

Estudo numérico da dispersão de aerossóis produzidos por ultrasons



Centro de Nanotecnologia e Materiais Técnicos, Funcionais e Inteligentes

João Carlos Teixeira Magalhães Freitas

Dissertação do MIEM

Orientador no CENTI: Doutor Tiago Sotto Mayor

Orientador na FEUP: Professor Doutor Fernando Tavares Pinho



FEUP

Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto

Mestrado Integrado em Engenharia Mecânica

Março de 2011

A ti, Diana....

“A maior recompensa do nosso
trabalho não é o que nos pagam
por ele, mas aquilo em que ele
nos transforma”
John Ruskin

Agradecimentos

Um trabalho desta natureza só se torna possível através da intervenção e colaboração de um conjunto de pessoas. Neste sentido gostaria de agradecer:

Ao Doutor Tiago Sotto Mayor pelo tempo disponibilizado na orientação deste trabalho, pelo constante apoio, motivação e transmissão de saberes e, pela exigência, entendida como condição de investigação de qualidade;

Ao Professor Doutor Fernando Tavares Pinho, pela disponibilidade e sugestões valiosas ao longo de todo o processo;

A todas as pessoas que trabalham no CeNTI, pela boa receptividade e disponibilidade demonstrada em todos os momentos do meu estágio.

Aos meus Pais, por todo o apoio prestado.

A ti, Diana por todo a compreensão e apoio que deste ao longo deste tempo

Resumo

O Centro de Nanotecnologia e Materiais Técnicos, Funcionais e Inteligentes (CeNTI) foi criado no sentido de investigar e desenvolver materiais, que mais tarde poderão ser lançados para diversas aplicações (Saúde/bem-estar, desporto, protecção, automóvel, aeronáutica, dispositivos para energias renováveis, moda, etc.). O CeNTI adquiriu recentemente um atomizador de partículas por ultra-sons, com a finalidade de fazer revestimentos de superfície. Este estudo surge como uma tentativa de simular o comportamento das gotículas, resultantes do contacto de compostos líquidos com um atomizador ultra-sónico. Foram estudadas geometrias com 2D e 3D, as quais foram realizadas através do programa Gambit depois inseridas no programa Fluent, para simulação da dispersão espacial das gotículas, considerando diferentes fracções volúmicas de líquido e diferentes velocidades de escoamento. Para esse efeito, utilizou-se o modelo Euleriano-Euleriano, presente no Fluent.

Os resultados permitiram concluir que nas simulações efectuadas em 2D, as gotículas afastam-se do atomizador em forma de jacto. À medida que esse jacto flui pela conduta, ocorre uma diminuição gradual da sua concentração. Com o aumento da fracção volúmica de gotículas, o jacto desloca-se para a direita da conduta.

A velocidade das gotículas aumenta ao longo da conduta devido ao efeito da gravidade, o que causa um aumento da velocidade do ar (na vizinhança da fase dispersa). Concluiu-se que a velocidade terminal das gotículas é praticamente independente da velocidade do ar em escoamento. Para o diâmetro das gotículas em estudo, a força de arrasto não tem um papel relevante. No entanto, para gotículas de inferiores dimensões, a força de arrasto influencia a sua trajectória.

Com a extensão da porção vertical de conduta, verifica-se uma alteração no escoamento das gotículas. O escoamento deixa de ocorrer em forma de jacto e passa a fluir ao longo da parede contígua à entrada das gotículas.

Nas simulações em 3D, observa-se que as gotículas formam o jacto que se visualiza nas simulações em 2D. No final da conduta obteve-se a mesma velocidade das gotículas (2,1m/s), em 2D e em 3D.

Numerical study of aerosols dispersion produced by ultrasonic atomizer

Abstract

The Centre for nanotechnology and Smart Materials (CeNTI) was created to investigate and develop materials that could later be launched for several applications (well-being & health, sports, protection, automotive, aeronautic, renewable energy devices, fashion, etc.). In this context, the CeNTI has recently acquired one particle's atomizer by ultrasound, in order to make surface coatings. This study is an attempt to simulate the behavior of the droplets, resulting from contact with an ultrasonic atomizer. It was then studied geometry performed on the Gambit and then inserted into the Fluent program, to simulate the spatial dispersion of droplets, considering different volume fractions of liquid and different flow velocities. To this end, we used the Eulerian-Eulerian model, present in Fluent.

The results showed that in 2D simulations, the droplets come out of the conduct in a form of a jet. As this jet flows through to the conduct, there is a gradual decrease of its concentration. With the increasing of the volume fraction of droplets, the jet moves to the right of the conduct.

The speed of the droplets increases along the conduct because of the effect of gravity, which causes an increase of the air speed (in the neighborhood of the dispersed phase). The terminal velocity of the droplets is almost independent of the air velocity flow. For the diameter of the droplets in study the drag force does not have a significant role. However for droplets with lower dimensions, the drag force influences its trajectory.

With the extension of the length of the duct, there is a change in the flow of the droplets. The flow fails to occur in the form of jets and will flow on the wall adjacent to the entrance of the droplets.

In 3D simulations, we observe that the droplets form the same jet that is displayed in 2D simulations. At the end of the conduct we obtained the same velocity of the droplets (2,1 m/s) compared to 2D geometry.

Key-words (subject): CFD, aerosol dispersion, Fluent, Eulerian-Eulerian model

Estudo numérico da dispersão de aerossóis produzidos por ultra-sons

Índice

Índice de Figuras	xiii
Índice de Tabelas.....	xix
Notação e Glossário	xxi
1. Introdução	1
1.1. Apresentação do CeNTI.....	1
1.2. O Projecto	1
1.3. Organização e Temas Abordados	2
2. Descrição do problema	3
2.1. Descrição do atomizador	3
2.2. Estado da Arte.....	4
2.2.1. Atomização ultra-sónica.....	4
2.2.1.1. Previsão da distribuição do tamanho das gotículas.....	6
2.2.2. Coalescência.....	9
2.2.3. Vaporização.....	9
2.2.4. Força de arrasto	9
3. Apresentação dos trabalhos de projecto, experimentais ou de modelação numérica realizados	11
3.1. Modelos de representação de dispersão de aerossóis	11
3.2. O modelo Euleriano-Euleriano no Fluent.....	14
3.3. Formulação Numérica do Modelo	14
3.4. Configuração da Simulação com base no tutorial	18
3.5. Testes Paramétricos	21
3.6. Estudo das geometrias	27
3.7. Construção das grelhas das geometrias	30
3.8. Configuração das simulações para as geometrias em estudo	31
4. Apresentação e Discussão de Resultados	37
4.1. Geometria 2D.....	37

4.2. Geometria 3D.....	47
5. Conclusões e Perspectivas de Trabalhos Futuros	51
6. Referências e Bibliografia	53
Anexo A.....	55
Anexo A.1. Diâmetro médio e suas aplicações	55
Anexo A.2. Diâmetros representativos	55
Anexo B.....	57
Anexo B.1. Teste de grelha à geometria do Tutorial	57
Anexo C.....	61
Anexo C.1. Teste de grelha à geometria I.....	61
Anexo D.....	65
Anexo D.1. Teste de grelha à geometria III.....	65
Anexo E	69
Anexo F.....	71
Anexo F.1. Teste de grelha à geometria XI	71

Índice de Figuras

Figura 1 – Imagem ilustrativa do atomizador de partículas por ultra-sons	3
Figura 2 - Esquema do atomizador (MPInterconsulting)	3
Figura 3 - Atomizador ultra-sónico (M. Dobre & L. Bolle, 2002).....	4
Figura 4 – a) Padrão quadrático regular durante a atomização ultra-sónica (Sindayihebura and Bolle 1995); b) Mecanismo de libertação de gotículas na atomização ultra-sónica (Sindayihebura and Bolle 1995)	5
Figura 5 - a) Distribuição do tamanho das gotículas num atomizador por ultra sons (Sindayihebura, Dobre et al. 1997); b) Distribuição do tamanho das gotículas num atomizador clássico.....	6
Figura 6 - Influência do caudal no diâmetro médio das gotículas (Sindayihebura, Dobre et al. 1997)	7
Figura 7 - a) Influência da viscosidade no diâmetro médio das gotículas (Sindayihebura, Dobre et al. 1997); b) Influência da tensão superficial no diâmetro médio da gotícula (Sindayihebura, Dobre et al. 1997).....	8
Figura 8 - Coeficiente de arrasto em função do número de Reynolds para esferas.....	10
Figura 9 – Tubo em forma de T, descrito no tutorial do Fluent	18
Figura 10 - Representação das linha aa' e bb' , utilizadas nos testes paramétricos para a recolha de dados relativos à fracção volúmica, velocidade das gotículas e do ar	21
Figura 11 – a) Perfil da fracção volúmica das gotículas ao longo da linha aa' , com diversos valores de fracção volúmica de gotículas à entrada (2%, 10% e 20%); b) Perfil da fracção volúmica das gotículas ao longo da linha bb' , com diversos valores de fracção volúmica de gotículas (2%, 10% e 20%); c) Perfil da fracção volúmica das gotículas ao longo da linha aa' , com diversos valores de velocidade de gotículas e do ar (3m/s, 4m/s e 5m/s); d) Perfil da fracção volúmica das gotículas ao longo da linha bb' , com diversos valores de velocidade de gotículas e do ar (3m/s, 4m/s e 5m/s)	22
Figura 12 – Fracção volúmica de gotículas ao longo do domínio do escoamento para diversos valores de velocidade do ar e das gotículas: a) $U_{ar} = 3$ m/s, $U_{got} = 3,07$ m/s, fracção volúmica de gotículas de 2%; b) $U_{ar} = 4$ m/s, $U_{got} = 4,07$ m/s, fracção volúmica de gotículas de 2%; c) $U_{ar} = 5$ m/s, $U_{got} = 5,07$ m/s, fracção volúmica de gotículas de 2%;.....	22
Figura 13 – Zoom da figura 11c, em que se observa o efeito de estratificação devido ao efeito da gravidade.....	23
Figura 14 - Fracção volúmica de gotículas ao longo do domínio do escoamento para diversos valores de fracção volúmica de gotículas: a) 10%; b) 20%;	23

Figura 15 – a) Perfil da pressão estática ao longo da linha aa' , com diversos valores de fracção volúmica de gotículas (2%, 10% e 20%); b) Perfil da pressão estática ao longo da linha bb' , com diversos valores de fracção volúmica de gotículas (2%, 10% e 20%); c) Perfil da pressão estática ao longo da linha aa' , com diversos valores de velocidade de gotículas e do ar (3m/s, 4m/s e 5m/s); d) Perfil da pressão estática ao longo da linha bb' , com diversos valores de velocidade de gotículas e do ar (3m/s, 4m/s e 5m/s)..... 24

Figura 16 – Valores da pressão estática ao longo do domínio do escoamento para diversos valores de velocidade do ar e das gotículas: a) $U_{ar} = 3$ m/s, $U_{got} = 3,07$ m/s, fracção volúmica de gotículas de 2%; b) $U_{ar} = 4$ m/s, $U_{got} = 4,07$ m/s, fracção volúmica de gotículas de 2%; c) $U_{ar} = 5$ m/s, $U_{got} = 5,07$ m/s, fracção volúmica de gotículas de 2%;..... 25

Figura 17 – Valores da pressão estática ao longo do domínio do escoamento para diversos valores de fracção volúmica de gotículas: a) 10%; b) 20%;..... 25

Figura 18 - Valores das velocidades das gotículas ao longo do domínio do escoamento para diversos valores de velocidade do ar e das gotículas: a) $U_{ar} = 3$ m/s, $U_{got} = 3,07$ m/s, fracção volúmica de gotículas de 2%; b) $U_{ar} = 4$ m/s, $U_{got} = 4,07$ m/s, fracção volúmica de gotículas de 2%; c) $U_{ar} = 5$ m/s, $U_{got} = 5,07$ m/s, fracção volúmica de gotículas de 2%;..... 26

Figura 19 - Valores das velocidades das gotículas ao longo do domínio do escoamento para diversos valores de fracção volúmica de gotículas: a) 10%; b) 20%; 26

Figura 20 – Geometria I..... 27

Figura 21 – a) Geometria II; b) Geometria III 27

Figura 22 - a) Geometria IV; b) Geometria V 28

Figura 23 – a) Geometria VI; b) Geometria VII; c) Geometria VIII; d) Geometria IX 28

Figura 24 – a) Geometria X, escala em mm; b) Zoom da entrada 2..... 29

Figura 25 – Geometria XI..... 29

Figura 26 - Grelhas criadas no Gambit a) Geometria I b) Geometria II e III..... 30

Figura 27 – Grelha da Geometria IV e V..... 30

Figura 28 - Grelha da geometria 3D 31

Figura 29 – a) Valor dos Resíduos da Geometria 1; b) Erro no balanço de massa entre entradas e saída 37

Figura 30 - a) Velocidade das gotículas ao longo do domínio do escoamento, para diversos valores de fracções volúmicas na entrada 2; a) 2%; b) 25%; c) 50%..... 38

Figura 31 -a) Fracção volúmica de gotículas ao longo do domínio para diversos valores de fracção de gotículas na entrada 2: a) 2%, b) 25% e c) 50% 39

Figura 32 - Velocidade do ar ao longo do domínio do escoamento, para diversos valores de fracções volúmicas na entrada 2; a) 2%; b) 25%; c) 50%	40
Figura 33 - Fracção volúmica de gotículas, para diferentes velocidades de ar (entrada 1); a) $U_{ar} = 0,2$ m/s; b) $U_{ar} = 0,5$ m/s; c) $U_{ar} = 0,75$ m/s.....	41
Figura 34 - a) Velocidade das gotículas para diferentes velocidades de ar na entrada 1; a) $U_{ar} = 0,2$ m/s b) $U_{ar} = 0,5$ m/s; c) $U_{ar} = 0,75$ m/s.....	41
Figura 35 - Velocidade do ar ao longo do domínio do escoamento; a) $U_{ar} = 0,2$ m/s; b) $U_{ar} = 0,5$ m/s; c) $U_{ar} = 0,75$ m/s	42
Figura 36 – a) Resultados obtidos na geometria III, para uma fracção volúmica de gotículas com 2% de gotículas na entrada 2; b) Resultados obtidos na geometria IV, para uma fracção volúmica de gotículas com 2% de gotículas na entrada.....	43
Figura 37 - a) Resultados obtidos na geometria III, para uma fracção volúmica de gotículas com 25% de gotículas na entrada 2; b) Resultados obtidos na geometria IV, para uma fracção volúmica de gotículas com 25% de gotículas na entrada 2.....	43
Figura 38 - a) Resultados obtidos na geometria III, para uma fracção volúmica de gotículas com 50% de gotículas na entrada 2; b) Resultados obtidos na geometria IV, para uma fracção volúmica de gotículas com 50% de gotículas na entrada 2.....	43
Figura 39 - a) Velocidade das gotículas ao longo do domínio do escoamento, para diversos valores de fracções volúmicas na entrada 2; a) 2%; b) 25%; c) 50%.....	44
Figura 40 – Zoom da zona do escoamento (Figura 40), em que se verifica a recirculação.	44
Figura 41 - a) Velocidade das gotículas com diâmetro de $5,9 \mu\text{m}$; b) Velocidade das gotículas com diâmetro de $59 \mu\text{m}$	46
Figura 42 – Fracção volúmica de gotículas para geometrias com diferentes comprimentos de conduta vertical a) geometria III; b) geometria VI; c) geometria VII; d) geometria VIII; e) geometria IX	46
Figura 43 - Valores da fracção volúmica de gotículas ao longo do domínio, apresentando na entrada 1 $U_{ar} = 0,5\text{m/s}$ e na entrada 2 $U_{got} = 0,5\text{m/s}$, $U_{ar} = 0,01\text{m/s}$ e com uma fracção volúmica de gotículas de 50% a) planos XZ; b) planos XY (a figuras não se encontram à escala 1:1)	47
Figura 44 - Valores da velocidade de gotículas ao longo do domínio, apresentando na entrada 1 $U_{ar} = 0,5\text{m/s}$ e na entrada 2 $U_{got} = 0,5\text{m/s}$, $U_{ar} = 0,01\text{m/s}$ e com uma fracção volúmica de gotículas de 50% a) planos XZ; b) planos XY (a figuras não se encontram à escala 1:1)	47

