

Relatório Final

Título do projeto de pesquisa: Estudo por simulação de CFD do efeito de pressurização/aspiração em bocal sônico e supersônico

Bolsista: Paula Cristina Gomes Fernandes

Orientador(a): Herve Layet Riette

Período a que se refere o relatório: Julho de 2016 a Julho 2017

1. Resumo

Os processos de *melting spray* e de *spray cooling* são normalmente empregados para a produção de partículas esféricas em escala nano e micro. Nesses processos, o material é fundido em um reservatório e atomizado em um bocal do tipo *air-assisted two-fluid*. O *spray* gerado é resfriado e as gotículas se solidificam formando partículas esféricas do material. O diâmetro dessas partículas depende da vazão de escoamento do material fundido, o qual se dá tanto pela ação da gravidade quanto pelo efeito de aspiração. Esse último pode ser determinado experimentalmente, mas não há correlações teóricas ou semiteóricas confiáveis para ele. Neste trabalho, buscou-se avaliar a aplicabilidade do CFD para esse efeito, a partir da comparação de dados obtidos por CFD, com o aplicativo *OpenFoam*, com dados experimentais obtidos para o sistema água + ar comprimido, em regime subsônico, a 298,15 K. Os resultados obtidos mostram boa concordância, o que indica que o CFD é uma ferramenta adequada, permitindo assim estender esses estudos para bocais divergentes em regimes sônico e supersônico, os quais são normalmente empregados para o preparo de nano partículas de metais por *melting spray*.

2. Introdução

Os processos de *melting spray*¹ e de *spray cooling*² são formas variantes das torres de *prilling*, empregadas no passado para a produção de munição para armamentos. Eles estão entre os métodos mais promissores para o preparo de partículas esféricas de diversos tipos de materiais em escala nano e micro. O processo de *spray cooling* está sendo empregado atualmente na AQI-IAE para o preparo de partículas esféricas de parafina para grãos-combustíveis de motores foguetes híbridos. Esse tipo de partículas encontra grande aplicação em diversas áreas, tais como: nano tecnologia, materiais compósitos, eletrônica e a indústria

aeroespacial^{3,4}. O processo consiste em fundir o material em um reservatório ou *tundish* e atomizá-lo em um bocal do tipo *air-assisted two-fluid*³. Nesse bocal, a atomização ocorre com o contato ou a colisão do filete do material fundido com ar comprimido ou gás inerte pressurizado: N₂, Ar, He, etc. O *spray* formado se resfria e as gotículas se solidificam na forma de partículas esféricas do material. A vazão do material fundido afeta diretamente o diâmetro dessas partículas, que é promovida tanto pela ação da gravidade quanto pelo efeito de aspiração. Esse último ocorre pela passagem do ar ou gás a altas velocidades em torno do filete de material fundido, provocando a sua aspiração ou sucção e o aumento da sua vazão. No processo de *melting spray*, o líquido é usualmente um metal fundido que apresenta viscosidades e tensões superficiais elevadas, o que demanda o emprego de um bocal divergente com gás inerte escoando em regime sônico ou supersônico. Esse processo é atualmente empregado para a produção de Alumínio em pó utilizado nos propelentes sólidos compostos do IAE. No *melting spray*, o efeito de aspiração ganha uma importância ainda maior na vazão e no diâmetro das partículas do metal.

Este é um estudo preliminar cujo objetivo é avaliar o emprego do CFD no estudo do efeito de aspiração em regimes subsônicos. Neste estudo são levantados dados experimentais para o sistema água + ar comprimido a 298,15 K, e comparados com respectivos dados obtidos por CFD. Os experimentos foram conduzidos com um *spray dryer* da *Büchi*, dotado de um bocal do tipo *air-assisted twin-fluid*. As simulações foram feitas com o aplicativo *OpenFoam*, utilizando o *twoPhaseEulerFoam* como *solver*. A partir dos resultados obtidos é possível avaliar a aplicabilidade do CFD nos estudos subsequentes com bocais divergentes em regimes sônico e supersônico.

