



Universidade Federal de Alagoas – UFAL

Unidade Acadêmica Centro de Tecnologia – CTEC



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
UNIDADE ACADÊMICA CENTRO DE TECNOLOGIA
CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA**

LUÍS FILLIPE NUNES LOPES

**ESTUDO NUMÉRICO DA INFLUÊNCIA DAS PROPRIEDADES FÍSICAS
GRANULARES APLICADO AO FENÔMENO DE FLUIDIZAÇÃO**

Maceió
2023



Universidade Federal de Alagoas – UFAL

Unidade Acadêmica Centro de Tecnologia – CTEC



LUÍS FILLIPE NUNES LOPES

**ESTUDO NUMÉRICO DA INFLUÊNCIA DAS PROPRIEDADES FÍSICAS
GRANULARES APLICADO AO FENÔMENO DE FLUIDIZAÇÃO**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao curso de Engenharia Química da Universidade Federal de Alagoas como requisito para obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Lucas Meili

Coorientador: Prof. Dr. Rodolfo Junqueira Brandão

Maceió
2023

Catlogação na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico

Bibliotecária Responsável: Livia Silva dos Santos - CRB 1670

L864e Lopes, Luís Fillipe Nunes.

Estudo numérico da influência das propriedades físicas granulares aplicado ao fenômeno de fluidização / Luís Fillipe Nunes Lopes. – 2023.

56 f. : il.

Orientador: Lucas Meili.

Coorientador: Rodolfo Junqueira Brandão.

Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso em Engenharia Química) – Universidade Federal de Alagoas. Centro de Tecnologia. Maceió, 2023.

Bibliografia: f. 82-85.

Apêndice: f. 86.

1. Fluidização. 2. Fluidinâmica computacional. 3. Programação Python.

I. Título.


CDU: 66.096.5




LUIS FILLIPE NUNES LOPES

ESTUDO NUMÉRICO DA INFLUÊNCIA DAS PROPRIEDADES FÍSICAS GRANULARES APLICADO AO FENÔMENO DE FLUIDIZAÇÃO


BANCA EXAMINADORA

Documento assinado digitalmente
 LUCAS MEILI
Data: 30/05/2023 22:21:00-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>


Prof. Dr. Lucas Meili

Documento assinado digitalmente
 RODOLFO JUNQUEIRA BRANDAO
Data: 27/05/2023 16:16:28-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Rodolfo Junqueira Brandão

Documento assinado digitalmente
 JOAO INACIO SOLETTI
Data: 02/06/2023 09:54:14-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. João Inácio Soletti

Documento assinado digitalmente
 CRISTIANE HOLANDA SODRE
Data: 01/06/2023 21:10:00-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dra. Cristiane Holanda Sodré

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a minha família: irmão, irmãs, avôs e avós, tios e tias pelo apoio em toda minha graduação. Em especial, os meus pais, Luciano Lopes e Liliane Lopes, por terem me educado e incentivado minha vida toda.

Ao meu orientador e coorientar, Professor Lucas Meili e Professor Rodolfo Brandão, pela paciência ao longo do desenvolvimento desse trabalho.

Aos meus amigos de graduação, pelos perrengues e risadas do dia a dia ao longo de todos esses anos.

E a todos que estiveram comigo, perto ou longe, durante minha trajetória, obrigado!

RESUMO

A operação de equipamentos em regime de leito fluidizado é largamente utilizada na indústria química por proporcionar uma elevada mistura entre as fases granular e fluida, possibilitando a intensificação das taxas de transferência de calor e massa, sendo amplamente empregados nas indústrias petrolíferas, com o craqueamento catalítico de hidrocarbonetos pesados, farmacêutica, em processos de secagem, granulação e revestimento. Diante da elevada complexidade inerente as interações entre a fase granular e fluida, estudos computacionais vêm sendo desenvolvidos nas últimas décadas com o intuito de entender a dinâmica interna nos equipamentos de leito fluidizado. O presente trabalho tem como objetivo analisar a eficiência de fluidização, empregando um planejamento composto central o qual foi verificada a influência das propriedades físicas granulares, pela variação de seu diâmetro entre $18\mu\text{m}$ a $888\mu\text{m}$ e sua massa específica de $1060 \text{ kg}/\text{m}^3$ a $7480 \text{ kg}/\text{m}^3$. Para isto simulações CFD foram avaliadas observando o comportamento fluidodinâmico das partículas de acordo com suas classificações frente ao diagrama de Geldart. As simulações do leito fluidizado foram realizadas utilizando o método de CFD (do inglês, *Computational Fluid Dynamics*) com o emprego do *software* livre e, de código aberto, OpenFOAM v.10, com aplicação da abordagem Euleriana nas fases gasosa e granular. Também empregou o *software* de visualização PARAVIEW 5.11.0, bem como, a linguagem de programação Python para a análise quantitativa dos dados oriundos das simulações. Dessa forma foi possível obter um maior entendimento do comportamento físico do leito fluidizado - mediante a variação dos parâmetros do material granular - com ênfase na qualidade da fluidização e seleção de métricas adequadas para sua quantificação, assim como no desenvolvimento de modelos matemáticos para a avaliação da velocidade de mínima fluidização e velocidade terminal.

Palavras-Chave: Leito Fluidizado, CFD, OpenFOAM.

ABSTRACT

The operation of equipment in a fluidized bed regime is widely used in the chemical industry, as it provides high mixing between the granular and fluid phases, enabling the intensification of heat and mass transfer rates. It is widely employed in the petroleum industry, for catalytic cracking of heavy hydrocarbons, as well as in the pharmaceutical industry for drying, granulation, and coating processes. Due to the inherent complexity of the interactions between the granular and fluid phases, computational studies have been developed in recent decades to understand the internal dynamics of fluidized bed equipment. The objective of this study is to analyze the fluidization efficiency, employing a central composite design to verify the influence of granular physical properties, by varying the diameter between 18 μm to 888 μm and specific mass from 1060 kg/m^3 to 7480 kg/m^3 . For this purpose, CFD simulations were evaluated, observing the fluid-dynamic behavior of particles according to their classifications based on the Geldart diagram. The fluidized bed simulations were carried out using Computational Fluid Dynamics (CFD) with the OpenFOAM v.10 free and open-source software, applying the Eulerian approach in the gas and granular phases. The visualization software PARAVIEW 5.11.0 and the Python programming language were also employed for the quantitative analysis of data from the simulations. This approach allowed for a deeper understanding of the physical behavior of the fluidized bed - through the variation of granular material parameters - with an emphasis on the quality of fluidization and the selection of appropriate metrics for its quantification, as well as the development of mathematical models for the evaluation of minimum fluidization velocity and terminal velocity.

Keywords: Fluidized Bed, CFD, OpenFOAM.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1: Queda de pressão no leito fluidizado.	16
Figura 2: Regimes de fluidização	18
Figura 3: Gráfico de Geldart.....	20
Figura 4: Visualização da geometria externa para avaliação do FVM pela técnica centrada na célula.....	27
Figura 5: Comparação entre os três modelos de turbulência.....	31
Figura 6: Comparação entre os métodos LES e DNS.	32
Figura 7: Ferramentas computacionais utilizadas. a) OpenFoam; b) ParaView; c) Statistica; d) Origin; e) Linguagem de programação Python.	33
Figura 8: Estrutura de arquivos no OpenFoam.....	34
Figura 9: Fluxograma de etapas do trabalho.	37
Figura 10: Esquema do leito fluidizado.....	38
Figura 11: Pontos do PCC no gráfico de Geldart.	39
Figura 12: Interface gráfica do Paraview 5.10.	43
Figura 13: Tamanho das partículas utilizadas nas simulações.	45
Figura 14: Malha do leito. a) Malha Robusta; b) Malha Intermediária; c) Malha Refinada.	46
Figura 15: Curvas de pressão para as malhas no teste de independência.....	47
Figura 16: Comparação entre os modelos $k - \varepsilon$ e laminar	48
Figura 17: Comparação entre modelos de turbulência com o $k - \varepsilon$ e RNG $k - \varepsilon$	49
Figura 18: Comparação entre modelos de turbulência com o $k - \varepsilon$ e $k - \omega$ c) LES.....	49
Figura 19: Comparação entre modelos de turbulência com o $k - \varepsilon$ e LES.	49
Figura 20: Ajuste linear da velocidade mínima de fluidização com a massa das partículas.	51
Figura 21: Resíduos da fração de partículas.....	52
Figura 22: Gráfico de Geldart com as partículas do grupo A.....	53
Figura 23: Mínima fluidização. a) Simulação 03; b) Simulação 07; c) Simulação 09.....	54
Figura 24: Fluidização borbulhante. a) Simulação 03; b) Simulação 07; c) Simulação 09.	55
Figura 25: Perfil de queda de pressão na simulação 03.....	55
Figura 26: Perfil de queda de pressão na simulação 07.....	56
Figura 27: Perfil de queda de pressão na simulação 09.....	56
Figura 28: Queda de pressão nas simulações 03, 07 e 09.....	58
Figura 29: Gráfico de Geldart com as partículas do grupo B.....	58
Figura 30: Mínima fluidização. a) Simulação 01; b) Simulação 04; c) Simulação 06.....	59

Figura 31: Fluidização borbulhante. a) Simulação 01; b) Simulação 04; c) Simulação 06	60
Figura 32: Curva de pressão para a simulação 01.	60
Figura 33: Curva de pressão para a simulação 04.	61
Figura 34: Curva de pressão para a simulação 06.	62
Figura 35: Queda de pressão nas simulações 01, 04 e 06.....	63
Figura 36: Gráfico de Geldart com a partícula do grupo A.....	64
Figura 37: Simulação 02. a) Leito fixo; b) Mínima fluidização; c) Fluidização Turbulenta. ..	65
Figura 38: Curva de pressão para a simulação 02.	65
Figura 39: Gráfico de Geldart com as partículas do grupo D.....	66
Figura 40: Mínima fluidização. a) Simulação 05; b) Simulação 08.....	67
Figura 41: Fluidização turbulenta. a) Simulação 05; b) Simulação 08.	68
Figura 42: Curva de pressão para a simulação 05.	68
Figura 43: Curva de pressão para a simulação 08.	69
Figura 44: Superfície de resposta para a velocidade mínima de fluidização.....	71
Figura 45: Superfície de resposta para a velocidade terminal.	72
Figura 46: Gráficos de paridade. a) Velocidade de mínima fluidização; b) Velocidade terminal.	73
Figura 47: Curva norma. a) Velocidade de mínima fluidização; b) Velocidade Terminal	73
Figura 48: Índice de mistura para as simulações.....	74
Figura 49: Fração de partículas em regime de fluidização borbulhante.....	75
Figura 50: Espectros de frequência da fração de partículas.	77
Figura 51: Gráfico de paridade para a frequência média de borbulhamento.....	79
Figura 52: Curva normal para a frequência média de borbulhamento	79

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Modelagem matemática do escoamento de fluidos num leito fluidizado.	14
Tabela 2: Correlações empíricas para a determinação de umf	17
Tabela 3: Materiais granulares e suas classificações de Geldart.	21
Tabela 4: Equações para os índices de mistura.	22
Tabela 5: Correlação de diversas propriedades que se adequam ao KTGF.	29
Tabela 6: Resumo dos principais modelos RANS de turbulência.	33
Tabela 7: Resumo dos parâmetros do leito.	38
Tabela 8: Planejamento Experimental.	39
Tabela 9: Quantidade de células no teste de independência de malha.	40
Tabela 10: Condições de contorno para os parâmetros físicos.	42
Tabela 11: Parâmetros gerais das simulações.	43
Tabela 12: Parâmetros físicos das simulações.	45
Tabela 13: Massas das partículas esféricas utilizadas nas simulações.	46
Tabela 14: Erro entre as velocidades calculadas e encontradas.	50
Tabela 15: Valores simulados para a velocidade mínima de fluidização e velocidade terminal.	57
Tabela 16: Velocidades de mínima fluidização e terminal encontrada para cada simulação de partículas tipo B.	62
Tabela 17: Valores simulados para a velocidade mínima de fluidização e velocidade terminal.	66
Tabela 15: Valores simulados para a velocidade mínima de fluidização e velocidade terminal.	69
Tabela 16: Planejamento experimental e variáveis de resposta.	70
Tabela 17: Centralidade das frequências dos espectros de fração de partículas.	76

LISTA DE SÍMBOLOS E ABREVIATURAS

Lista de Abreviaturas

CFD	Computational Fluid Dynamics
KTGF	Teoria Cinética do Fluxo Granular
DFT	Transformada de Fourier Discreta
FFT	Campo de pressão da fase fluida
EDP	Equação Diferencial Parcial
DEM	Método Dos Elementos Discretos
FVM	Método Dos Volumes Finitos
DNS	Simulação Numérica Direta
LES	Simulação de Grandes Escalas
RANS	Simulação Numérica de Escoamentos Turbulentos via Equações de Médias de Reynolds
RSM	Transporte do Tensor de Reynolds
PCC	Planejamento Composto Central

Lista de Símbolos

\bar{f}_α	Frequência média de borbulhamento
Θ_s	Temperatura granular
σ_0^2	Variâncias antes da agitação
σ_r^2	Variâncias numa mistura probabilística
A_e	Área de uma esfera de mesmo volume da partícula
A_k	Espectro de frequência
A_p	Área da partícula
C_D	Fator de arraste
K_{drag}	Coefficiente de arraste
P_p	Peso da partícula
a_n	Variável do sinal
d_p	Diâmetro da partícula
e_{ss}	Elasticidade do choque entre as partículas
$g_{0,ss}$	Função de distribuição radial de partículas
k_{Θ_s}	Condutividade granular
k_n	Frequências
p_f	Campo de pressão da fase fluida

p_p	Campo de pressão da fase granular
q_s	Flutuação de energia
u_f	Campo de velocidade da fase fluida
u_{mf}	Velocidade do fluido na condição de mínima fluidização.
u_p	Campo de velocidade da fase granular
u_t	Velocidade terminal
v_r	Velocidade relativa
α_f	Fração de partículas da fase fluida
α_s	Fração de sólidos
γ_{θ_s}	Dissipação de energia cinética
ε_f	Porosidade da fase fluida
ε_{mf}	Fração de vazios na condição de mínima fluidização
ε_p	Porosidade da fase granular
λ_s	Viscosidade mássica granular
μ_f	Viscosidade da fase fluida
$\mu_{s,col}$	Viscosidade granular de colisão
$\mu_{s,kin}$	Viscosidade granular cinética
μ_s	Viscosidade da fase granular
ρ_f	Massa específica da fase fluida
ρ_p	Massa específica da fase granular
τ_f	Tensor de tensão da fase fluida
τ_p	Tensor de tensão da fase granular
ϕ_s	Esfericidade da partícula
M	Índice de mistura
σ^2	Variância
Ar	Número de Arquimedes
Re	Número de Reynolds
g	Campo gravitacional
m	Força resistiva

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	11
2	OBJETIVOS.....	13
2.1	Geral.....	13
2.2	Específicos.....	13
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	14
3.1	Leito Fluidizado.....	14
3.2	Regimes de Fluidização.....	18
3.3	Caracterização das Partículas.....	19
3.4	Modelos de Mistura.....	21
3.5	Transformada de Fourier.....	22
3.6	Análise Numérica.....	23
3.7	Fluidodinâmica Computacional.....	24
3.7.1	Geometria e Malha.....	25
3.7.2	Métodos de Discretização.....	25
3.7.3	Teoria Cinética do Fluxo Granular.....	27
3.7.4	Modelos de Turbulência.....	31
3.8	Ferramentas Computacionais.....	33
3.8.1	OpenFoam.....	33
3.8.2	ParaView.....	35
3.8.3	Statística.....	35
3.8.4	Origin.....	36
3.8.5	Linguagem de programação Python.....	36
4	METODOLOGIA.....	37
4.1	Definições Gerais.....	37
4.2	Desenvolvimento do Planejamento Experimental.....	38

4.3	Criação das Malhas	40
4.4	Determinação dos parâmetros da simulação	40
4.5	Simulação fluidodinâmica	41
4.5.1	Pasta “ <i>constant</i> ”	41
4.5.2	Pasta “0”	42
4.5.3	Pasta “ <i>system</i> ”	42
4.6	Análises Qualitativas	43
4.7	Análises Quantitativas	44
5	RESULTADOS	45
5.1	Análise Qualitativa	50
5.1.1	Geral	50
5.1.2	Agrupamento por classificação de Geldart.....	53
5.2	Análise Quantitativa	69
5.2.1	Velocidades de mínima fluidização e terminal	70
5.2.2	Qualidade de Fluidização	74
6	CONCLUSÃO.....	80
7	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	82
8	APENDICE 1: Trabalho Publica no Congresso Nacional de Engenharia Química (COBEQ 2023).....	86

1 INTRODUÇÃO

A utilização de processos de fluidização de partículas granulares vem sendo aplicado nos mais diversos ramos industriais, sendo empregados em processos físicos – secagem e recobrimento de materiais – ou em processos reacionais, como reatores catalíticos e de gaseificação. O uso do leito fluidizado é justificado pelas elevadas transferências de calor e massa que se dão entre as fases fluida e granular no interior do equipamento, alcançando maiores níveis de eficiência frente a outras alternativas às citadas aplicações (CREMASCO, 2012).

Nesse contexto, dentre as aplicações da utilização dos leitos fluidizados pode-se ressaltar a granulação de partículas, em especial, seu uso na indústria farmacêutica. Tal aplicação possibilita que as partículas que adentram o leito fluidizado sejam inicialmente secadas, para posterior aglomeração com utilização de um líquido que irá recobri-las, formando-se grânulos de maiores dimensões. Os primeiros estudos em tal área datam da década de 60, quando os pesquisadores observaram as vantagens do uso do leito fluidizado em tal processo (MICHAEL; MICHAEL, 1991).

Adentrando aplicações mais modernas do leito fluidizado, estudos vêm sendo realizados para seu emprego em reatores de pirolise a fim de realizar o craqueamento de plásticos. Muito é discutido sobre os resíduos plásticos e seu impacto no meio ambiente, sendo um material que permanece por séculos sem ser decomposto. Além disso, quase a totalidade do plástico produzido é advindo de fontes fósseis - não renováveis – e apenas 9% são reciclados. A termo decomposição de polietileno em processo de fluidização permite um ciclo de vida renovável para produtos plásticos, pois transforma-o em componentes mais simples que podem ser reutilizados na cadeia produtiva do plástico (MANDVIWALA, 2022).

Apesar de sua alta empregabilidade, leitos fluidizados apresentam interações complexas entre as fases fluida e granular. Segundo Philippsen et al. (2015) existe uma demanda crescente em modelos matemáticos que permitam explicar os fenômenos físicos presentes em tal equipamento. Dentre os modelos, pode-se citar correlações matemáticas empíricas, no entanto, estas apresentam a problemática de serem muito específicas, não tendo boa generalidade para leitos fluidizados em condições de processo distintas.

Tendo em vista a dificuldade de modelar o fenômeno de fluidização, técnicas numéricas vêm sendo implementadas para a solução das equações que regem tal processo, destacando-se

a técnica de CFD (Computational Fluid Dynamics). Existem diversos pacotes de softwares que implementam o método de CFD, dentre eles se destacam o MFX e OpenFOAM, softwares livres e de código aberto, e o pacote comercial Fluent (HERZOGA et al, 2012).

A Computational Fluid Dynamics é uma área de simulação numérica que surgiu na década de 1940 com o objetivo de prever o comportamento de fluidos em sistemas complexos. No entanto, com a popularização dos computadores e a evolução da tecnologia de hardware, permitiram uma ampliação significativa no uso de tal método apenas a partir da década de 1980, tal método passou a ser acessível e tornou-se uma ferramenta valiosa para o estudo do comportamento de fluidos

Desde então, o CFD tem sido amplamente utilizado em uma ampla gama de aplicações, que incluem: engenharia mecânica, aeroespacial, química e de petróleo. Além disso, tem sido crucial na resolução de problemas de engenharia complexos, como o design de turbinas, a otimização de sistemas de combustão, mas, principalmente, na análise de escoamentos de fluidos (ZAWAWI et al., 2018).

Nesse contexto, trabalhos importantes que destacam o uso do método de CFD na simulação de leitos fluidizados incluem "*CFD simulation of fluidization behavior in a fixed bed reactor*" (LI et al., 2017) e "*Numerical Simulation of the Gas–Solid Flow in Fluidized-Bed Polymerization Reactors*" (SHI; LUO; GUO, 2010). Estes trabalhos apresentam a utilização de CFD para modelar o escoamento no referido equipamento, analisando o comportamento das fases fluida e granular em diferentes condições operacionais, como: velocidade do fluido, concentração de partículas e temperatura.

Assim sendo, o objetivo desse trabalho é ter o entendimento do processo de fluidização mediante a realização de simulações numéricas do leito fluidizado, com utilização do OpenFOAM, com foco em analisar a influência das propriedades físicas granulares sobre a queda de pressão e qualidade da fluidização.

2 OBJETIVOS

2.1 Geral

- Estudar o leito fluidizado mediante sua simulação no software OpenFOAM, variando os parâmetros físicos da fase granular para avaliação da qualidade do fenômeno de fluidização e queda de pressão.

2.2 Específicos

- Avaliar a influência da densidade e diâmetro das partículas da fase granular na qualidade de fluidização.
- Analisar a aplicabilidade da utilização do OpenFOAM para problemas de CFD em leito fluidizado.
- Avaliar qualitativamente o fenômeno de fluidização no leito fluidizado utilizando o software Paraview.
- Avaliar quantitativamente o fenômeno de fluidização no leito fluidizado utilizando scripts em Python.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 Leito Fluidizado

Os leitos fluidizados são equipamentos nos quais ocorre o fenômeno de fluidização, dessa forma, as partículas sólidas são suspensas e distanciadas pela sua interação com a fase fluida em escoamento, no entanto, sem sofrer arraste para fora dos limites do leito. Por proporcionar uma maior uniformidade de concentração da fase granular no interior do equipamento, o leito fluidizado apresenta maiores taxas de transferência de calor e massa, quando comparados ao leito fixo (CREMASCO, 2012).

A abordagem matemática para o leito fluidizado segue a formulação que descreve a fluidodinâmica para as fases fluida e granular, sendo definidas pelas equações da continuidade (Equações 01 e 03) e do movimento para cada fase (Equações 02 e 04), conhecidas como Equações de Balanço. Nesse contexto, a modelagem expressa o balanço de forças sobre as partículas sólidas, bem como a distribuição da velocidade do fluido.

Tabela 1: Modelagem matemática do escoamento de fluidos num leito fluidizado.

Fase Fluida	$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_f \rho_f) + \nabla \cdot \varepsilon_f \rho_f u_f = 0$	01)
	$\varepsilon_f \rho_f \left[\frac{\partial u_f}{\partial t} + u_f \cdot \nabla u_f \right] = -\nabla p_f + \nabla \cdot \tau_f - m - \rho_f g$	02)
Fase Particulada	$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_p \rho_p) + \nabla \cdot \varepsilon_p \rho_p u_p = 0$	03)
	$\varepsilon_p \rho_p \left[\frac{\partial u_p}{\partial t} + u_p \cdot \nabla u_p \right] = -\nabla p_p + \nabla \cdot \tau_p - m - (\rho_p - \rho_f)g$	04)

Fonte: Adaptado de CREMASCO, 2012 .

Sendo, m é a força resistiva que a fase fluida exerce sobre a fase sólida, como uma componente da força de interação fluido-partícula. Essa força é influenciada pela forma da partícula e pela distribuição dos campos de velocidade do fluido no interior do leito. A formulação matemática deste fator é realizada de maneira experimental. Segundo Massarani (2001) a força resistiva já foi amplamente estudada e a Equação 05 mostra uma correlação que é adequada para a maioria das situações de estudo dos leitos fluidizados, embora apresente maior imprecisão nos resultados para sistemas com alto valor de porosidade (ε_p).

$$m = \frac{\mu_f}{k} \left[1 + \frac{cp_f \varepsilon_f \sqrt{k} (u_f - u_p)}{\mu_f} \right] \varepsilon_f (u_f - u_p) \quad (05)$$

No que diz respeito ao termo τ_i , este representa o tensor de tensão sobre a fase i . A formulação matemática do tensor de tensão para a fase particulada necessita de termos que serão discutidos, uma vez que pertence ao estudo da Teoria Cinética do Fluxo Granular (conhecida pela sigla em inglês KTGF). Vale ressaltar, que a avaliação da força resistiva também pode ser feita utilizando o KTGF, neste caso $m = K_{drag}(u_f - u_s)$. O tensor de tensão para a fase fluida e granular podem ser descritos pelas Equações 06 e 07, respectivamente. (FATTI, 2021).

$$\tau_f = \mu_f [\nabla u_f + \nabla^T u_f] - \frac{2}{3} \mu_f (\nabla \cdot u_f) I \quad (06)$$

$$\tau_s = \mu_s [\nabla u_s + \nabla^T u_s] + \left(\lambda_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) (\nabla \cdot u_s) I \quad (07)$$

As equações que descrevem m e τ_i são chamadas de Equações Constitutivas, e junto as Equações de Balanço – ou Conservativas – modelam o fenômeno fluidodinâmico.

Um leito fluidizado é um sistema que consiste em uma camada de partículas sólidas mantidas em suspensão por um fluido que é forçado através da camada. O fluido mantém as partículas em equilíbrio por meio da combinação de forças de contato entre as partículas e a força hidrodinâmica do fluido (MASSARANI, 2001).

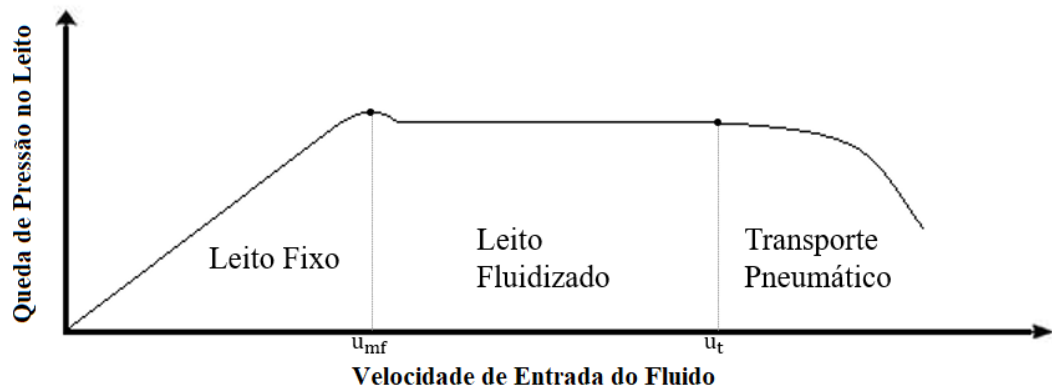
A fluidodinâmica em sistemas particulados, especialmente em leitos fluidizados, é altamente complexa e é influenciada por uma série de fatores, incluindo a massa específica das partículas, a velocidade e direção do fluido, a distribuição de tamanho de partícula, entre outros (MASSARANI, 2001). É importante compreender a fluidodinâmica de sistemas particulados para a otimização da performance do leito fluidizado e para a resolução de problemas técnicos relacionados à sua operação.

As partículas sólidas no interior do leito entram em fluidização quando o fluido transfere quantidade de momento suficiente para sobrepôr a força gravitacional, dada pelo seu peso aparente, dessa forma, a velocidade da fase fluida é chamada de velocidade mínima de fluidização (u_{mf}), sendo uma função das propriedades físicas das partículas sólidas, como densidade e diâmetro, da fase fluida, massa específica e viscosidade, como também, das

condições operacionais do leito - podendo citar a temperatura, pressão e velocidade do fluido (FATTI, 2021).

A determinação de u_{mf} é de essencial importância no estudo fluidodinâmico do leito fluidizado. Do ponto de vista experimental, pode ser visualizado pela queda de pressão que ocorre quando a fase granular entra em fluidização, pois a porosidade do leito aumenta - tendo em vista o distanciamento das partículas - como apresentado na Figura 1 (GOHEL et al, 2007).

Figura 1: Queda de pressão no leito fluidizado.



Fonte: Autor, 2023.

No entanto, estudos experimentais podem ser difíceis de serem realizados em cenários indústrias, devido a custos elevados, bem como, tempo morto do leito fluidizado para a realização do estudo, além de limitações operacionais e de instrumentação. A fim de superar esse problema, a determinação de u_{mf} pode ser realizada por formulações matemáticas. A correlação de Ergun (1952) expressa a queda de pressão num leito fluidizado contabilizando termos relacionados ao escoamento laminar e turbulento.

Pela definição de condição mínima de fluidização, sabe-se que a queda de pressão se iguala ao peso aparente das partículas, dessa forma, a correlação de Ergun (Equação 08) – para o cálculo de u_{mf} é dado em termos adimensionais por:

$$\frac{1.75}{\varepsilon_{mf}^3 \phi_s} Re_{p,mf}^2 + \frac{150(1 - \varepsilon_{mf})}{\varepsilon_{mf}^3 \phi_s^2} Re_{p,mf} = Ar \quad (08)$$

Sendo, os números de Reynolds (Re) e de Arquimedes (Ar), dispostos nas Equações 09 e 10 respectivamente.

$$\bullet \quad Re = \frac{d_p u_{mf} \rho_f}{\mu_f} \quad (09)$$

(10)

$$\bullet \quad Ar = \frac{d_p^3 \rho_f (\rho_p - \rho_f) g}{\mu_f^2}$$

Sendo,

- ε_{mf} : Porosidade na condição de mínima fluidização;
- ϕ_s : Esfericidade da partícula;
- d_p : Diâmetro da partícula;
- ρ_f : Massa específica do fluido;
- ρ_p : Massa específica da partícula;
- μ_f : Viscosidade do fluido.