Figura 45 – Valores da fracção volúmica de gotículas ao longo do domínio, apresentando na entrada 1 $U_{ar}= 0,5m/s$ e na entrada 2 $U_{got}= 0,5m/s$, $U_{ar}=0,01m/s$ e com uma fracção volúmica de gotículas de 50% a) planos XZ; b) planos XY (a figuras não se encontram à escala 1:1)	48
Figura 46 – Efeito da introdução da conduta de alimentação do líquido a atomizar, sobre o jacto de gotículas	49
Figura 47 – Valores da velocidade de gotículas ao longo do domínio, apresentando na entrada 1 $U_{ar}= 0,5m/s$ e na entrada 2 $U_{got}= 0,5m/s$, $U_{ar}=0,01m/s$ e com uma fracção volúmica de gotículas de 50% a) planos XZ; b) planos XY (a figuras não se encontram à escala 1:1)	49
Figura 48 - Localização de vários tipos de diâmetros.	56
Figura 49 - a) Malha original do Tutorial; b) 5ª Malha do Estudo	57
Figura 50 - Zoom da 5ª malha, na junção dos dois tubos	58
Figura 51 – Parâmetros ao longo da linha aa' ; a) Velocidade do ar, b) Velocidade das gotículas, c) Pressão estática, d) Fracção Volúmica de gotículas no escoamento.....	58
Figura 52- Parâmetros ao longo da linha bb' ; a) Velocidade do ar, b) Velocidade das gotículas, c) Pressão estática; d) Fracção Volúmica de gotículas no escoamento.....	59
Figura 53 - Geometria I.	61
Figura 54 – a) Grelha I; b) Grelha IV.	62
Figura 55 - a) Pressão Total na linha aa' ; b) Pressão Estática no Plano aa' ; c) Velocidade do ar no Plano aa'	62
Figura 56 - a) Pressão Total no Plano bb' ; b) Pressão Estática no Plano bb' ; c) Velocidade do ar no Plano bb'	63
Figura 57 – a) Campos de velocidades na grelha III retirado do Fluent ; b) Campos de velocidades na grelha IV retirado do Fluent.....	63
Figura 58 - Geometria III.....	65
Figura 59 - a) Pressão Estática no Plano aa' ; b) Pressão Total no Plano aa' ; c) Velocidade do ar no Plano aa' , d) Velocidade das gotículas no Plano aa' , e) Fracção volúmica de gotículas no Plano aa' ,	66
Figura 60 -; a) Pressão Estática no Plano bb' ; b) Pressão Total no Plano bb' ; c) Velocidade do ar no Plano bb' , d) Velocidade das gotículas no Plano bb' , e) Fracção volúmica de gotículas no Plano bb' ,	66
Figura 61 - a) Valores da fracção volúmica de gotículas ao longo do domínio, apresentando na entrada 1 $U_{ar}= 0,5m/s$ e na entrada 2 $U_{got}= 0,5m/s$, $U_{ar}=0,01m/s$ e com uma fracção	

Estudo numérico da dispersão de aerossóis produzidos por ultra-sons volúmica de gotículas de 50%; b) Valores da velocidade das gotículas ao longo do domínio, apresentando na entrada 1 $U_{ar}= 0,5m/s$ e na entrada 2 $U_{got}= 0,5m/s$, $U_{ar}=0,01m/s$ e com uma fracção volúmica de gotículas de 50%Velocidade das gotículas; c) Valores da velocidade do ar ao longo do domínio, apresentando na entrada 1 $U_{ar}= 0,5m/s$ e na entrada 2 $U_{got}= 0,5m/s$, $U_{ar}=0,01m/s$ e com uma fracção volúmica de gotículas de 50%.....	69
Figura 62 – a) Grelha IV concebida no Gambit; b) Zoom da zona de entrada 2.....	71
Figura 63 – a) Velocidade das gotículas na linha de intersecção do plano $z=0,005$ com o plano $y=-0,035$; b) Velocidade das gotículas na linha de intersecção do plano $z=0,005$ com o plano $y=-0,15$; Velocidade das gotículas na linha de intersecção do plano $z=0,005$ com o plano $y=-0,23$	72
Figura 64 - a) Fracção volúmica das gotículas na linha de intersecção do plano $z=0,005$ com o plano $y=-0,035$; b) Fracção volúmica das gotículas na linha de intersecção do plano $z=0,005$ com o plano $y=-0,15$; Fracção volúmica das gotículas na linha de intersecção do plano $z=0,005$ com o plano $y=-0,23$	72

Índice de Tabelas

Tabela 1 – Exemplos de custos computacionais com os modelos Euleriano-Euleriano e Euleriano-Lagrangiano	13
Tabela 2 – Opções do Solver	19
Tabela 3 – Opções no <i>viscous model</i>	19
Tabela 4 - Factores de Relaxamento	32
Tabela 5 - Condições de fronteira comuns às geometrias em 2D	33
Tabela 6 - Condições de Fronteira para cada geometria em 2D	34
Tabela 7 - Condições de Fronteira para a geometria X	35
Tabela 8 - Diâmetro médio de gotículas e suas aplicações	55
Tabela 9 – Tipo de Grelha	57
Tabela 10 – Tipo de Grelha para a geometria I.	61
Tabela 11 – Tipo de grelha para a geometria II	65
Tabela 12 - Diferentes grelhas, para a geometria 3D	71

Notação e Glossário

A – Área	m^2
d - Diâmetro	m
D_{30} - Diâmetro volumétrico médio	m
D_{32} - Diâmetro médio de Sauter	m
f - Frequência de excitação	Hz
f_c - Frequência de oscilação das ondas superficiais	Hz
g – Aceleração da gravidade	$m\,s^{-2}$
\bar{I} - Tensor de corte unitário,	Pa
k - Energia cinética de turbulência	$J\,kg^{-1}$
$K_{ga}(= K_{ag})$ - Coeficiente de troca de quantidade de movimento entre as fases	$kg\,m^{-2}\,s^{-2}$
p – Pressão	Pa
Q - Caudal	$m^3\,s^{-1}$
Re - Número de Reynolds	
R_{ga} – Força Interfásica	N
t – Tempo	s
U - Velocidade	$m\,s^{-1}$
U_{0y} – Velocidade inicial no eixo YY	$m\,s^{-1}$
U_y – Velocidade no eixo YY	$m\,s^{-1}$
V - Volume	m^3
y – Posição no eixo YY	m
y_0 – Posição Inicial no eixo YY	m

Letras Gregas

α - Fracções volúmicas	
ε - Taxa de dissipação da energia cinética	$J\,kg^{-1}\,s^{-1}$
λ - Comprimento de onda	m
μ – Viscosidade	$kg\,m^{-1}\,s^{-1}$
ρ - Massa volúmica	$kg\,m^{-3}$
σ - Tensão superficial	Pa
$\bar{\tau}$ - Tensor de reynolds	$m^2\,s^{-2}$

τ_p - *Particulate relaxation time*

Índices

ar – Ar

cri – Crítico

f - Fluido

got - Gotículas

m – Mistura

Lista de Siglas

2D - Duas dimensões

3D – Três dimensões

CeNTI - Centro de Nanotecnologia e Materiais Técnicos, Funcionais e Inteligentes

CFD – Simulação dinâmica de Fluidos

DC – Corrente continua

DNS – Simulação Numérica Directa

LES – Simulações de grande escala

ME - Método da entropia máxima

RAM – Memória de acesso aleatório

RANS - Equações de Navier-Stokes com média de Reynolds

SMD - Diâmetro médio de Sauter

VOF – Volume de Fluido

1. Introdução

1.1. Apresentação do CeNTI

O Centro de Nanotecnologia e Materiais Técnicos, Funcionais e Inteligentes (CeNTI), foi criado no sentido de investigar e desenvolver materiais, que mais tarde poderão ser lançados para diversas aplicações (Saúde/bem-estar, desporto, protecção, automóvel, aeronáutica, dispositivos para energias renováveis, moda, etc.). O objectivo do centro é desenvolver materiais inteligentes, fibras avançadas, multi-nanorevestimentos e estudar o desempenho real dos produtos, disponibilizando instalações e conhecimentos, ao nível das engenharias, química, têxtil, polímeros, materiais, biotecnologia e electrónica e com especialistas nos domínios da Química, Física e Biologia. Também desenvolve técnicas de simulação de uso, que permitem avaliar o desempenho de determinados produtos, de forma a assegurar a sua qualidade e segurança, apoiando as empresas e parceiros para que os seus produtos cheguem rapidamente ao mercado.

1.2. O Projecto

O CeNTI adquiriu recentemente um atomizador de partículas por ultra-sons, com a finalidade de fazer revestimentos de superfície. Este estudo surge como uma tentativa de simular o comportamento das gotículas resultantes do contacto de líquidos com um atomizador ultra-sónico. Nesse sentido, foram concebidas diferentes geometrias através do programa Gambit e depois inseridas no programa Fluent, sendo analisada, para diferentes fracções volúmicas de gotículas e diferentes velocidades, a dispersão espacial das gotículas. Numa primeira fase, realizou-se uma pesquisa no Fluent, com o objectivo de encontrar um modelo que descrevesse a transição de um filme de líquido para gotículas. No entanto, o custo computacional de um estudo desse género não era compatível com as restrições temporais existentes (quatro meses para realização deste estudo). Por essa razão, optou-se por efectuar o estudo do escoamento após a atomização do líquido. Para esse efeito, utilizou-se o modelo Euleriano-Euleriano, presente no Fluent para simular a dispersão dos aerossóis através de várias geometrias. Para compreender o comportamento das gotículas nessas geometrias, foram modificadas a fracção volúmica das gotículas e a velocidade do ar, à entradas da geometrias.

1.3. Organização e Temas Abordados

O presente estudo encontra-se dividido em cinco capítulos.

No capítulo dois é apresentado o problema tratado, incluindo referência ao estado-da-arte e/ou referência a soluções conhecidas, descrevendo entre vários assuntos, o processo de atomização por ultra-sons, os fenómenos que ocorrem durante a dispersão espacial das gotículas,

A modelação numérica é apresentada no capítulo três, em que se descreve o modelo utilizado (Modelo Euleriano-Euleriano) nas simulações e as geometrias utilizadas.

O capítulo quatro refere-se à apresentação e discussão dos resultados encontrados, através das simulações efectuadas.

As conclusões e perspectivas de trabalho futuro, são apresentadas no capítulo cinco.

Apesar de se ter usado a vírgula como separador decimal, alguns gráficos importados directamente das plataformas de CFD, contêm dados com ponto como separador decimal, uma vez que as plataformas usadas não permitem alterações a esse nível.

2. Descrição do problema

O CeNTI adquiriu recentemente um atomizador de partículas por ultra-sons (Figura 1), com a finalidade de fazer revestimentos de superfície. Para isso, é necessário construir uma geometria envolvente, de forma a obter uma deposição homogénea de partículas na superfície a revestir. Assim, este projecto pretende estudar a dispersão espacial da “nuvem de gotículas” que se forma após o contacto do líquido, com o atomizador. Para esse efeito, realizou-se o estudo numérico da dispersão das gotículas, através de várias geometrias.



Figura 1 – Imagem ilustrativa do atomizador de partículas por ultra-sons

2.1. Descrição do atomizador

O atomizador é alimentado através de uma fonte de alimentação DC (corrente contínua - *direct current*), a uma frequência de 20 kHz. A corrente eléctrica, ao circular através de transdutores piezoeléctricos, produz um campo eléctrico que origina uma alteração nas dimensões dos transdutores, produzindo assim vibrações ultra-sónicas. Essa oscilação provoca a ruptura do líquido, originando uma “nuvem” de gotículas à volta da barra do atomizador. Por uma questão de simplificação, só a barra onde incide o líquido a atomizar foi considerada nas simulações. A barra consiste num tubo circular com 1m de comprimento, 0,06m de diâmetro exterior e 0,056m de diâmetro interior.

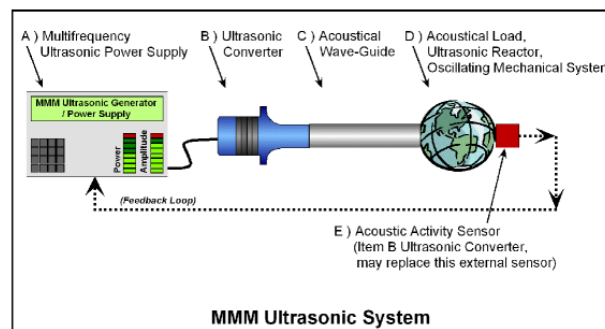


Figura 2 - Esquema do atomizador (MPInterconsulting)

Para compreender os factores que influenciam a atomização, foi aprofundado o conhecimento nesta área através da análise do estado da arte.

2.2. Estado da Arte

A dispersão de um aerossol, envolve uma série de fenómenos físicos complexos. Pode-se identificar quatro fases na dispersão de um aerossol, onde fenómenos físicos, regem a sua dispersão. A primeira fase consiste na desintegração de uma película de líquido em gotículas. Já na segunda fase é visível uma região, com uma densidade elevada de gotículas, onde as interacções entre as gotículas são predominantes (coalescência, por exemplo). De seguida (terceira fase), ocorre uma diminuição da concentração de gotículas, em que as forças aerodinâmicas influenciam a dispersão das gotículas. Na última fase, a interacção das gotículas com a superfície a atomizar, origina a deposição/reflexão das gotículas ou a atomização secundária, que resulta na ruptura de uma gotícula em várias gotículas, de menores dimensões (Sommerfeld e Qiu 1998). O nosso estudo, apenas se baseará na terceira fase da dispersão de um aerossol, ou seja, após a atomização ter ocorrido, apesar da relevância das restantes fases.