3. Materiais e métodos

O equipamento utilizado nos experimentos é um mini *Spray-dryer*, modelo B-290, da *Büchi*, dotado de um sistema de atomização formado por um reservatório para líquido, tubo injetor com válvula e um atomizador do tipo *air-assisted two-fluid*⁵, conforme ilustra a Fig. 1. O ar comprimido é fornecido por um compressor, cuja vazão é ajustada e medida por um rotâmetro.

O fluido no reservatório escoou pelo tubo injetor até alcançar o bocal de atomização, onde colide com o ar comprimido em expansão formando um spray com as gotículas do líquido. A vazão do líquido foi determinada para diferentes vazões do ar, e as demais condições de escoamento foram mantidas fixas.

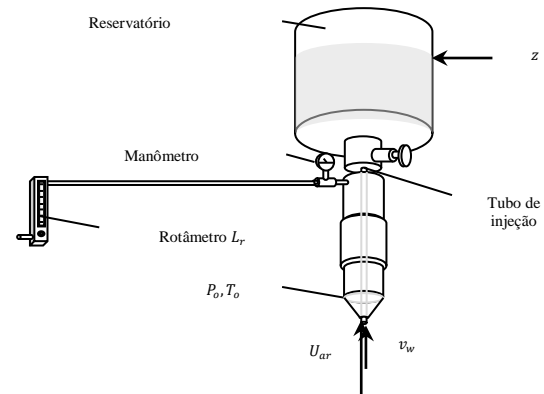


Fig. 1 – Representação do sistema de atomização

A execução das simulações foi realizada em um computador do tipo IBM-PC, dotado do sistema operacional *LINUX - Ubuntu* versão 14.04. O aplicativo utilizado nas simulações foi o *OpenFoam* versão 3.0.1 da ESI. O pós-tratamento dos resultados das simulações foi feito com o aplicativo *Paraview* versão 4.4.0. O ajuste dos dados com correlações matemáticas foi conduzido com o aplicativo *CurveExpert* versão 1.40.

3.1. Estimativa do número de Mach (Ma) e da velocidade do ar (U_{ar}) no atomizador.

O número de Mach (Ma) para escoamentos isoentrópicos em um atomizador pode ser relacionado com o fluxo do gás (w/A) através da expressão⁶:

$$\text{Eq. 1} \quad \frac{w}{A} = \sqrt{\frac{\gamma}{R}} \cdot \frac{P_o}{\sqrt{T_o}} \cdot \frac{Ma}{\left(1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma^2\right)^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}}}$$

sendo P_o e T_o são a pressão e a temperatura de estagnação do gás no interior do atomizador, $\gamma = c_p/c_v$ é a razão das capacidades caloríficas e R é a constante universal dos gases. Os parâmetros de estagnação foram medidos e o fluxo w/A foi determinado experimentalmente. Os valores de Ma obtidos da Eq. 1 foram utilizados para estimar a velocidade do ar (U_{ar}), dada por:

$$\text{Eq. 2} \quad U_{ar} = Ma \cdot \sqrt{\gamma \cdot R' \cdot T_{ar}}$$

sendo R' é a constante dos gases para o ar e T_{ar} é a temperatura do ar na saída do bocal.

3.2. Determinação do efeito de aspiração ΔP_{ea} .

A equação de Bernoulli foi aplicada à água na superfície do reservatório e na saída do tubo injetor no bocal de atomização:

$$\text{Eq. 3} \quad \frac{P_w - P_{atm}}{\rho_w} + \frac{v_w^2}{2} - gz + \alpha \frac{v_w^2}{2} = 0$$

sendo P_w é a pressão da água na saída do tubo injetor, z é o nível da superfície da água no reservatório em relação à saída do tubo injetor, g é a aceleração da gravidade, α é a constante relacionada com a perda de carga localizada por atrito e ρ_w é a densidade da água. O ensaio foi inicialmente realizado sem a utilização de ar comprimido. Assim, $P_w = P_{atm}$, e a velocidade da água é $v_w = v_{w,o}$. Substituindo na Eq. 3 tem-se:

$$\text{Eq. 4} \quad 1 + \alpha = \frac{2gz}{v_{w,o}^2}$$

Ao utilizarmos ar comprimido a pressão da água na saída do tubo injetor sofre o efeito de aspiração. Assim, $P_l = P_{atm} + \Delta P_{ea}$, e a Eq. 3 resulta:

$$\text{Eq. 5} \quad \frac{\Delta P_{ea}}{\rho_w} = gz - (1 + \alpha) \frac{v_w^2}{2}$$

mantendo-se as mesmas condições para o escoamento, e substituindo a variável $1 + \alpha$ na Eq. 5 obtemos:

$$\text{Eq. 6} \quad \Delta P_{ea} = \rho_w gz \left(1 - \frac{\phi_w^2}{\phi_{w,o}^2} \right)$$

sendo $v_w/v_{w,o} = \phi_w/\phi_{w,o}$. O efeito de aspiração ΔP_{ea} pode então ser obtido a partir das vazões volumétricas da água com e sem a passagem de ar comprimido.

3.3. Simulação do efeito de aspiração por CFD

As simulações de escoamento de fluidos por CFD foram feitas a partir da abordagem de Euler para dois fluidos. O *solver* empregado é o *twoPhaseEulerFoam*, que é baseado nas equações fundamentais de conservação de massa, quantidade de movimento e energia^{7,8}. A equação da continuidade é obtida a partir do balanço diferencial de massa¹⁰:

$$\text{Eq. 7} \quad \frac{\partial \alpha_i \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \mathbf{U}_i) = 0$$

sendo, \mathbf{U}_i é o vetor velocidade do fluido i e ρ_i é a sua densidade. O primeiro termo da equação da continuidade corresponde ao acúmulo de massa e o segundo termo corresponde ao fluxo convectivo. A equação de *Navier-Stokes* é obtida a partir do balanço diferencial de quantidade de movimento, apenas com forças de interação entre fases, dado por:

$$\text{Eq. 8} \quad \frac{\partial \alpha_i \rho_i \mathbf{U}_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \mathbf{U}_i \mathbf{U}_i) = -\alpha_i \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_i + \alpha_i \rho_i \mathbf{g} + K(\mathbf{U}_j - \mathbf{U}_i) + C_{vm} \alpha_i \rho_j \left(\frac{d\mathbf{U}_j}{dt} - \frac{d\mathbf{U}_i}{dt} \right)$$

sendo $C_{vm} = 0,5$ é o coeficiente da massa virtual e K é coeficiente de troca entre fluidos dado por¹⁰:

$$\text{Eq. 9} \quad K = \frac{\rho_i f}{6\tau_i} d_i A_{int}$$

sendo ρ_i é a densidade da fase i , d_i é o diâmetro de gotas da fase i , A_{int} é a área interfacial e τ_i é o tempo de relaxação de particulado dado por¹⁰:

$$\text{Eq. 9A} \quad \tau_i = \frac{\rho_i d_i^2}{18\mu_j}$$

e o μ_j é a viscosidade da fase j e f é o fator de arrasto dado por Schiller e Naumann¹⁰:

$$\text{Eq. 9B} \quad f = \frac{C_D Re}{24}$$

com:

$$\text{Eq. 9C} \quad C_D = \begin{cases} 24(1 + 0,15Re^{0,687})/Re & Re \leq 1000 \\ 0,44 & Re > 1000 \end{cases}$$

sendo Re é o número de Reynolds da mistura de fases.

3.3.1. Abordagem do regime turbulento por RAS.

Duas abordagens foram inicialmente adotadas para o regime turbulento⁹: o RAS (ou *Reynolds Averaged Simulation*), na qual a viscosidade efetiva é a soma da viscosidade μ_i , que é uma propriedade de estado do fluido i , mais a viscosidade turbulenta que é característica do escoamento μ_t , ou seja, $\mu^{ef} = \mu_i + \mu_t$. A viscosidade turbulenta μ_t não pode ser medida diretamente e alguns modelos de turbulência do tipo $k - \varepsilon$ têm sido propostos para a sua determinação; a outra abordagem é o LES (*Large Eddy Simulation*), cujo princípio é filtrar os termos *subgrid* ou de pequenos vórtices, a fim de simplificar os cálculos reduzindo o tempo de processamento. Nesse caso, as malhas devem ser refinadas e os pequenos vórtices devem ser calculados através de modelos adicionais. Optou-se neste trabalho pela primeira abordagem, devido aos resultados mais promissores obtidos nas simulações iniciais conduzidas sem a fase líquida e pela pequena diferença no tempo de processamento.