A porosidade do leito em condição mínima de fluidização pode ser determinada a partir da Equação 11, sendo encontrada a partir de trabalhos experimentais e que se adequa a diversas partículas com distintas esfericidades (THANH; DUC, 2020).

$$\frac{(1 - \varepsilon_{mf})}{\varepsilon_{mf}^3} \approx 11 \quad 11)$$

Além da correlação apresentada, existem diversas outras que podem ser utilizadas em cenários mais específicos, na Tabela 2 abaixo é possível visualizar algumas delas. Vale ressaltar, que tais correlações foram obtidas em condições operacionais, e propriedades das fases particulada e fluida particulares, ou seja, não são apropriadas para todos os cenários de leito fluidizados.

Tabela 2: Correlações empíricas para a determinação de u_{mf} .

Autores	Correlação para o cálculo de u_{mf}
Leva (1959)	$u_{mf} = \frac{0.702 \cdot (d_p)^{1.62} \cdot (\rho_p - \rho_f)^{0.95}}{\rho_f^{0.05} \mu_f^{0.88}}$
Wen & Yu (1966) ($d_p > 100\mu m$)	$u_{mf} = \frac{\mu_f}{d_p \rho_f} [(33.70^2 + 0.0408Ar)^{0.5} - 33.70]$
Baeyens & Geldart (1973)	$u_{mf} = \frac{\mu_f}{d_p \rho_f} [(25.25^2 + 0.0408Ar)^{0.5} - 25.25]$
Thonglimp, Hiquily & Laguerie (1984)	$u_{mf} = \frac{\mu_f}{d_p \rho_f} [(31.60^2 + 0.0425Ar)^{0.5} - 31.60]$

Para velocidades elevadas do fluido, ocorre o fenômeno de elutriação, no qual as partículas do leito são arrastadas para fora dos limites do equipamento. Essa velocidade é conhecida como Velocidade Terminal (u_t), e precisa ser determinada experimentalmente. Entre as diversas correlações apresentadas na literatura, a Equação 12 é apropriada para valores

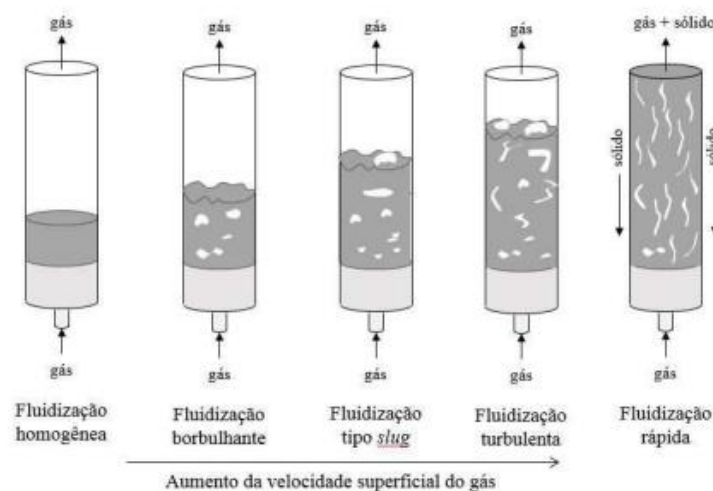
de Reynolds entre 10^{-1} a 10^6 , o que a torna uma opção viável para a determinação da Velocidade Terminal (STEPIEN, 2015).

$$Re^2 \left(\frac{24}{Re} + \frac{4}{\sqrt{Re}} + 0.4 \right) = \frac{4}{3} Ar \quad (12)$$

3.2 Regimes de Fluidização

Regimes fluidodinâmicos diz respeito aos diferentes padrões de escoamento de um fluido no interior do leito fluidizado. Esses regimes são definidos pelas características do escoamento, como a velocidade, viscosidade, densidade, geometria do sistema e outras propriedades do fluido. Uma abordagem clássica para classificar os regimes de fluidização baseia-se na análise do comportamento do leito com o aumento da velocidade do fluido, mantendo constante as demais características do equipamento e da fase granular (CREMASCO, 2012).

Figura 2: Regimes de fluidização



Fonte: (GENEHR,2015)

Como observado na Figura 2, no instante que a velocidade superficial do fluido supera u_{mf} as partículas colapsam, criando vazios, tendo como consequência o surgimento de bolhas no interior do leito. Percebe-se também, que o aumento da velocidade do fluido leva a bolhas maiores, no regime denominado *Slugging*, caracterizado pela coalescência das bolhas. Para maiores incrementos na velocidade, as bolhas se quebram levando ao regime de alta

turbulência. Vale ressaltar, que a descrição dos regimes de fluidização são bastante dependentes das características das partículas que compõem o leito (FATTI, 2021).

3.3 Caracterização das Partículas

A caracterização de partículas é um processo que consiste em determinar as propriedades físicas das partículas em uma amostra, como tamanho, forma, distribuição de tamanho. No contexto de fluidodinâmica, tal método acaba sendo dificultado a depender do quão irregular a partícula seja, muito embora, seja de essencial importância pois permite que as forças de interação fluido-partícula e partícula-partícula sejam apropriadamente computadas (CREMASCO, 2012).

Nesse contexto, autores afirmam que a partícula esférica tem a forma mais simples que, por consequência, pode-se mais facilmente ser desenvolvido modelos para forças que atuam em tal grão. Dessa forma, uma metodologia usualmente aplicada para partículas irregulares é pela comparação de sua forma com a de uma esfera, tal fator é chamado de esfericidade, que varia de 0 a 1, sendo o valor de 1 uma partícula esférica, apresentado na Equação 13 (ECHENIQUE et al., 2021).

$$\phi = \frac{A_e}{A_p} \quad (13)$$

Sendo,

- A_e : Área de uma esfera de mesmo volume da partícula;
- A_p : Área da partícula.

Além do conceito de esfericidade, Cremasco (2012) aborda em seu livro diversas outras características de partículas, algumas dessas são:

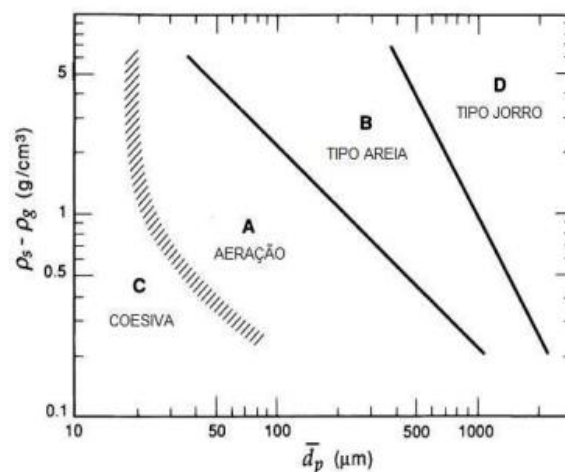
- Porosidade: Valor adimensional que mede a fração de vazios no interior da partícula, sendo conhecida como porosidade particular, ou dos vazios entre os grãos que formam um leito. Tem seu valor entre 0 e 1.
- Massa específica: Propriedade definida pela quantidade de massa da partícula dividido pelo seu volume. Tal valor pode variar devido ao cálculo do volume, que difere caso a porosidade seja considerada.

- Tamanho: Dado normalmente pelo cálculo do diâmetro da partícula. Existem diversos métodos que podem ser utilizados, alguns deles são: diâmetro de uma esfera que teria o mesmo volume que a partícula (diâmetro volumétrico), o diâmetro de uma esfera que teria a mesma área superficial que a partícula (diâmetro superficial), ou o diâmetro de uma esfera que teria a mesma velocidade de sedimentação que a partícula (diâmetro de sedimentação).

Visando entender o comportamento fluidodinâmico típico de partículas com diferentes massas específica aparente e diâmetro, GELDART (1973) propôs uma classificação para sólidos granulares variando suas características físicas, separando-o em 4 grupos distintos. Vale ressaltar, que a generalização do regime de fluidização para cada grupo deve ser realizado com cautela, tendo em vista que tal comportamento é função não apenas das características das partículas.

Partículas do grupo A apresentam regime de fluidização borbulhante quando a velocidade superficial do fluido supera u_{mf} , enquanto que sólidos do grupo B já apresentam tal comportamento mesmo na velocidade mínima de fluidização. As partículas do grupo C, possuem notória coesividade, sendo difíceis de fluidizar e estão associadas ao regime Slugging, diferentemente das partículas D – com alta densidade e diâmetro – formam leitos de jorro estáveis. (GELDART, 1973)

Figura 3: Gráfico de Geldart.



Fonte: (GENEHR,2015)

Diversos são os exemplos de partículas que podem obter a classificação de Geldart, no que diz respeito aos alimentos, são normalmente do tipo D, devido aos seus elevados diâmetros.

Partículas do Tipo A encontra-se na indústria em reatores catalíticos heterogêneos. A Tabela 3 apresenta alguns exemplos de partículas com sua classificação.

Tabela 3: Materiais granulares e suas classificações de Geldart.

Material Granular	Grupo de Geldart
Aveia	D
Talco	C
Açúcar	B
Areia de Quartzo	B
Cimento	A
Caulim	A
Arroz	D

3.4 Modelos de Mistura

Leitos fluidizados tem como principais benefícios a intensificação dos fenômenos de transferência de calor e massa, quando comparado a demais equipamento. No entanto, tal vantagem depende do grau de mistura das partículas sólidas no interior do leito, exercendo papel crítico para a fluidização promover a homogeneização de temperatura e concentração. Nesse contexto, o regime de fluidização borbulhante exerce papel fundamental na mistura, tendo em vista que as bolhas criadas geram mecanismos para uma maior movimentação e segregação da fase granular (BAKSHI; GHONIEM; ALTANTZIS, 2017).

Diversas são a metodologias empregadas para a quantificação do grau de mistura num leito fluidizado, podendo citar: coeficiente de dispersão de sólidos; coeficiente de difusão granular; índices de mistura, que será abordado nesse trabalho (SALEHI; ASKARISHAHI; RADL, 2020).

Tabela 4: Equações para os índices de mistura.

Autores	Índice de Mistura	Equação
Lexis, (1877)	$M = \frac{\sigma}{\sigma_r}$	14)
Herdan, G., (1960)	$M = \frac{\sigma^2 - \sigma_r^2}{\bar{x}^2}$	15)
Kramer, H. A., (1968)	$M = \frac{\sigma_0 - \sigma}{\sigma_0 - \sigma_r}$	16)
Lacey, O. L., (1943)	$M = \frac{\sigma_0^2 - \sigma^2}{\sigma_0^2 - \sigma_r^2}$	17)
Adams, J. F. E.; Baker A. G., (1956)	$\sigma^2 = \frac{\sum(x_i - \bar{x})}{n - 1}$	18)

Fonte: Adaptado de BRANDAO, 2017.

Como pode ser visualizado na Tabela 4 diversas podem ser a metodologia abordada para a determinação do grau de mistura por meio de índices, no entanto, o índice de Lacey (1943), Equação 17, se destaca por estar presente em diversos estudos que seguem tal metodologia, sendo utilizado nos trabalhos Oschmann et al. (2014) e Tian et al. (2007).

O índice de Lacey é uma medida estatística, que usa a variância da amostra (σ^2) para a determinação quantitativa da mistura. A variância de uma amostra computa o grau de dispersão de tal amostra, quanto maior σ^2 , mais dispersos os dados estarão. Como posto pelo autor do citado índice, uma mistura completamente randômica é aquela na qual a probabilidade de encontrar um componente é a mesma em qualquer ponto da região. Avaliando cada termo da Equação 17 – no contexto de leito fluidizado - σ_0^2 e σ_r^2 são as variâncias do leito antes da agitação e numa mistura probabilística, respectivamente. Já o termo σ^2 , diz respeito a variância atual do leito, e tem um valor intermediário em relação aos elementos explicitados anteriormente.

3.5 Transformada de Fourier

A Transformada de Fourier é utilizada para representação de funções em termos de fatores trigonométricos, sendo um campo amplamente estudado por matemáticos como: Euler, Bernoulli e Gauss. Porém, foi somente em 1807 que Jean Baptiste Joseph Fourier propôs uma formulação para tal problema. Sua transformada utilizada senoides complexas, de diversas

frequências, ou seja, converte o domínio da função original numa nova função no domínio da frequência (VISWANATHAN ANAND, [s.d.]).

A Transformada de Fourier é empregada no processamento de sinais, sendo utilizada uma forma alternativa de seu equacionamento que permite a utilização de dados discretos, sendo chamada de Transformada de Fourier Discreta (DFT). No entanto, tal transformada envolve uma série de iterações que a torna computacionalmente ineficiente, devido a isso, o matemático J.W.Cooley, em 1965, propôs um algoritmo para otimizar o tempo de processamento da DFT, sendo chamado de Transformada Rápida de Fourier (FFT).

A Equação 18 mostra a DFT, sendo a_n o sinal que será transformado, k a frequência que esse será decomposto e A_k o espectro do sinal.

$$A_k = \sum_{n=0}^{N-1} e^{-i\frac{2\pi}{N}kn} a_n \quad 18)$$

3.6 Análise Numérica

A avaliação numérica de problemas físicos é de essencial importância por permitir que sistemas complexos sejam solucionados, quando resultados analíticos e/ou experimentais são de difícil obtenção.

Existem diversos métodos para a avaliação numérica da dinâmica de fluidos, entre eles pode ser citado o método de Monte Carlo. Este método envolve uma sequência de microprocessos discretos que são aplicados a uma amostra finita de partículas que representam uma população real de partículas. Ao contrário de outros métodos, ele não requer discretização e é especialmente adequado para lidar com distribuições de propriedades multivariadas. Entretanto, o tempo de computação do método de Monte Carlo pode ser significativamente maior em comparação com outros métodos, e, portanto, é restrito para ser utilizado em controle ou otimização de processos (RIECK et al., 2016).

Uma outra metodologia que pode ser utilizada para a simulação de sistemas fluidodinâmicos é a utilização de máquinas de aprendizado, em especial o ramo de redes neurais profundas – conhecido como *deep learning*. Tais modelos tem capacidade de aproximar comportamentos não lineares a partir de variáveis de entradas, no entanto, são entendidos como modelos de caixa preta, pois não há um equacionamento fenomenológico do processo, logo,

não fica evidente as relações criadas pelo modelo que relacionam a variável de saída ao *input* (FRESCA; MANZONI, 2021).

No entanto, a técnica mais utilizada para a simulação de escoamentos de fluidos é a fluidodinâmica computacional (CFD). Tal método utiliza equações fenomenológicas para simular o comportamento de fluidos. Essas equações são discretizadas em uma malha, e então resolvidas numericamente para obter valores das variáveis do sistema.

3.7 Fluidodinâmica Computacional

O método de CFD (do inglês, *Computational Fluid Dynamics*) é uma técnica de aproximação numérica para resolução de problemas de fenômenos de transporte, no qual, o equacionamento matemático é descrito por meio de equações diferenciais parciais, nas coordenadas espaciais bem como, com variação temporal - para o caso de sistemas dinâmicos. Tal método progrediu de forma intensa no início do século XX, tendo em vista os avanços computacionais, com melhores CPU's, memória RAM e uso de unidades gráficas para processamento em paralelo. (ZAWAWI et al., 2018)

Uma das primeiras etapas para o uso da técnica de CFD é a definição da geometria, espaço bidimensional ou tridimensional no qual o processo se realizará. Em seguida ocorre a criação da malha, que consiste na divisão da geometria escolhida em células de formato poligonal - usualmente tetraedros, hexaedros, prismas ou pirâmides, para o caso de um espaço definido em três dimensões. É importante salientar que a malha deve ser refinada, porém não ao ponto do custo computacional ser demasiado não compensando o ganho em precisão do resultado, dessa forma, opta-se por dá atenção especial aos locais da geometria onde o fluxo do fluido muda de direção, como em arestas e dobras (KOCHEVSKY; NENYA, 2004) .

Diversas são as abordagens matemáticas para a modelagem de um problema com utilização de CFD, as mais utilizadas são a Euleriana e Lagrangeana. A abordagem Euleriana trata as fases do problema como meios contínuos e interpenetrantes, utilizando discretização do volume de controle no qual o problema se encontra, implicando menor custo computacional. Já a abordagem Lagrangeana modela o balanço de forças que ocorre em cada elemento das fases, empregando a discretização de elemento e, diferentemente da anterior, requer maior poder de processamento (FATTI, 2021).

3.7.1 Geometria e Malha

A criação de geometria é uma etapa fundamental na simulação numérica de fluidos utilizando CFD. Para isso, é necessário utilizar softwares de modelagem tridimensional capazes de criar modelos geométricos, podendo citar o software comercial *SolidWorks*, ou o software gratuito *onShape*, no entanto, geometrias mais simples podem ser construídas nos pacotes providos pelos softwares de CFD.

Após a criação da geometria, é importante realizar o refino de malha para que a simulação possa ser realizada com precisão. Nessa etapa, é necessário definir o tamanho da célula, uma metodologia que pode ser utilizada é o emprego do parâmetro y^+ . Uma malha grosseira – com a quantidade de células abaixo do suficiente - pode resultar em perda de precisão, de modo contrário, malhas muito refinadas podem levar a um aumento excessivo no custo computacional. Portanto, é importante realizar um ajuste adequado do parâmetro y^+ para obter resultados precisos e eficientes (KOCHEVSKY; NENYA, 2004) .

O parâmetro y^+ é um dos parâmetros mais importantes na simulação numérica de fluidos. Ele está diretamente relacionado com a espessura da camada limite e é usado para ajustar o tamanho da malha. Ele é a relação entre os efeitos turbulentos e laminar em uma célula. Valores de $y^+ \approx 1$ são os mais desejáveis para modelagem de fluxos próximos à parede, no entanto, para escoamentos turbulentos, valores mais elevados de y^+ são aceitáveis, normalmente sendo empregados $30 \leq y^+ \leq 300$. (PUREVSUREN; TIAN, 2018).

3.7.2 Métodos de Discretização

Discretização é o processo de resolução das equações diferenciais parciais (EDP's) nas células da malha - ou nos elementos finitos - dessa forma, a resolução ocorre na divisão do domínio geométrico. Pela complexidade dos fenômenos estudados, não é possível a resolução analítica das EDP's, dessa forma, métodos são aplicados para sua transformação em equações algébricas, que podem ser computadas. Existem diversos métodos de discretização, sendo os mais comuns: Método de Diferenças Finitas; Método dos Elementos Finitos e Método dos Volumes Finitos (ASHGRIZ; MOSTAGHIMI, 2002).

A técnica de diferença finita tem como intuito aproximar as equações diferenciais em termos de diferenças finita, tomando a derivada em termos finitos. Supondo que se deseje avaliar a função diferencial $\mathbf{u}'(\mathbf{x})$, isso pode ser feito – utilizando o citado método – pela aproximação: $\mathbf{D}_+ \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{u}(\mathbf{x}+h) - \mathbf{u}(\mathbf{x})}{h}$, sendo h um valor pequeno. O erro da aproximação pode

ser diminuído pela escolha de h cada vez menor, mas também, diferenças finitas de ordem superior podem ser utilizadas, utilizando expansões maiores da série de Taylor (LEVEQUE ; C; LEVEQUE, 1998).

O método dos elementos discretos (DEM), comumente utilizado na abordagem Lagrangeana, é comumente aplicável em problemáticas que envolvem fluidos e fluxos granulares, sendo também utilizado para análise estrutural de sólidos. Isso se deve ao fato que, a citada técnica, descreve matematicamente o sistema em estudo utilizando a 2ª Lei de Newton, ou seja, é realizado um balanço de forças para cada elemento e são calculadas as interações partícula-partícula e partícula-parede, acompanhando o deslocamento de cada elemento no tempo (BRANDAO, 2017). As equações 19 e 20 descrevem o método DEM.

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = \sum_{j=1}^{k_c} (f_{c,ij} + f_{d,ij}) + m_i g \quad (19)$$

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_{j=1}^{k_c} (M_{t,ij} + M_{r,ij} + M_{n,ij}) \quad (20)$$

Muito embora o método DEM tenha boa precisão e estabilidade na simulação, a complexidade matemática da técnica tem como consequência um maior custo computacional e tempo de simulação.

Ao avaliar o método dos volumes finitos (FVM), este é usualmente empregado em problemas físicos que apresentam leis conservativas. Nessa técnica – especificando casos multifásicos – tanto a fase fluida quanto a sólida são tratadas como meios contínuos, sendo assim, a análise é realizada num volume de controle, e suas propriedades acompanhadas durante o tempo, tal abordagem é chamada de Euleriana e envolve menor custo computacional.

Dessa forma, as equações envolvidas – Leis de Balanço e Equações Constitutivas – são avaliadas matematicamente, por integração, em cada célula da malha. Dada a equação de balanço da forma: $-\nabla \cdot (K\nabla u) = f$, definida num volume Ω e, sendo \mathbf{u} uma função que define as propriedades físicas, pode ser discretizada - pelo método FVM - como posto na Equação 21 (CHEN, [s.d.]).

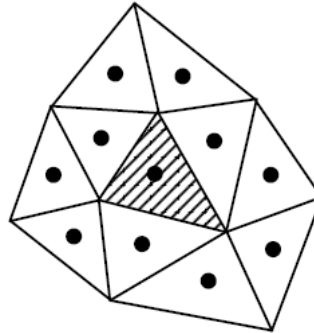
$$-\int_{\partial b_i} (K\nabla_h u_h) \cdot n \, dS = \int_{b_i} f \, dx, \quad \forall b_i \subset \Omega, i \leq M \quad (21)$$

Sendo, M a quantidade de células da malha e o subscrito h , a aproximação da função \mathbf{u} para um domínio discreto. Para a avaliação de tal discretização, diversos métodos podem ser

utilizados, um dos mais comuns é empregar o método do volume discreto utilizando a técnica de célula centralizada (Equação 22).

$$\nabla_h u_h \cdot n_e = \frac{u_h|_{\tau_2} - u_h|_{\tau_1}}{c_{\tau_2} - c_{\tau_1}} \quad (22)$$

Figura 4: Visualização da geometria externa para avaliação do FVM pela técnica centrada na célula.



Fonte: Adaptado de Chen, [s.d.]

A Equação 21 define o fluxo pelos contornos da geometria, e se assemelha bastante ao método de diferenciação, tal que:

- τ_1 e τ_2 são a superfície interna e externa da célula.
- n_e : vetor normal de τ_1 na direção de τ_2 .
- $u_h|_{\tau_i}$ é o valor da função avaliado na superfície i .
- c_{τ_i} são os pontos de cada superfície i . É possível visualizar tais pontos das superfícies externas de cada célula, na Figura 4.

O método dos volumes finitos é especialmente preciso para problemas físicos descritos matematicamente por leis conservativas, por ser robusto o suficiente para tais problemas, e se adequando bem para geometrias complexas, diferentemente no método de diferença finita. Simultaneamente, não apresenta grande custo computacional, como o DEM. No entanto, sua precisão nos resultados está bastante vinculada a regularidade geométrica da malha (EYMARD; GALLOUËT; ELE HERBIN, 2003).

3.7.3 Teoria Cinética do Fluxo Granular

A Teoria Cinética do Fluxo Granular (da sigla em inglês, KTGF) é um modelo, amplamente utilizado, para o cálculo das interações partícula-partícula utilizando a abordagem Euleriana. O citado faz tal avaliação numérica pelo cálculo das seguintes propriedades relacionadas a fase granular: cisalhamento, viscosidade e pressão (FATTI, 2021).

No contexto do KTGF, uma nova propriedade é introduzida, chamada de temperatura granular (Θ_s). Tal conceito está relacionado a energia cinética macroscópica da movimentação aleatória das partículas contida na fase granular, sendo análoga a propriedade termodinâmica de temperatura amplamente conhecida. O valor de Θ_s está implicitamente definido por meio da equação diferencial apresentada na Equação 22 (LUNDBERG; HALVORSEN, 2008).

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho_s \alpha_s \Theta_s) + \nabla \cdot (\rho_s \alpha_s u_s \Theta_s) \right] = \tau_s : \nabla u_s - \nabla \cdot q_s - \gamma_{\Theta_s} - 3K_{drag} \Theta_s \quad (22)$$

Tal que,

- $\nabla \cdot q_s$ é o termo de flutuação de energia, sendo descrito por: $q_s = k_{\Theta_s} \nabla \Theta_s$;
- γ_{Θ_s} diz respeito a dissipação de energia cinética causada pelo choque entre as partículas, dada por: $\gamma_{\Theta_s} = \frac{12(1-e_{ss}^2)g_{0,ss}}{d_p \sqrt{\pi}} \rho_s \alpha_s^2 \sqrt{\Theta_s^3}$. e_{ss} é chamado de coeficiente de restituição, tendo seu valor entre 0 e 1, e computa a elasticidade do choque entre as partículas. Caso seu valor seja 1, o choque é totalmente elástico e nenhuma energia é dissipada;
- τ_s representa a tensão na fase granular;
- u_s é o vetor velocidade da fase granular e,
- α_s é a fração de partículas;
- e_{ss} é a elasticidade do choque.

A temperatura granular é essencial para o cálculo de diversas outras propriedades das partículas, como na determinação das viscosidades granular e mássica granular e de condutividade granular. No entanto, a avaliação de tais parâmetros necessitou de resultados experimentais para o desenvolvimento de correlações. Entre as diversas correlações presentes na literatura, foram escolhidas aquelas que mais se adequam ao modelo KTGF, como apresentado por Lundberg et al. (2008) e FATTI (2021). A Tabela 5 descreve matematicamente os termos.

Tabela 5: Correlação de diversas propriedades que se adequam ao KTGF.

Propriedade	Autor	Equação
		$\mu_s = \mu_{s,col} + \mu_{s,kin} \quad 23)$
		$\mu_{s,col} = \frac{4}{5} \rho_s \alpha_s^2 d_p g_{0,ss} (1 + e_{ss}) \sqrt{\frac{\Theta_s}{\pi}} \quad 24)$
Viscosidade Granular	Syamlal <i>et al.</i> (1993)	$\mu_{s,kin} = \frac{\rho_s \alpha_s d_p \sqrt{\Theta_s \pi}}{6(3 - e_{ss})} \left[1 + \frac{2}{3} (1 + e_{ss})(3e_{ss} - 1) \alpha_s g_{0,ss} \right] \quad 25)$
	Gidaspow (1994)	$\mu_{s,kin} = \frac{10 \rho_s \alpha_s d_p \sqrt{\Theta_s \pi}}{96(1 + e_{ss})} \left[1 + \frac{4}{5} (1 + e_{ss}) \alpha_s g_{0,ss} \right]^2 \quad 26)$
Viscosidade mássica granular	Lun (1984)	$\lambda_s = \frac{4}{3} \rho_s \alpha_s d_p g_{0,ss} (1 + e_{ss}) \sqrt{\frac{\Theta_s}{\pi}} \quad 27)$
Condutividade granular	Syamlal <i>et al.</i> (1993)	$k_{\Theta_s} = \frac{15 \rho_s \alpha_s d_p \sqrt{\Theta_s \pi}}{4(41 - 33\eta)} \left[1 + \frac{12}{5} \eta^2 (4\eta - 3) \alpha_s g_{0,ss} + \frac{16}{15\pi} (41 - 33\eta) \eta \alpha_s g_{0,ss} \right] \quad 28)$
		$\eta = \frac{1}{2} (1 + e_{ss}) \quad 29)$
Função de distribuição radial	Lun (1984)	$g_{0,ss} = \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}} \right)^{1/3} \right]^{-1} \quad 30)$

Fonte: Lundberg et al. (2008)

No que diz respeito a avaliação de K_{drag} e, diferentemente dos parâmetros apresentados na Tabela 5, deve-se escolher o que mais se adequa ao problema físico simulado. Existem diversas correlações na literatura, sendo necessário uma avaliação cuidadosa para sua escolha. Dentre eles se destacam (SYAMLAL; O'BRIEN, 1994) e (GIDASPOW, 1994)

- Modelo de Gidaspow

$$K_{drag} = \begin{cases} \frac{3\rho_f\alpha_f\alpha_s}{4d_p} C_D |u_s - u_f| \alpha_f^{-2.65} & \alpha_f > 0.8 \\ 150 \frac{\mu_f(1-\alpha_f)^2}{\alpha_f(d_p\phi)^2} + 1.75 \frac{\rho_f(|u_f - u_s|)(1-\alpha_f)}{d_s\phi} & \alpha_f \leq 0.8 \end{cases} \quad (31)$$

Sendo o fator de arraste definido por,

$$C_D = \frac{24}{\alpha_f Re} \left[1 + 0.15(\alpha_f Re)^{0.687} \right] \quad (32)$$

- Modelo de Syamlal O.Brien

$$K_{drag} = \frac{3\rho_f\alpha_f\alpha_s}{4d_p v_r^2} C_D |u_s - u_f| \quad (33)$$

Sendo o fator de arraste definido por,

$$C_D = \left[0.63 + \frac{4.8}{\sqrt{\frac{Re}{v_r}}} \right]^2 \quad (34)$$

E, a velocidade relativa dada por,

$$v_r = \frac{1}{2} [A - 0.06Re] + \frac{1}{2} \sqrt{(0.06Re)^2 + 0.12Re(2B - A) + A^2} \quad (35)$$

$$A = \alpha_f^{4.14} \quad (36)$$

$$B = \begin{cases} 0.8\alpha_f^{1.28} & \alpha_f \leq 0.85 \\ \alpha_f^{2.65} & \alpha_f > 0.85 \end{cases} \quad (37)$$

Para finalizar a modelagem do KTGF é necessário a avaliação da pressão da fase granular. De modo semelhante ao que foi apresentado na Tabela 5, a escolha da correlação é realizada analisando aquela que melhor se adapta ao modelo KTGF, nesse contexto, FATTI (2021) e Tandon et al. (2014) apresentam o modelo de Lun (1984).