2.2.1. Atomização ultra-sónica

Quando um líquido é sujeito a um campo ultra sónico suficientemente intenso, tem lugar a ejeção de gotículas da sua interface para o ambiente que o rodeia, formando-se um denso nevoeiro, processo denominado de atomização por ultra-sons (Rajan e Pandit 2001). A produção de aerossóis através de uma película de filme a vibrar é usada na atomização por ultra-sons. A formação de gotículas originadas através de pratos mecânicos postos a vibrar a baixas frequências é conhecida há algum tempo, sendo este fenómeno descrito primeiramente por Wood e Loomis (1927). Segundo Yule e Al – Suleimani (2000), a partir de 1927, efectuaram-se estudos a baixas (20-100kHz) e altas (0.1-5 MHz) frequências, no entanto, já se verificam frequências na ordem dos 10-500MHz (Qi, Yeo et al. 2008).

Na superfície activa de ressonância (ponta do amplificador) é formada uma película fina de líquido. Quando a frequência de vibração se aproxima da frequência de ressonância, forma-se uma onda padrão de forma quadrática sobre a superfície líquida. Rayleigh (1883) reconheceu que a instabilidade em que as ondas de superfície são formadas é do tipo paramétrico (instabilidade de Faraday). Estas ondas foram alvo de estudo (Lyngshansen, Alstr et al. 1997), utilizando-se vibrações de baixa frequência. Os atomizadores que utilizam transdutores magnetostrictivos não são muito utilizados porque a sua eficiência decresce com o aumento da frequência, tendo uma frequência limite de 125 kHz. A banda de operação óptima do atomizador com transdutores magnetostrictivos é entre os 20 e os 40 kHz. Já os transdutores piezoeléctricos, que são constituídos por materiais cerâmicos sintéticos, operam com grande eficiência num intervalo de frequências entre 30 kHz e 5MHz (Rajan e Pandit 2001).

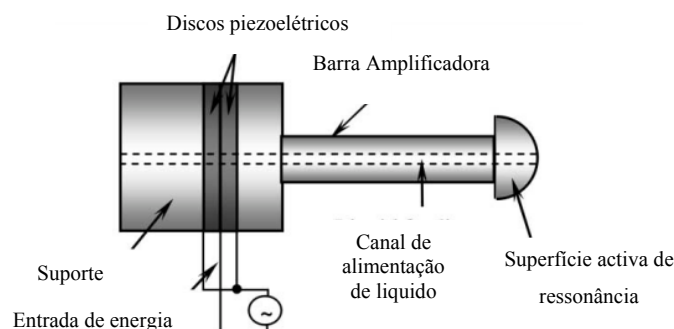


Figura 3 - Atomizador ultra-sónico (M. Dobre & L. Bolle, 2002)

Segundo Dobre e Bolle (2002), os atomizadores ultra-sônicos com orientação originam um efeito semelhante a um spray (diâmetro volumétrico médio $D_{30} = 20 \mu\text{m}$; ver em anexo 1), apresentando um diâmetro de gotículas homogêneo e velocidade muito reduzida (velocidade típica de uma gotícula: 1m/s). Para além do baixo consumo energético, são muitos úteis em sistemas de ar condicionado e aplicação de medicamentos ou perfumes na forma de aerossóis. Para obtermos uma previsão das características dos aerossóis é necessário ter um conhecimento prévio de certas características, tais como frequência de ressonância do atomizador e as propriedades dos líquidos.

Na vibração ultra-sónica, pode-se observar ondas na superfície do líquido antes de se atingir a frequência de ressonância, com um padrão quadrático aproximadamente regular, Figura 4 (Dobre e Bolle 1998). Quando a frequência de ressonância é alcançada, a amplitude cresce até à libertação de gotículas (Figura 4b).

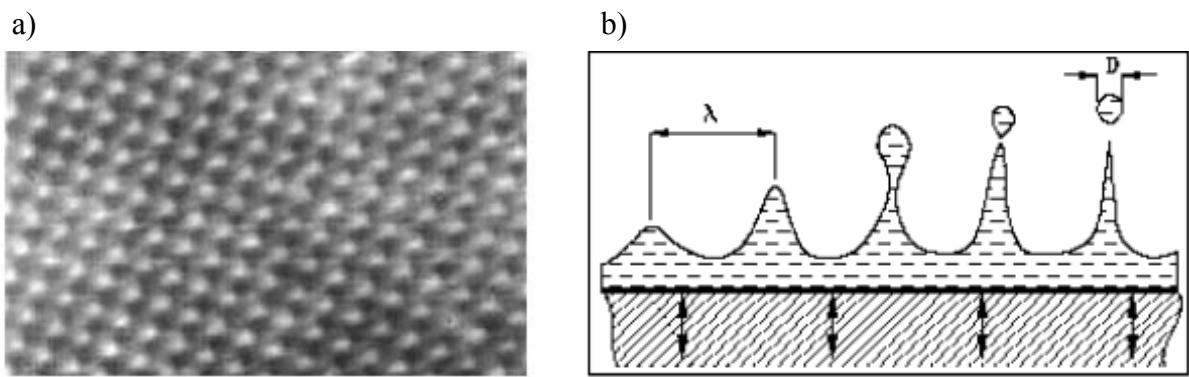


Figura 4 – a) Padrão quadrático regular durante a atomização ultra-sónica (Sindayihebura and Bolle 1995); b) Mecanismo de libertação de gotículas na atomização ultra-sónica (Sindayihebura and Bolle 1995)

A desintegração de líquidos em gotículas por ultra-sons resulta da instabilidade das ondas de superfície que são criadas à superfície de uma película de líquido que é vertido sobre o atomizador (Sindayihebura, Dobre et al. 1997). Existem dois mecanismos para explicar a desintegração de um líquido durante uma atomização por ultra sons: mecanismo de cavitação e mecanismo de ondas capilares (Rajan e Pandit 2001). A cavitação ocorre geralmente a altas frequências e em sistemas de energia de alta intensidade. As bolhas de cavitação são geradas quando se aplica uma frequência ultra-sónica a um líquido. Choques hidráulicos de alta intensidade são gerados durante a implosão dessas bolhas (perto da superfície do líquido), provocando assim a sua desintegração e consequente ejeção directa de gotículas. De acordo com o mecanismo de ondas capilares, estas são compostas por cristas e vales (Figura 4). A atomização ocorre quando oscilações instáveis separam as cristas das ondas capilares da superfície do líquido. Bouguslavskii e Eknadiosyants (1969) juntaram estes dois mecanismos e propuseram uma “teoria conjunta”. De acordo com esta teoria, os choques hidráulicos periódicos originados pela perturbação da cavitação, interagem com a amplitude finita das ondas capilares e provocam a formação de gotículas.

Vários processos foram observados para a formação de gotículas na atomização por ultra-sons (Yule e Al – Suleimani 2000), o que pode também explicar a variedade de tamanhos observados. Os processos observados foram: múltiplas gotículas formadas por um só ligamento; a variação do tamanho, orientação e diâmetro dos ligamentos; o

aparecimento de uma gotícula completamente formada a partir de uma cratera originada no limite inferior da onda de vibração, “modo vulcão”.

2.2.1.1. Previsão da distribuição do tamanho das gotículas

Tal como reportado por Rajan e Pandit (2001), o modo mais usual para atomizar um líquido é forçá-lo a passar a alta velocidade por um orifício muito pequeno, sendo necessária uma velocidade suficientemente alta para formar partículas. Nos aerossóis convencionais, o tamanho do orifício é o que mais afecta a dimensão das gotículas. No caso de o líquido a atomizar conter alguma impureza, ou partículas sólidas, pode ocorrer uma obstrução do orifício. Essa limitação é um dos grandes problemas na produção de aerossóis de pequenas dimensões. O mesmo não acontece na atomização por ultra-sons visto que a frequência de vibração ultra-sónica, as propriedades do líquido e o caudal a atomizar são o que determina o tamanho das gotículas.

As grandes vantagens dos atomizadores por ultra-sons são: o tamanho bastante reduzido das suas gotículas (o qual pode ser controlado com precisão), a maior uniformidade da distribuição do tamanho das gotículas, gotículas quase esféricas (comparativamente aos aerossóis convencionais) e o facto de o líquido não ter de estar pressurizado (Rajan & Pandit 2001).

A Figura 5 é reveladora de quão monodisperso é o tamanho das gotículas obtidas através da atomização por ultra-sons para baixas frequências, quando comparada com os atomizadores clássicos. No estudo de Avvaru, Patil et al. (2006), constatou-se que a distribuição não é tão monodispersa devido a fenómenos de cavitação.

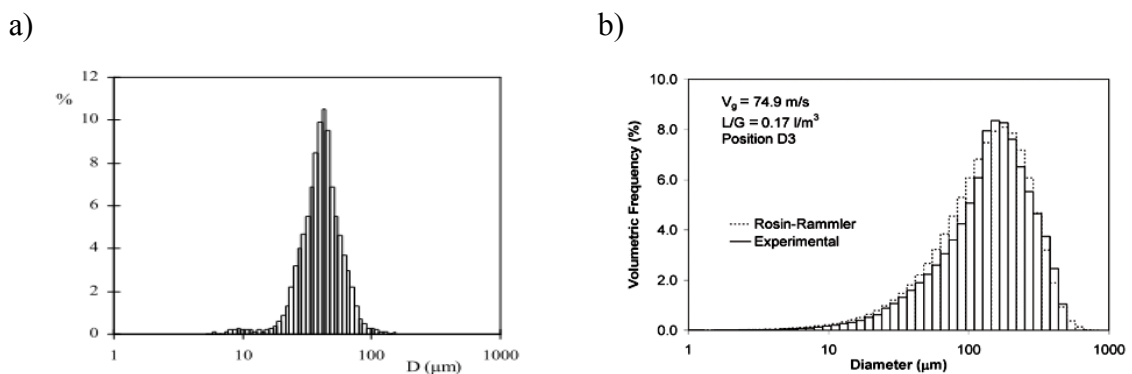


Figura 5 - a) Distribuição do tamanho das gotículas num atomizador por ultra sons (Sindayihebura, Dobre et al. 1997); b) Distribuição do tamanho das gotículas num atomizador clássico

Comparando os dois gráficos verifica-se nos atomizadores clássicos uma maior diversidade do diâmetro das gotículas.

As forças envolvidas na formação de gotículas podem ser descritas através de dois números adimensionais, o número de Weber (We), que relaciona a força de arrasto com a tensão superficial e o número de Ohnesorge (Oh), que relaciona as forças viscosas com a força de tensão superficial (Rajan & Pandit 2001).

Verifica-se na atomização por ultra-sons, que a frequência ultra-sónica de vibração é um dos principais factores para a determinação das dimensões das gotículas. O diâmetro médio das gotículas é inversamente proporcional à frequência de vibração, ou seja quanto mais alta for esta, menor será a dimensão das gotículas. Ao aumentar a frequência podem-se produzir partículas de dimensões muito reduzidas (1-5 μm). O tamanho das gotículas também é afectado pela espessura da película formado na superfície vibratória, o qual pode ser ajustado controlando o caudal do líquido (Rajan e Pandit 2001). Existe um pequeno aumento do diâmetro médio das gotículas com o aumento do caudal devido ao fenómeno de cavitação, que ocorre quando a espessura da película de líquido aumenta (Sindayihebura, Dobre et al. 1997) Figura 6.

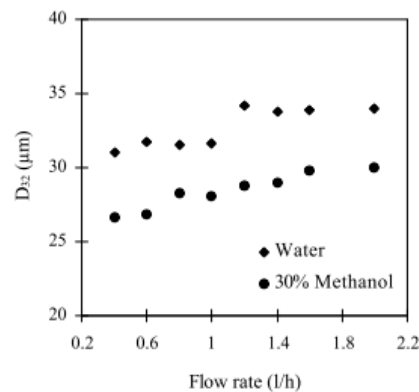


Figura 6 - Influência do caudal no diâmetro médio das gotículas (Sindayihebura, Dobre et al. 1997)

Ao modificar o número de Weber para incluir o caudal e a frequência ultra-sónica e se igualarmos as forças externas à tensão superficial, o valor do número de Weber será igual a 1 ($We = fQ\rho/\sigma = 1$) em que σ é a tensão superficial (N/m), f é a frequência de excitação (Hz) e ρ é massa volúmica (kg/m^3), existe um caudal crítico Q_{crit} (m^3/s) que dado por $\sigma/f\rho$ (Rajan & Pandit 2001).

O parâmetro Q_{crit} corresponde ao caudal a partir do qual se obtêm gradualmente partículas com um tamanho superior ao previsto. No entanto, existe um caudal máximo a partir do qual a altura de líquido sobre a superfície vibratória origina fenómenos de amortecimento, podendo impedir o crescimento das ondas e limitar a amplitude de ressonância.

Em relação às propriedades do líquido que influenciam o processo de atomização por ultra-sons, Sindayihebura, Dobre et al. (1997), verificaram que a viscosidade não produz efeito no tamanho médio das gotículas. O mesmo não acontece com a tensão superficial, pois, à medida que esta aumenta, verifica-se um aumento do tamanho das gotículas (Figura 7).

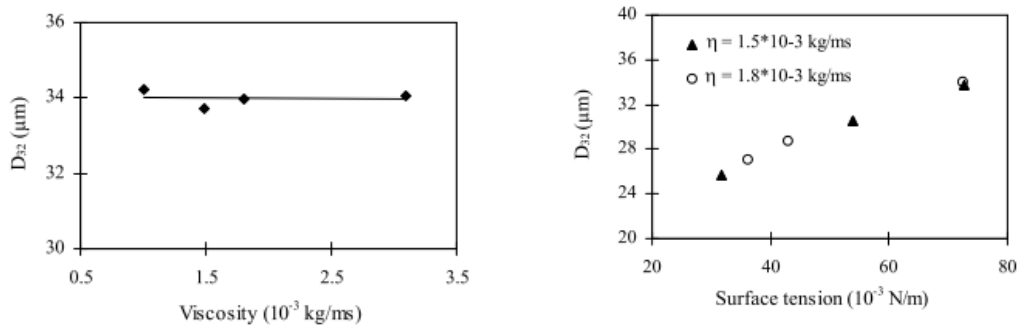


Figura 7 - a) Influência da viscosidade no diâmetro médio das gotículas (Sindayihebura, Dobre et al. 1997); b) Influência da tensão superficial no diâmetro médio da gotícula (Sindayihebura, Dobre et al. 1997)

Os estudos anteriormente efectuados (Lang 1962; Peskin e Raco 1963; Sindayihebura, Dobre et al. 1997) focaram a medição do comprimento de onda, bem como da amplitude das vibrações. Em todos esses estudos, a frequência de oscilação das ondas superficiais é metade da frequência aplicada ($f_c = f/2$). Foram realizadas experiências para medir a distribuição do tamanho das gotículas, através da expressão:

$$D_{32} \approx 0,34 \lambda \quad (1)$$

em que D_{32} é o Diâmetro médio de Sauter (SMD; ver anexo 1), directamente proporcional ao comprimento de ondas da superfície λ . O diâmetro médio é definido por:

$$\text{SMD} = D_{32} = \frac{\sum n_i d_i^3}{\sum n_i d_i^2} \quad (2)$$

em que, n_i é o número de unidades de gotículas de um determinado tamanho i e d_i o diâmetro dessas gotículas.