3.3.2. Solução das Equações de Navier-Stokes.

A solução das equações de Navier Stokes é obtida através do algoritmo PIMPLE, desenvolvido para o OPENFOAM⁷. O PIMPLE é uma fusão ou uma combinação de outros dois algoritmos: o PISO (*Pressure Implicit with Splitting of Operator*) e o SIMPLE (*Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations*). O PIMPLE utiliza os números de correção do PISO em cada passo no tempo durante a simulação, o que auxilia na correção de pressão e na manutenção da coerência das equações conservativas com o tempo. É um processo mais demorado que o SIMPLE, produzindo resultados confiáveis em regime transitório¹⁰. Por outro lado, o PIMPLE utiliza ainda o fator de relaxação do SIMPLE para a correção da pressão, o que auxilia a manter a compatibilidade das equações conservativas, produzindo resultados mais rápidos, com um comportamento suave e convergente até atingir o regime

permanente¹⁰. A adoção do fator de relaxação igual a um no programa reduz o algoritmo PIMPLE ao PISO, e a adoção do número de correções igual a um reduz o PIMPLE ao algoritmo SIMPLE.

3.3.3. Características do campo de simulação

A Fig. 2 apresenta as dimensões utilizadas da saída do bocal de atomização. Na parte central localizam-se as duas paredes do tubo injetor do líquido. O ar comprimido passa pelas duas câmaras situadas nas paredes laterais externas do tubo injetor, cuja seção mais estreita corresponde à garganta de passagem do ar.

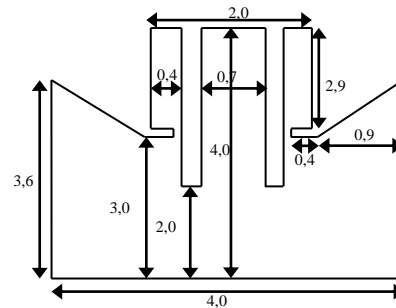


Fig. 2 – Dimensões do atomizador em mm

A Fig. 3 apresenta o padrão de escoamento do ar na saída do bocal de atomização, e a malha e a distribuição de células utilizadas nas simulações, é apresentada na Fig. 4.

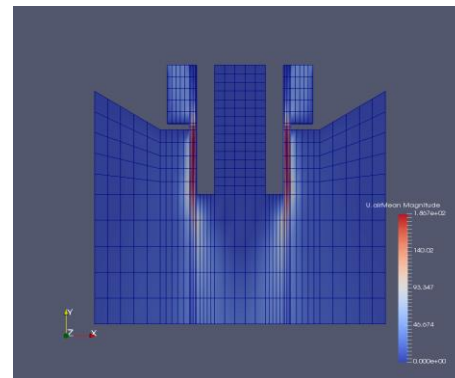
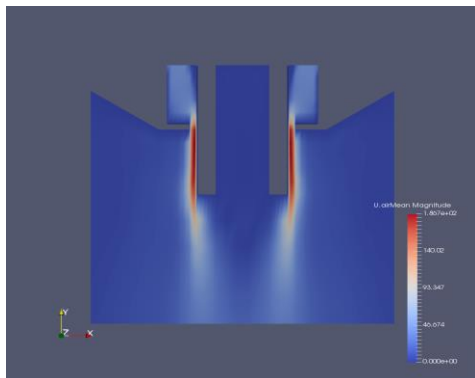


Fig. 3 – Comportamento do ar na simulação **Fig. 4** – Malha de simulação distribuição das células

A Fig. 5 apresenta na cor rosa as células utilizadas para a medida da pressão, e a Fig. 6 mostra também em rosa as células escolhidas para a determinação da velocidade do ar U_{ar} .