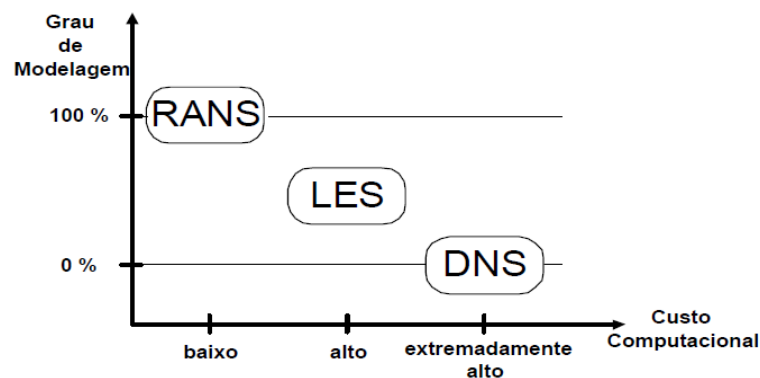
$$p_s = \rho_s \alpha_s \Theta_s (1 + 2(1 + e_{ss}) \alpha_s g_{0,ss}) \quad (38)$$

3.7.4 Modelos de Turbulência

A maioria dos escoamentos estudados tem comportamento turbulento, sendo causado por irregularidades na geometria, ou elevadas velocidades de escoamento. Por ser um fenômeno complexo e altamente não linear, caracterizado por flutuações rápidas e irregulares nos campos de velocidade e pressão do fluido, a turbulência não pode ser avaliada numericamente pela discretização das equações que o governam, pois o custo computacional seria demasiado, isso se deve ao caráter caótico que rege tal fenômeno (TORRECILLA, 2004).

Apesar da quantidade elevada de pesquisas e modelos desenvolvidos no ramo do escoamento turbulento, não existe uma formulação matemática que abrange todos os casos, sendo necessário avaliar ponderar o custo computacional, pelo grau de precisão nos resultados. Apesar disso, foram criados três ramos principais para a simulação de turbulência são eles: Simulação Numérica Direta (DNS), Simulação de Grandes Escalas (LES), Simulação Numérica de Escoamentos Turbulentos via Equações de Médias de Reynolds (RANS). A Figura 5 traz um resumo das principais características dos modelos (“3 Modelagem da Turbulência,” [s.d.]).

Figura 5: Comparação entre os três modelos de turbulência.

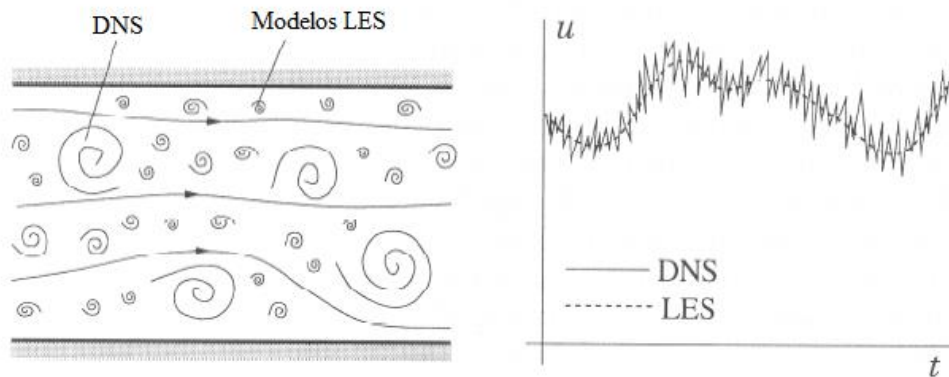


A simulação de turbulência utilizando DNS emprega o uso das equações de Navier-Stokes diretamente, discretizando-as numa malha suficientemente refinada, devido a isso, é dito que não existe modelagem de turbulência em tal método. No entanto, para valores elevados do número de Reynolds – como em aplicações aerodinâmicas no qual Re estão em torno de 10^6 - a quantidade de células na malha inviabiliza o uso de tal método, sendo tal método empregado para menores valores de Re .

O método LES, calcula diretamente as grandes escalas, enquanto que as pequenas são modeladas, como pode ser visualizado na Figura 6. Dessa forma, a técnica resolve os grandes turbilhões que contém energia, sendo difíceis de modelar, pois tem alta dependência do

escoamento e transportam momento, massa e energia térmica. No entanto, tais características não se aplicam aos vórtices pequenos, sendo produzidos pelos grandes e tendo caráter principalmente de dissipação de energia, logo, são mais fáceis de modelar.

Figura 6: Comparação entre os métodos LES e DNS.



Fonte: Adaptado de Torrecilla (2004)

Os modelos RANS adotam a simplificação que cada variável associada ao escoamento turbulento é dada em termos de sua média, logo, $\phi = \bar{\phi} + \phi'$. Sendo ϕ uma variável, e $\bar{\phi}$, ϕ' , seu valor médio e flutuação instantânea, respectivamente. Assim, as equações de Reynolds são desenvolvidas pela inserção de $\bar{\phi}$ nas equações de Navier-Stokes, com o aparecimento do chamado tensor de Reynolds ($-\overline{u_i u_j}$), sendo necessário a criação de modelos para sua avaliação e fechamento do sistema de equações matemáticas.

Nesse contexto, Boussinesq (1877), estudando os fluxos turbulentos, propôs uma simplificação para o cálculo da tensão turbulenta pela sua analogia com a tensão laminar. Em seu trabalho, o autor explicitou que $-\overline{u_i u_j}$ pode ser proporcional ao gradiente de velocidade média, sendo o coeficiente de proporcionalidade, chamado de viscosidade média (ν_t). Com essa simplificação, os modelos criados – usando a hipótese de Boussinesq – tiveram como intuito a determinação de ν_t (YUSOF et al., 2020).

Existem diversos modelos para o cálculo da tensão turbulenta, os modelos que utilizam 1 ou 2 equações de turbulência se apoiam na hipótese de Boussinesq. No entanto, para casos onde a citada simplificação não é válida - em geral escoamentos com turbulência fortemente anisotrópica - é necessário a avaliação de diversas equações de Transporte do Tensor de Reynolds (RSM). A Tabela 6 traz um resumo dos principais modelos de cada categoria.

Tabela 6: Resumo dos principais modelos RANS de turbulência.

Classe do Modelo	Principais Modelos
Modelo de uma equação	Spalart-Almaras (1992)
	Baldwin – Barth (1991)
Modelo de duas equações	$k - \varepsilon$ (LAUNDER, SPALDING ,1993)
	$k - \omega$ (WILCOX, 1970)
Modelo de sete equações	RSM

Fonte: Autor, 2023.

3.8 Ferramentas Computacionais

Diversas foram as ferramentas computacionais utilizadas neste trabalho, sendo assim, essa sessão tem como intuito a conceituação e detalhamento de tais ferramentas.

Figura 7: Ferramentas computacionais utilizadas. a) OpenFoam; b) ParaView; c) Statistica; d) Origin; e) Linguagem de programação Python.



a)

b)



c)



d)



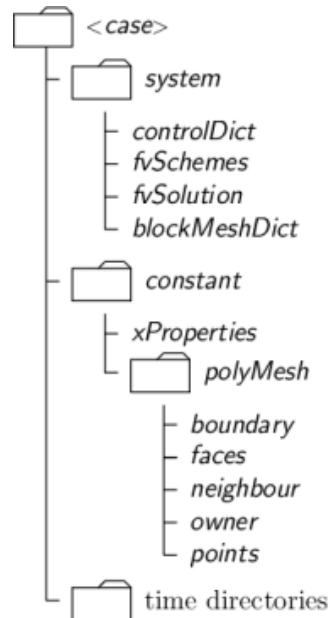
e)

3.8.1 OpenFoam

O OpenFoam (do inglês, Open Source Field Operation and Manipulation) é um software gratuito e de código aberto desenvolvido em 2004 pela OpenCFD Ltd sendo utilizado para fins comerciais e acadêmicos nas mais diversas áreas da engenharia. É essencialmente construído e

desenvolvido na linguagem de programação C++ e apresenta uma estrutura de arquivos padronizada que se divide nas pastas: *system*, *constant* e *times* (FATTI, 2021).

Figura 8: Estrutura de arquivos no OpenFoam.



Fonte: <https://www.openfoam.com/>

A seguir serão abordados cada pasta presente no OpenFoam:

- *system*: Contém os parâmetros relativos ao procedimento do solucionador que será executado. São três os arquivos essenciais que tal pasta deve conter. São eles:
 - *controlDict*: Contem parâmetros da execução da simulação tais como, o tempo que a simulação irá ocorrer, número de Courant, timestep da simulação, tempo para escrita dos dados simulados, dentre vários outros.
 - *fvSolution*: Define os solucionadores para cada variável que será calculada – pressão, velocidade, massa específica, fração da fase particular - junto com a tolerância aceitável e a quantidade mínima de iterações.
 - *fvScheme*: Define os métodos discretizadores que serão utilizados para cada operação matemática: derivada total, gradiente, divergente, laplaciano, interpolação, dentre outros.
- *constant*: Tem a descrição das constantes do problema a ser simulado. Contém uma subpasta denominada *polyMesh* que contém a malha da geometria definida. Alguns exemplos de constantes são: gravidade, propriedades físicas das fases

(massa específica, calor específico) e definição do modelo de turbulência a ser utilizado.

- *times*: Contém as variáveis que serão simuladas. Tal pasta inicia com a subpasta '0', que apresenta as condições iniciais e de contorno para todas as variáveis da simulação. No andamento da simulação, mais pastas serão criadas, com o resultado da simulação, no tempo de escrita que foi definido pelo parâmetro escolhido na pasta *system*.

O OpenFoam contém vários *solvers*, adequados a diversos casos para simulações que apresentem fenômenos físicos ou químicos. Além disso, apresenta *utilities*, que são comandos para realizar alguma manipulação dentro do OpenFoam. Alguns exemplos são: *blockMesh* (construção da malha a partir de uma geometria); *setFields* (definição de propriedades físicas dentro de limites geométricos).

3.8.2 ParaView

ParaView é uma ferramenta de pós-processamento de dados, gratuito e de código aberto, que permite a análise e visualização de dados científicos de grande porte. Ele foi projetado para trabalhar com conjuntos de dados que são tão grandes que não podem ser facilmente manipulados em software convencional de análise de dados, destacando o fato que o software trabalha com paralelismo computacional (AHRENS, 2005).

O ParaView foi desenvolvido por um esforço conjunto pela empresa de tecnologia Kitware e Los Alamos National Laboratory no ano de 2000, e desde então vem sendo continuamente atualizada para trazer ainda mais recursos. O software permite que os usuários interajam com dados complexos e fornece recursos para visualização e análise de dados avançados, incluindo – mas não se limitando - a animação, criação de imagens estáticas, plotagem e extração de informações de dados.

3.8.3 Statistica

Statistica é um software de análise de dados de renome mundial que oferece uma ampla gama de ferramentas para análise exploratória, modelagem estatística, mineração de dados e visualização de dados. Uma das principais características do Statistica é sua capacidade de realizar análises de dados preditivas e exploratórias de maneira eficiente, com uma interface

amigável ao usuário para usas análises de dados se destacando pela quantidade de ferramentas disponíveis em apenas um software.

O software oferece uma ampla gama de técnicas de modelagem estatística, como regressão linear e não linear, teste de hipótese e análise de componentes principais. Além disso, o Statistica tem uma variedade de ferramentas para mineração de dados no ramo do aprendizado de máquina como árvores de decisão, agrupamento e redes neurais (HILBE, 2007).

3.8.4 Origin

O Origin é desenvolvido pela OriginLab Corporation sendo um software para análise de dados e visualização. É reconhecido por ser fácil de usar, mas com configurações avançadas para aqueles que já trabalham com o software. Entre as diversas capacidades do Origin é possível citar: Exploração de Dados, Ajuste de Curva e Superfície, Estatística, Processamento de Sinal, Visualização de Dados (MAY; STEVENSON, 2009).

No que tange a última funcionalidade supracitada, o Origin tem bastante notoriedade em tal área. Sendo capaz de criar gráficos tanto 2d quanto 3d, para variáveis categóricas e numéricas. Cada gráfico apresenta diversas opções de personalização gráfica, incluindo a possibilidade de juntar gráficos distintos para a criação de um novo.

3.8.5 Linguagem de programação Python

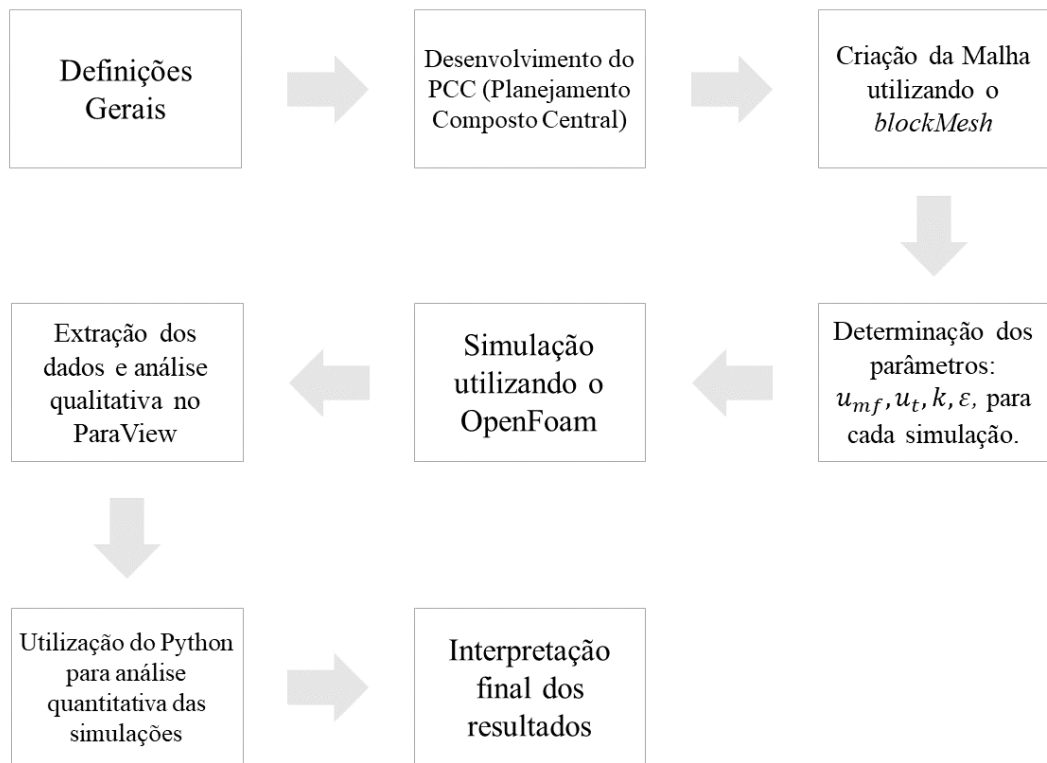
Historicamente, uma grande variedade de linguagens de programação foi utilizada para fins de computação. No entanto, nos últimos anos, a linguagem Python tem ganhado uma grande notoriedade na comunidade, especialmente em relação as suas diversas bibliotecas para análise, manipulação e visualização de dados como: *Numpy*, *Pandas* e *Matplotlib*. Além disso, utilizando a biblioteca *Sklearn*, podem ser implementados algoritmos de aprendizado de máquina.

Python é uma linguagem amplamente reconhecida por sua facilidade de aprendizado, além de ser gratuita e de código aberto. Além disso, a comunidade continuamente disponibiliza ferramentas e bibliotecas, tornando a linguagem ainda mais atraente. Uma pesquisa realizada pela KDnuggets, envolvendo mais de 1.800 participantes, tinha como objetivo verificar suas preferências em relação às linguagens de programação para análise de dados e aprendizado de máquina. De acordo com a pesquisa, Python manteve sua posição como uma das linguagens mais amplamente utilizadas em 2019 (RASCHKA; PATTERSON; NOLET, 2020).

4 METODOLOGIA

A metodologia empregada para o desenvolvimento e obtenção dos resultados seguiu o fluxograma apresentado na Figura 9.

Figura 9: Fluxograma de etapas do trabalho.



Fonte: Autor, 2023.

4.1 Definições Gerais

Tomando como base o trabalho de Fatti (2021), a geometria do leito fluidizado foi escolhida como pseudo-3D, tendo as dimensões 0.28m x 1m x 0.02m. Também apoiando-se no trabalho do citado autor, que compara simulações CFD de um leito fluidizado gasoso com trabalhos experimentais, foi selecionado a altura inicial do leito em 0.4m. A Figura 10 mostra um esquema da geometria do leito, enquanto que a Tabela 7 apresenta um resumo dos parâmetros fixos iniciais da simulação.

Figura 10: Esquema do leito fluidizado.

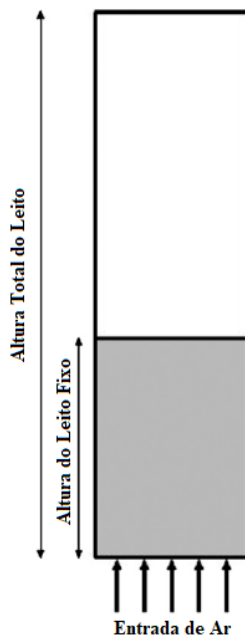


Tabela 7: Resumo dos parâmetros do leito.

Parâmetro	Valor
Largura do leito	0.28 m
Altura do leito	1 m
Profundidade do leito	0.02 m
Altura do leito fixo	0.4 m
Empacotamento do leito fixo	0.6
Coefficiente de restituição	0.9
Pressão	10^5 Pa
Temperatura	300K
Densidade do ar	1.225 kg/m^3
Viscosidade cinemática do ar	$1.485 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$

4.2 Desenvolvimento do Planejamento Experimental

No intuito de avaliar numericamente a qualidade do fenômeno de fluidização mediante a variação das propriedades físicas granulares, foi definido a partir da utilização de um planejamento experimental as propriedades da fase granular: Massa específica (ρ_s) e Diâmetro (d_p) de forma que as partículas escolhidas percorreram todas as classificações propostas por Geldart, Figura 3.

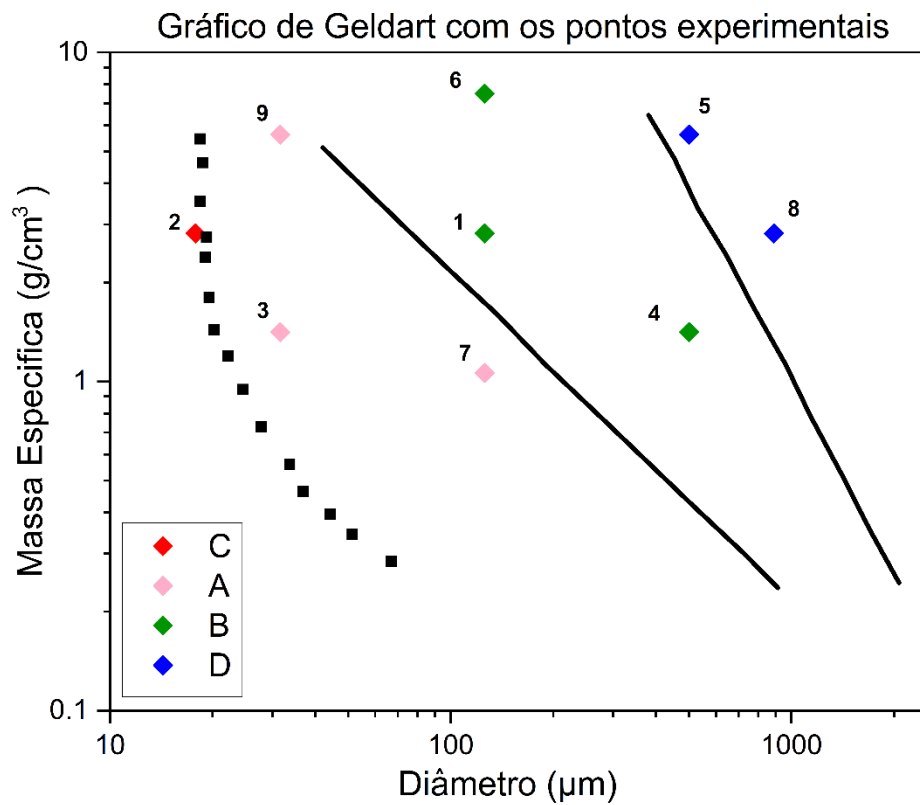
O Planejamento Composto Central (PCC) é uma metodologia para estudo de superfícies de respostas, mediante k variáveis de entradas, analisando sua influência na variável de saída. Nesse contexto, o PCC é amplamente utilizado por utilizar poucos ensaios – se comparado a outras técnicas. O citado método é formado por 3 partes: k^2 pontos fatoriais, $2k$ pontos axiais e o ponto central (MENDONÇA, 2012).

No presente trabalho, o PCC foi desenvolvido utilizando o software Statistica, sendo o ponto central escolhido para ser uma partícula tipo B, $\rho_s = 2820 \text{ kg/m}^3$ e $d_p = 126 \mu\text{m}$. Tendo em vista que o gráfico de Geldart apresenta os eixos em escala logarítmica, foi necessário tal transformação matemática para as variáveis avaliadas. A Tabela 8 apresenta os resultados do PCC, já na escala numérica original.

Tabela 8: Planejamento Experimental.

Simulação	Massa específica (kg/m ³)	Diâmetro (μm)	Classificação de Geldart
1	2820	126	B
2	2820	18	C
3	1410	32	A
4	1410	501	B
5	5620	501	D
6	7480	126	B
7	5620	32	A
8	2820	888	D
9	1060	126	A

Figura 11: Pontos do PCC no gráfico de Geldart.



4.3 Criação das Malhas

A malha do leito fluidizado foi criada utilizando o comando do OpenFoam *blockmesh*, que utiliza uma geometria entregue e definição dos parâmetros da malha para sua criação. Após o comando ter sido executado, uma pasta chamada de *PolyMesh* foi criada, dentro da pasta *constant*. Empregando a metodologia y-plus, a dimensão da célula foi calculada, criando uma malha com 87500 células. A malha criada obteve característica cubica, ou seja, o domínio geométrico pseudo-3d foi dividido em células de mesma dimensão, mediante o emprego do fator y-plus para estimativa inicial do refino da malha.

A fim de validar a malha encontrada pela utilização do método citado, o teste de independência de malha foi efetuado, no qual realizou-se 3 simulações utilizando a configuração do leito fluidizado do ponto central. A Tabela 9 resume a quantidade de células para cada uma das malhas avaliadas.

Tabela 9: Quantidade de células no teste de independência de malha.

Teste de Independência de Malha	Quantidade de Células
Refinado	87500
Intermediário	57500
Grosseira	27500

4.4 Determinação dos parâmetros da simulação

A correta avaliação da qualidade de fluidização requer que o leito fluidizado seja analisado em distintos regimes de escoamento, de forma semelhante ao que pode ser observado na Figura 2. Para isso, foram calculados os valores da velocidade mínima de fluidização (u_{mf}) e a velocidade terminal (u_t), utilizando a Equação 8 - com auxílio das Equações 9 a 11 e 12, respectivamente.

Após as velocidades mencionadas serem calculadas, foi realizado o perfil de velocidade do ar de entrada. Definiu-se o tempo total da simulação em 100 segundos, com u_{ar} sendo incrementado a cada 5 segundos, logo, a velocidade de entrada do ar foi modificada 20 vezes. Desse total, 10 pontos foram postos no intervalo $0 - 1,2 * u_{mf}$, enquanto que, os demais pontos foram distribuídos linearmente entre $1,2 * u_{mf} - 1,2 * u_t$. Como já mencionado, tais valores

foram escolhidos a fim de analisar o comportamento do leito fluidizado nos diferentes regimes de escoamento.

Tendo em vista que o leito fluidizado, a partir da condição mínima de fluidização, é um sistema turbulento, requer-se a correta avaliação dos parâmetros do modelo de turbulência utilizado, RANS k - ϵ . Ambos os parâmetros do modelo de turbulência utilizado foram calculados baseados nos estudos realizados por Jones, e Launder (1972).

4.5 Simulação fluidodinâmica

As simulações foram realizadas no software gratuito OpenFoam, que não apresenta interface gráfica para seu usuário, os arquivos e parâmetros que definiram cada simulação são apresentados em linha de código da linguagem C++ e os comandos são realizados via terminal do sistema operacional Linux, que inclui o comando para iniciar a simulação.

Foi estabelecida a abordagem Euleriana para as simulações, sendo assim, a fase granular foi descrita como um meio contínuo. O solucionador do OpenFoam utilizado foi o *multiphaseEulerFoam*, que emprega a citada abordagem numérica em sistemas físicos multifásicos, como o exemplo do leito fluidizado.

4.5.1 Pasta “constant”

Iniciando pelas propriedades físicas de cada fase, nos arquivos *physicalProperties.air* e *physicalProperties.particles* foram definidos os modelos termodinâmicos e parâmetros de mistura para cada fase, tais quais: Massa molecular, Massa específica, Capacidade calorífica, dentre outros. Para a fase gasosa, foram utilizados os valores fixos para o ar em $T = 300\text{ K}$, apresentados na Tabela 7. Enquanto que - para a fase particular - os valores de massa específica foram modificados para cada simulação, como definido no planejamento de experimentos.

A definição das propriedades das fases, na mistura, foi realizada no arquivo *phaseProperties*. Estabeleceu ambas as fases isotérmicas, e o parâmetro de diâmetro da partícula foi modificado para cada simulação. O modelo de Gidaspow, Equações 31 e 32, foi estabelecido para o cálculo de K_{drag} .

Prosseguindo, foram definidos os modelos que determinam a transferência de momento na fase gasosa e particular, nos arquivos *momentumTransport.air* e *momentumTransport.particles*, respectivamente. Para o ar, foi utilizado o modelo de

turbulência RAS k- ϵ , enquanto que a fase granular foi definida pelo modelo KTGF utilizando as Equações 23, 24, 26, 27 e 30.

4.5.2 Pasta “0”

Nessa pasta foram definidas as condições de contorno dos parâmetros simulados em problemas que utilizam o *multiphaseEulerFoam*. A Tabela 10 resume algumas dessas propriedades físicas, juntamente com as condições utilizadas e contorno.

Tabela 10: Condições de contorno para os parâmetros físicos.

Parâmetro	Descrição	Fase	Condição de Contorno em cada superfície		
			<i>Inlet</i>	<i>Outlet</i>	<i>Walls</i>
alpha (α)	Fração volumétrica da fase	Ar	fixedValue	zeroGradient	zeroGradient
		Partícula	fixedValue	zeroGradient	zeroGradient
epsilon (ϵ)	Parâmetro do modelo de turbulência: Taxa de dissipação	Ambas	fixedValue	inletOutlet	epsilonWallFunction
k	Parâmetro do modelo de turbulência: Energia cinética	Ambas	fixedValue	inletOutlet	kqRWallFunction
p_rgh	Pressão dinâmica	Ambas	calculated	calculated	calculated
p	Pressão total	Ambas	calculated	calculated	calculated
U	Velocidade da fase	Ar	uniformFixedValue	pressureInletOutletVelocity	noSlip
		Partícula	fixedValue	pressureInletOutletVelocity	noSlip

4.5.3 Pasta “system”

O arquivo *setFieldsDict* definiu a fração de partículas que cada porção do leito possui no início das simulações, sendo assim, foram utilizados os valores da Tabela 7, com 40cm do leito apresentado 0,6 de fração de sólidos.

No que diz respeito aos parâmetros gerais das simulações, foram definidos no arquivo *controlDict*, como apresentados na Tabela 11.

Tabela 11: Parâmetros gerais das simulações.