De acordo com a bibliografia existem três formas de calcular o comprimento de onda, sendo a primeira expressão formulada por Kelvin (cit. in (Yule e Al – Suleimani 2000):

$$\lambda = (8\pi\sigma / \rho_f f^2)^{1/3} \quad (3)$$

A segunda expressão, de acordo com Tembely (2010), λ pode ser obtida por:

$$\lambda \approx \left(\frac{\mu \sigma}{\rho^2 f^3} \right)^{1/5} \quad (4)$$

sendo considerada nesta expressão a viscosidade μ (Pa.s). Rajan e Pandit (2001) chegaram a uma correlação para determinar o diâmetro médio, sendo esta utilizada nos estudos mais recentes (Avvaru, Patil et al. 2006; Wang, Purwanto et al. 2008):

$$d = C (f)^{0,66} (Q)^{0,207} (\sigma)^{0,11} (\rho)^{-0,274} (\mu)^{0,166} (Potência_{atomizador}/\acute{a}rea)^{0,4} \quad (5)$$

em que C é igual a 1600 e Q é o caudal de líquido (m^3/s).

2.2.2. Coalescência

O fenómeno de coalescência intervém em diversas situações físicas. Uma compreensão detalhada sobre este fenómeno, é importante em diversas aplicações industriais, tais como a estabilidade da emulsão, impressão de jacto de tinta, revestimento de aplicações e as dinâmicas de escoamentos multifásicos. A coalescência consiste num fenómeno em que duas gotículas se unem, através de uma película de filme líquido (Marrucci 1969).

Depois de se formar uma ponte de ligação entre as duas superfícies, a velocidade a que se forma esta ligação é resultante entre as forças capilares (que resultam da coalescência) e as forças viscosas, que contrariam essa ligação.

2.2.3. Vaporização

Um cenário comum de transferência de massa é a transferência de uma espécie para uma corrente gasosa, devido ao fenómeno de vaporização.

A evaporação das gotas de um aerossol em ambiente turbulento, é importante para uma série de processos técnicos e industriais.

Quando a taxa de vaporização de massa é elevada, o comportamento físico esperado é modificado. Quando a taxa de vaporização aumenta, o acoplamento entre as duas fases fica mais forte e à medida que o “tempo de vida” da gotícula diminui, o carácter transiente ou dinâmico do problema emerge de um modo dominante.

2.2.4. Força de arrasto

Qualquer objecto que se movimenta num fluido sofre o efeito de arrasto (força na direcção do escoamento que se opõe ao movimento, composta pelas forças de pressão e de corte que actuam na superfície do objecto) (Munson et al., 2004). É claro que o coeficiente de arrasto sobre um objecto depende de sua forma. Um número de experiências com corpos rígidos de diferentes tamanhos sobre uma vasta gama de valores de Re , mostraram que o coeficiente da força de arrasto (C_D), é uma função do número de Re . O coeficiente de arrasto do corpo (C_D), é uma grandeza adimensional que, ao depender dos números de Strouhal, Froude, Euler e Reynolds, expõe a dependência da força relativamente às variáveis independentes (massa volúmica – ρ , velocidade – U , secção transversal máxima – s), varia lentamente, por sua vez em função do comprimento do corpo (l), de ρ , de v , da

pressão (p), da aceleração da gravidade (g), do coeficiente de viscosidade do fluido (μ) da forma e orientação do corpo relativamente à direcção de deslocamento (Fédiaevski et al., 1979). O escoamento exercerá portanto, forças e momentos, de acordo com a forma e orientação arbitrárias de um corpo (White 1999).

O coeficiente de arrasto de um corpo é definido por:

$$C_D = \frac{F_D}{1/2\rho U^2 A} \quad (6)$$

O coeficiente de arrasto é composto por duas componentes: arrasto devido à pressão e arrasto devido ao atrito.

O arrasto devido à pressão, D_p , é a parte do arrasto provocada directamente pela distribuição de pressão sobre o objecto. Esta contribuição ao arrasto total é denominada arrasto de forma, devido à sua forte dependência do formato do objecto (Munson et al., 2004). O arrasto de pressão resulta portanto, da resistência criada por uma pressão diferencial entre as superfícies anterior e posterior de um corpo que se movimenta através de um fluido. A superfície do corpo que entra em contacto com a corrente, forma uma zona de pressão relativamente alta, enquanto na superfície oposta do corpo, cria-se uma zona de pressão relativamente baixa que gera turbulência (Hall 1993).

A outra das componentes do arrasto total é conhecido como arrasto por atrito, que é a parte do arrasto provocada pela tensão de corte sobre o objecto (Munson et al., 2004).

Para número de Reynolds elevados, ou seja, regime turbulento, a componente do arrasto devido às tensões de corte é muito baixo.

O coeficiente de arrasto depende muito de o número de Reynolds do escoamento, onde a esfera está imersa. Os escoamentos podem observar-se com número de Reynolds muito baixo, em que são controlados pelo balanço entre as forças viscosas e de pressão e as forças de inércia são muito pequenas. Os escoamentos com número de Reynolds moderados, o coeficiente de arrasto tende a diminuir. Para valores de Reynolds $10^3 < Re < 10^5$, o coeficiente de arrasto (no caso das esferas) é relativamente constante. Já para escoamentos com número de Reynolds elevados, o coeficiente de arrasto aumenta quando o escoamento se torna turbulento, pois a maior parte do arrasto é devido à tensão de corte. No caso das esferas, para valores de Reynolds $10^5 < Re < 10^6$, ocorre uma queda abrupta do coeficiente de arrasto aumentando de seguida (Figura 8).

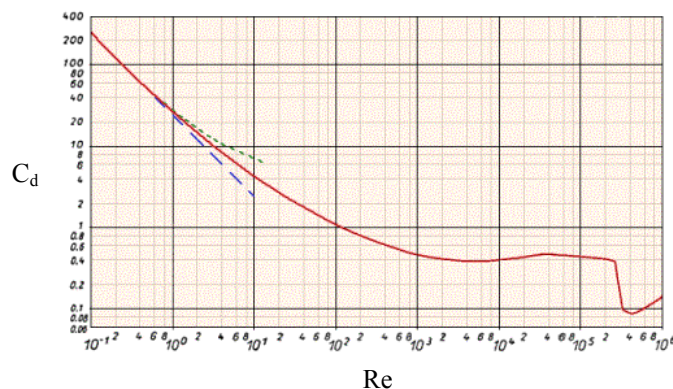


Figura 8 - Coeficiente de arrasto em função do número de Reynolds para esferas

3. Apresentação dos trabalhos de projecto, experimentais ou de modelação numérica realizados

3.1. Modelos de representação de dispersão de aerossóis

O estudo de escoamentos através de CFD (Dinâmica de fluidos Computacional), é nos dias de hoje, uma ferramenta muito importante para todos os ramos da engenharia. A modelização dos processos físicos e químicos que tem lugar em qualquer sistema pode ser feita através de programas computacionais como o Fluent, Comsol, Ace, etc.

Através de modelos pré-existentes no Fluent, procura-se neste estudo simular a dispersão espacial dos aerossóis produzidos por um atomizador por ultra-sons. Após uma pesquisa na literatura, verificou-se a quase inexistência de modelos para descrever o processo de atomização por ultra-sons. Devido a esse facto, foram analisados processos que apresentassem semelhanças com o objecto deste estudo, de forma a identificar um modelo que permitisse a previsão da dispersão espacial de aerossóis. Nessa pesquisa foram analisados vários processos, tais como, a produção de aerossóis (Behzadi, Issa et al. 2004; Koskela 2004; von Berg, Edelbauer et al. 2005; Nijdam, Guo et al. 2006; Qian, Lin et al. 2009; Jiang, Siamas et al. 2010), a propagação e distribuição de pesticidas (Delele, Jaeken et al. 2007; Endalew, Debaer et al. 2010), secagem por atomização (Huang, Passos et al. 2005; Fletcher, Guo et al. 2006; Huang, Kumar et al. 2006; Delele, Jaeken et al. 2007; Mezhericher, Levy et al. 2009), humedificação de câmaras frigoríficas, *spray pyrolysis depositions* (CHAPRON, #160 et al. 2007) e extinção de chamas por atomizadores (Adiga, Hatcher et al. 2007).

Nos artigos analisados, encontra-se um padrão, a análise do escoamento em duas fases: fase contínua (ar) e fase dispersa (gotículas). O tratamento dessas duas fases é feito de duas formas distintas: através do modelo Euleriano-Euleriano ou do modelo Euleriano-Lagrangiano. No modelo Euleriano-Euleriano trabalha-se a fase dispersa como uma fase contínua, ou seja, considera-se a existência de duas fases Eulerianas (uma para o gás e outra para as gotículas). Cada célula da grelha computacional contém fracções de gás e de gotículas, e as equações de transporte são escritas de forma a que a soma destas duas fracções seja igual à unidade. As grandes vantagens do modelo Euleriano-Euleriano são o reduzido custo computacional, a facilidade de adição de equações e a facilidade de modelização da turbulência.

No modelo Euleriano-Lagrangiano, a fase contínua é semelhante à considerada no modelo Euleriano-Euleriano. A fase dispersa é representada com um conjunto de partículas computacionais discretas, sendo cada partícula controlada pelo escoamento dominante, desde o seu ponto de injeção até à saída do domínio Lagrangiano.

O modelo Euleriano-Euleriano foi o utilizado ao longo do trabalho. O modelo utilizado não descreve os efeitos da coalescência das gotículas bem como a sua evaporação. Apesar da sua possibilidade de ser introduzida num estudo posterior.

A turbulência é introduzida nas simulações através de 3 estratégias/modelos: o Equações de Navier-Stokes com média de Reynolds (RANS), Simulações de grande escala

(LES) e o Simulação numérica directa (DNS). Por motivos de custo computacional as estratégias LES e DNS são negligenciadas neste trabalho, optando-se pela estratégia RANS que, apesar de não ser tão preciso, permite obter informações úteis e relevantes.

De acordo com a estratégia de RANS, o sistema de equações é obtido através da média de Reynolds nas equações de Navier Stokes. Este procedimento implica que na decomposição da média de Reynolds, sejam introduzidas incógnitas adicionais devido à tensão de corte de Reynolds. Há duas formas de abordar quase todos os modelos da tensão de Reynolds. A primeira implica a descrição da tensão de Reynolds de um modo similar à viscosidade turbulenta, como se estivesse a introduzir mais uma propriedade do líquido. No entanto, esta abordagem está cada vez mais em desuso, porque a tensão de Reynolds não é uma propriedade do líquido, mas sim uma propriedade do escoamento. A segunda forma de abordar os modelos de tensão de Reynolds, introduzido por Kolmogorov em 1942, que calculava a energia cinética de turbulência k e a sua taxa de dissipação ε , relacionando o comprimento e o intervalo de tempo do escoamento. Como são usadas duas equações adicionais para calcular k e ε , este modelo tem como nome, *modelo de duas equações* ou *modelo k - ε* .

Na Tabela 1, são apresentados alguns exemplos de estudos numéricos sobre a dispersão de aerossóis, com modelos Euleriano-Euleriano e Euleriano-Lagrangiano.

Estudo numérico da dispersão de aerossóis produzidos por ultra-sons

Tabela 1 – Exemplos de estudos de dispersão de aerossóis, com os modelos Euleriano-Euleriano e Euleriano-Lagrangiano

Fonte	Programa	Modelo	Malha	Nº de partículas controladas	Processador	Memória RAM	Tempo de simulação
(Koskela 2004)	CFX 4.2	-	59000 em 12 blocos	-	-	-	-
(Huang, Passos et al. 2005)	FLUENT 6.1	Euleriano-Lagrangiano	185539 células	120 parcelas	-	-	-
(Fletcher, Guo et al. 2006)	CFX 4	Euleriano-Lagrangiano	340000 células	2000	500Hz	1GB	1 semana
(Fletcher, Guo et al. 2006)	CFX 5.6	Euleriano-Lagrangiano	400000 células	2000	1 GHz	-	1 , 2 dias
(Huang, Kumar et al. 2006)	FLUENT 6.1	Euleriano-Lagrangiano	185539 células	120 parcelas	-	-	-
(Nijdam, Guo et al. 2006)	CFX 4	Euleriano-Euleriano	370000	15,000	-	-	-
(Nijdam, Guo et al. 2006)	CFX 4	Euleriano-Lagrangiano	370,000	20,000	-	-	-
(CHAPRON, #160 et al. 2007)	ACE	-	-	-	-	-	-
(Delele, Jaeken et al. 2007)	FLUENT 6.1.22	Euleriano-Lagrangiano	499060 células	3000	Pentium IV 2.6 GHz	1 GB	15 horas
(Nijdam, Langrish et al. 2008)	CFX 4	Euleriano-Euleriano	2500 células	10 parcelas	500 MHz DEC-alpha		3 horas
(Delele, Schenk et al. 2009)	FLUENT 6.3.28	Euleriano-Lagrangiano	1243628 células	30,000 por ponteira	Pentium IV, 3.21 GHz WinXp	3.62GB	9 dias
(Mezhericher, Levy et al. 2009) 2D	FLUENT 6.3.26	Euleriano-Lagrangiano	34852	20 streams de diferentes diâmetros	Processor Pentium 2.6 GHz	1 GB	2 dias no regime estacionário e 1 semana para se obter 30 segundos no regime transiente
(Mezhericher, Levy et al. 2009) 3D	FLUENT 6.3.26	Euleriano-Lagrangiano	619849	20 streams de diferentes diâmetros	Dois Processadores Pentium com 2.66 GHz	8GB	1 semana para o regime estacionário como para o regime transiente, para se obter 30 segundos
(Endalew, Debaer et al. 2010)	CFX	Euleriano-Lagrangiano	1448760	3000	-	8 GB	-

3.2. O modelo Euleriano-Euleriano no Fluent

Com base no modelo Euleriano-Euleriano, existem três métodos de simulação de um escoamento de duas fases: o Mistura, o Volume do Fluido (VOF) e o Euleriano. O método VOF não se adequa à situação em estudo, devido ao facto de a percentagem de segunda fase (gotículas) ser superior a 10%, impossibilitando assim a sua utilização (ANSYS 2009). O método Mistura resolve a equação da energia para a mistura e estabelece uma velocidade relativa para descrever a fase dispersa. O método Euleriano é o método mais complexo dos três referenciados, pois nele são resolvidas as equações de energia, de conservação de massa e do momento para cada fase (ANSYS 2009).

Neste estudo foram utilizados os métodos Mistura e Euleriano. Em cada simulação, usou-se o método Mistura de forma a obter-se uma primeira solução, e de seguida, usou-se o método Euleriano para obter-se a solução final. Este procedimento é recomendado pelo manual do Fluent, para reduzir substancialmente o custo computacional em cada simulação (ANSYS 2009).

3.3. Formulação Numérica do Modelo

Conforme foi referido anteriormente, foi utilizada para a solução deste problema o modelo Euleriano-Euleriano, presente no programa computacional Fluent 6.3.26.

A definição de escoamento multifásico como um meio contínuo (meio interpenetrante), incorpora o conceito das fracções volúmicas de cada fase aqui designado como α (α_{ar} - fracção volúmica do ar; α_{got} - fracção volúmica das gotículas). A fracção volúmica representa o espaço que cada fase ocupa no escoamento, em que as leis de conservação de massa e movimento são satisfeitas para cada fase (Ansys 2009). Para cada fase são resolvidas as equações abaixo mencionadas.