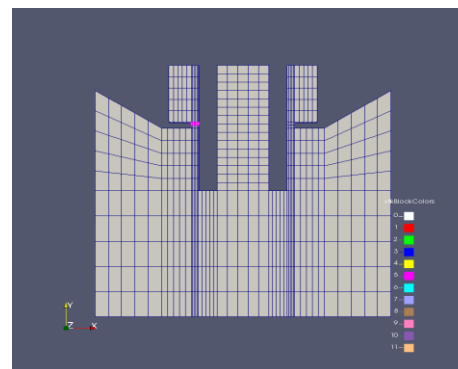
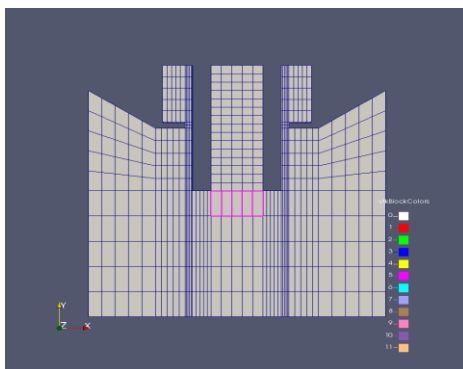


Fig.5 – Conjunto de células selecionadas para p

Fig. 6 – Conjunto de células selecionadas para U_{ar}

A Fig. 7 apresenta um exemplo dos valores médios de pressão p obtidas nas células selecionadas da Fig. 5 em função do tempo. O valor médio da pressão é obtido nas seções onde não ocorrem grandes oscilações ou perturbações. A Fig. 8 apresenta um exemplo dos valores médios da velocidade do ar U_{ar} obtidas nas células selecionadas da Fig. 6 em função do tempo.

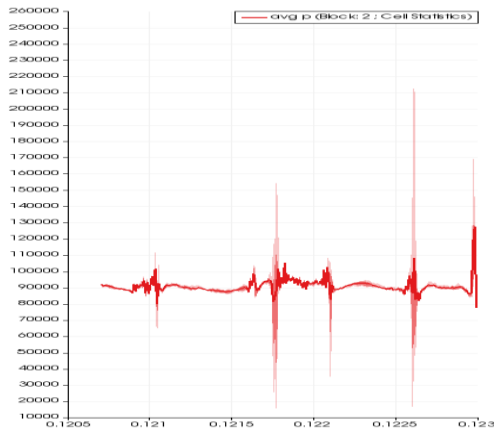


Fig. 7 – Comportamento de p com o tempo

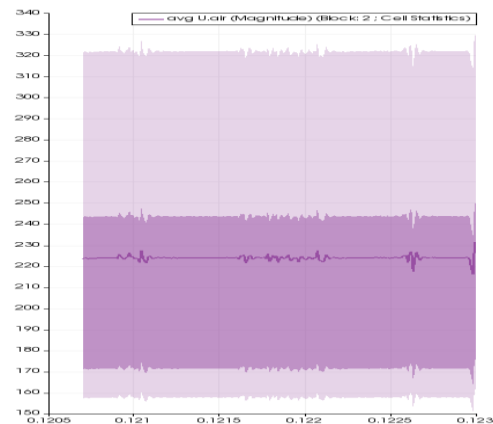


Fig. 8 – Comportamento de U_{ar} com o tempo

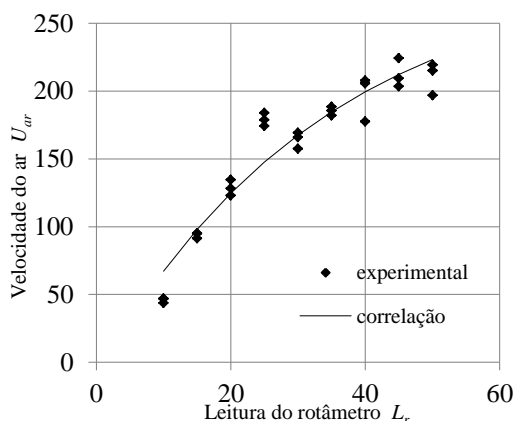
4. Resultados e discussões

4.1. Determinação de Ma e da velocidade do ar U_{ar} .

O número de Mach Ma foi obtido a partir da Eq. 1 para diferentes leituras de vazão de ar no rotâmetro L_r , conforme ilustra a Tab. 1. Nessa tabela estão apresentadas a pressão P_o e a temperatura T_o de estagnação média no atomizador, e o fluxo mássico médio do ar w/A obtido experimentalmente.