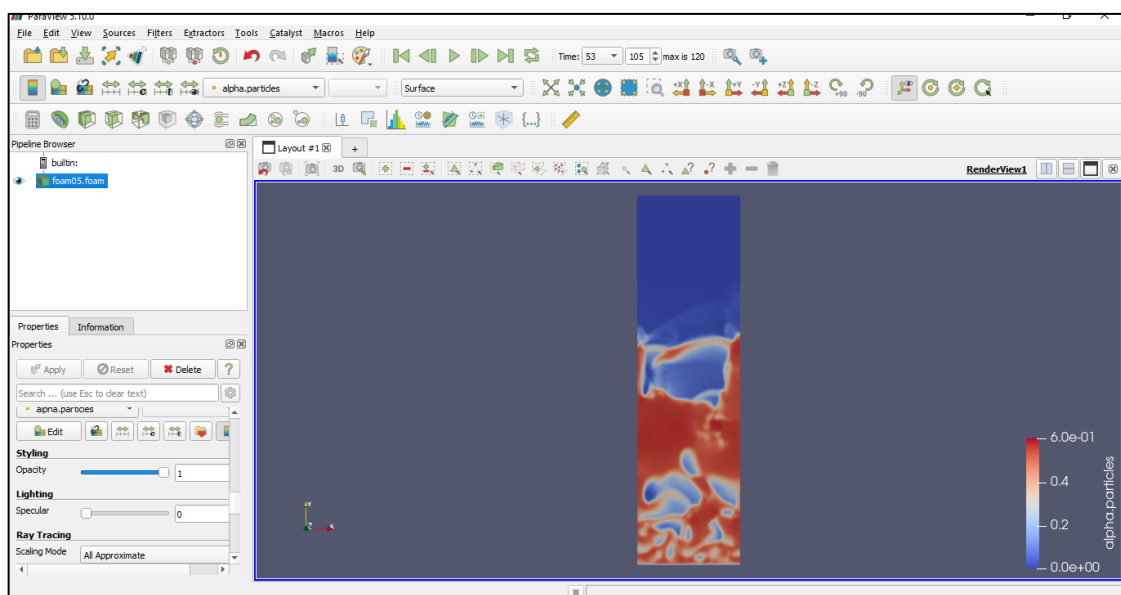
Parâmetro	Valor
Tempo total de simulação	100 segundos
Tempo de escrita dos resultados	0,5 segundos
Tempo de discretização (deltaT)	10^{-6} segundos
Número máximo de Courant	0.5

4.6 Análises Qualitativas

As simulações utilizando o OpenFoam geraram 200 passos de tempo, cada passo com os resultados para os parâmetros físicos do leito fluidizado – que incluem aqueles apresentados na Tabela 10. A fim de estruturar os dados, o comando *foamToVTK* foi utilizado, sendo assim, arquivos “.*vtk*” foram gerados para cada tempo de escrita definido em 0,5 segundos, como apresentado na Tabela 11.

Tais arquivos foram carregados no software ParaView para pós-processamentos das simulações. A citada ferramenta computacional permite diversas configurações, entre elas a paleta de cores para visualização dos resultados.

Figura 12: Interface gráfica do Paraview 5.10.



O ParaView foi utilizado primariamente para gerar as imagens e gifs das simulações. Além disso, o citado software permite a utilização de diversas funções para o pós-processamentos dos dados, como por exemplo, integração numérica de certa propriedade física selecionada. Tendo em vista que tal tratativa computacional foi empregada em todas as simulações realizadas, o Paraview foi utilizado em conjunto com a linguagem Python para extração automática dos dados e criação de arquivos “.csv” que seguiram às análises quantitativas.

A seguir serão apresentados os dados extraídos:

- Diferencial de pressão no leito: Inlet – Outlet
- Média da fração de partículas no tempo
- Desvio padrão da fração de partículas no tempo

Ademais, a linguagem Python foi empregada para tratativas de dados com intuito de criar visualizações gráficas dos resultados, como gráfico de linhas e de bolhas. Para isso, empregou-se bibliotecas como: *Numpy*, *Pandas*, *Matplotlib*, *Seaborn* e *Plotly*.

4.7 Análises Quantitativas

As variáveis resposta analisadas quantitativamente neste trabalho foram: μ_{mf} , μ_t e \bar{f}_α . No que tange as velocidades, sua extração foi realizada diretamente dos gráficos construídos, utilizando a linguagem Python, pela análise qualitativa.

Para a frequência média de borbulhamento, inicialmente foi aplicado a Transformada de Fourier na média da fração de partículas, em regime de fluidização borbulhante. Após a construção do espectro, foram selecionadas apenas as frequências positivas – devido a simetria do gráfico – e fez-se uma média ponderada utilizando a magnitude de cada frequência como peso. Sendo assim, foi encontrado uma medida de centralidade dos espectros de frequência da fração de partícula em cada simulação, como apresentado nas Equações 39 e 40.

$$mag, freq = FFT(\overline{\alpha_p}) \quad (39)$$

$$\bar{f}_\alpha = \frac{freq \cdot mag}{\sum mag} \quad (40)$$

Vale ressaltar que a aplicação da transformada e o cálculo da frequência média foram realizadas utilizando a linguagem Python. A construção dos modelos preditivos utilizando o planejamento experimental foi realizado com auxílio do software STATISTICA. Para as três variáveis de resposta selecionadas, foram empregados os resultados gerados pelo PCC, como variáveis de entrada.

5 RESULTADOS

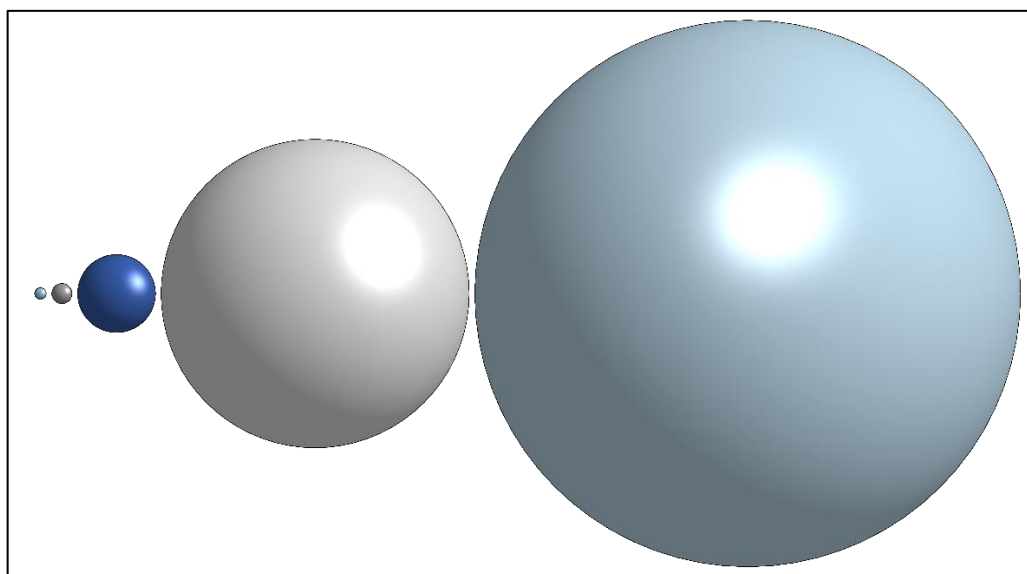
A etapa inicial da análise dos resultados foi realizada a partir da utilização das Equações 8 e 12, foram calculados os valores de u_{mf} e u_t para cada partícula selecionada no PCC.

Tabela 12: Parâmetros físicos das simulações.

Simulação	u_{mf} (m/s)	u_t (m/s)	k (J/kg)	ε (J/(kg . s))
1	0,0146	0,8528	1,50E-02	5,50E-04
2	0,0003	0,0261	1,00E-05	2,00E-08
3	0,0005	0,0403	1,00E-05	2,00E-08
4	0,1159	2,6253	1,50E-01	2,00E-02
5	0,4616	6,1602	8,20E-01	2,40E-01
6	0,0388	1,8498	1,50E-02	3,00E-03
7	0,0018	0,1530	8,00E-08	1,00E-05
8	0,7264	6,3184	8,20E-01	2,40E-01
9	0,0055	0,3730	3,00E-03	5,00E-05

Na Figura 13 pode-se perceber a diferença entre os tamanhos das partículas selecionadas, que têm seus diâmetros variando de 18 μ m a 888 μ m, e que influenciam nos valores calculados na Tabela 12, tendo em vista que o peso da partícula é proporcional ao cubo diâmetro particular, $P_p \propto d_p^3$.

Figura 13: Tamanho das partículas utilizadas nas simulações.



A Tabela 13 expressa a massa de cada partícula nas simulações realizadas, sendo evidente que o diâmetro da partícula ter maior influência em tal cálculo, tendo em vista que $m \propto d_p^3$, enquanto que a massa específica influencia linearmente no valor da massa.

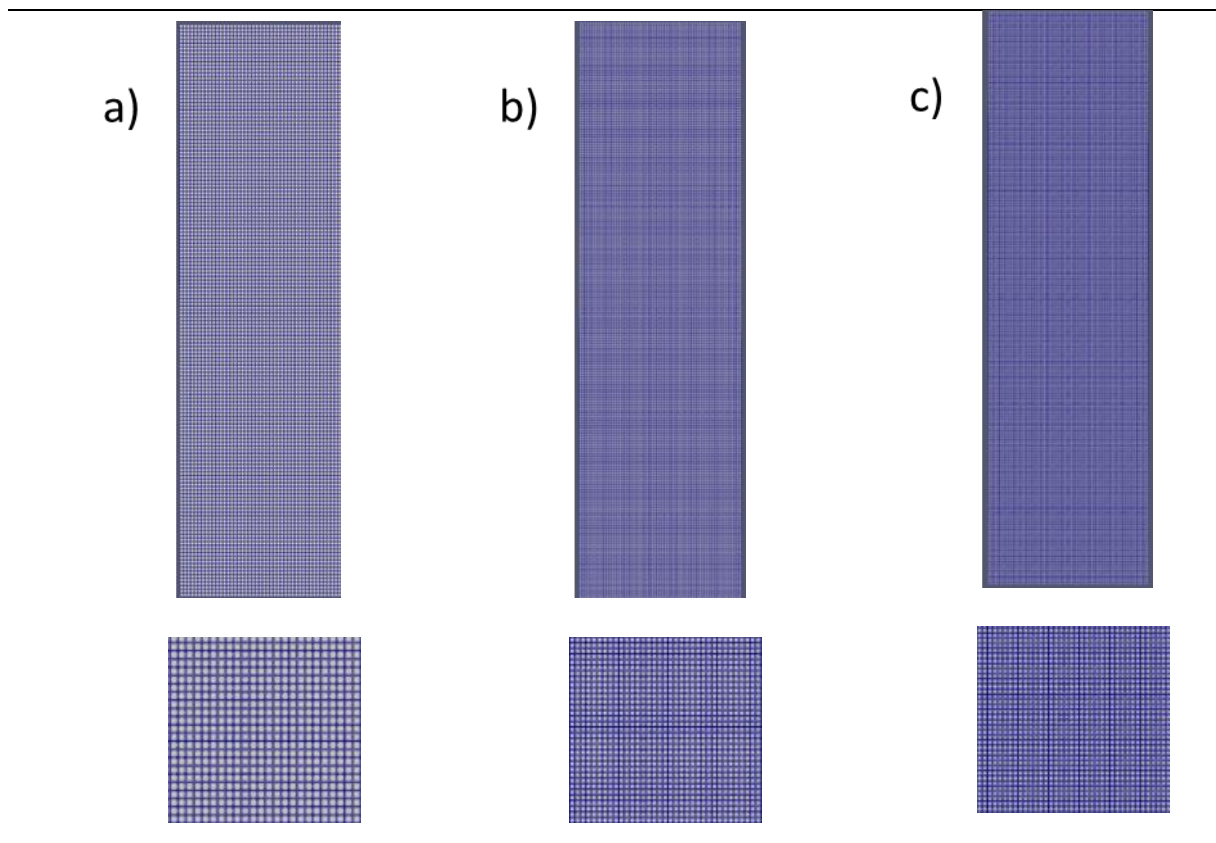
Tabela 13: Massas das partículas esféricas utilizadas nas simulações.

Simulação	Massa (g)
1	4,68E+02
2	9,40E-04
3	1,48E-03
4	3,72E-01
5	1,48E+00
6	1,24E-01
7	5,89E-03
8	2,33E+00
9	1,76E-02

- **Independência de Malha**

Afim de avaliar as simulações de forma coerente, foi realizada inicialmente o teste de independência de malha (Figura 14).

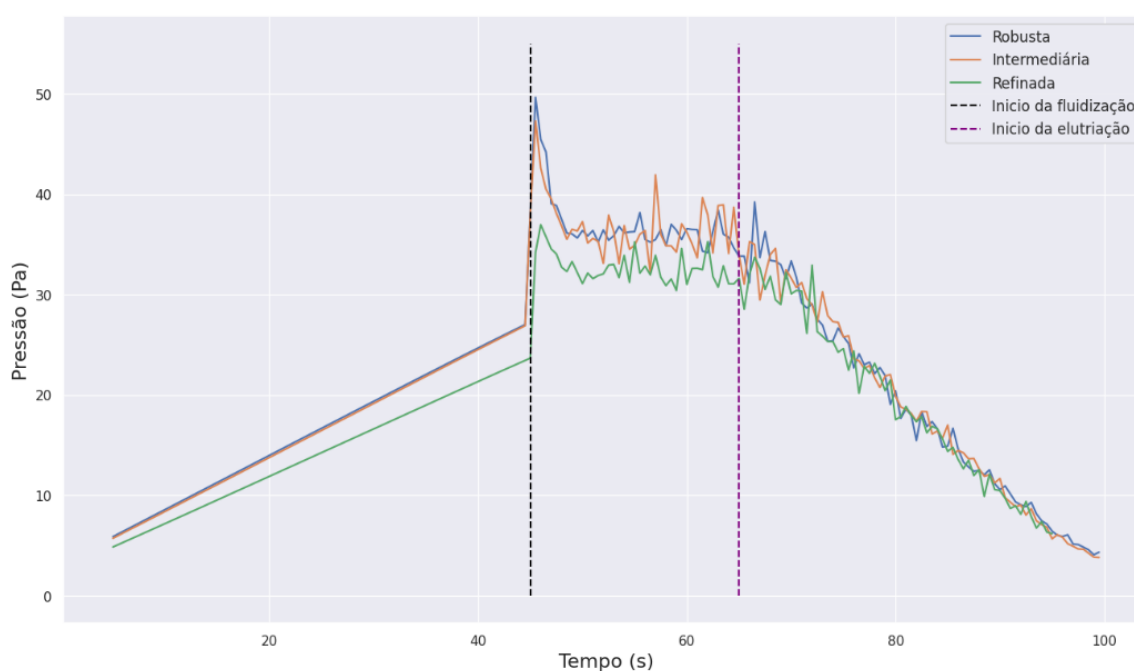
Figura 14: Malha do leito. a) Malha Robusta; b) Malha Intermediária; c) Malha Refinada.



A Figura 14 apresenta as malhas utilizadas no teste de independência de malha, descritas na Tabela 9. Tal teste tem por objetivo uma análise heurística malha mais adequada a ser utilizada nas simulações do PCC, tendo em vista que uma malha robusta causa imprecisão nos resultados, ao passo que, demasiado refino torna a simulação altamente custosa computacionalmente.

Empregando as malhas da Figura 14, foi realizado o processamento das simulações a fim de analisar o perfil de queda de pressão para cada caso avaliado.

Figura 15: Curvas de pressão para as malhas no teste de independência.



Observa-se, na Figura 15, que as malhas grosseira e intermediária obtiveram valores semelhantes para a queda de pressão, destoando da malha refinada. Tal observação corrobora com a escolha desta última, que se assemelha ao indicado pelo fator y -plus, tendo em vista que malhas com uma menor quantidade de células superestimam a queda de pressão no leito levando a resultados imprecisos.

A sobrevalorização da queda de pressão por malhas grosseiras está relacionada a imprecisões no cálculo da porosidade, tendo em vista que uma quantidade menor de células tem como consequência células de maiores dimensões, não capturando de forma adequada os vazios entre as partículas durante o processo de interpolação. Logo, a fração de vazios será menor, o que causa uma maior queda de pressão no leito.

- **Modelos de Turbulência**

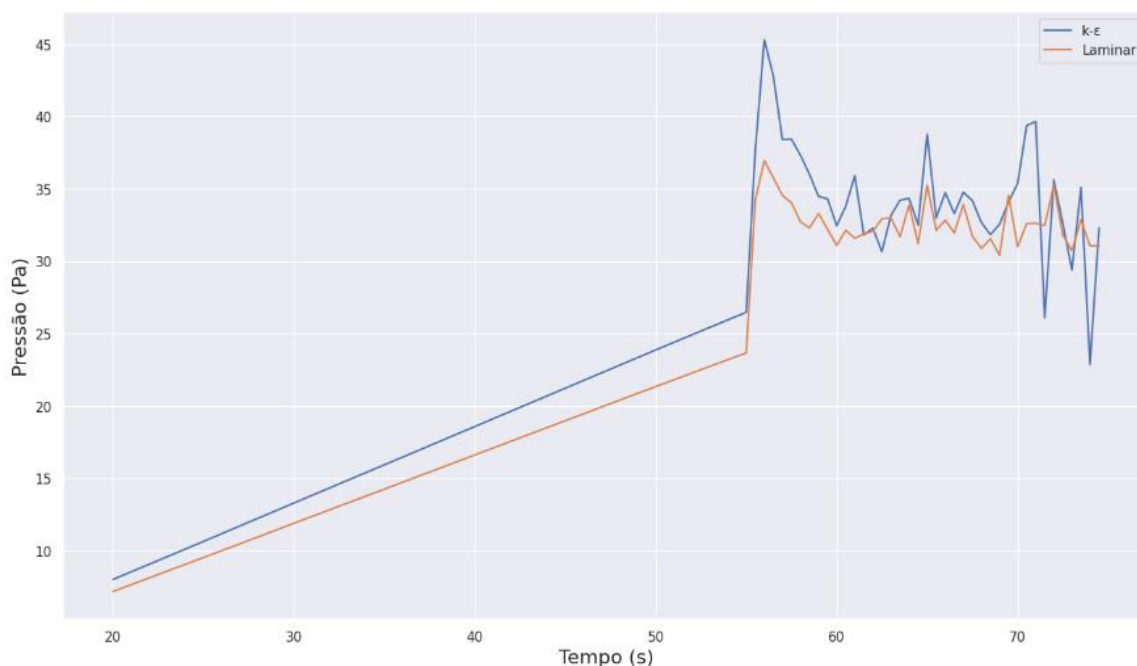
Além de verificar a influência da malha sobre o fenômeno de fluidização, foi também estudado o efeito dos modelos de turbulência.

A fim de verificar as diferenças na fluidodinâmica num leito fluidizado pela utilização de distintos modelos de turbulência, a configuração do leito com partícula do ponto central, $\rho_s = 2820$ e $d_p = 126$, foi simulada utilizando os seguintes modelos: Laminar, $k - \varepsilon$, RNG $k - \varepsilon$, $k - \omega$ e LES.

Trabalhos como Fatti (2021) e Blehrmühlhuber (2018) trazem os modelos $k - \varepsilon$ como os mais adequados para estudos fluidodinâmicos computacionais de leitos fluidizados, apresentando adequada precisão nos resultados sem tornar a simulação demasiadamente custosa, em termos computacionais.

Devido a isso, as simulações foram analisadas em pares, comparando cada modelo ao $k - \varepsilon$ padrão.

Figura 16: Comparação entre os modelos $k - \varepsilon$ e laminar



A Figura 16 mostra que o modelo laminar subestima a queda de pressão, quando comparado ao modelo $k - \varepsilon$. Isso se deve pois o modelo $k - \varepsilon$ considera as perdas energéticas devido a formação de vórtices e turbilhões no escoamento do fluido, dado que é um modelo de turbulência, o que não ocorre com o modelo laminar. Apesar disso, os valores estão semelhantes, isso se deve, pois, a geometria adotada é pseudo-3d, logo, a imprecisão do modelo laminar relacionada a formação de turbilhões é atenuada.

Figura 17: Comparação entre modelos de turbulência com o $k - \varepsilon$ e RNG $k - \varepsilon$.

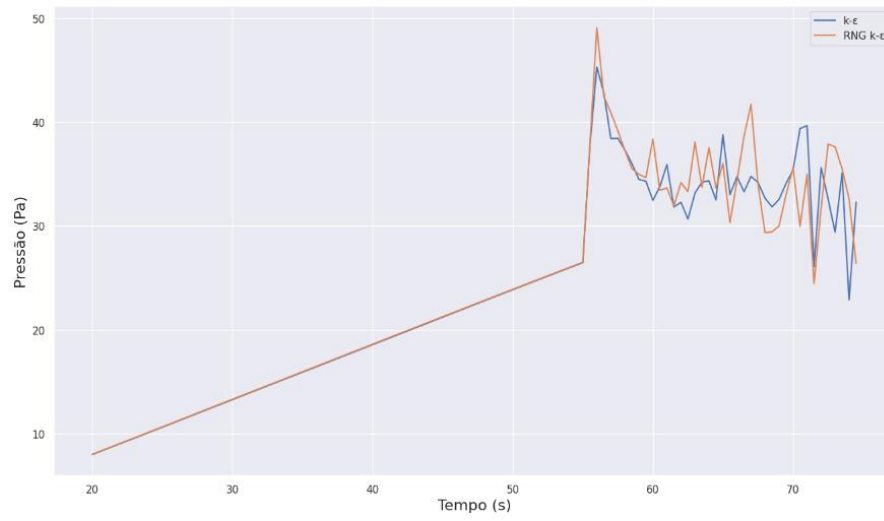


Figura 18: Comparação entre modelos de turbulência com o $k - \varepsilon$ e $k - \omega$ c) LES.

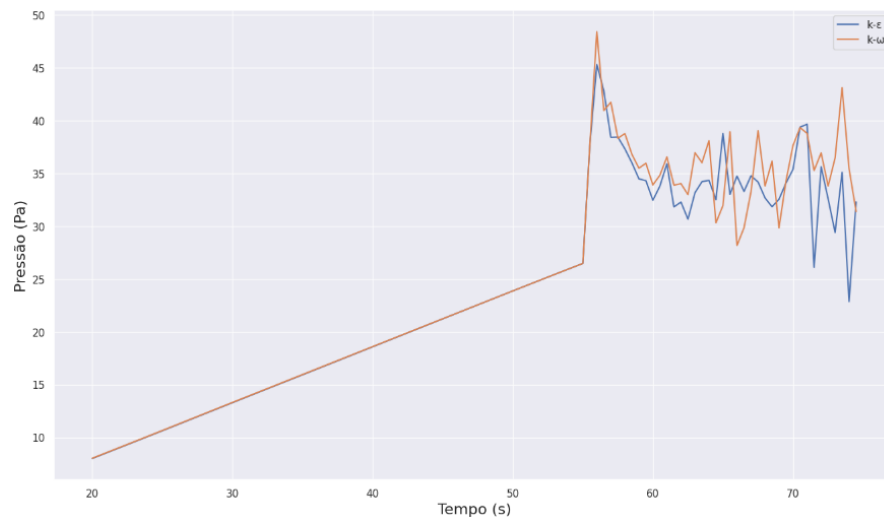
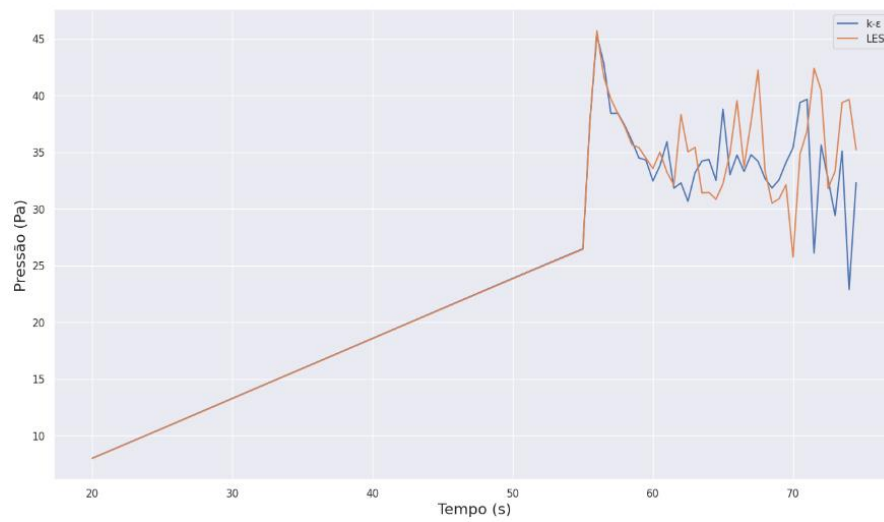


Figura 19: Comparação entre modelos de turbulência com o $k - \varepsilon$ e LES.



É possível identificar nas Figura 17, Figura 18 e Figura 19, que os modelos RNG $k - \varepsilon$, $k - \omega$ e LES obtiveram queda de pressão semelhante a simulação utilizando o modelo padrão $k - \varepsilon$. A literatura expõe que tanto $k - \varepsilon$ padrão quanto o RNG podem ser utilizados para simulações CFD de leitos fluidizados, dessa forma, a Figura 17 corrobora com tal fato.

O modelo $k - \omega$ é especialmente utilizado para simulações aerodinâmicas envolvendo geometrias com alta curvatura, dessa forma, para geometrias retangulares, seus resultados ajustam-se ao do modelo $k - \varepsilon$. No que tange o modelo LES, é utilizado para o cálculo direto de pequenos turbilhões no escoamento, necessitando de malhas altamente refinadas, para casos nos quais tal característica não é introduzida na simulação, seus resultados devem se assemelhar ao modelo $k - \varepsilon$.

Vale ressaltar que, apesar das Figura 17, Figura 18 e Figura 19 induzirem ao pensamento que os modelos apresentados podem ser utilizados em simulações CFD de leitos fluidizados sem distinção, faz-se necessário avaliar o custo computacional de tais modelos, sendo o modelo padrão $k - \varepsilon$ o mais simples, logo, foi utilizado nas simulações posteriores do presente trabalho.

5.1 Análise Qualitativa

5.1.1 Geral

Utilizando os resultados apresentados nas observações anteriores, a seguir é apresentado análises comparativas entre as simulações, em específico, verificar as diferenças nos regimes de fluidização entre as simulações contendo $\pm\alpha$ nas suas propriedades da partícula.

- Valor de μ_{mf}

Tabela 14: Erro entre as velocidades calculadas e encontradas.

	u_{mf} (Calculada)	u_{mf} (Simulada)	erro (%)
Simulação 01	0,0146	0,1200	722,4800
Simulação 02	0,0003	0,0050	1624,1400
Simulação 03	0,0005	0,0067	1356,5200
Simulação 04	0,1159	0,6700	478,2800
Simulação 05	0,4616	1,1700	153,4900
Simulação 06	0,0388	0,2200	467,4500
Simulação 07	0,0018	0,0290	1476,0900
Simulação 08	0,7264	0,8600	18,3900
Simulação 09	0,0055	0,0600	992,9000

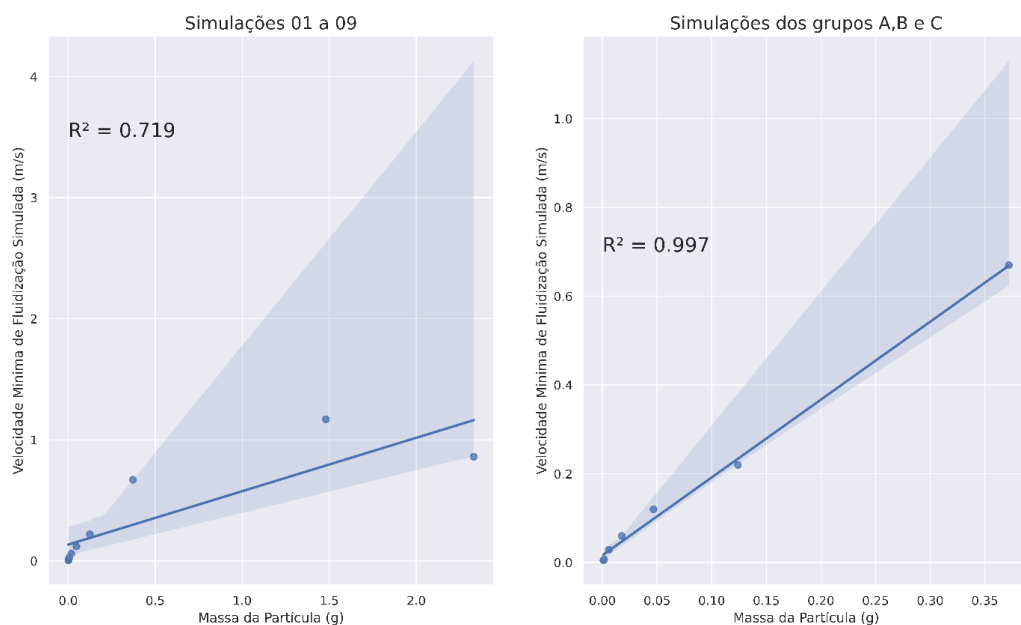
Logo, em todas as simulações do grupo A, o valor de u_{mf} encontrado na simulação foi superior aquele calculado pela Equação 08. A correlação para o cálculo de ε_{mf} – Equação 11 – foi estudada por Wen e Yu (1966) utilizando partículas de $50 \mu m$ a $5000 \mu m$ e, pelo estudo realizado por (THANH; DUC, 2020), o valor a velocidade mínima de fluidização é subestimada por tal correlação, adquirindo piores resultados para d_p abaixo de $450 \mu m$. Isso se deve, pelo fato que a citada correlação – dentre outras mencionadas – foram desenvolvidas em estudos experimentais em leitos cilíndricos.