A fracção volúmica de cada fase é dado por:

$$\alpha_{ar} = \frac{\text{Volume ar}}{\text{Volume Total}} \quad (7)$$

$$\alpha_{got} = \frac{\text{Volume gotículas}}{\text{Volume Total}} \quad (8)$$

O volume de cada fase é dado por:

$$V_{ar} = \int_V \alpha_{ar} dV \quad (9)$$

$$V_{got} = \int_V \alpha_{got} dV \quad (10)$$

(18)

em que

$$\sum_{q=1}^n \alpha_{ar} = 1 \quad (11)$$

$$\sum_{q=1}^n \alpha_{got} = 1 \quad (12)$$

e a massa volúmica da fase é dada por

$$\hat{\rho}_{ar} = \alpha_{ar} \rho_{ar} \quad (13)$$

$$\hat{\rho}_{got} = \alpha_{got} \rho_{got} \quad (14)$$

Equação da conservação da massa

$$\nabla \cdot (\alpha_{ar} \rho_{ar} \vec{U}_{ar}) = 0 \quad (15)$$

$$\nabla \cdot (\alpha_{got} \rho_{got} \vec{U}_{got}) = 0 \quad (16)$$

Fracção Volúmica

$$\alpha_{ar} + \alpha_{got} = 1 \quad (17)$$

Equação da conservação da quantidade de movimento

$$\nabla \cdot (\alpha_{ar} \rho_{ar} \vec{v}_{ar} \vec{U}_{ar}) = -\alpha_{ar} \nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau} + \alpha_{ar} \rho_{ar} \vec{g} + R_{got,ar} \quad (18)$$

$$\nabla \cdot (\alpha_{got} \rho_{got} \vec{v}_{got} \vec{U}_{got}) = -\alpha_{got} \nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau} + \alpha_{got} \rho_{got} \vec{g} - R_{got,ar} \quad (19)$$

em que p é a pressão partilhada pelas duas fases, $R_{got,ar}$ representa a troca de quantidade de movimento entre fases, e $\bar{\tau}$ é o tensor de reynolds

$$\bar{\tau} = \alpha_{ar} (\mu_{lam,ar} + \mu_{tur,ar}) (\nabla \vec{U}_{ar} + \nabla \vec{U}_{ar}^T) - \frac{2}{3} \alpha_{ar} (\mu_{lam,ar} + \mu_{tur,ar}) \nabla \cdot \vec{U}_{ar} \vec{I} \quad (20)$$

$$\bar{\tau} = \alpha_{got}(\mu_{lam,got} + \mu_{tur,got})(\nabla\vec{U}_{got} + \nabla\vec{U}_{got}^T) - \frac{2}{3}\alpha_{got}(\mu_{lam,got} + \mu_{tur,got})\nabla\cdot\vec{U}_{got}\bar{I} \quad (21)$$

em que μ_a é a viscosidade cinemática da fase e \bar{I} é o tensor de identidade unitário,

$$\sum_{p=1}^n \vec{R}_{ar,got} = \sum_{p=1}^n \vec{K}_{ar,got} (\vec{U}_{got} - \vec{U}_{ar}) \quad (22)$$

em que $K_{got,ar}(= K_{ar,got})$ é o coeficiente de troca de quantidade de movimento entre as fases

$$K_{got,ar} = \frac{\alpha_{ar}\alpha_{got}\rho_{got}f}{\tau_{got}} \quad (23)$$

em que f é o coeficiente de arrasto definido pelo modelo *Schiller-Naumann* baseado no número de Reynolds (Re) e τ_{got} é “*particulate relaxation time*” e são definidos por:

$$\tau_{got} = \frac{\rho_{got}d_{got}^2}{18\mu_{got}} \quad (24)$$

$$f = \frac{C_D Re}{24} \quad (25)$$

$$Re = \frac{\rho_{got}|\vec{U}_{got} - \vec{U}_{ra}|d_{got}}{\mu_{got}} \quad (26)$$

$$\text{onde o valor de } C_D = \begin{cases} 24(1 + 0,15Re^{0,687})/Re & Re \leq 1000 \\ 0,44 & Re > 1000 \end{cases} \quad (27)$$

Modelo de Turbulência

O Fluent fornece 3 modelos para descrever os efeitos de turbulência num escoamento multifásico, dentro do contexto do modelo $k-\epsilon$. Os modelos mistura, disperso e para cada fase. Por razões de custo computacional, optou-se pelo modelo mistura sendo as suas equações traduzidas por:

Equação de k :

$$\nabla\cdot(\rho_m \vec{v}_m k) = \nabla\cdot\left(\frac{\mu_{t,m}}{\sigma_k} \nabla k\right) + G_{k,m} - \rho_m \epsilon \quad (28)$$

Equação de ϵ :

$$\nabla \cdot (\rho_m \vec{v}_m \epsilon) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_{t,m}}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon \right) + \frac{\epsilon}{k} (C_{1\epsilon} G_{k,m} - C_{2\epsilon} \rho_m \epsilon) - \rho_m \epsilon \quad (29)$$

em que a massa volúmica e a velocidade da mistura (ρ_m e \vec{v}_m) são calculadas por:

$$\rho_m = \sum_{i=1}^N \alpha_i \rho_i \quad (30)$$

$$\vec{v}_m = \frac{\sum_{i=1}^N \alpha_i \rho_i \vec{v}_i}{\sum_{i=1}^N \alpha_i \rho_i} \quad (31)$$

a viscosidade turbulenta é calculada por

$$\mu_{t,m} = \rho_m C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (32)$$

e a dissipação por

$$G_{k,m} = \mu_{t,m} \left(\nabla \vec{U}_m + (\nabla \vec{U}_m)^T \right) : \nabla \vec{U}_m \quad (33)$$

3.4. Configuração da Simulação com base no tutorial

A construção do modelo deste estudo baseou-se no tutorial “*Using the Mixture and Eulerian Multiphase Models*”, que o Fluent dispõe na sua documentação. Ao analisar esse tutorial, identificaram-se algumas semelhanças com o caso em estudo. Neste tutorial é descrito um escoamento de água (fase contínua) e bolhas de ar (fase dispersa) através de um tubo em forma de T, com 25 mm de diâmetro (Figura 9).

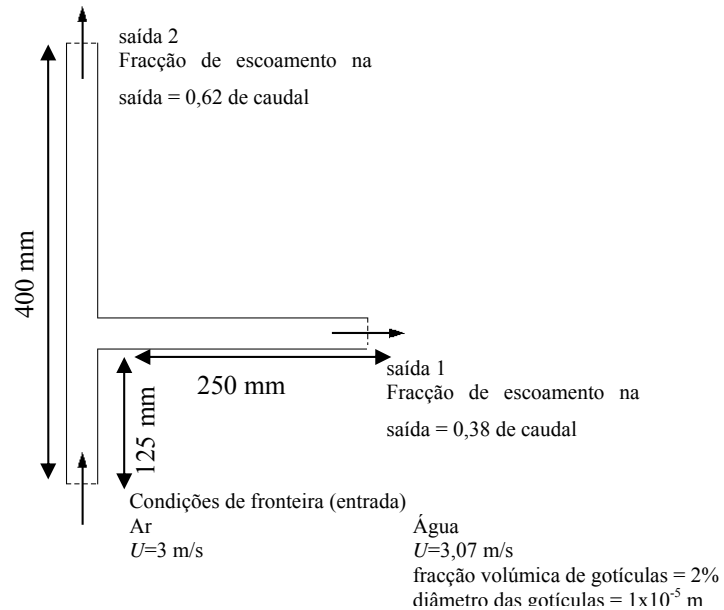


Figura 9 – Tubo em forma de T, descrito no tutorial do Fluent

Porém, no caso que se pretende estudar, a fase contínua é ar e a fase dispersa é água, que é exactamente o oposto do considerado no tutorial. Para ser o mais fiel possível ao tutorial, modificou-se a ordem das fases, aumentou-se a velocidade dos fluidos ($U_{ar}= 3$ m/s; $U_{got}= 3,07$ m/s) para manter o regime turbulento no escoamento e diminuiu-se o diâmetro das gotículas para 0,01 mm. Alterou-se o diâmetro das gotículas porque, no caso em estudo, o diâmetro é inferior ao considerado no tutorial (1mm).

Após importar¹ a grelha fornecida pelo tutorial do Fluent, verificou-se a integridade da grelha² e se o seu volume mínimo é positivo. De seguida, definiu-se o solver³, o modelo de multi-fases⁴ e o modelo de turbulência⁵ de acordo com o tutorial.

¹ File -> Read -> Case (ficheiro.msh)

² Grid-> Check

³ Define -> Models -> Solver

⁴ Define ->Models -> Multiphase -> Mixture

⁵ Define -> Models -> Viscous

Tabela 2 – Opções do Algoritmo de Solução

Opções do Algoritmo de Solução	Razão de Escolha
Algoritmo de Solução - Baseado em Pressão	O único modelo disponível para escoamentos com diversas fases.
Formulação da Velocidade – Absoluta	O escoamento não é rotativo, e portanto é preferível usar esta formulação (ANSYS 2009).
Opções de Gradiente – Baseado na célula Green Gauss	Formulação menos precisa, mas menos dispendiosa em custos computacionais (ANSYS 2009).
Formulação Porosa – Velocidade Superficial	Por defeito do fluent, visto que não há meios porosos no caso em estudo.
Tempo – Regime Permanente	Por razões de custo computacional optou-se por um modelo estacionário.

Ao escolher o modelo Mistura é necessário seleccionar a opção velocidade de escorregamento porque existe uma diferença de velocidades entre as duas fases. Ao seleccionar-se a opção forças de massa implícitas favorece-se a convergência da solução, pois faz-se com que o equilíbrio parcial entre o gradiente de pressões e as forças associadas aos corpos, seja considerado nas equações da quantidade de movimento. Esta opção é utilizada nos modelos VOF e Mistura, onde as forças de corpo são superiores às forças viscosas e de conexão.

Tabela 3 – Opções de turbulência

Opções de Turbulência	Razão da escolha
Modelo – $k-\epsilon$	Apropriado para escoamentos turbulentos.
Modelo $k-\epsilon$ – Padrão	Apesar de não ser o modelo mais preciso dos modelos possíveis, no fluent optou-se por este modelo por uma questão de redução de custo computacional.
Tratamento próximo de parede – Funções de parede padrão	

Introduziu-se a acção da gravidade através de Condições de Operação⁶ ao activar o parâmetro da gravidade, admitindo uma aceleração de -9.81 m/s^2 na coordenada vertical (Y). Não se seleccionou a opção condição de operação específica porque o Fluent calcula uma média da densidade de todos os elementos da malha (ANSYS 2009). De seguida, definiram-se os dois materiais utilizados. O ar vem pré-definido no Fluent como fluido do escoamento, sendo apenas necessário acrescentar a água⁷.

⁶ Define -> Operating Conditions

⁷ Define -> Materials -> Fluent Data Base -> Water liquid

Estudo numérico da dispersão de aerossóis produzidos por ultra-sons

O passo seguinte foi definir as fases⁸ do escoamento. No Fluent o ar (fase contínua) define-se como fase primária e a água (fase dispersa) como fase secundária. Ainda no painel de escolha das fases, escolhe-se o modelo de interação entre as fases. No caso em estudo, optou-se pelo modelo *Schiller-Naumann* (lei de arrasto disponível no Fluent), que descreve o arrasto entre partículas esféricas e o líquido circundante. De seguida, introduziram-se as condições de fronteira⁹ de acordo com o apresentado na tabela seguinte.

Tabela 4 - Condições de fronteira

Zona	Condição de Fronteira	Mistura	Ar	Gotículas
Entrada	Velocidade de Entrada	Intensidade de Turbulência - 10% Escala característica de comprimento* - 0,025 m	Momento específico de velocidade - Magnitude, Normal à condição de fronteira Quadro de referência - Absoluto Magnitude da velocidade - 3 m/s	Momento específico de velocidade - Magnitude, Normal à condição de fronteira Quadro de referência - Absolute Magnitude da velocidade - 3,07 m/s Multi-fásico - Fracção volúmica - 0,02
Saida 1	Escoamento à saída	Percentagem do escoamento à saída - 0,62		
Saida 2	Escoamento à saída	Percentagem do escoamento à saída - 0,38		
Paredes	Parede	Movimento da parede - Parede estacionária Condições de corte - não escorregamento		

* Valor definido no Tutorial

O passo seguinte é definir os controlos do Algoritmo de Solução¹⁰. Para o caso em estudo, utilizaram-se as predefinições do Fluent relativamente ao factor de relaxamento e fez-se uma alteração no método de discretização do parâmetro pressão, escolhendo o PRESTO. Este é adequado para escoamentos que tenham no seu domínio curvas

⁸ Define -> Phases

⁹ Define -> Boundary Conditions

¹⁰ Solve -> Controls -> Solution

acentuadas (ANSYS 2009). Como critério de convergência, exigiu-se que todas as equações tivessem resíduos¹¹ inferiores a 1×10^{-5} . Para se averiguar da precisão dos resultados de simulação, foi feito um balanço de massa às gotículas, entre a entrada e as saídas, exigindo um erro máximo de 0,1%. No caso do erro no balanço de massa ser superior a 0,1%, diminui-se o valor de resíduos aceitável (referente ao fracção volúmica) até se obter resíduos no balanço de massa no intervalo referido. Refira-se que alguns autores (Mezhericher, Levy et al. 2009) usam critérios mais exigentes em termos de erro no balanço de massa (0,01%). Para verificar se os resultados obtidos são independentes da grelha fornecida pelo tutorial efectuou-se um teste de grelha que pode ser visualizado no Anexo B.

3.5. Testes Paramétricos

De forma a verificar se o modelo havia sido correctamente implementado, efectuaram-se testes paramétricos tendo como base os resultados obtidos nas linhas \overline{aa} e \overline{bb} (Figura 10), focando a atenção sobre pressão estática, pressão total, velocidade do ar, velocidade das gotículas e fracção volúmica das gotículas, Figura 11 à Figura 17. Numa primeira fase alterou-se a fracção volúmica de gotículas (2%; 10%; 20%), mantendo as velocidades do ar e das gotículas constantes ($U_{ar}= 3$ m/s; $U_{got}= 3,07$ m/s). De seguida, manteve-se a fracção volúmica constante (2%) e procedeu-se a uma alteração das velocidades do ar e das gotículas ($U_{ar}= 3; 4; 5$ m/s e $U_{got}=3,07; 4,07; 5,07$ m/s). Estas alterações nas velocidades, foram realizadas para manter um escoamento turbulento.