Tab. 1 – Dados experimentais obtidos na calibração do rotâmetro.

L_r	P_o Pa	T_o K	w/A $\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$	Ma	U_{ar} $(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$
10	113789	300,45	59,44	0,1313	45,7
15	113789	300,45	117,93	0,2692	93,7
20	127579	300,45	174,67	0,3692	128,6
25	127579	300,45	225,69	0,5134	178,8
30	168947	300,45	280,82	0,4711	164,0
35	186184	299,15	338,84	0,5333	185,3
40	251683	299,15	475,70	0,5667	196,9
45	293052	298,85	581,11	0,6110	212,2
50	361999	298,85	713,88	0,6056	210,3



O parâmetro $\gamma = 1,4$ para o ar e $R = 8,31 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, e a velocidade do ar na saída do bocal U_{ar} foi calculada através da Eq. 2 com $R' = 288,28 \text{ J/K}$ e $T_{ar} = 298,15 \text{ K}$. A Fig. 9 apresenta a correlação da velocidade do ar U_{ar} com a leitura de vazão do rotâmetro L_r .

Fig. 9 – Curva de correlação de U_{ar}

A equação de correlação obtida é expressa por:

$$\text{Eq. 10} \quad U_{ar} = 302,78(0,9671 - e^{-0,02941L_r})$$

4.2. Determinação do efeito de aspiração ΔP_{ea} .

O efeito de aspiração ΔP_{ea} foi obtido a partir da Eq. 6 para as diferentes leituras de vazão de ar do rotâmetro L_r . Os dados de fração volumétrica de água sem ar comprimido ϕ_{lo} e com ar comprimido ϕ_l foram obtidos experimentalmente e estão apresentados na Tab. 2. A densidade da água adotada foi $\rho_w = 1000 \text{ kg/m}^3$, a aceleração da gravidade $g = 9,81 \text{ m/s}^2$ e a cota do nível de água no reservatório $z = 0,340 \text{ m}$.

Tab. 2 – Dados experimentais de ΔP_{ea} .

L_r	Ma	$\phi_{lo} \times 10^7$ (m ³ /s)	$\phi_l \times 10^7$ (m ³ /s)	ΔP_{ea} (Pa)
10	0,13	5,7739	6,1208	-413±21
15	0,27	5,7739	5,3099	515±26
20	0,37	5,7739	5,7664	9±1
25	0,51	5,7739	7,2384	-1906±95
30	0,47	5,7739	8,5412	-3963±198
35	0,53	5,7739	9,4274	-5556±278
40	0,57	5,7739	9,8760	-6423±321
45	0,61	5,7739	10,9646	-8693±435
50	0,61	5,7739	11,3904	-9645±482

4.3. Simulação do efeito de aspiração por CFD

O efeito de aspiração ΔP_{ea} foi obtido a partir da diferença da leitura da pressão da Fig. 9 e da pressão atmosférica.

Tab. 3 – Dados simulados de ΔP_{ea} .

L_r	Ma	U_{ar} (m/s)	v_w (m/s)	ΔP_{ea} (Pa)
10	0,13	67,2	1,59	-442±22
15	0,27	98,0	1,38	-137±7
20	0,37	125,0	1,50	-357±18
25	0,51	148,0	1,88	-1122±56
30	0,47	168,0	2,22	-1744±87
35	0,53	185,0	2,45	-5588±279
40	0,57	199,0	2,57	-6916±346
45	0,61	212,0	2,85	-8087±404
50	0,61	223,0	2,96	-9608±480

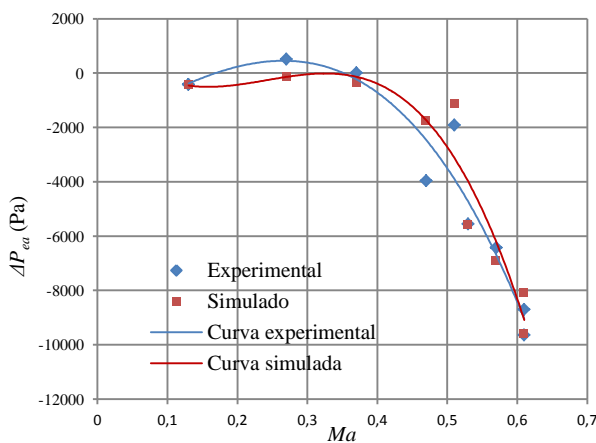


Fig. 10 – Dados de ΔP_{ea} experimentais e simulados

$$\text{Eq. 11} \quad \Delta P_{ea} = p_{lida} - p_{atm}$$

Sendo a pressão atmosférica $p_{atm} = 10^5$ Pa.