A geometria cilíndrica acomoda as partículas esféricas exercendo menor tensão sobre os grãos, ou seja, o atrito das partículas com as paredes do cilindro tem menor intensidade, quando comparados a geometria retangular. Dessa forma, a suposição da correlação utilizada irá subestimar o valor de u_{mf} , pois os experimentos foram realizados pelos autores em leitos mais facilmente fluidizáveis devido a sua geometria.

Tal resultado demonstra a dificuldade em propor correlações empíricas o cálculo da velocidade mínima de fluidização que atenda as diversas condições do leito fluidizado, tendo em vista que não apenas as propriedades físicas da fase granular e fluida são bastante variadas, mas também condições operacionais do leito.

Ademais, analisando a relação matemática de u_{mf} vs m , é possível observar um comportamento próximo a linearidade. No que cerne as simulações realizadas no presente trabalho, o Grupo D apresentou distorções no ajuste linear. A Figura 20 mostra a comparação entre os ajustes realizados com todos os pontos com as simulações excetuando as partículas do Grupo D.

Figura 20: Ajuste linear da velocidade mínima de fluidização com a massa das partículas.

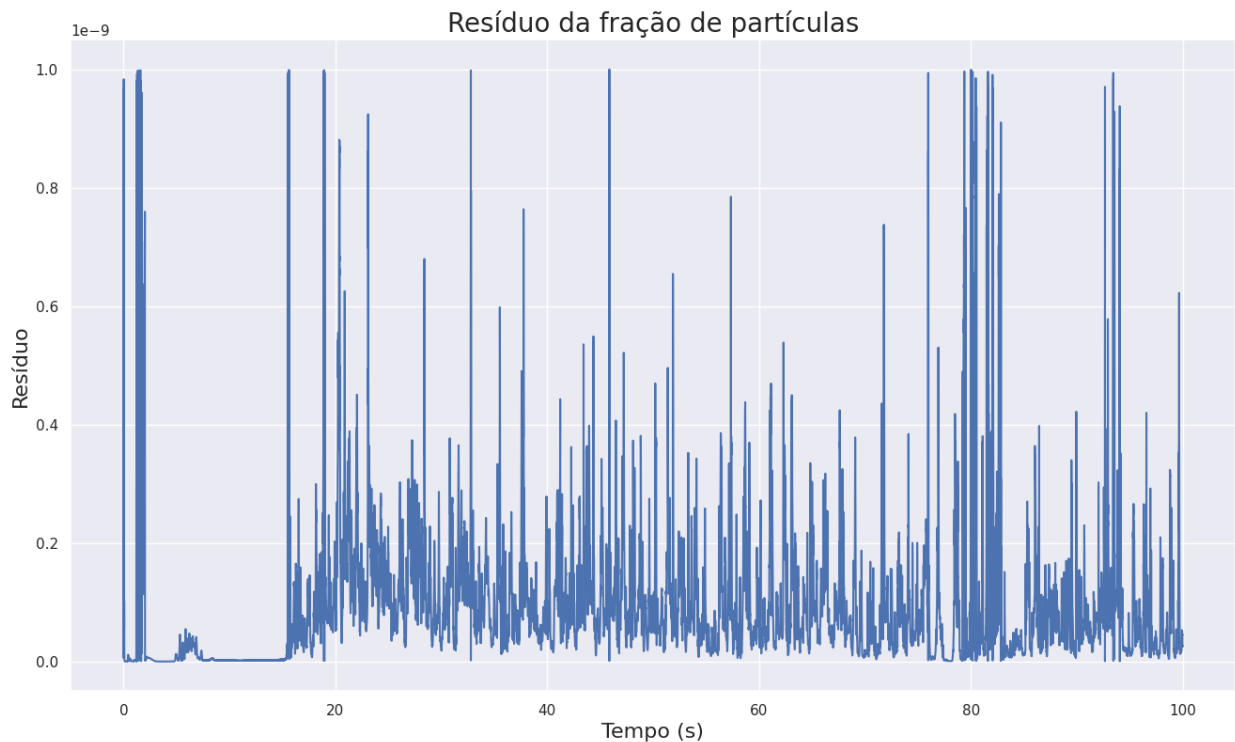


- **Resíduos**

A Figura 21 expõe que a simulação do leito fluidizado apresentou adequada convergência no cálculo dos parâmetros, tendo em vista que o valor do resíduo da fração de partículas – variável sensível no fenômeno de fluidização – manteve-se em valores máximos da ordem 10^{-9} . Vale ressaltar que já no início da simulação o resíduo está baixo, o que evidencia uma correta avaliação dos parâmetros iniciais da simulação.

No que diz respeito as configurações de hardware nas quais as simulações foram realizadas, foi empregado uma máquina equipada com um processador Ryzen 9 5900, placa de vídeo gtx 1660 e 32 gb de memória RAM. Dessa forma, foram necessárias 12 horas para adquirir os resultados de cada simulação.

Figura 21: Resíduos da fração de partículas.



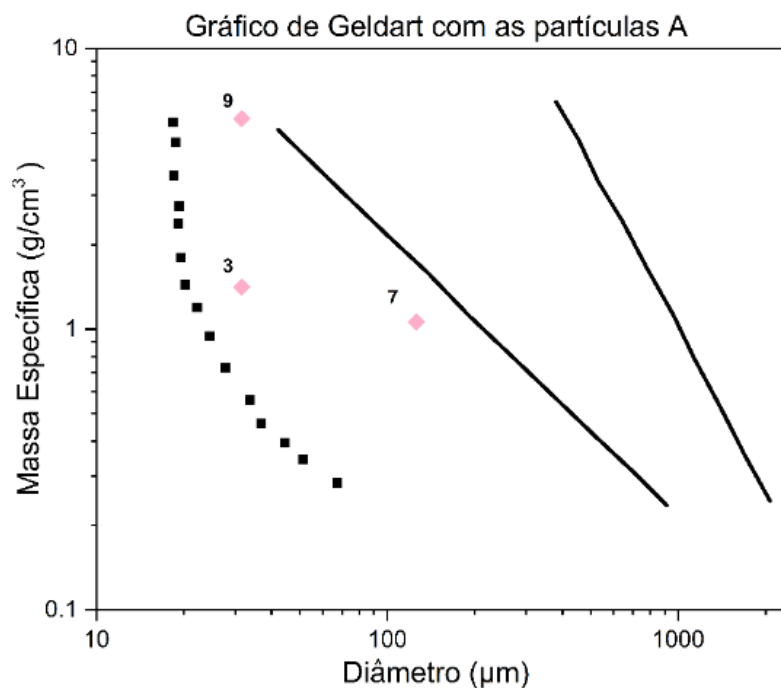
5.1.2 Agrupamento por classificação de Geldart

A seguir serão apresentadas discussões, agrupados pela classificação de Geldart das partículas, dos resultados obtidos nas simulações.

i) Grupo A

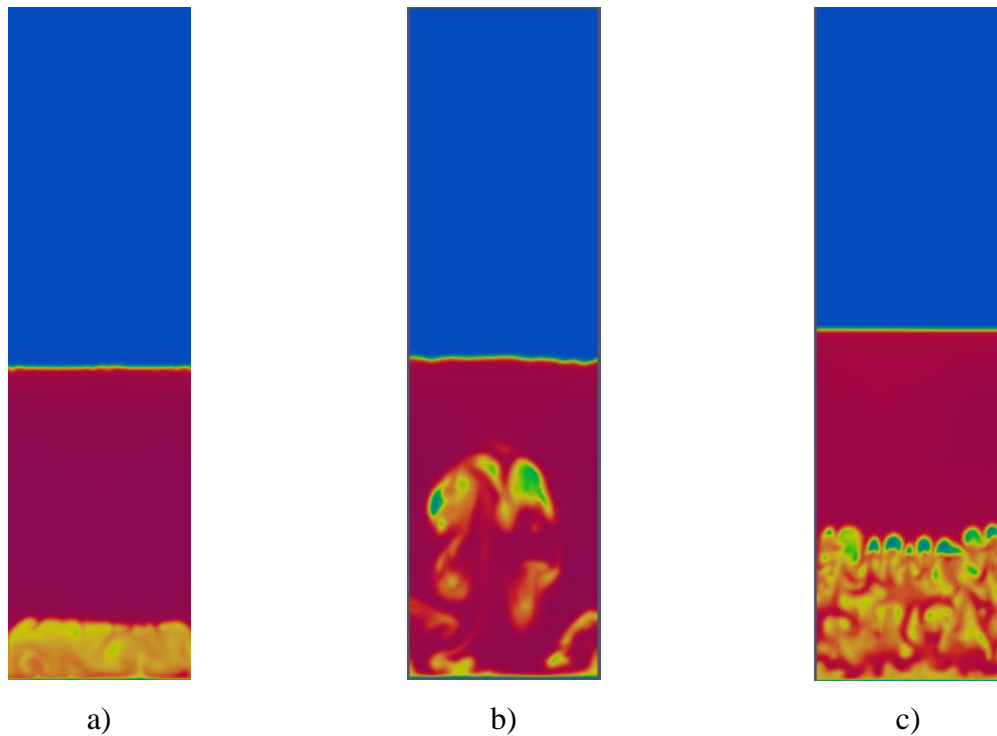
A Figura 23 apresentada à disposição gráfica das partículas do Grupo A, nas simulações realizadas. Percebe-se que uma das partículas tem o valor da massa específica elevada, estando presente na simulação 7.

Figura 22: Gráfico de Geldart com as partículas do grupo A.



A Figura 23 expõe o momento de mínima fluidização dos leitos. É perceptível a influência do efeito das propriedades físicas das partículas, tendo em vista que, no momento de mínima fluidização – na simulação 03 – as partículas estão conglomeradas formando uma nuvem particular. Analisando a simulação 07, o incremento em ρ_s leva a comportamento típico de fluidização, com o borbulhamento do leito logo após a entrada de ar adquirir o valor u_{mf} . Tal comportamento se torna ainda mais evidente na simulação 09, o qual contém partículas com massa específica próxima ao estudo do Grupo A de Geldart.

Figura 23: Mínima fluidização. a) Simulação 03; b) Simulação 07; c) Simulação 09

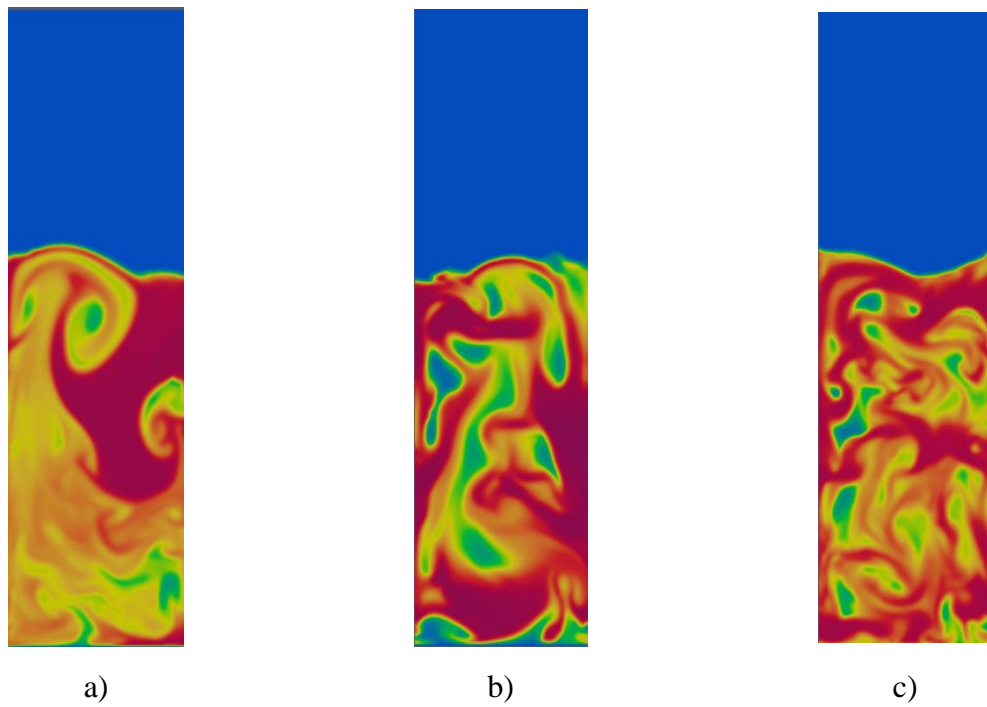


Observa-se na Figura 24, o comportamento dos leitos em regime de fluidização borbulhante. Pode-se considerar as simulações 03 e 07 são casos extremos de partículas pertencentes ao Grupo A, tendo em vista os valores de diâmetro e massa específica, podendo ser observado na Figura 22 sua localização na região que delimita tal tipo de partícula.

Nesse contexto, a simulação 03 apresenta dificuldade em sua fluidização, assemelhando-se a partículas do Grupo C – que serão discutidos posteriormente. A coesão das partículas cria impedimento para o afastamento dos grãos particulares e, apesar da fluidização ocorre é visível que sua qualidade não é semelhante a simulação 09.

No que diz respeito a simulação 07, a fluidização ocorre pela ocorrência de bolhas de elevado diâmetro – quando comparados a simulação 09 – configurando o surgimento de *sluggings*. Assim como discutido para a simulação 03, a fluidização nesse caso não apresenta qualidade equivalente a simulação 09 por não distanciar as partículas de maneira eficiente.

Figura 24: Fluidização borbulhante. a) Simulação 03; b) Simulação 07; c) Simulação 09.



As Figura 25, Figura 26 e Figura 27 mostram o perfil de queda de pressão pela elevação de velocidade de entrada do ar.

Figura 25: Perfil de queda de pressão na simulação 03.

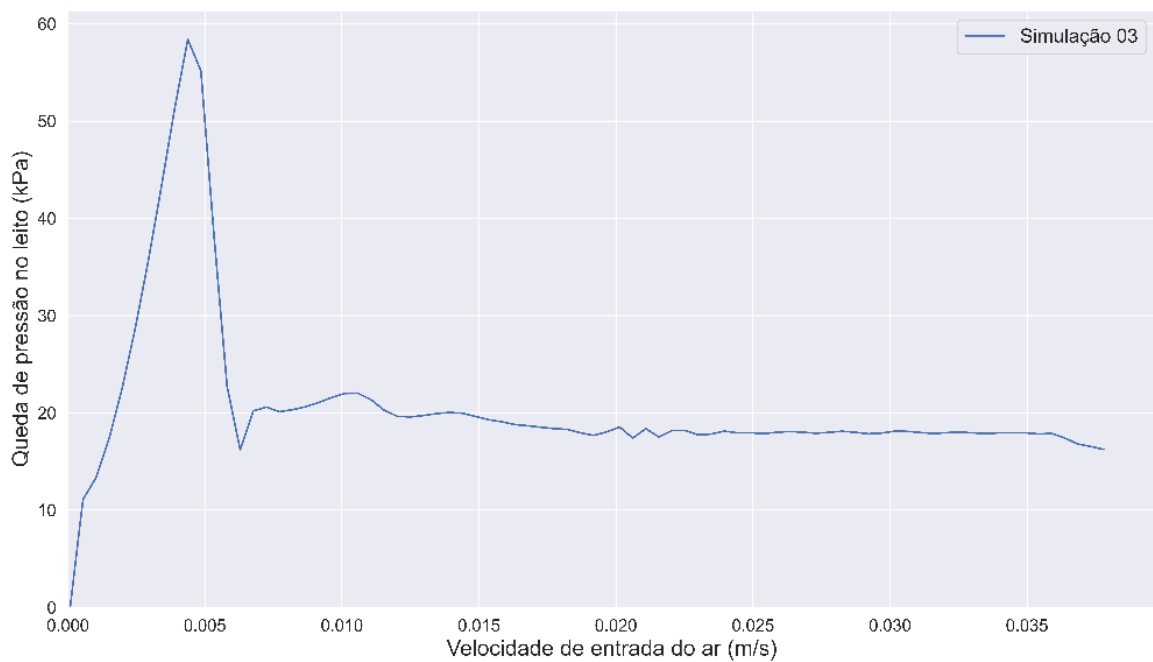


Figura 26: Perfil de queda de pressão na simulação 07.

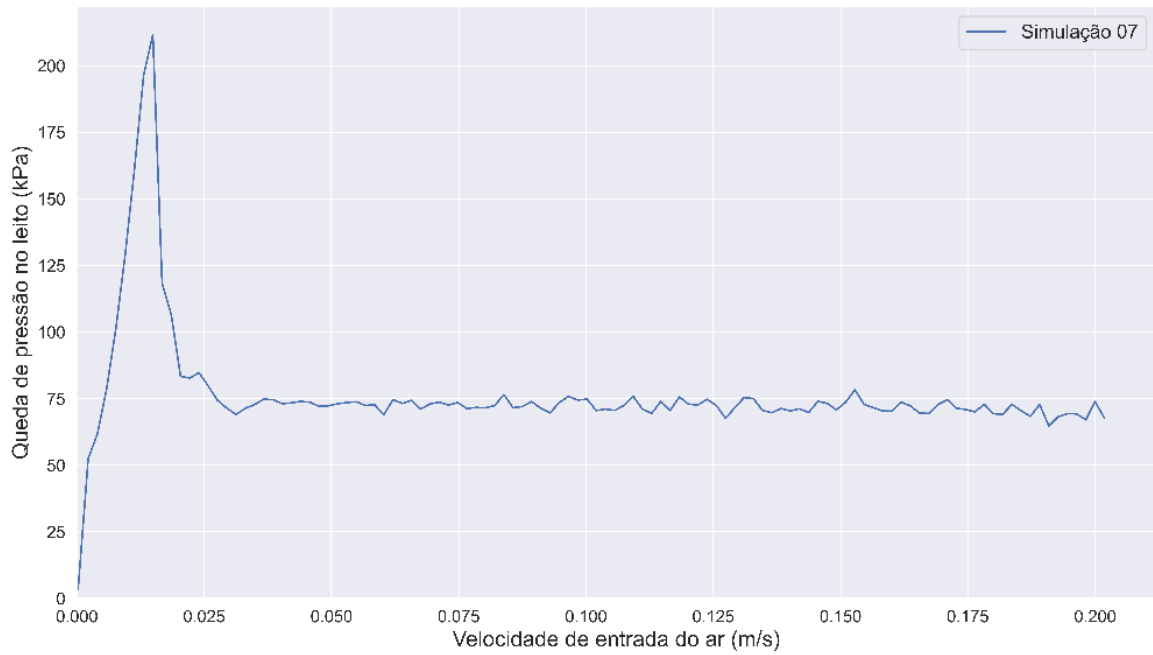
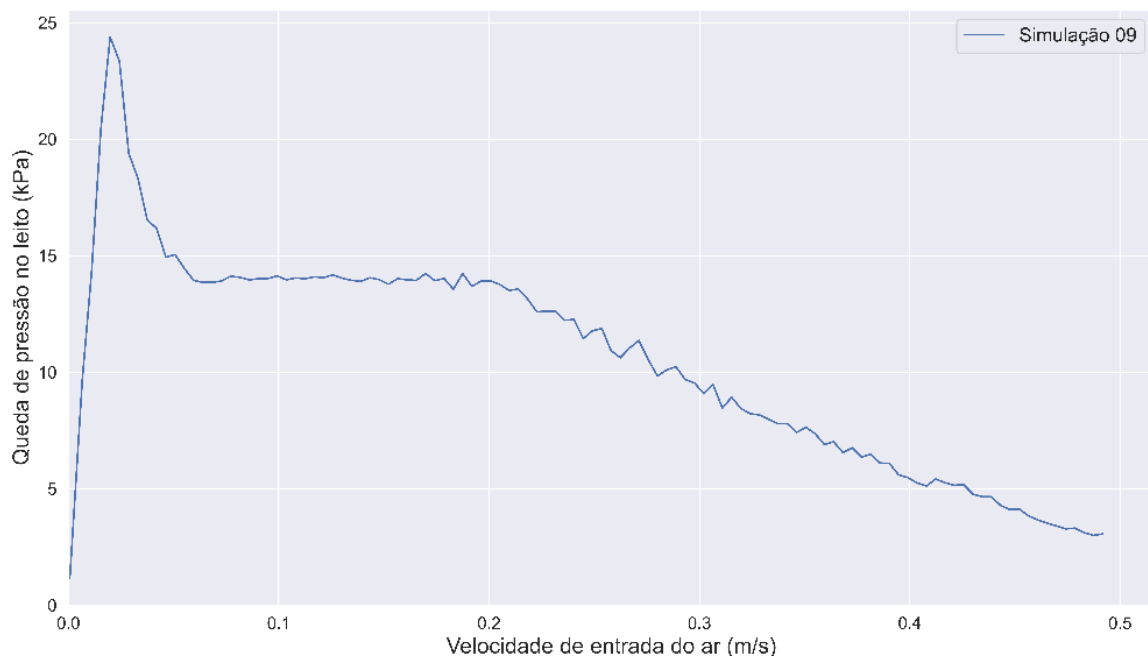


Figura 27: Perfil de queda de pressão na simulação 09.



É possível observar, nas Figura 25, Figura 26 e Figura 27, que todos os gráficos apresentam perfil de quedas de pressão típicas de um leito fluidizado, sendo semelhantes a Figura 1, logo, tais visualizações corroboram com as observações das Figura 23 e, que as partículas tipo A escolhidas sofreram o fenômeno de fluidização, como discutido por Geldart (1973).

Os valores de u_{mf} e u_t foram extraídos dos gráficos citados, sendo apresentados na Tabela 15.

Tabela 15: Valores simulados para a velocidade mínima de fluidização e velocidade terminal.

	u_{mf} (Simulada)	u_t (Simulada)
Simulação 03	0,007	0,0350
Simulação 07	0,029	0,2000
Simulação 09	0,060	0,2070

Observando a Tabela 15, percebe-se que a simulação 03 apresenta baixa u_{mf} se comparada as demais, pois são partículas pequenas e com baixo ρ_s , também num aspecto comparativo aos valores máximos de massa específica utilizados nas simulações.

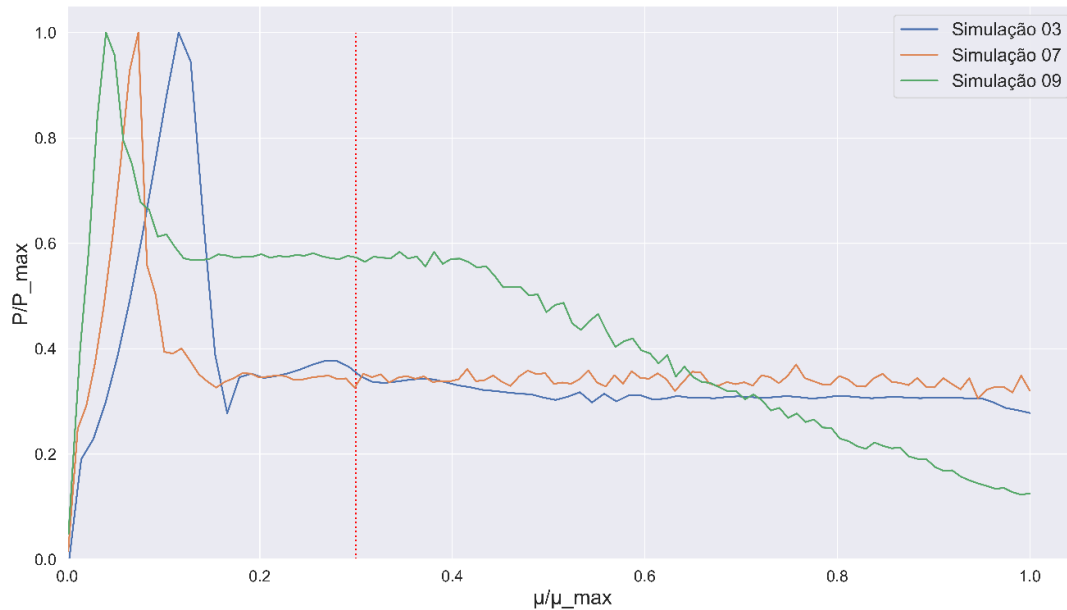
Sabe-se que a iminência de fluidização ocorre quando a força do fluido, pela transferência de momento, se iguala ao peso aparente das partículas e que, para partículas mais densa, é necessário velocidades maiores do ar. Isso pode ser constatado pela comparação de u_{mf} entre as simulações 03 e 07, pois apresentam o mesmo d_p , porém a partícula da simulação 07 é mais densa que a 03, como observado na Tabela 13.

No que tange a u_t , foram obtidos valores nas simulações próximos aqueles calculados pela correlação da Equação 12. Tendo em vista que o cálculo da velocidade terminal leva em consideração uma partícula isolada na qual a transferência de momentum é suficiente para que o balanço de forças seja nulo, logo, ocorre uma maior adequação de correlações empíricas ao valor de u_t .

Todavia, divergências ainda podem ser identificadas, por exemplo, para a simulação 09, o valor encontrado de u_t foi menor que aquele calculado, pois a correlação utilizada não leva em consideração que as bolhas formadas no regime de fluidização borbulhante apresentam maior velocidade que o ar de entrada, dessa forma, a elutriação se inicia em valores inferiores.

De modo contrário, a simulação 07 apresentou velocidade terminal maior do que a exposta na Tabela 12, pois seu valor de massa específica foi demasiadamente elevado para a correlação.

Figura 28: Queda de pressão nas simulações 03, 07 e 09.

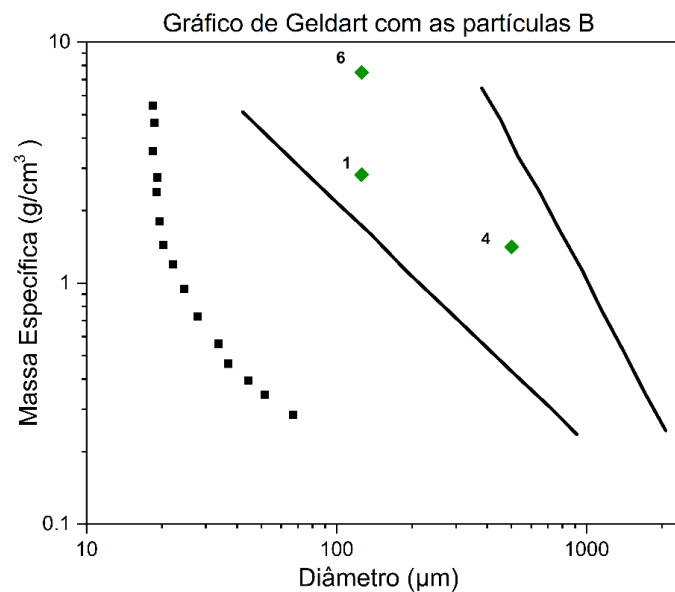


Após a fluidização, partículas maiores irão apresentar maior impeditivo a movimentação do ar, conduzindo a uma maior perda de carga. Dessa forma, a variação de pressão em leitos com maior partícula, como a simulação 09 – linha vermelha – terá valores mais próximos à sua queda de pressão máxima ($P/P_{max} = 1$) como pode ser visualizado na Figura 28. Percebe-se ainda, que as simulações 03 e 07 obtiveram a mesma variação nos citados referenciais de queda de pressão, isso se deve ao fato de ter o mesmo diâmetro de partícula.

ii) Grupo B

A Figura 29 expõe a localização das simulações contendo partículas tipo B, no gráfico de Geldart.

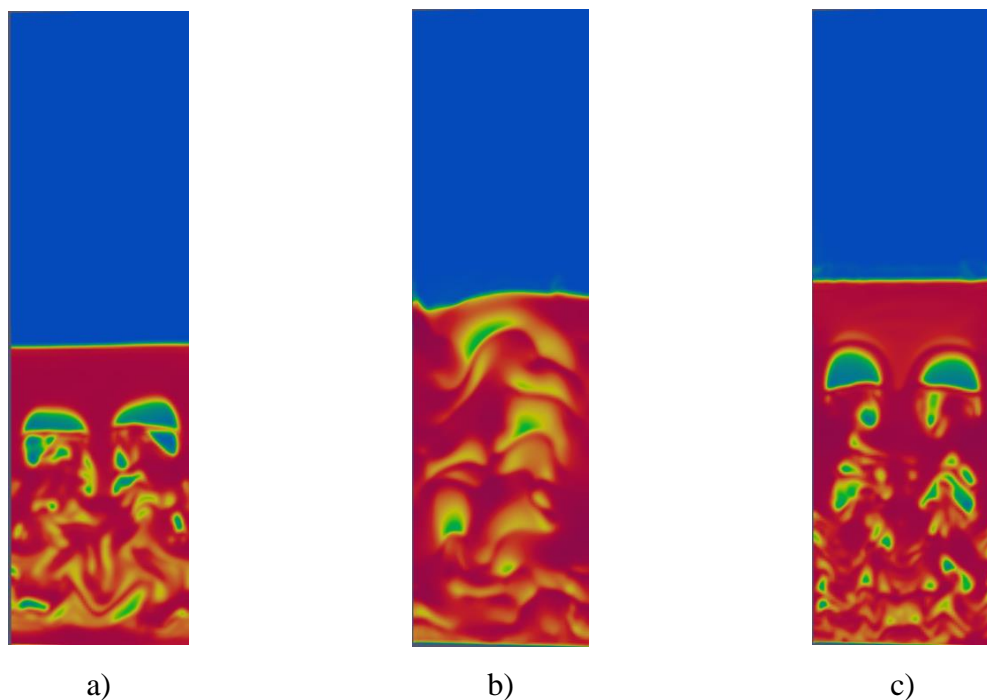
Figura 29: Gráfico de Geldart com as partículas do grupo B.