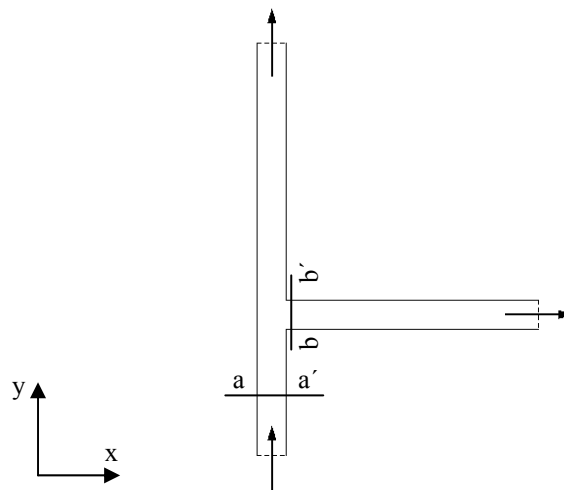


Figura 10 - Representação das linha \overline{aa} e \overline{bb} , utilizadas nos testes paramétricos para a recolha de dados relativos à fracção volúmica, velocidade das gotículas e do ar

¹¹ Solve -> Monitors -> Residuals

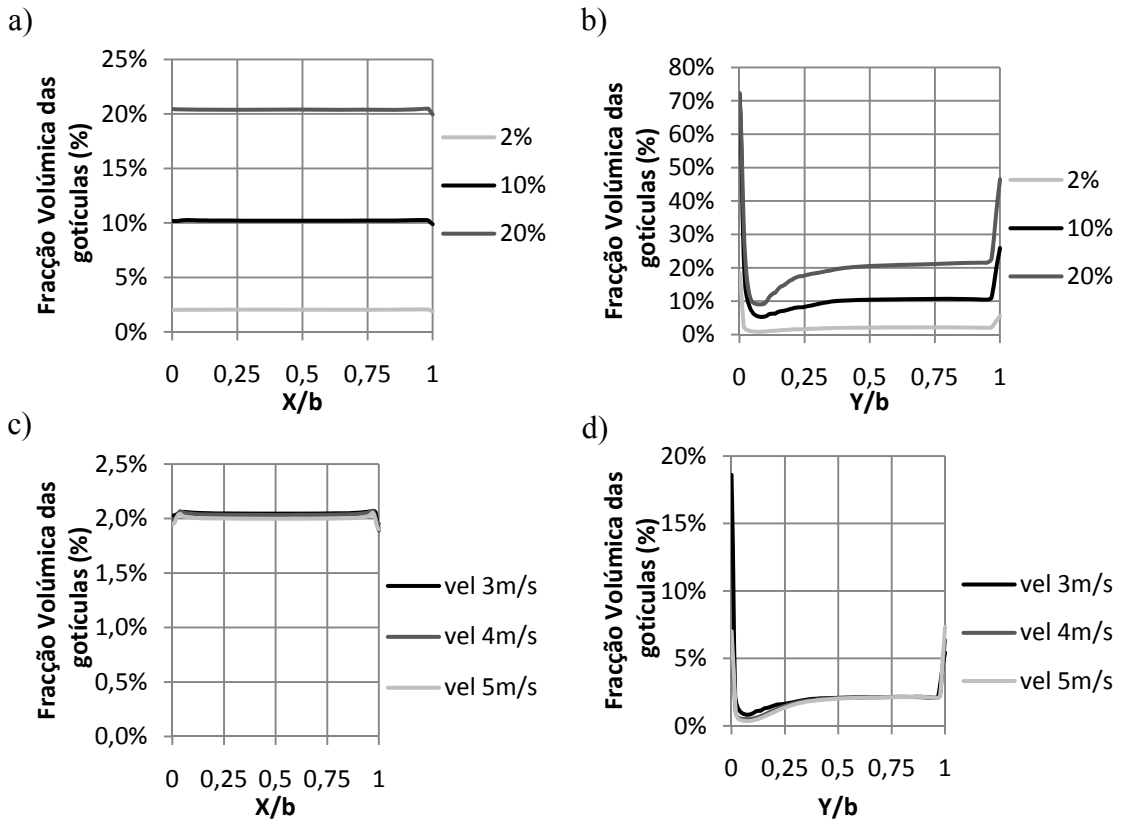


Figura 11 – a) Perfil da fracção volúmica das gotículas ao longo da linha \overline{aa} , com diversos valores de fracção volúmica de gotículas à entrada (2%, 10% e 20%); b) Perfil da fracção volúmica das gotículas ao longo da linha \overline{bb} , com diversos valores de fracção volúmica de gotículas (2%, 10% e 20%); c) Perfil da fracção volúmica das gotículas ao longo da linha \overline{aa} , com diversos valores de velocidade de gotículas e do ar (3m/s, 4m/s e 5m/s); d) Perfil da fracção volúmica das gotículas ao longo da linha \overline{bb} , com diversos valores de velocidade de gotículas e do ar (3m/s, 4m/s e 5m/s)

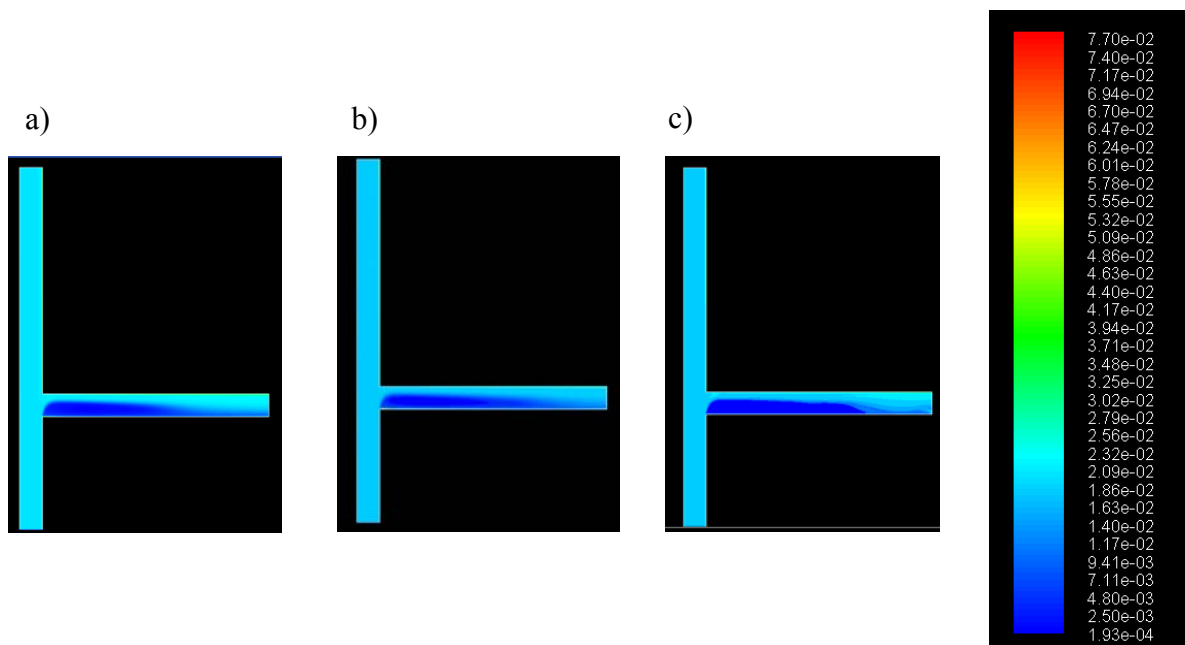


Figura 12 – Fracção volúmica de gotículas ao longo do domínio do escoamento para diversos valores de velocidade do ar e das gotículas: a) $U_{ar} = 3 \text{ m/s}$, $U_{got} = 3,07 \text{ m/s}$, fracção volúmica de gotículas de 2%; b) $U_{ar} = 4 \text{ m/s}$, $U_{got} = 4,07 \text{ m/s}$, fracção volúmica de gotículas de 2%; c) $U_{ar} = 5 \text{ m/s}$, $U_{got} = 5,07 \text{ m/s}$, fracção volúmica de gotículas de 2%;

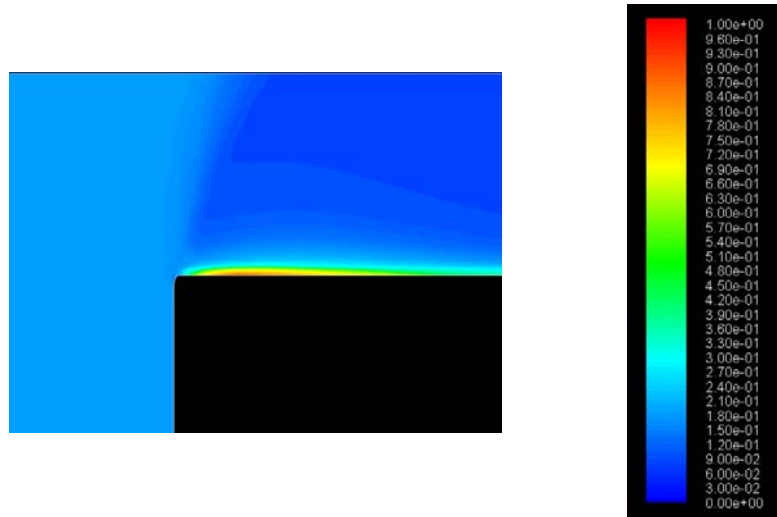


Figura 13 – Zoom da figura 11c, em que se observa o efeito de estratificação devido ao efeito da gravidade

Na Figura 12, constata-se a influência do vórtice que é formado na junção da segunda tubagem, originando o decréscimo da fracção volúmica de gotículas. Com o aumento da velocidade também se verifica o crescimento da área que o vórtice ocupa. A gravidade actua contra o efeito de inércia, o que faz com que o ar tenha tendência a se concentrar na zona de pressão mais baixa, criando assim uma bolsa de ar. Verifica-se na Figura 11c), que o aumento da velocidade não produz alterações no perfil da fracção volúmica ao longo da linha *aa'*. Relativamente ao comportamento da fracção volúmica de gotículas na Figura 11b e Figura 11d, verifica-se o efeito de estratificação devido ao efeito da gravidade (Figura 13).

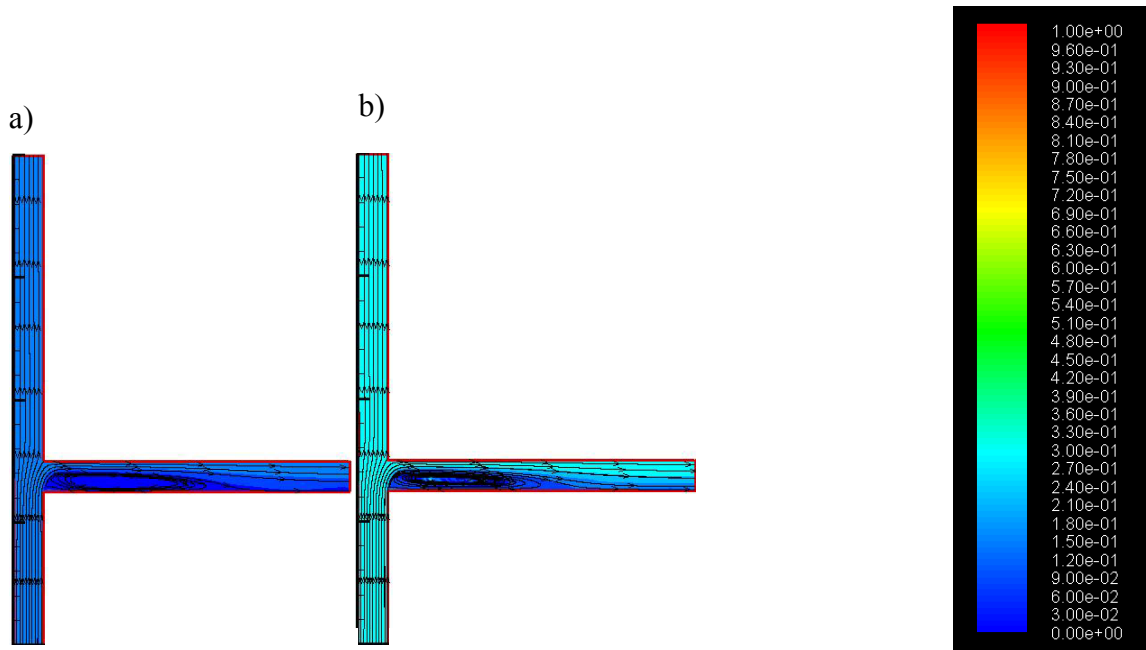


Figura 14 - Fracção volúmica de gotículas ao longo do domínio do escoamento para diversos valores de fracção volúmica de gotículas: a) 10%; b) 20%;

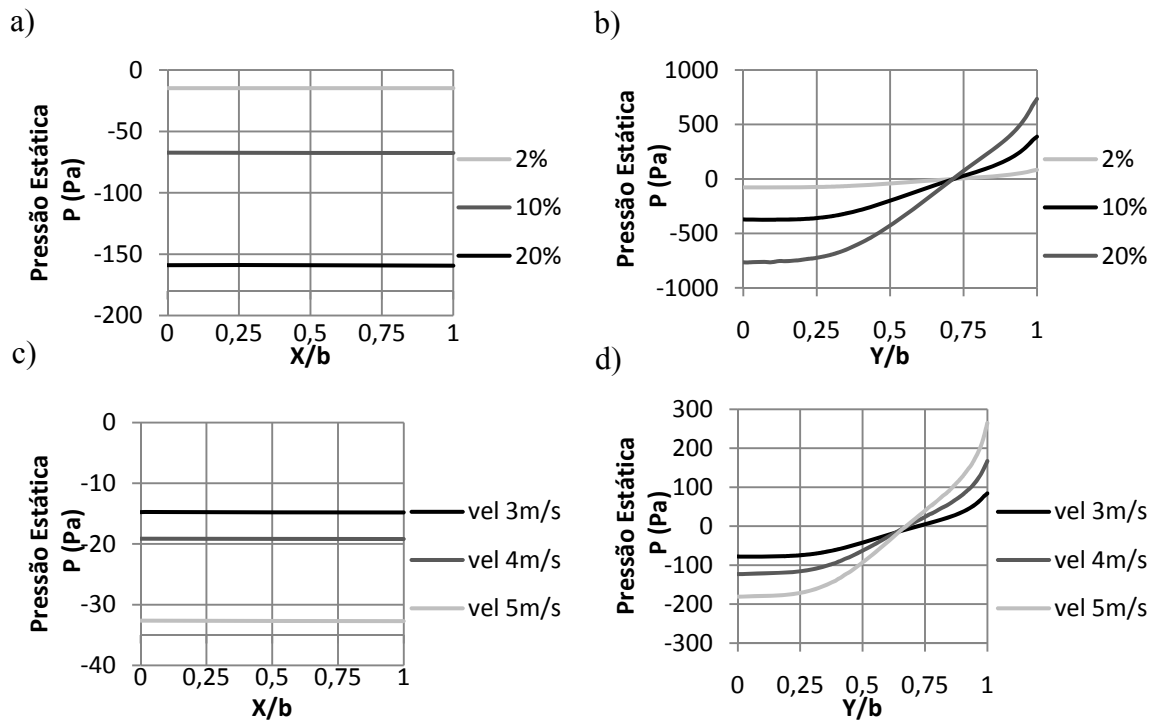


Figura 15 – a) Perfil da pressão estática ao longo da linha \overline{aa} , com diversos valores de fracção volúmica de gotículas (2%, 10% e 20%); b) Perfil da pressão estática ao longo da linha \overline{bb} , com diversos valores de fracção volúmica de gotículas (2%, 10% e 20%); c) Perfil da pressão estática ao longo da linha \overline{aa} , com diversos valores de velocidade de gotículas e do ar (3m/s, 4m/s e 5m/s); d) Perfil da pressão estática ao longo da linha \overline{bb} , com diversos valores de velocidade de gotículas e do ar (3m/s, 4m/s e 5m/s)

Na Figura 15a e na Figura 15c, verifica-se que com o aumento da fracção volúmica de gotículas, da velocidade do ar e da velocidade das gotículas, ocorre um aumento da pressão estática ao longo da linha \overline{aa} . Observa-se na Figura 15b e na Figura 15d, que ao longo da linha \overline{bb} ocorre um aumento da sub-pressão na zona do vórtice (Figura 12). Na fronteira entre o vórtice e o escoamento de gotículas com ar, verifica-se um ponto em que a pressão estática se anula. Com o aumento da velocidade e da fracção volúmica ocorre um aumento da pressão estática.