As velocidades do ar U_{ar} e da água v_w da Tab.3 foram utilizadas nas simulações. A Fig. 10 apresenta os resultados obtidos de ΔP_{ea} experimental e simulados.

Os resultados obtidos mostram ótima concordância entre os dados experimentais e os dados obtidos por simulação, demonstrando que o CFD é uma importante ferramenta para o estudo do efeito de aspiração nesse tipo de atomizador. Os dados experimentais e simulados foram ainda comparados, conforme apresentados na Fig. 11.

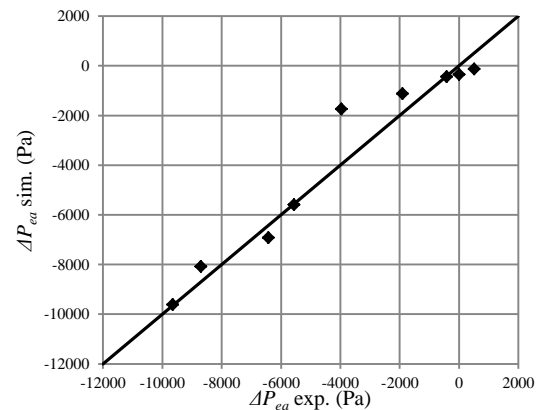


Fig. 11 – Comparação de ΔP_{ea} experimentais e simulados.

Os pontos se localizam em torno da reta de 45°, o que indica boa concordância dos resultados, além disso, é baixa a dispersão desses pontos em relação a essa reta. Isso demonstra a validade da simulação por CFD para esse tipo de sistema nesse regime de escoamento.

5. Conclusão

Os resultados obtidos apresentam ótima concordância entre os dados experimentais e simulados, comprovando que o CFD é uma importante ferramenta para o estudo do efeito de aspiração neste tipo de atomizador. Com os resultados obtidos neste estudo preliminar, é possível prosseguir e estender esses estudos para bocais divergentes com escoamentos de gás em regime sônico e supersônico. Essas condições introduzem outras complicações como a ação das ondas de choque nesse efeito e a dificuldade no levantamento de dados experimentais para validação dos resultados.

6. Divulgação dos Resultados

Os resultados deste trabalho serão divulgados através da participação em palestras e congressos, ou através da submissão na forma de artigos científicos a revistas nacionais ou internacionais.

Referências Bibliográficas

[1] Yule, A. J., Dunkley J.J., “Atomization of Melts: For Powder Production and Spray Deposition”, Oxford University Press, London, (1994).



- [2] Parikh, D. M. “Handbook of Pharmaceutical Granulation Technology” CRC Press, 3^a edição, Boca Raton, 2010.
- [3] Parikh, D. M. “How to Optimize Fluid Bed Processing Technology” Academic Press, Elsevier, San Diego, 2017.
- [4] Nasr G. G., Yule A. J., Bendig L.B., “Industrial Sprays and Atomization: Design, Analysis and Applications”, Springer, London, (2002).
- [5] Ashgriz N., “Handbook of Atomization and Sprays”, Springer Science, New York, (2011).
- [6] Shapiro A. H. “The Dynamics and Thermodynamics of Compressible Fluid Flow”, The Ronald Press Co, New York, (1953).
- [7] Greenshields, C. J., “*The Open Source CFD Toolbox User Guide*“, ESI group, Paris, (2015).
- [8] Date, A. W., “*Introduction to Computational Fluid Dynamics*”, Cambridge University Press, London, (2005).
- [9] Chung, T. J.,” *Computational Fluid Dynamics*”, Cambridge University Press, London, (2002).
- [10] ANSYS, Inc., “*ANSYS Fluent Theory Guide*”, Canonsburg: ANSYS, (2013).