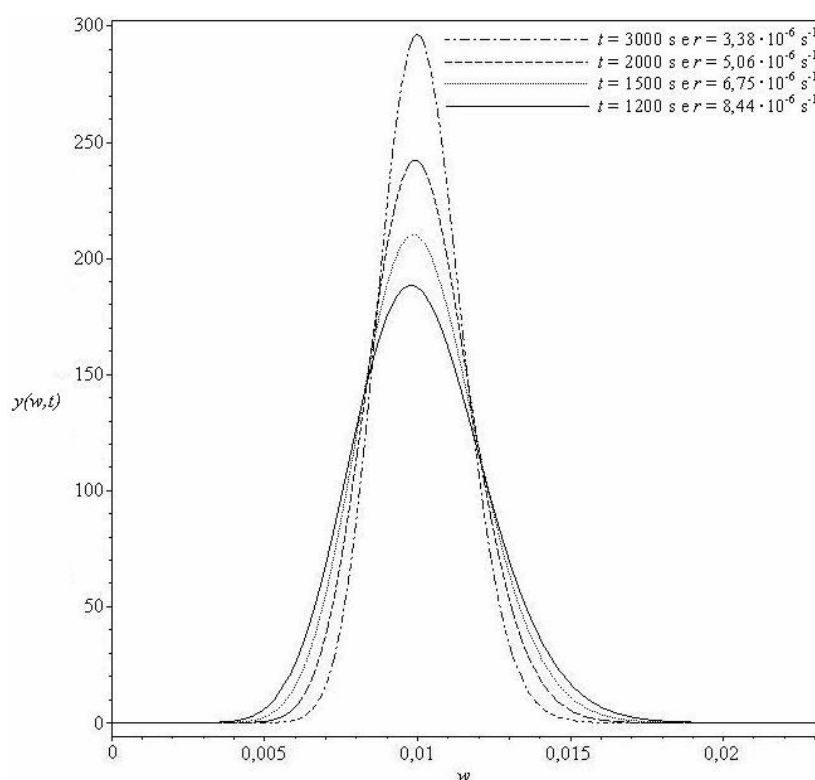


Figura 3.19 – Distribuição de frequência para diferentes valores de tempo e de taxa de adição de massa de recobrimento.

A Figura 3.20 apresenta uma comparação entre as distribuições de frequência para o menor valor r testado ($3,38 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$), que equivale a 40% do valor de r no experimento 11, e o valor base do próprio experimento ($8,44 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$).

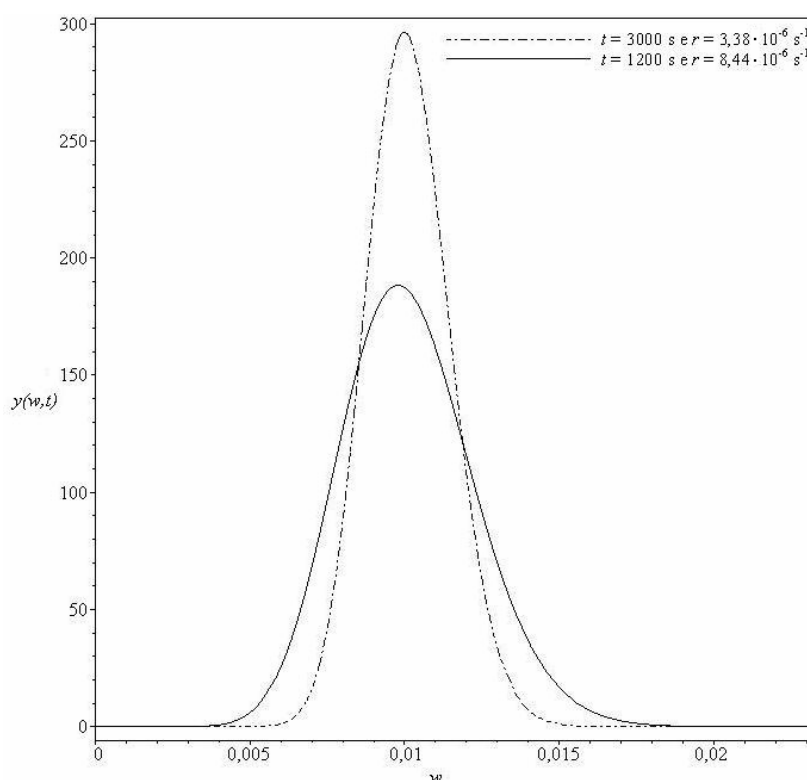


Figura 3.20 – Distribuição de frequência para o menor valor de taxa de adição de massa de recobrimento testado e para o valor base.

A Figura 3.21 apresenta uma comparação das distribuições de frequência cumulativa para os dois casos supracitados.