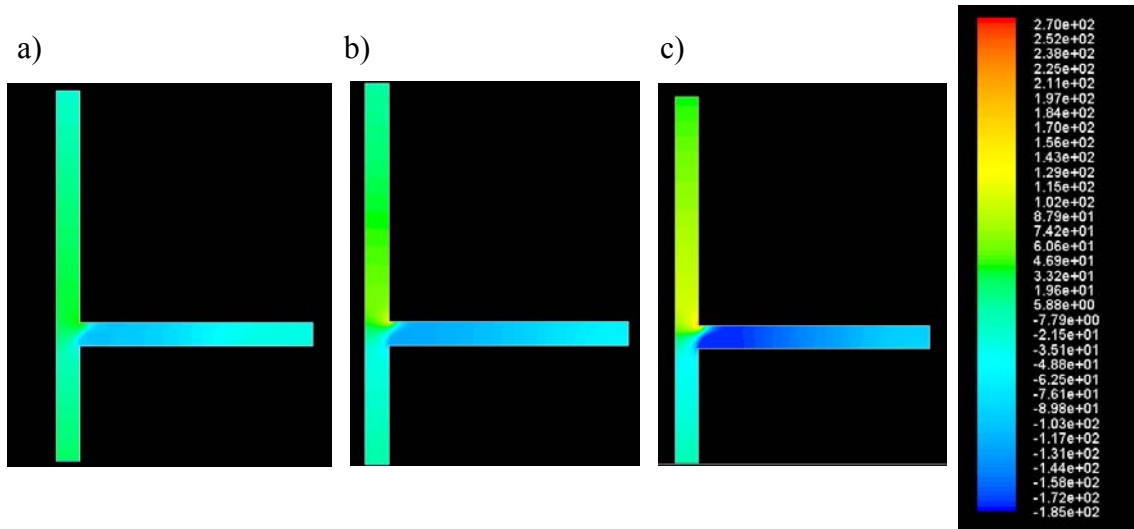


Figura 16 – Valores da pressão estática ao longo do domínio do escoamento para diversos valores de velocidade do ar e das gotículas: a) $U_{ar} = 3$ m/s, $U_{got} = 3,07$ m/s, fracção volúmica de gotículas de 2%; b) $U_{ar} = 4$ m/s, $U_{got} = 4,07$ m/s, fracção volúmica de gotículas de 2%; c) $U_{ar} = 5$ m/s, $U_{got} = 5,07$ m/s, fracção volúmica de gotículas de 2%;

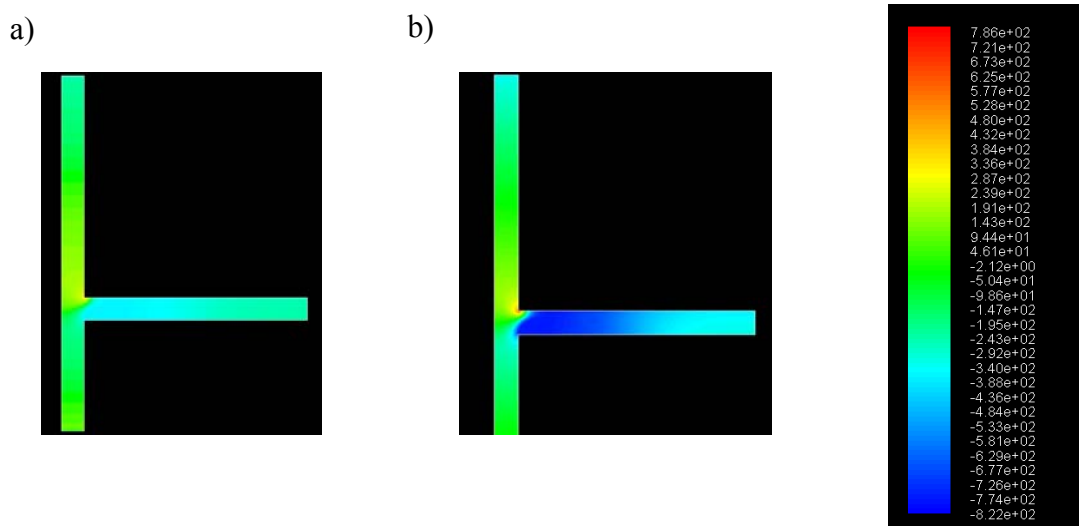


Figura 17 – Valores da pressão estática ao longo do domínio do escoamento para diversos valores de fracção volúmica de gotículas: a) 10%; b) 20%;

Através da Figura 16, verifica-se que com o aumento da velocidade do ar e das gotículas ocorre um aumento dos valores da sub-pressão na conduta horizontal e um aumento dos valores da pressão estática na conduta vertical. Já na Figura 17, constata-se que com o aumento da fracção volúmica ocorre um aumento significativo dos valores da sub-pressão na conduta horizontal. Na conduta vertical, após a intercepção com a conduta horizontal, os valores da pressão estática mantêm-se aproximadamente constantes, com o aumento da fracção volúmica.

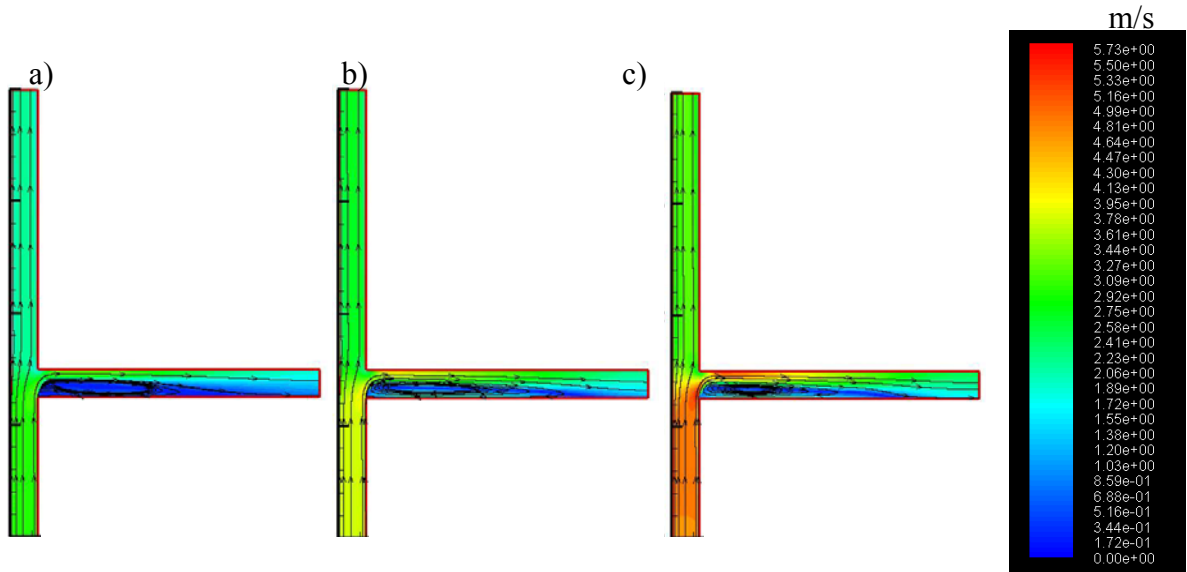


Figura 18 - Valores das velocidades das gotículas ao longo do domínio do escoamento para diversos valores de velocidade do ar e das gotículas: a) $U_{ar} = 3$ m/s, $U_{got} = 3,07$ m/s, fracção volúmica de gotículas de 2%; b) $U_{ar} = 4$ m/s, $U_{got} = 4,07$ m/s, fracção volúmica de gotículas de 2%; c) $U_{ar} = 5$ m/s, $U_{got} = 5,07$ m/s, fracção volúmica de gotículas de 2%;

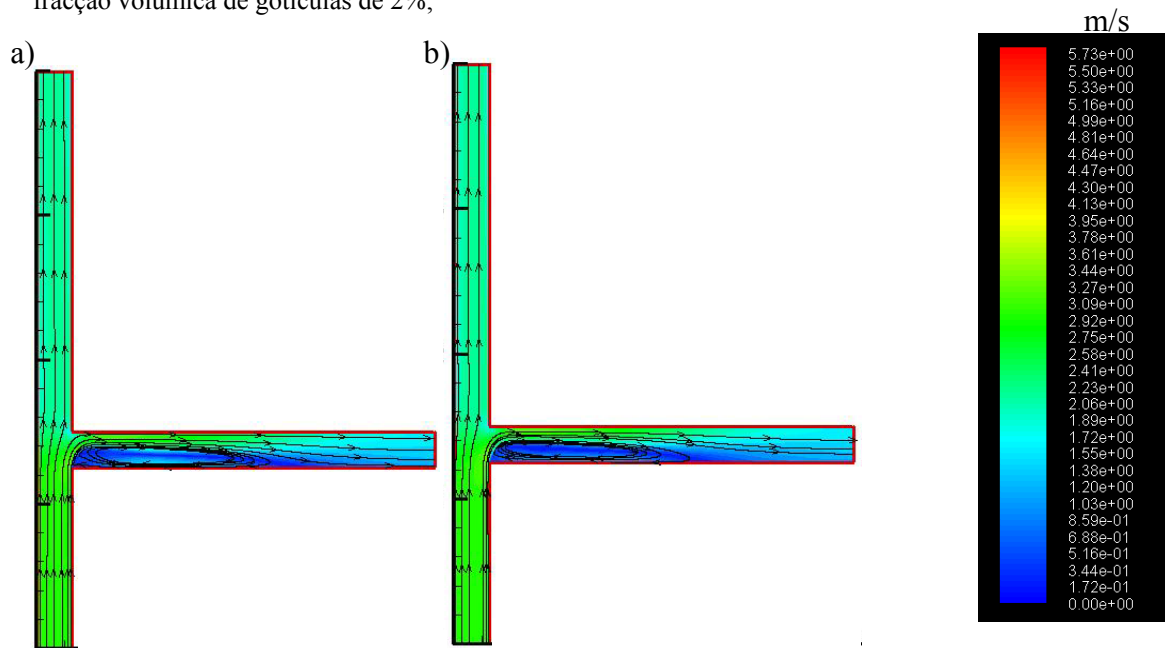


Figura 19 - Valores das velocidades das gotículas ao longo do domínio do escoamento para diversos valores de fracção volúmica de gotículas: a) 10%; b) 20%;

No que diz respeito à velocidade das gotículas, pode-se observar que os campos de velocidade (Figura 18 e Figura 19) mantêm-se constantes com o aumento da velocidade e da fracção volúmica das gotículas.

Este estudo paramétrico permite verificar que o modelo está bem implementado, pois através das variações efectuadas quer a nível da velocidade quer da fracção volúmica de gotículas, foram obtidos os resultados esperados, traduzindo a realidade física do escoamento.

3.6. Estudo das geometrias

Ao longo do estudo foram desenvolvidas várias geometrias para a análise da dispersão espacial das gotículas. A geometria I (Figura 20) tem a entrada 1 no seu topo, em que se introduz apenas ar e a entrada 2, no topo do cilindro (representando o atomizador), em que se introduz ar e gotículas. A saída encontra-se na parte inferior da geometria.

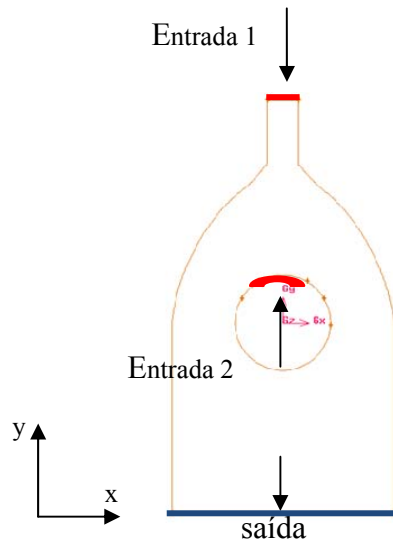


Figura 20 – Geometria I

A geometria II (Figura 21a) consiste na representação em 2D de uma conduta rectangular com um escoamento de ar contínuo, introduzindo-se ar e gotículas na entrada 2. A entrada 2 abrange a totalidade da curva interior da conduta (representando parcialmente o atomizador). A geometria III (Figura 21b) é praticamente idêntica à II, com excepção da dimensão da entrada 2. Enquanto que na geometria II a entrada abrange todo o quadrante superior direito do atomizador, na geometria III a entrada começa quando a curva já perfez um ângulo de 20° com a vertical.

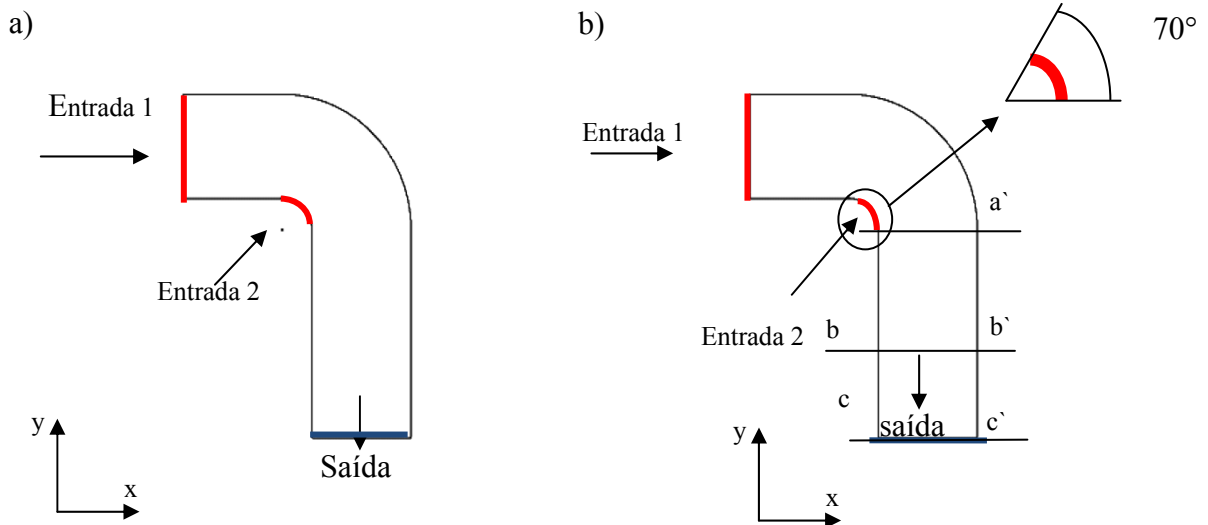


Figura 21 – a) Geometria II; b) Geometria III

A geometria IV (Figura 22a) foi realizada com o objectivo de verificar se o escoamento não seria afectado pela condição de fronteira imposta à saída. Para isso procedeu-se a uma extensão e alargamento na zona final da conduta. A geometria V (Figura 22b), foi obtida a partir da geometria IV. Enquanto na geometria IV a saída do escoamento só ocorre na parte inferior da conduta, na geometria V a saída do escoamento efectua-se também pelas fronteiras laterais da extensão. O objectivo da geometria V é o mesmo que o da geometria IV.