Observando a Figura 30 verifica-se que apesar do planejamento experimental conter partículas do Tipo B com valores de diâmetro e massa específica mais elevados do que o típico, a fluidização das partículas de tal grupo são similares, obtendo fluidização em regime borbulhante desde a condição de mínima fluidização, adequando-se ao que foi estudado por Geldart (1973).

Dentre as partículas selecionadas nas simulações do referido grupo, a simulação 04 apresentou comportamento mais distinto. Observa-se, na Figura 30 b), que a fluidização para tal partícula é dificultada devido seu diâmetro, que é elevado se comparado a outras partículas tipo B, devido a isso, a simulação 04 apresenta partículas com elevada massa como constatado pela Tabela 13. Devido a isso, é necessário altas pressões de ar para a elevação e distanciamento das partículas, tal característica leva a formação de bolhas instáveis e de elevado diâmetro, sem a possibilidade de formação de bolhas pequenas. O comportamento descrito se assemelha a partículas do tipo D, que serão analisadas posteriormente.

Figura 30: Mínima fluidização. a) Simulação 01; b) Simulação 04; c) Simulação 06

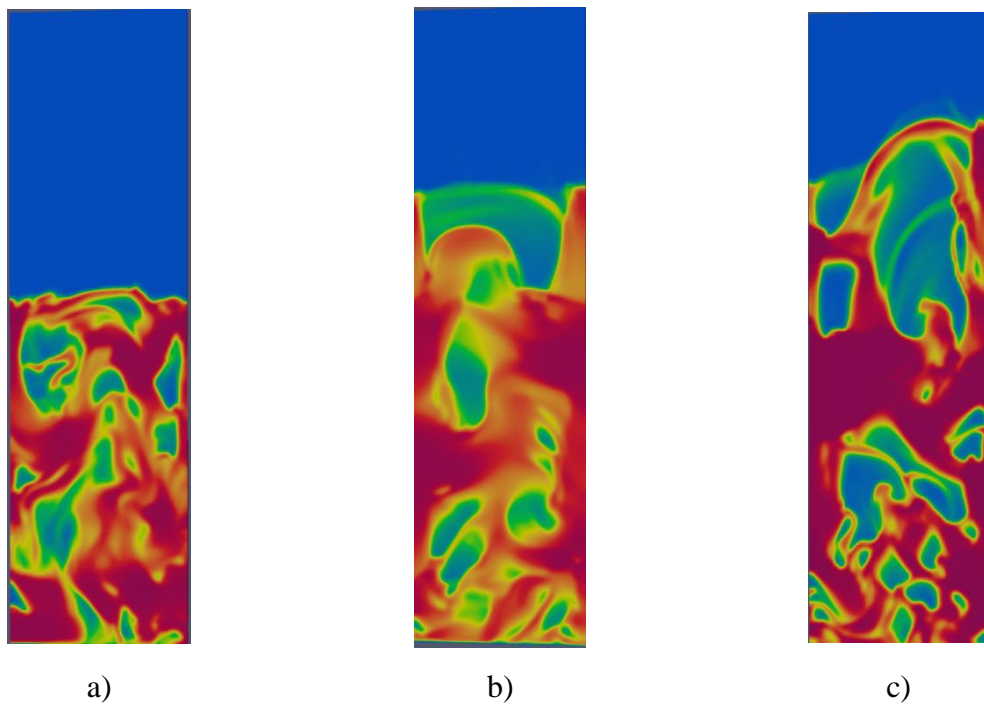


A Figura 31 apresenta as simulações com partículas do tipo B em condição de fluidização borbulhante. O comportamento dos leitos segue as análises discutidas na condição de mínima fluidização. Observa-se, na Figura 31, que as simulações do grupo B apresentam regiões com alta concentração de partículas, sendo uma característica que se ajusta as

observações de Geldart (1973), pois partículas tipo B coalescem em regimes acima da velocidade mínima de fluidização.

Analisando as simulações 04 e 06 em regime de fluidização borbulhante, é possível observar que as partículas se aderem mais intensamente a parede do leito, criando maiores vazios na região central, devido ao aparecimento de grandes bolhas. Tais simulações demonstram acentuadamente a característica exposta por Geldart de partículas tipo B.

Figura 31: Fluidização borbulhante. a) Simulação 01; b) Simulação 04; c) Simulação 06



A seguir, estão apresentados os gráficos da queda de pressão para as simulações que contém a partícula tipo B.

Como já explicado nas análises da Figura 30 e Figura 31, todas as partículas do tipo B estudadas sofreram fluidização. Os gráficos expostos na Figura 32, Figura 33 e Figura 34 corroboram com tal fato, tendo em vista que são similares ao perfil de queda de pressão típico de um leito fluidizado apresentado na Figura 1.

Figura 32: Curva de pressão para a simulação 01.

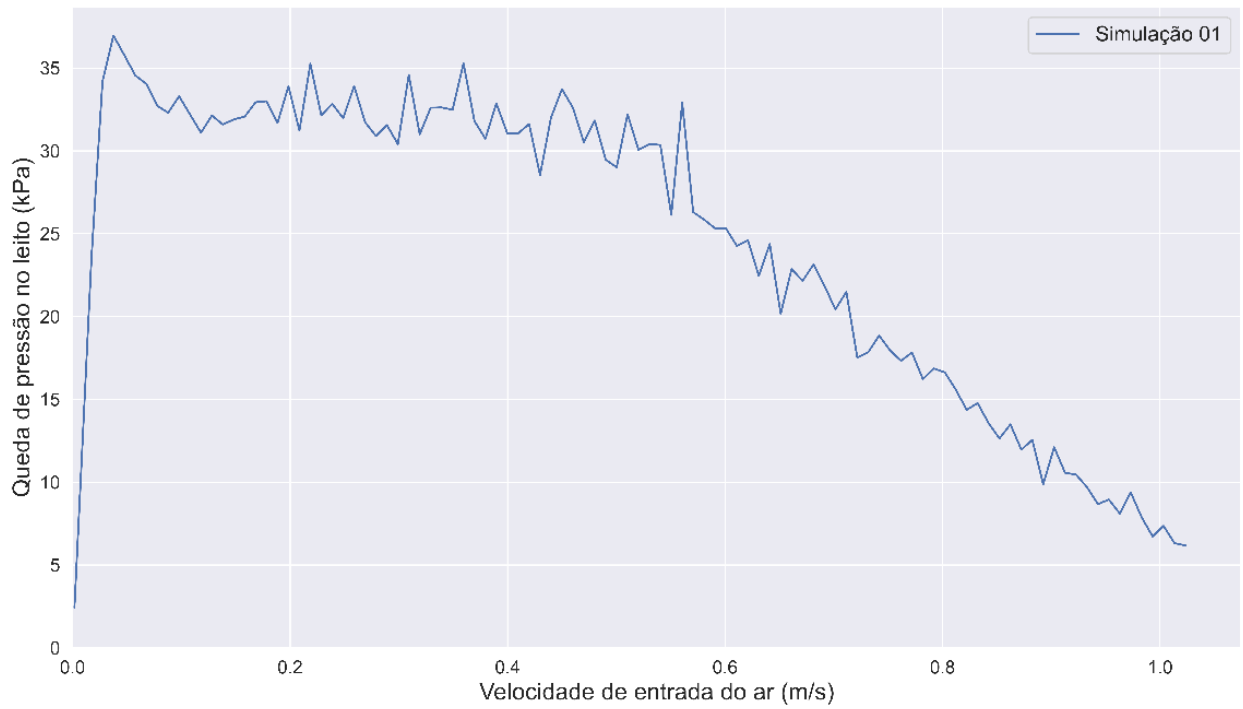


Figura 33: Curva de pressão para a simulação 04.

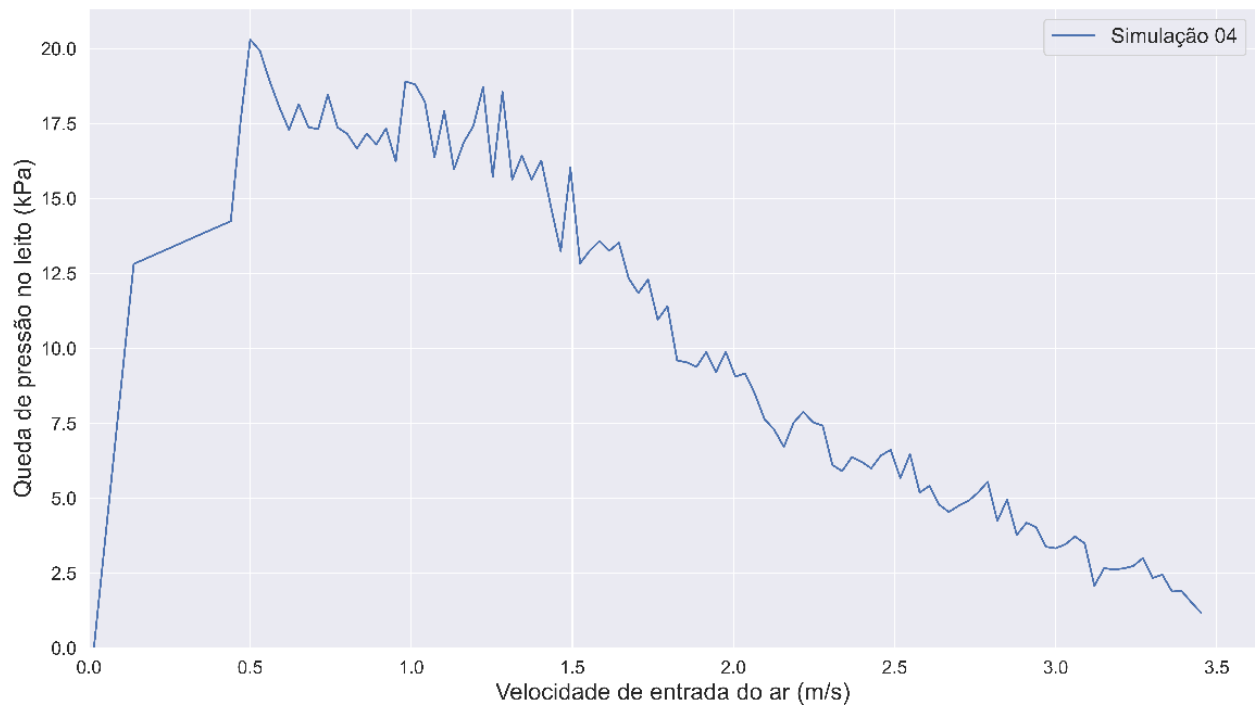
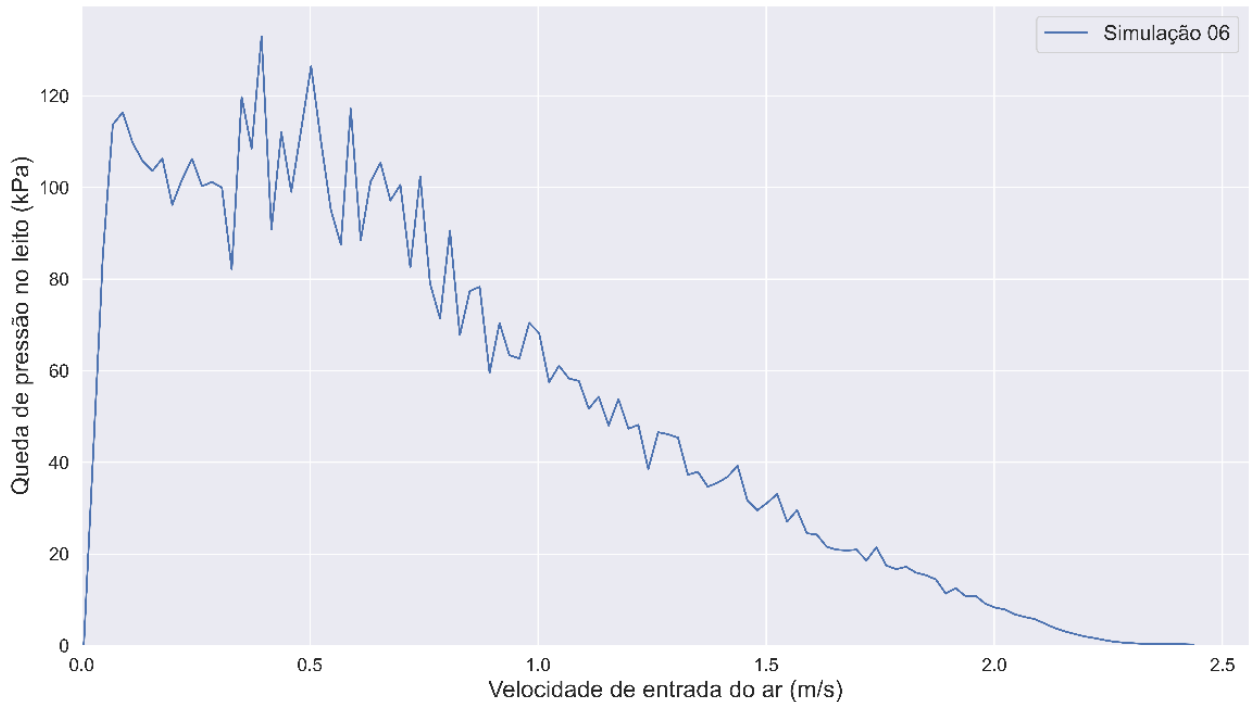


Figura 34: Curva de pressão para a simulação 06.



É interessante notar que as citadas figuras expõem gráficos com maior oscilação quando comparados aos gráficos de queda de pressão do Grupo A, Figura 25, Figura 26 e Figura 27. Isso se deve a maior quantidade de bolhas, e de maior diâmetro, formadas nas simulações do presente grupo que geram maior instabilidade no leito quando estouram.

Vale ressaltar que, apesar da fluidização ocorrer, tal fenômeno não tem a mesma qualidade em todas as simulações com partícula tipo B. Pela observação dos gráficos expostos acima, juntamente com a Figura 31, a simulação 01 apresentou melhor fluidização dentre as partículas estudadas para esse grupo. Posteriormente, no presente trabalho, será analisada de forma quantitativa a qualidade da fluidização.

Pela visualização da Figura 32, Figura 33 e Figura 34, o valor de u_{mf} foi encontrado, sendo expostas na Tabela 16.

Tabela 16: Velocidades de mínima fluidização e terminal encontrada para cada simulação de partículas tipo B.

	u_{mf} (Simulada)	u_t (Simulada)
Simulação 01	0,12	0,57
Simulação 04	0,67	1,46
Simulação 06	0,22	0,72

Percebe-se que os valores encontrados para u_t , Tabela 16, são inferiores aos calculados pela Equação 12. Como observado nas Figura 30 e Figura 31, tais simulações apresentaram fluidização com elevada criação de bolhas, as quais possuem velocidades mais elevadas que o ar de entrada e, bolhas grandes – simulações 04 e 06 – que cavitam e expõem as partículas. Devido a isso, a elutriação inicia em velocidades bem abaixo das apresentadas na Tabela 12. Num aspecto comparativo entre os valores de u_{mf} , partículas de menor massa – Tabela 13 – obtiveram menor velocidade mínima de fluidização.

Figura 35: Queda de pressão nas simulações 01, 04 e 06.



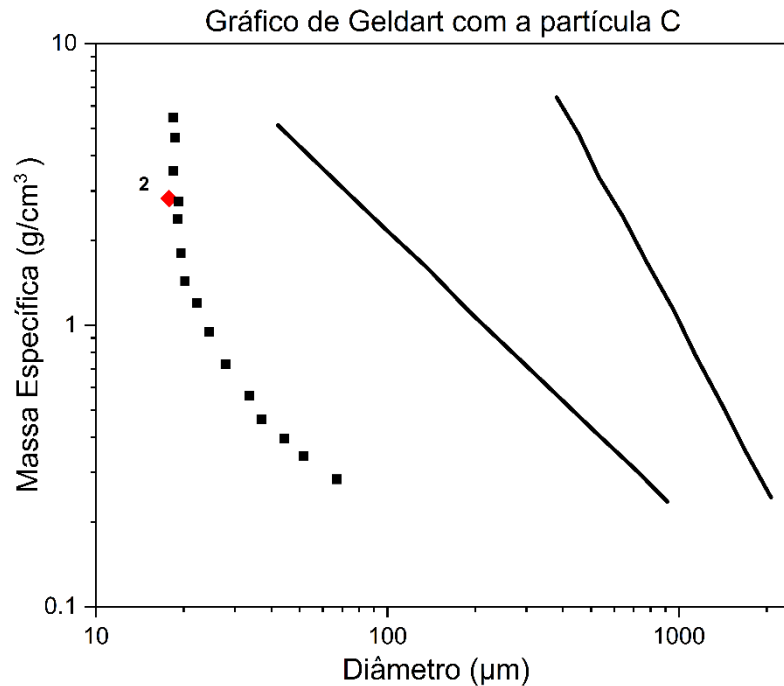
A Figura 35 evidencia que a simulação 04 e, especialmente, a simulação 06 apresentaram maior comportamento de arraste de partículas, tendo em vista a elevada expulsão de partículas do limite do leito devido a formação de bolhas maiores e instáveis.

É notável que não ocorrem, nas simulações do Grupo B, uma variação na queda de pressão semelhante a Figura 28, Grupo A. Uma vez que partículas do tipo B apresentam maiores diâmetros, uma maior queda de pressão será mantida ao longo dos regimes de fluidização, decaindo apenas quando se inicia a elutriação.

iii) Grupo C

A Figura 36 apresenta a localização, no gráfico de Geldart, da simulação realizada com a partícula tipo C.

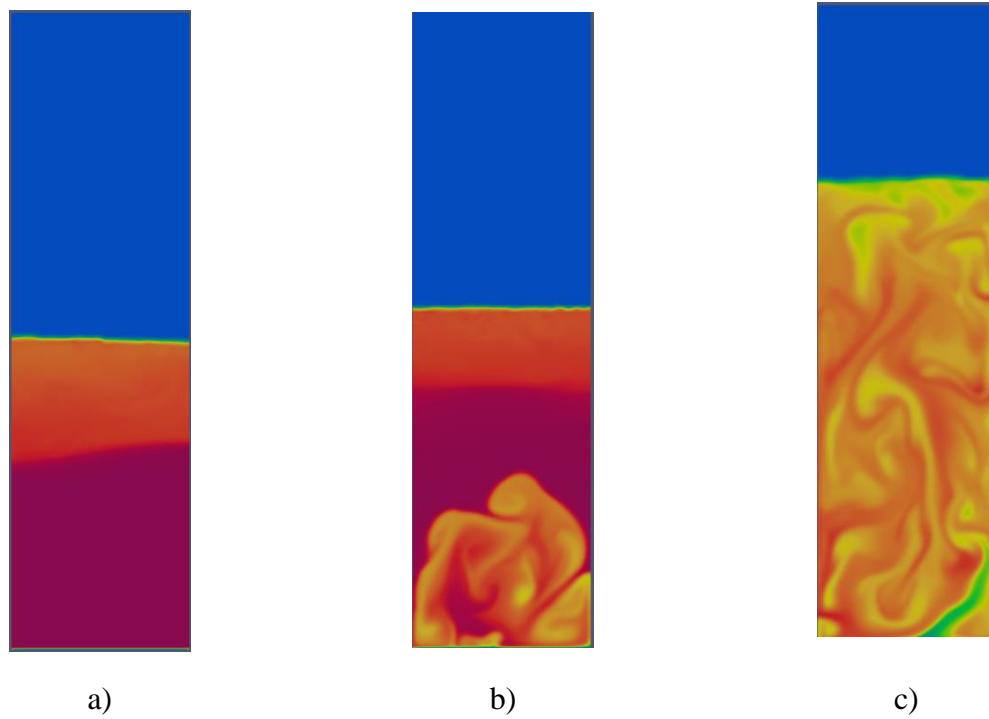
Figura 36: Gráfico de Geldart com a partícula do grupo A.



Na Figura 37, é possível perceber os distintos regimes de fluidização com a utilização de partículas tipo C. Já no início da simulação é possível perceber que uma porção das partículas -localizadas na parte superior do leito – estão sofrendo distanciamento devido a passagem de ar por estarem numa região de menor pressão, devido a isso, a fração de partículas no leito não é constante, como pode ser visualizado na Figura 37 a).

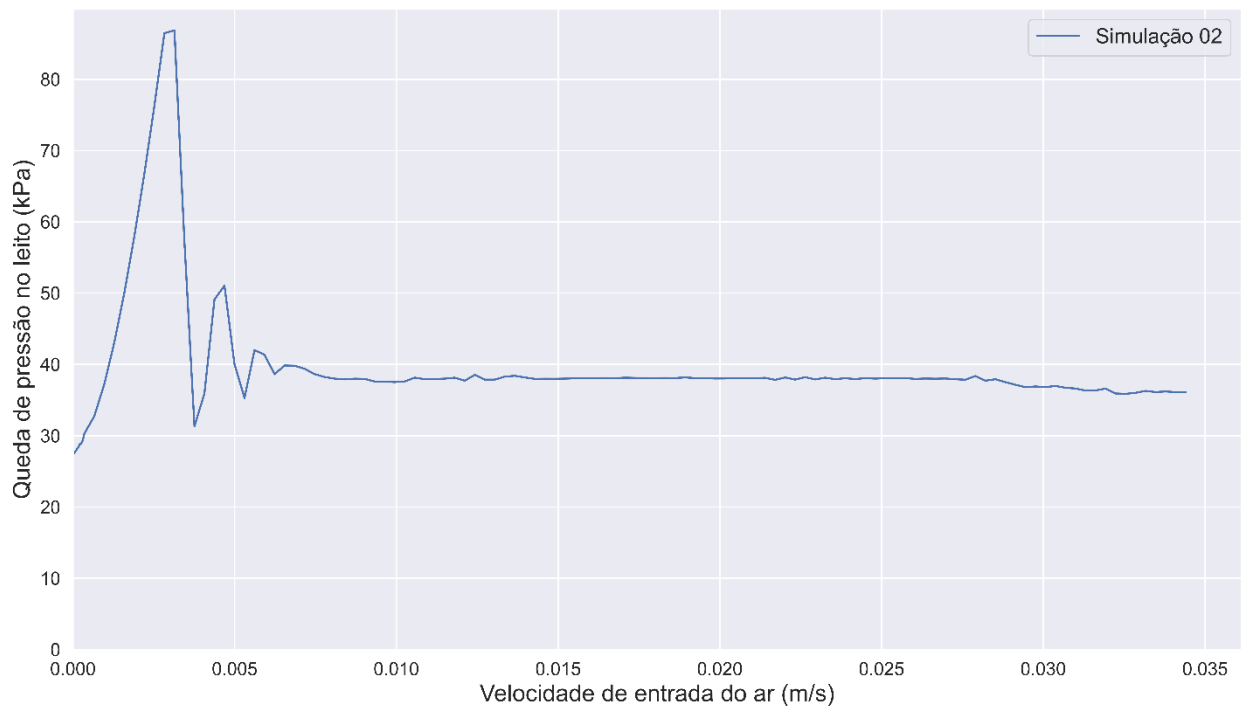
Como pode ser observado nas Figura 37 b) e c) e - já mencionado para a simulação 03 - quando as partículas tem pequeno diâmetro a força coesiva entre os grãos gera uma nuvem particular na iminência do fenômeno de fluidização. Ademais, tais figuras evidenciam que a movimentação predominante do material granular no interior do leito é a uma mistura turbulenta, com criação de vórtices e turbilhões, em oposição a suspensão e distanciamento das partículas. Além disso, não se verifica o borbulhamento do leito na simulação 02, sendo uma característica inerente de um leito fluidizado.

Figura 37: Simulação 02. a) Leito fixo; b) Mínima fluidização; c) Fluidização Turbulenta.



A Figura 38, está apresentado o gráfico da queda de pressão para a simulação que contém a partícula tipo C.

Figura 38: Curva de pressão para a simulação 02.



É possível perceber, na Figura 38, que o gráfico já se inicia com uma queda de pressão distante de zero. Como comentado na análise da Figura 37, mesmo velocidades baixas de entrada do ar, geram a elevação das partículas situadas na região superior do leito. Devido a isso, não existe uma elevação gradual da queda de pressão, tal parâmetro se mantém constante, no valor de 30 kPa, até u_{mf} seja atingido.

Os valores de u_{mf} e u_t foram extraídos dos gráficos citados, sendo apresentados na Tabela 17.

Tabela 17: Valores simulados para a velocidade mínima de fluidização e velocidade terminal.

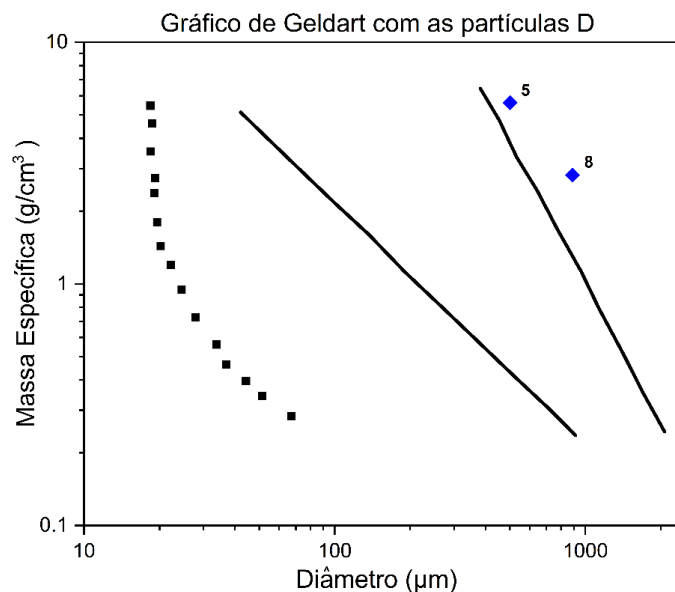
	u_{mf} (m/s)	u_t (m/s)
Simulação 02	0,005	0,03

O valor encontrado para u_t é similar ao calculado, na Tabela 12, pois não há a formação de bolhas, sendo assim, a Equação 12 se adequa melhor a simulação 02, quando comparado a outras simulações. No que tange a velocidade mínima de fluidização, seu valor segue o comportamento geral das simulações realizadas.

iv) Grupo D

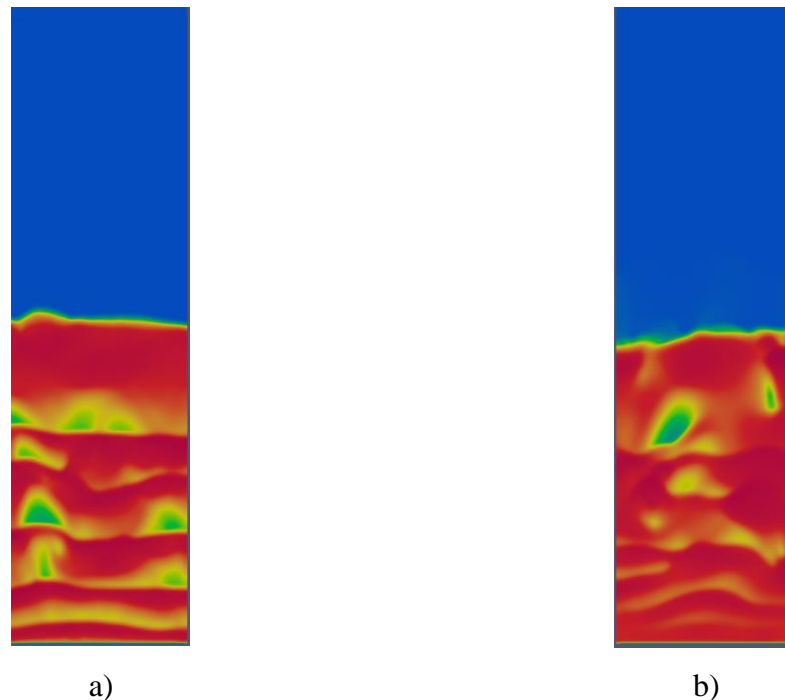
A Figura 39 apresentada à disposição gráfica das partículas do Grupo D no gráfico de Geldart. Percebe-se, que as simulações do grupo D utilizaram partículas semelhantes no gráfico, tendo em vista que é uma classificação com valores extremos das propriedades físicas da partícula.

Figura 39: Gráfico de Geldart com as partículas do grupo D



A Figura 40 expõe os leitos fluidizados na condição de mínima fluidização, contendo partículas do tipo D. É perceptível a similaridades das simulações, com formação de bolhas de elevado diâmetro, muito embora, seja possível observar uma maior resistência na simulação 08 na criação de tais vazios no leito, devido a sua maior massa, como visualizado pela Tabela 13.