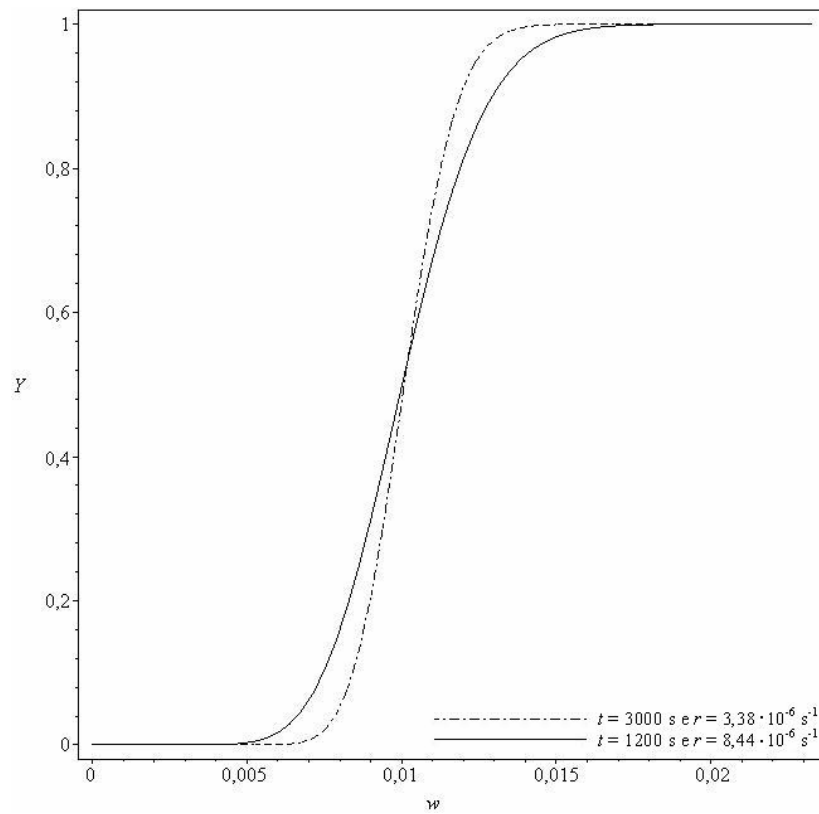


Figura 3.21 – Distribuição de frequência cumulativa para o menor valor de taxa de adição de massa de recobrimento testado e para o valor base.

Analisando-se a Tabela 3.11, a Figura 3.20 e a Figura 3.21, conclui-se que é possível obter uma distribuição final muito mais homogênea sem perder massa de recobrimento.

Vale ressaltar que uma redução de r para 40% do valor utilizado no experimento 11, implica em uma redução da vazão de suspensão de 15 mL/min para 6 mL/min; e para obter a mesma massa de recobrimento média, o tempo de processamento aumentaria de 20 min para 50 min.

CAPÍTULO 4

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

4.1 – Conclusões

- O recobrimento de partículas em leito de jorro cônico-cilíndrico com tubo *draft* foi modelado de acordo com uma descrição teórica baseada em equações de balanço populacional aplicadas a dois domínios de mistura perfeita acoplados, resultando em um sistema de equações diferenciais parciais hiperbólicas, resolvidas analiticamente pelo método dos momentos e por transformadas de Laplace.
- As expressões obtidas para o cálculo de média e variância são coincidentes com os de Wnukowski e Setterwall (1989), mas a função densidade populacional por eles apresentada é inconsistente.
- O modelo utiliza como dados de entrada a dimensão do domínio de recobrimento (α), estimada por relações geométricas advindas da configuração do equipamento e de suas regiões típicas, além da altura da fonte (H_f), da taxa de circulação de partículas (W) e da porosidade na região da fonte (ε_f), estimados através de simulação por CFD.
- Em todas as condições simuladas, a taxa de circulação de partículas entre os domínios (W) foi subestimada pela correlação de Claflin e Fane (1984) quando comparada aos valores simulados por CFD. Embora o leito utilizado pelos autores seja de dimensão maior do que o analisado neste trabalho, a razão entre os diâmetros da parte cilíndrica e da entrada dos leitos é a mesma. Entretanto, a distância do tubo *draft* à base para os dois leitos é igual a 5 cm e os autores utilizaram grãos de trigo, cujo diâmetro (3,5 mm) é menor do que o diâmetro típico de sementes de soja (6 mm), objeto deste estudo.
- A comparação entre os perfis simulados e experimentais para o recobrimento de sementes de soja com inoculante e micronutrientes em um leito de jorro com tubo *draft*, considerando a taxa de circulação de partículas estimada por CFD, mostrou que a dimensão da região de recobrimento (α) é diretamente proporcional à taxa de adição de massa de recobrimento (r). Mais

especificamente, a estimativa que considera esta dimensão proporcional a $(2d_p)$ se mostrou mais adequada para o experimento com $r = 8,44 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$. Para os experimentos com $r = 9,55 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ e com $r = 1,28 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, a estimativa que considera a dimensão proporcional a $(5d_p)$ representou melhor os dados experimentais.

- Os resultados simulados mostram que é possível obter uma maior uniformidade de recobrimento, caracterizada por um menor desvio padrão, diminuindo-se a taxa de adição de massa de recobrimento (r) e aumentando-se o tempo de operação.
- O modelo matemático de recobrimento de partículas desenvolvido no trabalho pôde prever a distribuição de massa do recobrimento de partículas em leito de jorro.

4.2 – Sugestões

- Desenvolver correlações específicas para a estimativa da taxa de circulação de sementes de soja e da altura da fonte em leito de jorro com tubo *draft* com a geometria estudada neste trabalho.
- Validar o procedimento de estimativa da dimensão da região de recobrimento (α) por comparação com valores experimentais, em função da taxa de adição de massa de recobrimento.
- Avaliar o efeito da dependência da taxa de crescimento com a massa com a massa da partícula nos resultados obtidos.
- Analisar o desempenho de métodos numéricos de solução do modelo, permitindo considerar a taxa de crescimento dependente da massa, avaliando a qualidade de aproximação numérica dos perfis de distribuição e dos momentos. Vários métodos apresentados na literatura garantem somente a aproximação correta dos momentos (de ordem zero e/ou ordem 1 e/ou ordem 2) mas não garantem a precisão da aproximação do perfil de distribuição. Estudos preliminares realizados nesta Dissertação, utilizando o método das diferenças finitas centrais para a discretização do termo de variação espacial, mostraram que à medida que o tempo adimensional aumenta, ocorre um desvio entre o valor máximo alcançado pela distribuição calculada numericamente comparada com a calculada analiticamente. Além disto, o esforço computacional decorrente da discretização é expressivo e formas mais eficientes de solução devem ser investigadas.
- Utilizar o modelo dinâmico desenvolvido na formulação de um problema de otimização dinâmica do processo de recobrimento, visando a maior uniformidade de recobrimento.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALEXIADIS, A., VANNI, M. and GARDIN, P., Extension of the method of moments for population balances involving fractional moments and application to a typical agglomeration problem, **Journal of Colloid and Interface Science**, v.276, p. 106-112, 2004.
- AYUB, G. S. E., ROCHA, S. C. S. and PERRUCCI, A.L. I., Analysis of the surface quality of sulfur-coated urea particles in a two-dimensional spouted bed, **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v.18, n. 1, p. 13-22, 2001.
- BERRUTI, F., MUIR, J. R. and BEHIE, L. A., Solids Circulation in a Spout-Fluid Bed with Draft Tube, **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 66, p. 919-923, 1988.
- BRIESEN, H., Simulation of crystal size and shape by means of a reduced two-dimensional population balance model, **Chemical Engineering Science**, v. 61, p. 104-112, 2006.
- CHOI, M. M. S. and MEISEN, A., Sulfur coating of urea in shallow spouted beds, **Chemical Engineering Science**, v. 52, n. 7, p. 1073-1086, 1997.
- CLAFLIN, J. K. and FANE, A. G., Gas Distribution and Heat Transfer in a Draft-tube Spouted Bed, **AIChE Symposium Series**, v. 80, n. 241, p. 17-23, 1984.
- CROWLEY, T. J., MEADOWS, E. S., KOSTOULAS, E., DOYLE III, F. J., Control of particle size distribution described by a population balance model of semibatch emulsion polymerization, **Journal of Process Control**, v. 10, p. 419-432, 2000.
- DAY, J.-Y., The fountain height and particle circulation rate in a spouted bed, **Chemical Engineering Science**, v. 45, n. 9, p. 2987-2990, 1990.
- DENIS, C., HEMATI, M., CHULIA, D., LANE, J.-Y., BUISSON, B., DASTE, G., ELBAZ, F., A model of surface renewal with application to the coating of pharmaceutical tablets in rotary drums, **Powder Technology**, v. 130, p. 174-180, 2003.
- DUARTE, C. R., **Estudo experimental e de simulação da fluidodinâmica e inoculação de sementes de soja em leito de jorro**, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia – MG, 2006.
- DUARTE, C. R., **O uso de modelo de balanço populacional no estudo de inoculação de sementes de soja em leito de jorro**, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia – MG, 132 p., 2002.
- FOGLER, H. S., **Elements of Chemical Reaction Engineering**, 2nd ed., Prentice Hall, 838 p., 1992.
- FREITAS L. A. P. and FREIRE, J. T., Experimental Study on the Dynamics of a Spouted Bed with Particle Feed Through the Base, **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 14, n. 3, p. 1-19, 1997.
- HIMMELBLAU, D. M., BISCHOFF, K. B., **Process Analysis and Simulation**, John Wiley & Sons, Inc, New York, p. 183-199, 1967.
- HOUNSLOW, M. J., RYALL, R. L., MARSHALL, V. R., A Discretized Population Balance for Nucleation, Growth, and Aggregation, **AIChE Journal**, v. 34, p. 1821-1832, 1988.
- HULBURT, H. M. and KATZ, S., Some problems in particle technology, **Chemical Engineering Science**, v. 19, p. 555-574, 1964.