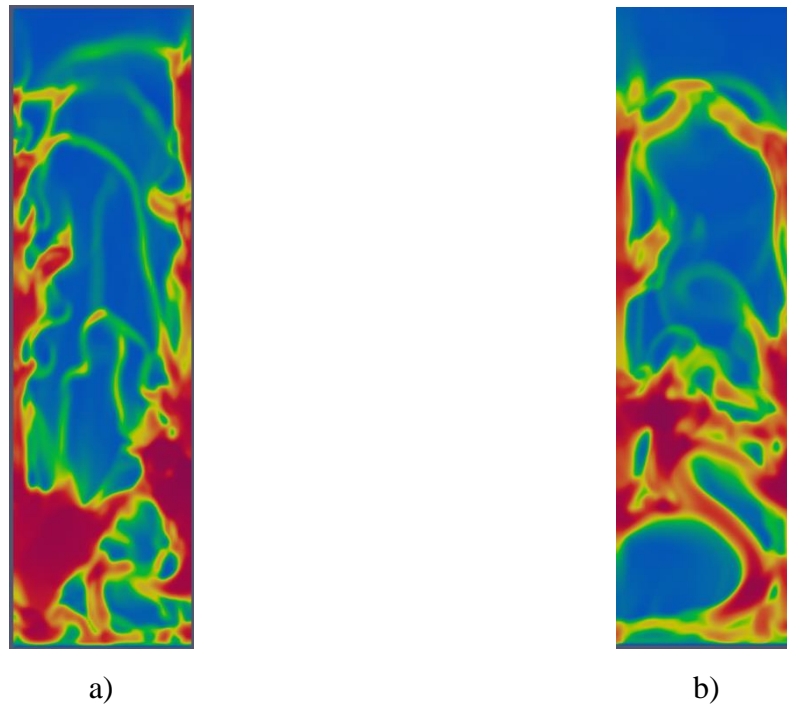
Figura 40: Mínima fluidização. a) Simulação 05; b) Simulação 08.



A conformidade das simulações com presença de partícula do grupo D é ainda maior no regime de fluidização borbulhante. Como é possível perceber na Figura 41, ambas as simulações exibem criação de grandes bolhas - gerando vazios na região central do leito – tendo como consequência a expulsão das partículas para as paredes. Além disso, numa visualização temporal da simulação, observa-se a dificuldade do ar na suspensão de tais partículas, pois apresenta quedas constantes do nível do leito elevado.

A Figura 41 expõe as partículas do grupo D interagindo com o ar em elevadas velocidades, devido a isso, a fluidização é do tipo turbulenta. Tal condição permite observar que parte das partículas continua na região inferior do leito mesmo em tal cenário indesejável do ponto de vista de intensificação de transferência de momento.

Figura 41: Fluidização turbulenta. a) Simulação 05; b) Simulação 08.



As Figura 42 e Figura 43, apresentam os gráficos da queda de pressão para as simulações que contém a partícula tipo D.

Figura 42: Curva de pressão para a simulação 05.

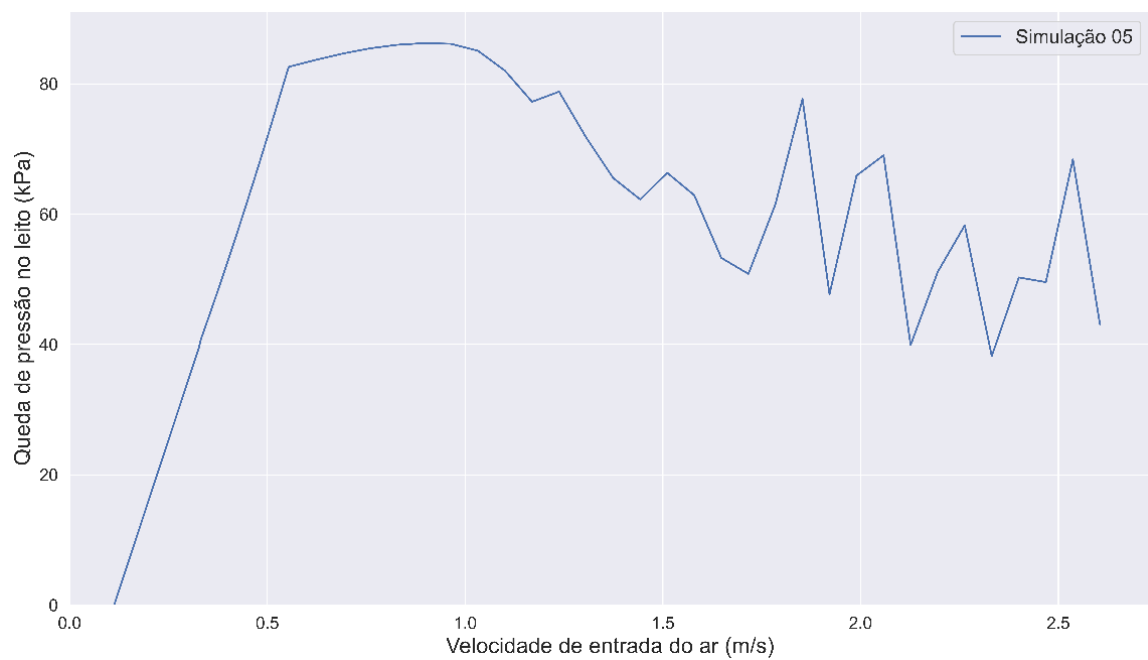
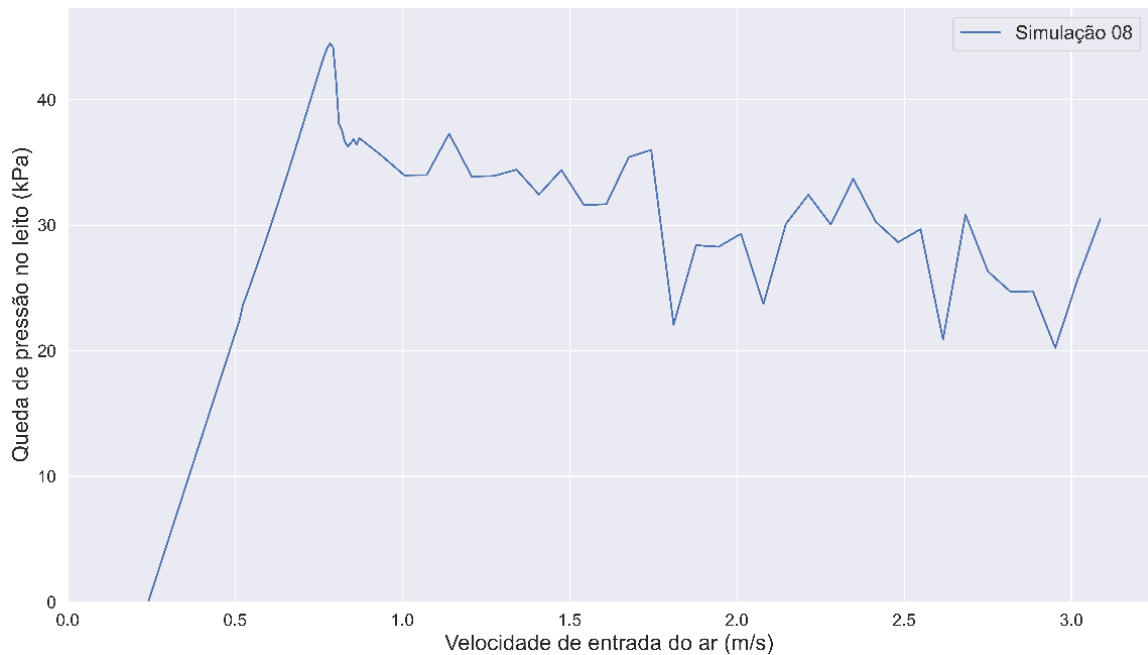


Figura 43: Curva de pressão para a simulação 08.



Observa-se, nas Figura 42 e Figura 43, que as partículas do Grupo D não apresentam o patamar estável – em regime borbulhante – como percebido no Grupo B, Figura 32, Figura 33 e Figura 34, iniciando de forma antecipada o regime de elutriação. Isso se deve a grandes bolhas formadas que, ao estourarem, expõem as partículas para fora da delimitação do leito.

Vale ressaltar, que as simulações do tipo D não foram simulação em todo o regime de elutriação, ou seja, a simulação percorreu até que $u_{ar} = u_t$.

Tabela 18: Valores simulados para a velocidade mínima de fluidização e velocidade terminal.

	u_{mf} (m/s)	u_t (m/s)
Simulação 05	1,17	2,60
Simulação 08	0,86	3,10

5.2 Análise Quantitativa

A seguir, serão apresentados as análises numéricas e quantitativas das simulações realizadas, com foco no estudo da qualidade da fluidização – discutida em detalhes com base nas imagens das simulações – e na utilização do PCC para a inferência dos valores de μ_{mf} e μ_t .

5.2.1 Velocidades de mínima fluidização e terminal

Os dados apresentados na Tabela 12 foram resumidos na Tabela 16, juntamente com os valores dos fatores avaliados no Planejamento Experimental.

Tabela 19: Planejamento experimental e variáveis de resposta.

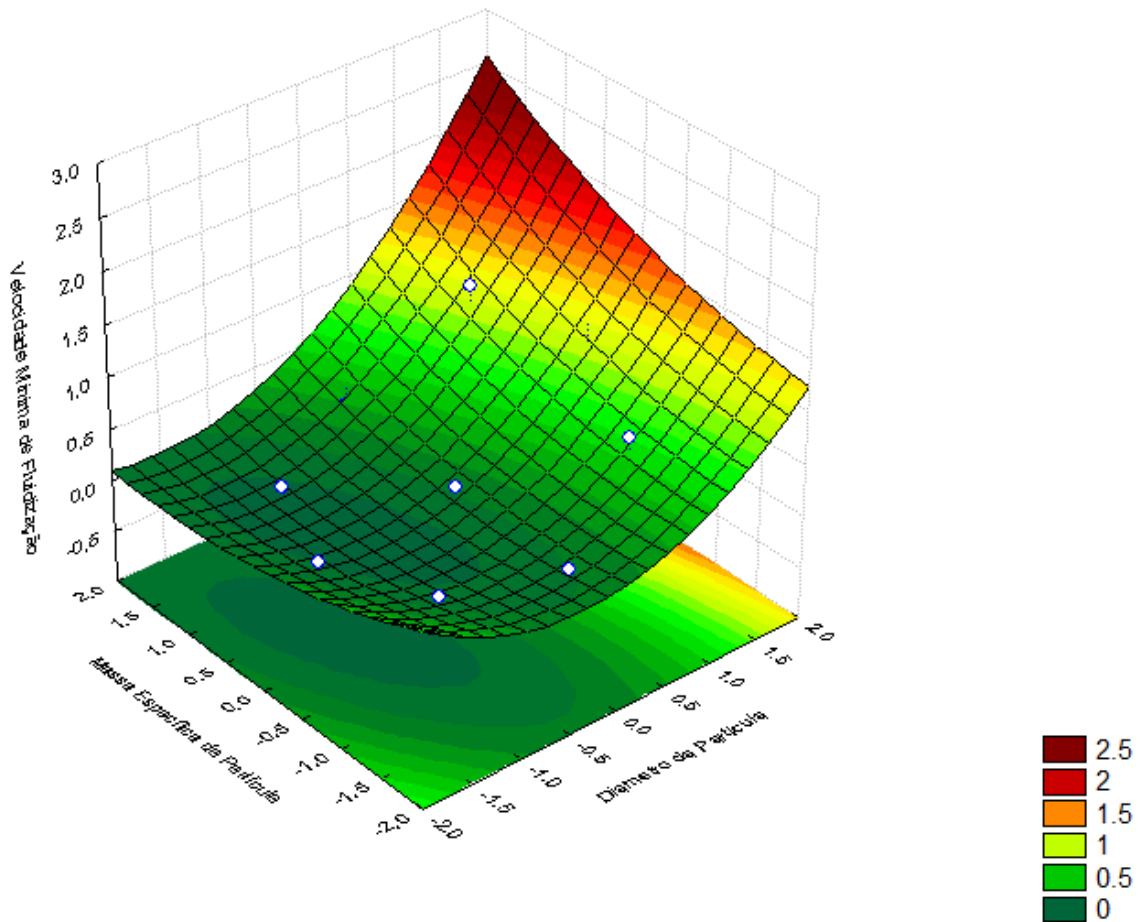
Experimento	d_p	ρ_p	μ_{mf}	μ_t
01	0	0	0,120	0,570
02	$-\alpha$	0	0,005	0,030
03	-1	-1	0,007	0,035
04	1	-1	0,670	1,460
05	1	1	1,170	2,600
06	0	$+\alpha$	0,220	0,720
07	-1	1	0,029	0,200
08	$+\alpha$	0	0,860	3,100
09	0	$-\alpha$	0,060	0,207

Com base no Planejamento Experimental, o software STATISTICA realiza uma regressão linear utilizando como variável dependente as propriedades das partículas e, como variáveis respostas, as velocidades encontradas nas simulações.

A citada ferramenta computacional também informa quais termos apresentam significância estatística, utilizando o grau de confiança em 95% e, o coeficiente de correlação (R^2), a fim de verificar o quanto o modelo estatístico utilizado capturou a variação nos dados.

No que diz respeito a velocidade mínima de fluidização, o modelo identificou que apenas d_p influência de maneira significativa o valor de μ_{mf} , obtendo um valor de $R^2 = 92,02\%$ utilizando todos os termos do planejamento. O coeficiente de correlação se relaciona com a análise apresentada na Figura 20, tendo em vista que o valor de R^2 apresentado no PCC demonstra um ajuste mais adequado que a regressão linear utilizando a massa como variável de entrada.

Figura 44: Superfície de resposta para a velocidade mínima de fluidização.



Pela observação da Figura 44 é perceptível que a curvatura da superfície ao longo o eixo de d_p é mais acentuada que para ρ_p , demonstrando que uma variação no diâmetro da partícula terá maior influência no valor de μ_{mf} – fixando as demais condições do leito fluidizado, fato este corroborado pela análise dos coeficientes presentes na Equação 40. A seguir (Equação 40) é apresentado o modelo matemático do PCC para a velocidade de mínima fluidização.

$$\mu_{mf} = 0,12 + 0,75 \cdot x_1 + 0,19 \cdot x_2 + 0,40 \cdot x_1^2 + 0,11 \cdot x_2^2 + 0,24 \cdot x_1 \cdot x_2 \quad (40)$$

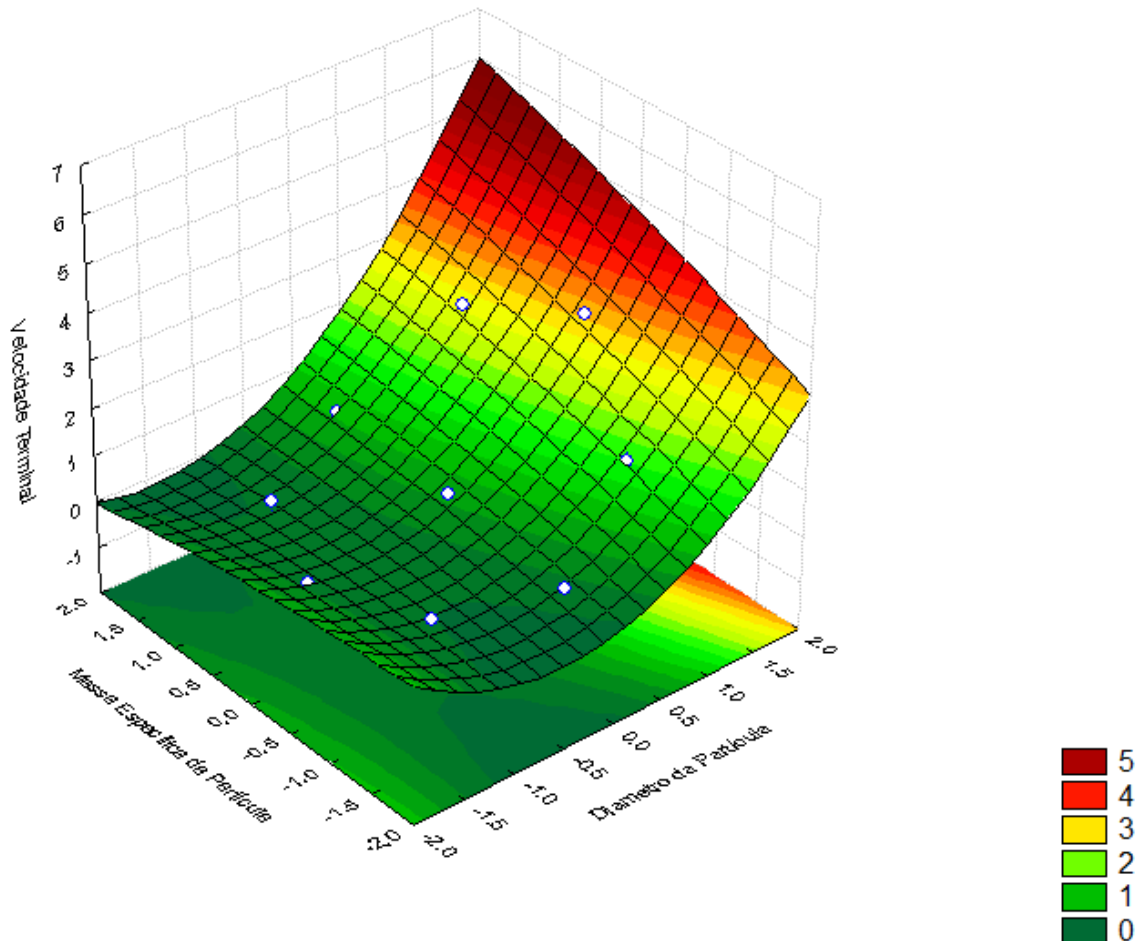
Dado que,

- $x_1 = \frac{\log(d_p) - \log(126)}{\log(501) - \log(126)}$
- $x_2 = \frac{\log(\rho_s) - \log(2820)}{\log(5620) - \log(2820)}$

Em relação a velocidade terminal, o modelo obteve $R^2 = 99,22\%$ e, assim como para μ_{mf} , é considerado um ajuste adequado para as variáveis. Além disso, ambos os termos lineares das variáveis de entrada, d_p e ρ_p - e o termo quadrático do diâmetro da partícula, apresentam

significância estatística, no entanto, o fator $d_p * \rho_p$ não tem tal característica, para o grau de confiança de 95%.

Figura 45: Superfície de resposta para a velocidade terminal.



De forma semelhante a análise realizada para μ_{mf} , o valor de μ_t é mais afetado pela variação no diâmetro da partícula do que por mudanças na sua massa específica, como pode ser observado nas curvaturas da superfície apresentada na Figura 45. O modelo reduzido apresenta satisfatório ajuste, com $R^2 = 97,92\%$, sua expressão matemática é apresentada a seguir, Equação 41.

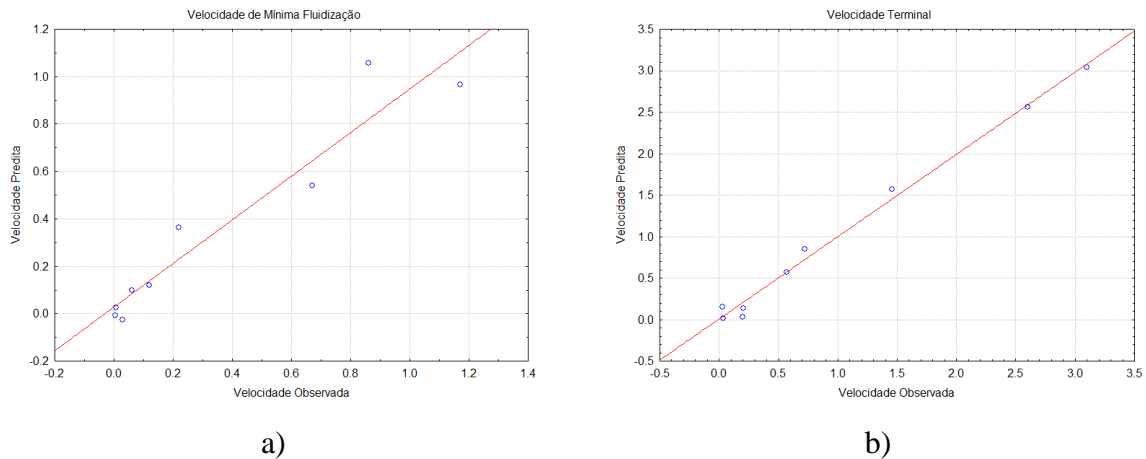
$$\mu_t = 0,57 + 2,04 \cdot x_1 + 0,52 \cdot x_2 + 1,02 \cdot x_1^2 \quad 41)$$

As Figura 44 e Figura 45, juntamente com os coeficientes apresentados nas equações dos modelos – Equações 40 e 41 - apontam que um aumento em alguma das variáveis de entrada irá produzir uma elevação de μ_{mf} ou μ_t , concordando com as análises qualitativas.

Numa análise conjunta de ambas as variáveis resposta no que diz respeito as performances dos modelos, a Figura 46 mostra que os valores preditos para μ_{mf} e μ_t não

apresentaram viés, tendo em vista que os pontos em ambos os gráficos tem variação em torno das retas apresentadas, sendo assim, os modelos não exibem superestimação – ou subestimação – dos valores preditos.

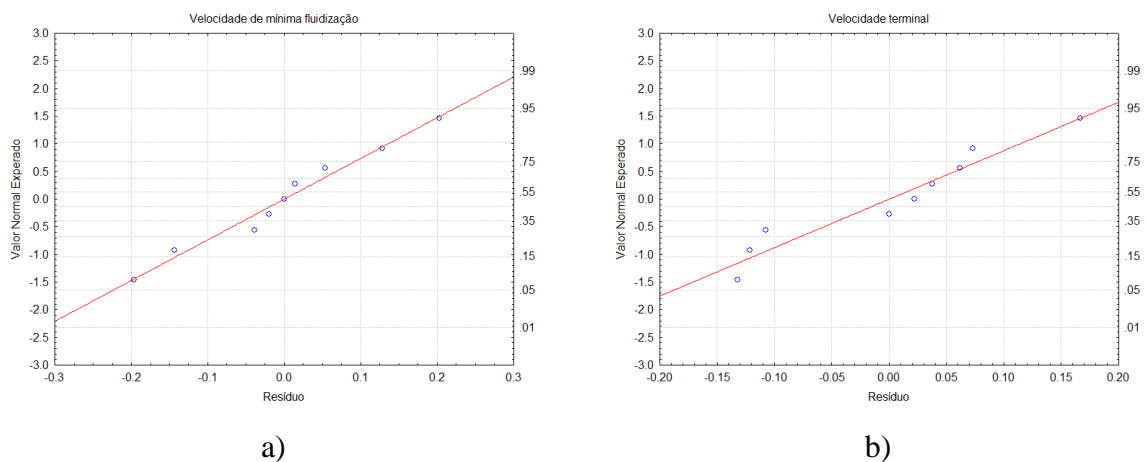
Figura 46: Gráficos de paridade. a) Velocidade de mínima fluidização; b) Velocidade terminal.



A Figura 46 também corrobora com os valores de R^2 já apresentados, tendo em vista que maior coeficiente de correlação implica em menor erro, traduzindo-se em pontos mais próximos a reta. Dessa forma, observa-se que a Figura 46 b) tem pontos com menor distancia a reta na cor vermelha, pois tem R^2 mais elevado.

Além disso, foram realizadas análises de comparação dos resíduos obtidos do PCC com a distribuição normal, sendo observados na Figura 47. Observa-se que os pontos apresentam proximidade a reta normal e dispersão em torno da mesma, não sendo possível observar viés na variação dos dados.

Figura 47: Curva norma. a) Velocidade de mínima fluidização; b) Velocidade Terminal

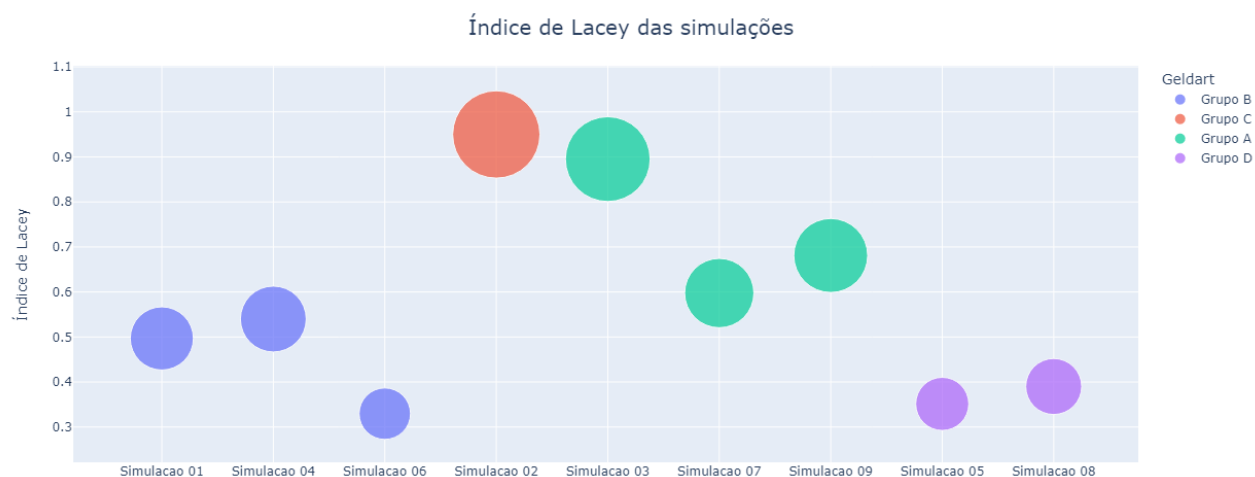


Sabendo que as análises estatísticas realizadas têm como premissa a distribuição normal e aleatória dos resíduos, portanto, os gráficos da Figura 47 corroboram com os resultados obtidos pelo software STATISTICA no Planejamento Experimental.

5.2.2 Qualidade de Fluidização

A fim de obter uma análise quantitativa da qualidade de fluidização nas simulações realizadas, foi utilizado inicialmente o índice de Lacey (1943), comumente aplicado em problemas de mistura. A Figura 48 expõe um gráfico de bolhas com o emprego de tal índice.

Figura 48: Índice de mistura para as simulações.

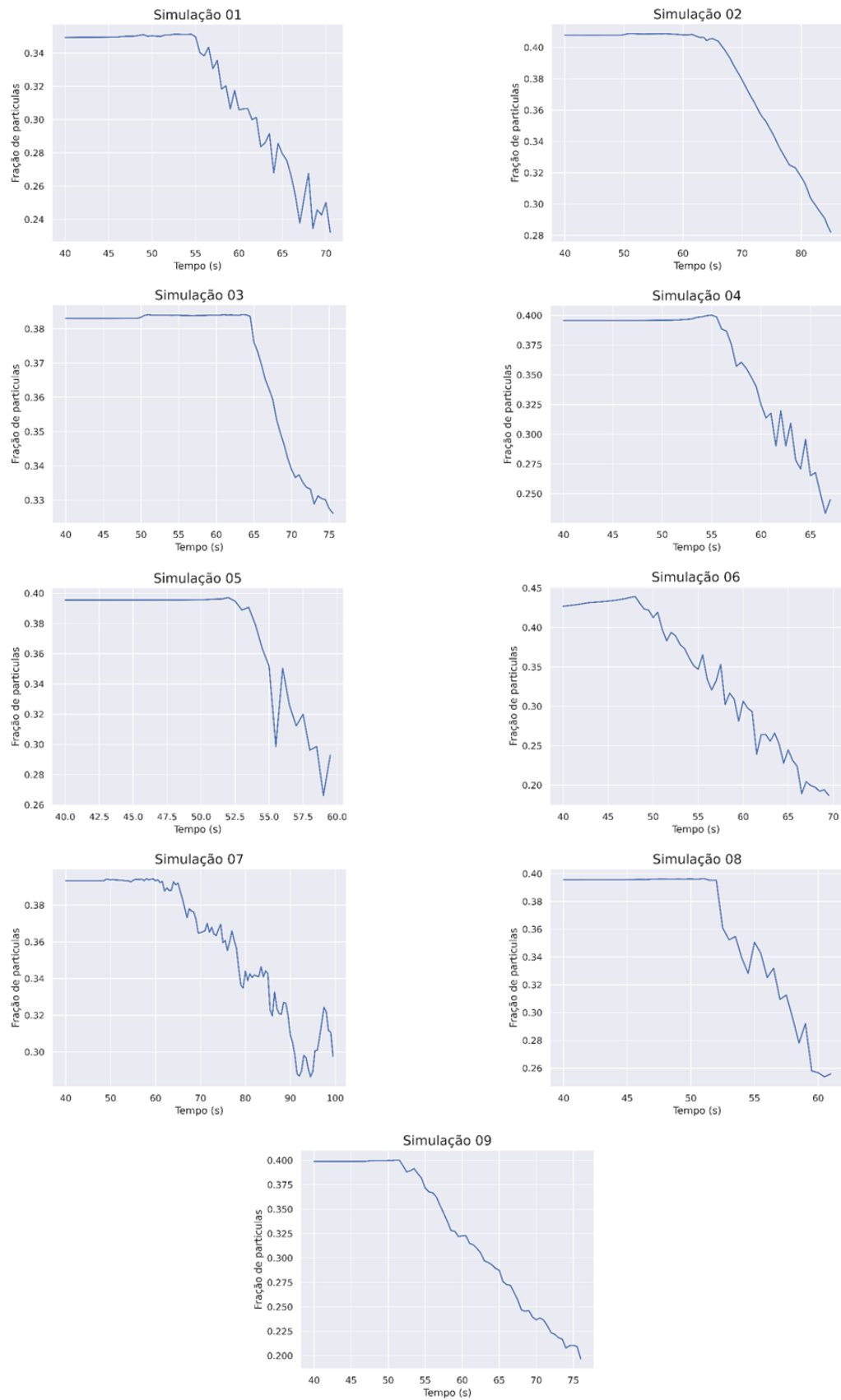


Observa-se, na Figura 48, que as simulações do Grupo D apresentam índices de mistura menores, quando comparados aos outros grupos, concordando com as análises qualitativas, devido a formação de grandes bolhas. Além disso, as simulações 01, 07 e 09 – já apontadas como referencial de fluidização no presente trabalho – obtiveram adequados índices de mistura, utilizando a equação de Lacey.

Apesar disso, as simulações 02 e 03 expõem um elevado valor para o índice de Lacey, no entanto, tais leituras não apresentaram fluidização com qualidade equiparável a simulação 09, por exemplo. Isso se deve, pois, o citado índice calcula apenas o grau de mistura entre as fases - no entanto - esse é apenas um aspecto da fluidização, deve ser avaliado a frequência de formação de bolhas, juntamente com seu diâmetro. Logo, o índice de Lacey não é inteiramente adequado para a avaliação quantitativa do fenômeno de fluidização.

Posto isso, a qualidade da fluidização pode ser realizada pela visualização dos gráficos temporais de fração de partículas, como apresentado na Figura 49.

Figura 49: Fração de partículas em regime de fluidização borbulhante.



Percebe-se que os gráficos da Figura 49 apresentam comportamento decrescente na fração de partículas no leito, tendo em vista que bolhas são criadas e ocorre a elevação do leito pela suspensão das partículas. Ademais, observa-se que os gráficos apresentados possuem diferenças na oscilação da fração de partículas, podendo perceber que a presença de bolhas no regime de fluidização possuem maior flutuação em tal propriedade.

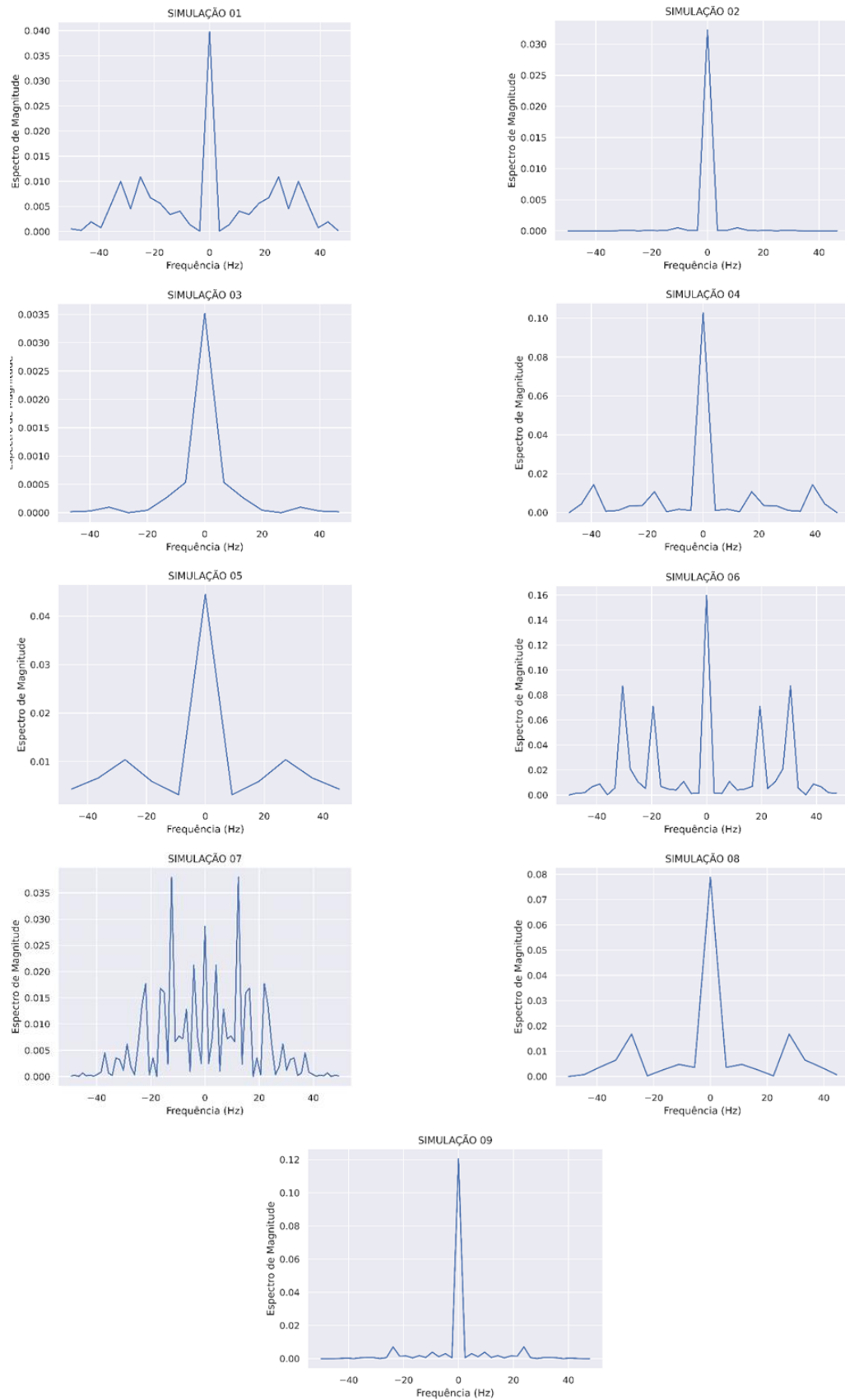
No intuito de avaliar o borbulhamento do leito, os valores da fração de partículas no leito foram tratados com a Transformada de Fourier a fim de gerar o espectro de frequência das series temporais no regime de fluidização borbulhante – associados a região de decréscimo de α_p nos gráficos da Figura 49.

Observando os gráficos da Figura 50 é possível perceber que as simulações com maior qualidade de fluidização, apontadas na análise qualitativa, obtiveram frequências mais elevadas com maior magnitude (Tabela 20). Em específico, a simulação 02 não obteve formação expressiva de bolhas, logo a maior amplitude é exibida em baixas frequências. Foi calculado a medida de centralidade das frequências nos espectros apresentados na Figura 50.

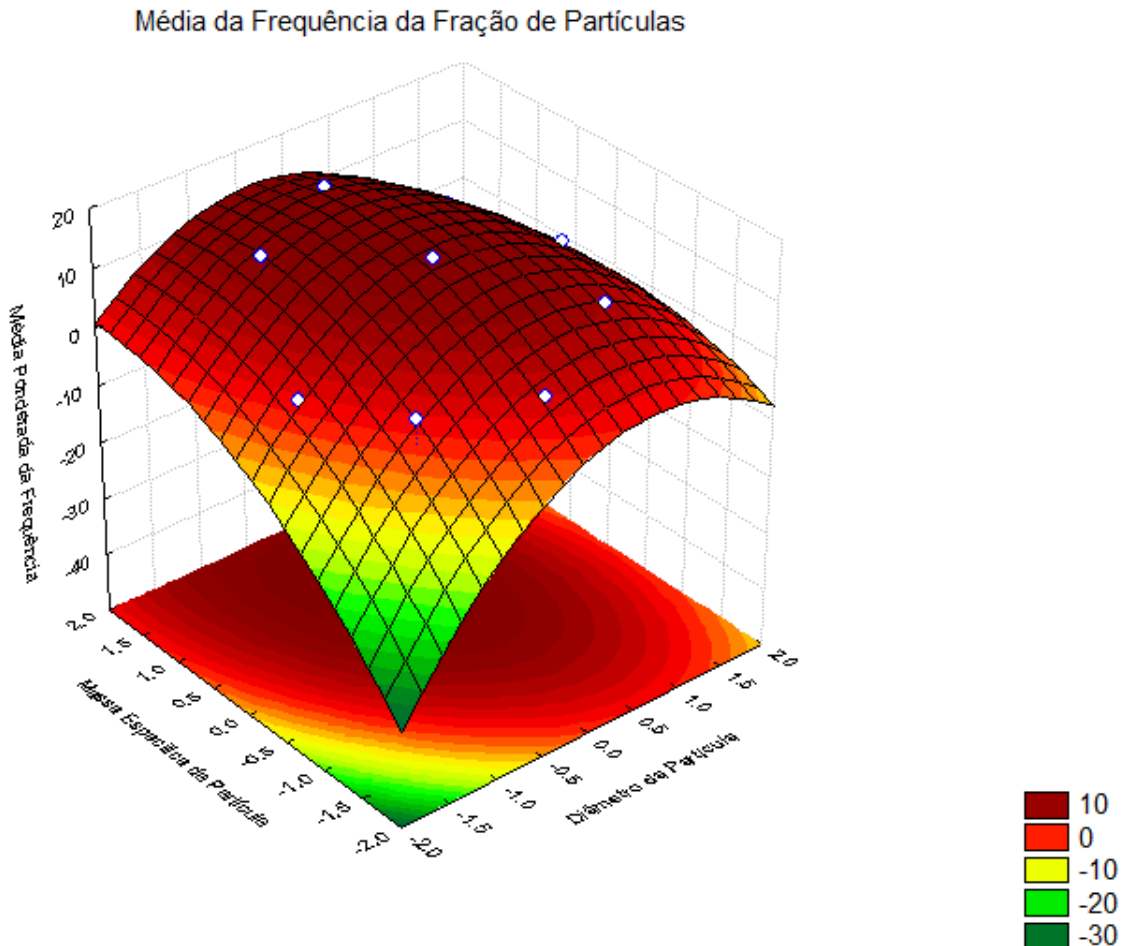
Tabela 20: Centralidade das frequências dos espectros de fração de partículas.

Simulação	Média Ponderada de Frequência (Hz)
1	14,51
2	0,38
3	2,78
4	8,25
5	9,35
6	12,29
7	13,52
8	8,09
9	2,93

Figura 50: Espectros de frequência da fração de partículas.



De maneira análoga a análise das velocidades, foi utilizado o software STATISTICA a fim de construir um modelo preditivo para a média de frequência, avaliando assim o borbulhamento do leito e, por consequência, a qualidade da fluidização.



Observa-se que os maiores valores para a frequência de borbulhamento ocorrem para os valores centrais de d_p e ρ_p , que englobam partículas do Grupo A e B. Partículas que apresentam baixos valores para o diâmetro e massa específica exibem as menores frequências – região em verde na superfície de ajuste.

No que diz respeito a partículas do Grupo D ou, até mesmo, partícula tipo B com elevado diâmetro – simulação 04 – obtiveram frequências de borbulhamento intermediárias. Isso se deve ao fato que leitos fluidizados com tais partículas formam bolhas grandes e lentas, diminuindo sua frequência e por consequência o grau de fluidização. Os resultados quantitativos para o índice de fluidização apresentado concordam com as análises qualitativas e entendimento do fenômeno de fluidização explicitado por GELDART (1973).

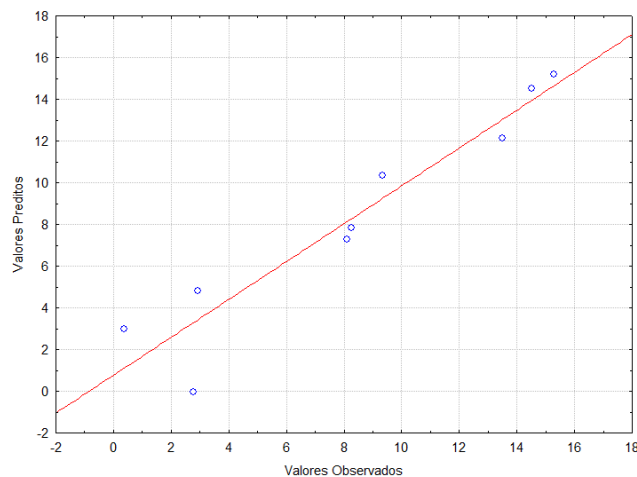
A Equação 43 apresenta o modelo de ajuste para a frequência média de borbulhamento, obtendo $R^2 = 90,78\%$ utilizando todas as variáveis.

$$\bar{f}_\alpha = 14,51 + 3,05 \cdot x_1 + 7,33 \cdot x_2 - 9,37 \cdot x_1^2 - 4,50 \cdot x_2^2 - 4,82 \cdot x_1 \cdot x_2 \quad (43)$$

Observa-se que o valor de \bar{f}_α aumenta linearmente com as variáveis utilizadas, ao passo que descreve de forma quadrática, promovendo a diminuição de \bar{f}_α para valores mais elevados de d_p e ρ_p . Ademais, a análise realizada mostrou que o efeito linear de ρ_p e o quadrático de d_p influenciam de forma significativa o valor de \bar{f}_α .

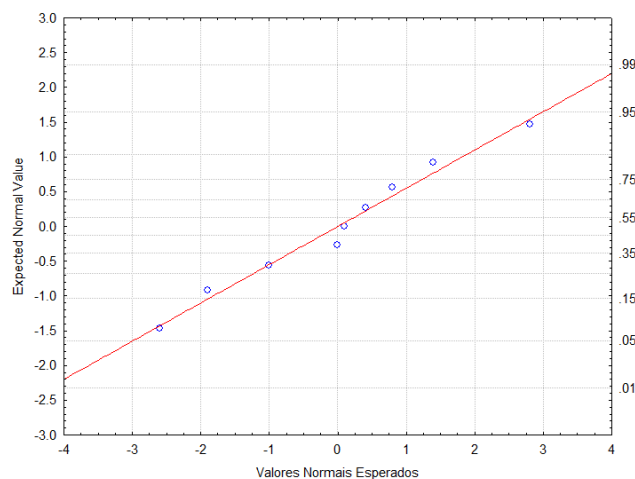
O gráfico de paridade exibido na Figura 51 indica que o modelo não apresentou viés na predição do valor de \bar{f}_α , tendo em vista a dispersão equilibrada dos pontos em torno da reta.

Figura 51: Gráfico de paridade para a frequência média de borbulhamento



De modo semelhante as análises das velocidades, é apresentado o gráfico normal - Figura 52 - no qual também se percebe boa adequação dos dados a distribuição normal, validando o planejamento experimental realizado para a predição do valor da frequência média da fração de partículas.

Figura 52: Curva normal para a frequência média de borbulhamento



6 CONCLUSÃO

A compreensão do fenômeno de fluidização é de essencial importância para a sua utilização nos mais diversos processos da indústria química. No entanto, a fluidodinâmica no interior do leito é influenciada por diversos fatores, que incluem características de operação do equipamento – como geometria do leito e velocidade do fluido de entrada - e as propriedades físicas das fases fluida e granular.

Nesse contexto, o presente trabalho teve como objetivo analisar a influência do diâmetro e massa específica das partículas nas velocidades de mínima fluidização e terminal, bem como, na qualidade da fluidização do leito. Com foco no estudo do entendimento da fluidização para cada grupamento de Geldart.

A fim de alcançar os citados objetivos foi utilizado o software gratuito e de código livre OpenFoam, para realização das simulações empregando a técnica de CFD no sistema multifásico típico de um leito fluidizado. O citado resolvidor numérico foi utilizado em conjunto com o planejamento experimental composto central com o intuito de explicar os parâmetros selecionados.

Os resultados numéricos obtidos com o OpenFoam foram visualizados pela utilização do software ParaView que, a princípio, foi empregado para análises qualitativas, para em seguida – em conjunto com a linguagem de programação Python – gerar arquivos “.csv” de cada simulação, sintetizando a massa de dados tratadas em etapas posteriores.

Os arquivos csv gerados compreenderam três principais parâmetros: pressão do leito, média e desvio padrão da fração de partículas, analisados ao longo do tempo. A pressão foi empregada para a identificação das velocidades de mínima fluidização e terminal em cada simulação, enquanto que as estatísticas da fração de partículas foram estudadas, empregando métodos matemáticos, para estabelecer métricas quantitativas da qualidade da fluidização.

Tanto o valor da velocidade terminal, quanto do terminal, destoram daqueles calculados por correlações empíricas experimentais. No que diz respeito as relações encontradas para as velocidades, foi encontrado que a velocidade de mínima fluidização é influenciada principalmente pelo comportamento linear do diâmetro da partícula, enquanto que a velocidade terminal depende – de forma mais significativa – dos parâmetros lineares e quadrático do diâmetro, bem como do termo quadrático da massa específica.

A utilização do índice de Lacey não foi inteiramente adequado para o entendimento da qualidade da fluidização. Dessa forma, foi avaliado a frequência média de borbulhamento,

atendendo ao comportamento físico do leito fluidizado. A relação quantitativa para tal parâmetro indicou o termo linear da massa específica e quadrático do diâmetro são os mais importantes na determinação numérica da qualidade do fenômeno de fluidização.

A fluidodinâmica no interior de um leito fluidizado é um processo complexo e influenciada por diversos fatores, necessitando, para avaliações futuras que demais parâmetros de entrada sejam avaliados a fim de obter um melhor entendimento de tal processo. Além disso, é pertinente o análises adicionais dos leitos fluidizados contendo partículas do tipo C e D.

O primeiro grupo apresentou alta coesão na fase granular, a aplicação de leitos fluidizados vibratórios ou, até mesmo, a instalação de *internals* no interior do leito podem ser estudados para o aprimoramento na qualidade da fluidização em tal grupo. No que tange as partículas do tipo D, são empregados comumente em equipamentos de leito de jorro, sendo um tópico para análises futuras, comparando-o ao leito fluidizado, em especial, no estudo do diâmetro das bolhas geradas no processo de fluidização.

Apesar dos aprofundamentos que podem ser realizados sobre o tema, o estudo realizado permitiu identificar que as variáveis analisadas influenciam de forma significativa no fenômeno de fluidização – bem como – sugerem que a escolha da métrica utilizada para análise da qualidade da fluidização foi adequada

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AHRENS, J. PARAVIEW: AN END-USER TOOL FOR LARGE DATA VISUALIZATION. Telemark University College, 2008. Disponível em: <<https://www.researchgate.net/publication/247111133>>.

ALFREDO GENEHR ENGENHEIRO MECÂNICO, G. CARACTERIZAÇÃO DA FLUIDIZAÇÃO DE BIOMASSAS DE CASCA DE MADEIRAS EM LEITOS POLIDISPERSOS. Dissertação de Mestrado, 2015.

ASHGRIZ, N.; MOSTAGHIMI, J. AN INTRODUCTION TO COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS CHAPTER 20 IN FLUID FLOW HANDBOOK. [s.l: s.n.].

AUTHOR, F.; INZ LESZEK STEPIEN SUPERVISOR, MGR; HAB INZ MAREK SCIAZKO, DR. Introduction to fluidization. Department of Mechanical & Industrial Eng. University of Toronto, [s.l: s.n.].

BAKSHI, A.; GHONIEM, A. F.; ALTANTZIS, C. MIXING DYNAMICS IN BUBBLING FLUIDIZED BEDS. AICHE Journal, v. 63, n. 10, p. 4316–4328, 1 out. 2017.

CHEN, L. FINITE VOLUME METHODS. [s.l: s.n.].

DE, M.; TORRECILLA, M. INTRODUCTION TO NUMERICAL SIMULATION OF FLUID FLOWS. Mónica de Mier Torrecilla Technical University of Munich, 2004.

ECHENIQUE, J. B. et al. CARACTERIZAÇÃO FLUIDODINÂMICA DE MEIOS POROSOS FORMADOS COM RECHEIOS INDUSTRIAIS PROJETO DE FINAL DE CURSO. 2021.

EYMARD, R.; GALLOUËT, T.; ELE HERBIN, R. FINITE VOLUME METHODS. P.G. Ciarlet, J.L. Lions eds. [s.l: s.n.].

FATTI, V. F. L. CFD MODELING OF GAS-SOLID FLUIDIZED BEDS IN OPENFOAM: A COMPARISON BETWEEN THE EULERIAN-EULERIAN AND EULERIAN-LAGRANGIAN METHODS. MILANO: ING - Scuola di Ingegneria Industriale e dell'Informazione, 2021.

FRESCA, S.; MANZONI, A. REAL-TIME SIMULATION OF PARAMETER-DEPENDENT FLUID FLOWS THROUGH DEEP LEARNING-BASED REDUCED ORDER MODELS. *Fluids*, v. 6, n. 7, 1 jul. 2021.

GELDART, D. ELSEVIER SEQUOIA SA, LAUSANNE-PRINTED IN THE NETHERLANDS TYPES OF GAS FLUIDIZATION. *Powder Technology*. [s.l: s.n.].

GIDASPOW, D. Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions, vol. 7. 1972.

JUNQUEIRA BRANDAO, R. ESTUDO DA SEGREGAÇÃO DE MATERIAL GRANULAR EM TAMBOR ROTATÓRIO EMPREGANDO A ABORDAGEM NUMÉRICA LAGRANGEANA. Uberlândia: Universidade Federal de Uberlândia, 17 jul. 2017.

KOCHEVSKY, A. N.; NENYA, V. G. CONTEMPORARY APPROACH FOR SIMULATION AND COMPUTATION OF FLUID FLOWS IN CENTRIFUGAL HYDROMACHINES. [s.l: s.n.]. Disponível em: <<http://www.tflex.com>,>.

MENDONÇA, L. A. DESEMPENHO DO DELINEAMENTO COMPOSTO CENTRAL EM EXPERIMENTOS COM ALTO COEFICIENTE DE VARIAÇÃO. Dissertação de Mestrado. 2012.

LEVEQUE, R. J. FINITE DIFFERENCE METHODS FOR DIFFERENTIAL EQUATIONS. University of Washington. 2005.

LI, P. et al. CFD SIMULATION OF THE HYDRODYNAMIC BEHAVIOR IN AN INTERNALLY CIRCULATING FLUIDIZED BED REACTOR FOR PRODUCING POLYSILICON GRANULES. *Powder Technology*, v. 311, p. 496–505, 2017.

LUNDBERG, J.; HALVORSEN, B. M. A REVIEW OF SOME EXSISTING DRAG MODELS DESCRIBING THE INTERACTION BETWEEN PHASES IN A BUBBLING FLUIDIZED BED. 2008. Disponível em: <<https://www.researchgate.net/publication/228515089>>.

CREMASCO, M. A. OPERAÇÕES UNITÁRIAS EM SISTEMAS PARTICULADOS E FLUIDOMECÂNICOS. Edgard Blücher. 2012.

MASSARANI, G. FLUIDODINÂMICA EM SISTEMAS PARTICULADOS. 2ª ed. 2001.

MAY, R. A.; STEVENSON, K. J. SOFTWARE REVIEW OF ORIGIN 8. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 21 jan. 2009.

MICHAEL, B.; MICHAEL, E. A. FLUIDISED-BED GRANULATION: A CHRONOLOGY. Drug Development and Industrial Pharmacy, v. 17, n. 11, 1991.

OSCHMANN, T.; HOLD, J.; KRUGGEL-EMDEN, H. NUMERICAL INVESTIGATION OF MIXING AND ORIENTATION OF NON-SPHERICAL PARTICLES IN A MODEL TYPE FLUIDIZED BED. Powder Technology, v. 258, p. 304–323, 2014.

PHILIPPSEN, C. G.; VILELA, A. C. F.; ZEN, L. D. FLUIDIZED BED MODELING APPLIED TO THE ANALYSIS OF PROCESSES: REVIEW AND STATE OF THE ART. Journal of Materials Research and Technology. Elsevier Editora Ltda, , 1 abr. 2015.

PUREVSUREN, E.; TIAN, D. AERODYNAMIC CFD STUDY OF WORTMANN FX66-S-196 AIRFOIL. International Journal of Engineering Research & Technology (IJERT), vol. 7, 2018. Disponível em: <www.ijert.org>.

RASCHKA, S.; PATTERSON, J.; NOLET, C. MACHINE LEARNING IN PYTHON: MAIN DEVELOPMENTS AND TECHNOLOGY TRENDS IN DATA SCIENCE. Machine Learning, and Artificial Intelligence. Information, v. 11, n. 4, 2020.

RIECK, C.; BÜCK, A.; TSOTSAS, E. MONTE CARLO MODELING OF FLUIDIZED BED COATING AND LAYERING PROCESSES. AIChE Journal, v. 62, n. 8, p. 2670–2680, 1 ago. 2016.

SALEHI, M. S.; ASKARISHAHI, M.; RADL, S. QUANTIFICATION OF SOLID MIXING IN BUBBLING FLUIDIZED BEDS VIA TWO-FLUID MODEL SIMULATIONS. Industrial and Engineering Chemistry Research, v. 59, n. 22, p. 10606–10621, 3 jun. 2020.

SHI, D.-P.; LUO, Z.-H.; GUO, A.-Y. NUMERICAL SIMULATION OF THE GAS–SOLID FLOW IN FLUIDIZED-BED POLYMERIZATION REACTORS. Industrial & Engineering Chemistry Research, v. 49, n. 9, p. 4070–4079, 5 maio 2010.

STATISTICA 7: An overview. American Statistician, fev. 2007.

SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T. THE DERIVATION OF A DRAG COEFFICIENT FORMULA FROM VELOCITY-VOIDAGE CORRELATIONS. fev. 1994.

TANDON, M. P.; KARNIK, A. U. SIMULATION OF RECTANGULAR FLUIDIZED BED WITH GELDART D PARTICLES. 10th International computational fluid dynamics in the oil and gas, metallurgical and process industries conference (CFD 2014), 2014

THANH, B. T.; DUC, L. A. DETERMINATION ON FLUIDIZATION VELOCITY TYPES OF THE CONTINUOUS REFINED SALT FLUIDIZED BED DRYING. In: PALA-ROSAS, I. (Ed.). Current Drying Processes. Rijeka: IntechOpen, 2020. p. Ch. 5.

TIAN, F. et al. NUMERICAL STUDY ON MICROSCOPIC MIXING CHARACTERISTICS IN FLUIDIZED BEDS VIA DEM. Fuel Processing Technology, v. 88, n. 2, p. 187–198, fev. 2007.

VISWANATHAN ANAND, A. A BRIEF STUDY OF DISCRETE AND FAST FOURIER TRANSFORMS. [s.l: s.n.].

YUSOF, S. N. A. et al. A SHORT REVIEW ON RANS TURBULENCE MODELS. CFD Letters, Penerbit Akademia Baru, 2020.

ZAWAWI, M. H. et al. A REVIEW: FUNDAMENTALS OF COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS (CFD). AIP Conference Proceedings. Anais American Institute of Physics Inc., 9 nov. 2018.

8 APENDICE:

Trabalho Publicado no Congresso Nacional de Engenharia Química (COBEQ 2023)



ESTUDO NUMÉRICO DA INFLUÊNCIA DAS PROPRIEDADES FÍSICAS GRANULARES APLICADO AO FENÔMENO DE FLUIDIZAÇÃO

LFN LOPES¹, LEA OLIVEIRA¹, FAM VILELA¹, RJ BRANDÃO¹, SHV CARVALHO¹, JI SOLETTI¹

¹Universidade Federal de Alagoas, Centro de Tecnologia, Departamento de Engenharia Química

E-mail para contato: rodolfo.brandao@ctec.ufal.br

RESUMO – Leitos fluidizados são amplamente empregados em processos industriais por apresentar elevadas taxas de transferência de calor e massa. Devido à complexidade de sua natureza, urge a necessidade da utilização de métodos computacionais, como fluidodinâmica computacional (CFD), para o entendimento da interação entre a fase gasosa e a fase sólida. Para melhor compreensão do fenômeno de fluidização foi realizado um planejamento experimental composto central (PCC) para definição dos casos simulados. O software de CFD OpenFOAM foi utilizado para simular o escoamento no interior de leitos fluidizados para partículas com diferentes propriedades físicas (massa específica e diâmetro) e sob diferentes velocidades de escoamento. A análise dos resultados foi feita utilizando o software Paraview em conjunto com Python. Foi discutido o comportamento do escoamento no interior no leito fluidizado de acordo com a classificação de Geldart.

1 INTRODUÇÃO

Os processos de fluidização de materiais granulares são aplicados nos mais diversos ramos industriais, sendo empregados em processos físicos – secagem e recobrimento de materiais – ou em processos reacionais, como reatores catalíticos e de gasificação. O uso do leito fluidizado é justificado pelas elevadas transferências de calor e massa que se dão entre as fases fluida e granular no interior do equipamento, alcançando níveis superiores de eficiência frente a outras alternativas às citadas aplicações (PHILIPPSEN et al, 2015).

Apesar de sua alta empregabilidade, leitos fluidizados apresentam interações complexas entre as fases fluida e granular e, segundo Philippesen et al. (2015) existe uma demanda crescente em modelos matemáticos que permitam explicar os fenômenos físicos presentes em tal equipamento. Tendo em vista a dificuldade de simular o fenômeno de fluidização, técnicas numéricas vêm sendo implementadas para a solução das equações que regem tal processo, destacando-se a técnica de CFD (Computational Fluid Dynamics) (HERZOG et al. 2012).