- IJICHI, K., TSUTSUI, T., UEMURA, Y., HATATE, Y., Mono-core Coating of Fine Particles with Finer Particles by Means of a Draft-Tube Spouted-Bed with Medium Particles, **Journal of Chemical Engineering of Japan**, v. 36, n. 10, p. 1282-1287, 2003.
- IJICHI, K., UEMURA, Y., HATATE, Y., Coating of Particles with Finer Particles Using a Draft-Tube Spouted-Bed, **Journal of Chemical Engineering of Japan**, v. 33, n. 3, p. 526-528, 2000.
- KUMAR, S., RAMKRISHNA, D., On the solution of population balance equations by discretization – I. A Fixed Pivot Technique, **Chemical Engineering Science**, v. 51, n. 8, p. 1311-1332, 1996.
- KUMAR, S., RAMKRISHNA, D., On the solution of population balance equations by discretization – III. Nucleation, growth and aggregation of particles, **Chemical Engineering Science**, v. 52, n. 24, p. 4659-4679, 1997.
- LIU, L. X. and LISTER, J. D., Coating mass distribution from a spouted bed seed coater: experimental and modeling studies, **Powder Technology**, v. 74, p. 259-270, 1993.
- LUCAS, K. B. C., **Inoculação de sementes de soja e recobrimento com micronutrientes em leite de jorro**, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia – MG, 90 p., 2000.
- MARCHAL, P., DAVID, R., KLEIN, J. P. and VILLERMAUX, J., Crystallization and precipitation engineering – I. An efficient method for solving population balance in crystallization with agglomeration, **Chemical Engineering Science**, v. 43, n. 1, p. 59-67, 1988.
- MARONGA, S. J. and WNUKOWSKI, P., Modeling of the three-domain fluidized-bed particulate coating process, **Chemical Engineering Science**, v. 52, n. 17, p. 2915-2925, 1997.
- MATHUR, K. B. and EPSTEIN, N., **Spouted beds**, Academic Press Inc. LTD., 304 p., 1974.
- MUHR, H., DAVID, R., VILLERMAUX, J. and JEZEQUEL, P. H., Crystallization and precipitation engineering – VI. Solving population balance in the case of the precipitation of silver bromide crystals with high primary nucleation rates by using the first order upwind differentiation, **Chemical Engineering Science**, v. 51, n. 2, p. 309-319, 1996.
- OLIVEIRA, W. P., FREIRE, J. T., COURRY, J. R., Analysis of particle coating by spouted bed process, **International Journal of Pharmaceutics**, v. 158, n. 1, p. 1-9, 1997.
- RAMKRISHNA, D., **Population Balances, Theory and Application to Particulate System in Engineering**, Academic Press Inc. LTD., 355 p., 2000.
- RANDOLPH, A. D. and LARSON, M. A., **Theory of particulate process**, 2nd ed., Academic Press Inc. LTD., 369 p., 1988.
- SEMINO, D. and RAY, H., Control of systems described by population balance equations – I. Controllability analysis, **Chemical Engineering Science**, v. 50, n. 11, p. 1805-1824, 1995.
- SHERONY, D. F., A model of surface renewal with application to fluid bed coating of particles, **Chemical Engineering Science**, v. 36, p. 845-848, 1981.
- THORLEY, B., SAUNBY, J. B., MATHUR, K. B. and OSBERG, G. L., An Analysis of Air and Solid Flow in a Spouted Wheat Bed, **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 37, p. 184-192, 1959.
- VIEIRA, M. G. A., ROCHA, S. C. S., Influence of the liquid saturation degree on the fluid dynamics of a spouted-bed coater, **Chemical Engineering and Processing**, v. 43, p. 1275-1280, 2004.
- WALDIE, B. and WILKINSON, D., Measurement of Particle Movement in a Spouted Bed Using a New Microprocessor Based Technique, **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 64, p. 944-949, 1986.
- WANG, F. Y., GE, X. Y., BALLIU, N., CAMERON, I. T., Optimal control and operation of drum granulation processes, **Chemical Engineering Science**, v. 61, p. 257-267, 2006.