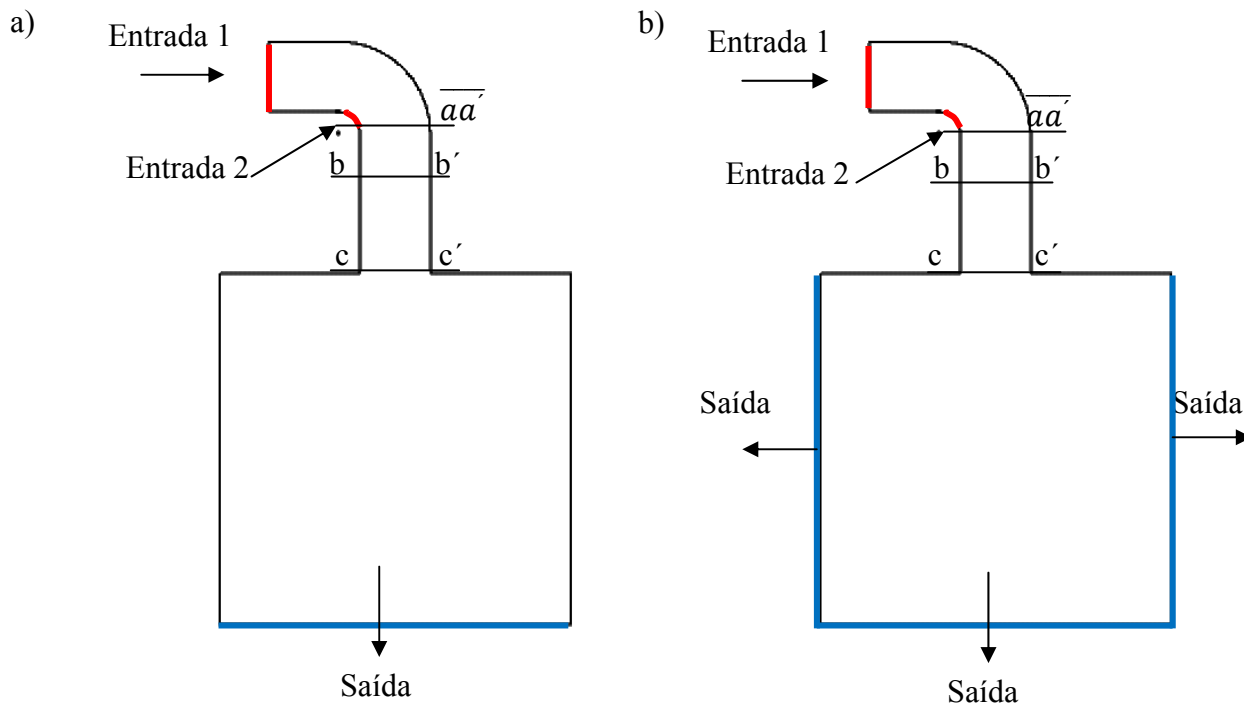
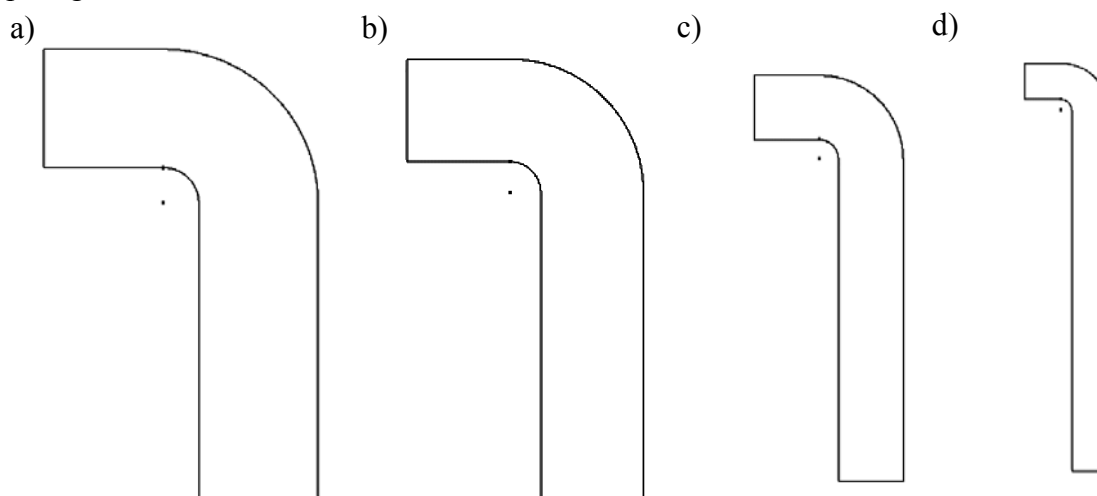


Figura 22 - a) Geometria IV; b) Geometria V

Posteriormente, realizou-se um estudo sobre a influência da conduta vertical, sobre a dispersão espacial das gotículas. Para isso foram utilizadas mais quatro geometrias (VI, VII, VIII e IX; Figura 23), aumentando o comprimento da conduta vertical de geometria para geometria.



Com o objectivo de conhecer a distância necessária entre as entradas de gotículas (ao longo do atomizador) para se conseguir obter no final da conduta uma dispersão das

Figura 23 – a) Geometria VI; b) Geometria VII; c) Geometria VIII; d) Geometria IX

gotículas homogénea, foi construída uma geometria em 3D. A geometria consiste numa conduta com as dimensões da geometria III, mas com uma profundidade de 1 cm. A entrada 2 foi alterada como se pode visualizar na Figura 25. A entrada tem uma largura de 4 mm e perfaz um ângulo de 70° com a horizontal. As paredes laterais da conduta foram consideradas planos de simetria.

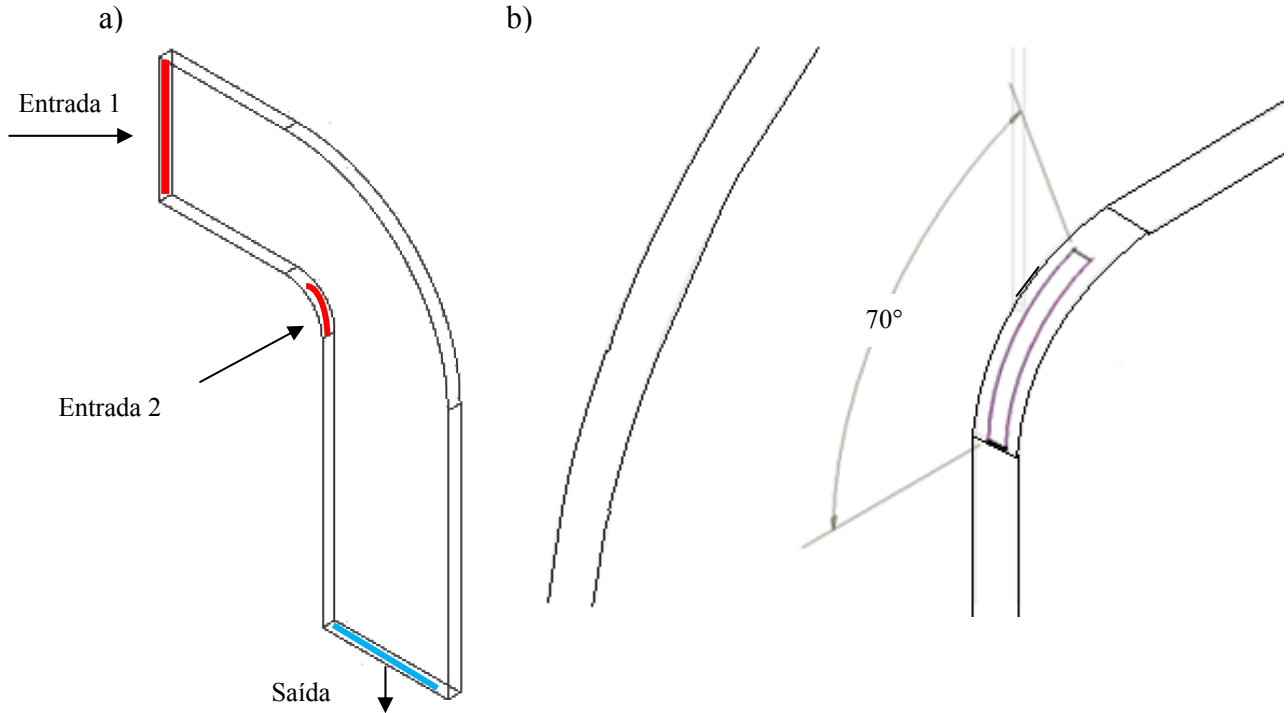


Figura 24 – a) Geometria X, escala em mm; b) Zoom da entrada 2

Foi inserido na geometria X, uma conduta circular com 2 mm de diâmetro (que liberta o líquido a atomizar), de forma a verificar qual o efeito desta sobre o escoamento e dispersão das gotículas, obtendo-se a geometria XI (Figura 25).

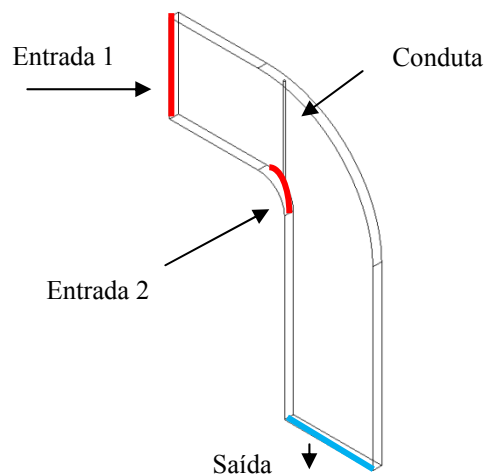


Figura 25 – Geometria XI

3.7. Construção das grelhas das geometrias

As grelhas das geometrias I e II (III) foram construídas no programa Gambit, com um intervalo entre cada célula de 0,5 mm. Em linha com o exigido nos testes de grelha para a geometria do tutorial, garantiu-se que as grelhas I e II (III) têm assimetria¹² inferior a 0,90 como recomendado no manual do Fluent (Ansys 2009). Os testes de grelha relativos às geometrias I e II (III) podem ser encontrados nos Anexos C e D, respectivamente.

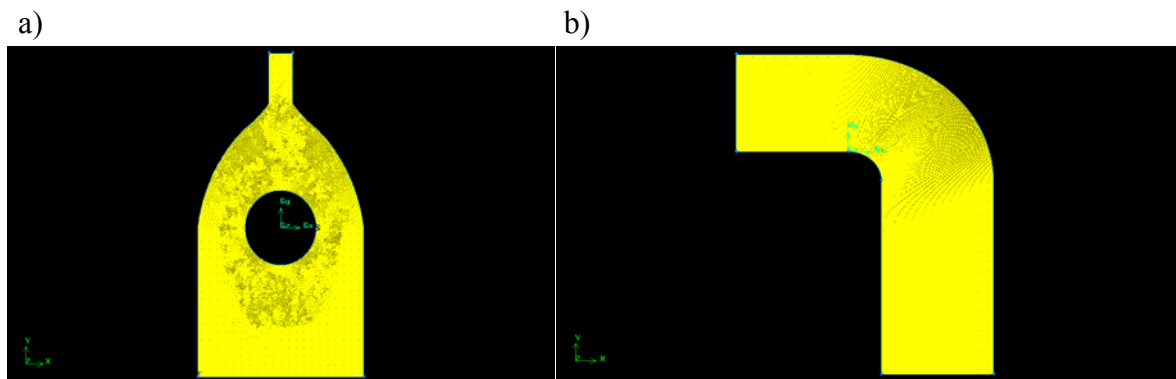


Figura 26 - Grelhas criadas no Gambit a) Geometria I b) Geometria II e III

Para a geometria IV (V), foi utilizada o mesmo intervalo entre cada célula da grelha da geometria II (III), acrescentando apenas na zona inferior da conduta uma zona de transição com um espaçamento da primeira linha 0,5 mm e com um factor de crescimento de 1,2. Após a zona de transição, introduziu-se uma malha com um intervalo entre cada célula de 4 mm. Tal como nas geometrias anteriores, foi garantida assimetria inferior a 0,90.

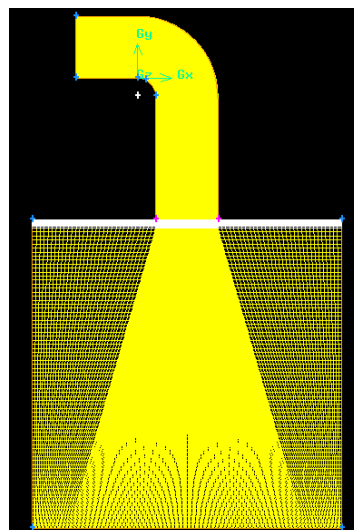


Figura 27 – Grelha da Geometria IV e V

A geometria X e XI foi dividida em 3 volumes no programa Gambit, sendo que o primeiro volume é a porção horizontal da conduta, o segundo volume é a curva da conduta

¹² Qualidade = 0 (alta qualidade); qualidade = 1 (elementos da grelha com muito baixa qualidade)

e o terceiro volume é a parte vertical da conduta. Para o primeiro e o terceiro volumes escolheu-se uma malha hexagonal com um intervalo entre cada célula de 1 mm. No segundo volume foi escolhida uma malha tetraédrica/híbrida com um intervalo entre cada célula de 1 mm. Foi garantido que a assimetria da malha fosse inferior a 0,90 como recomendado no manual do Fluent. Efectuaram-se testes de grelha à geometria, que se podem visualizar no Anexo F.

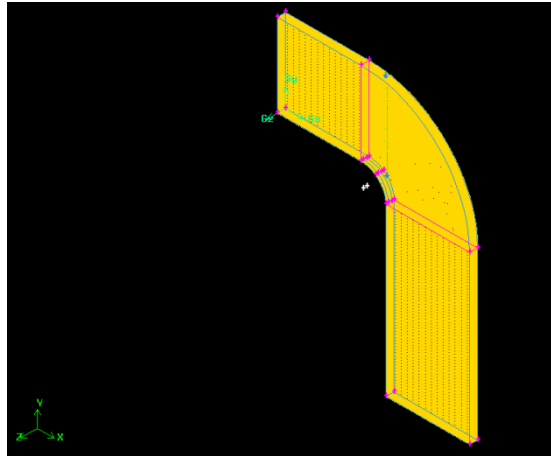


Figura 28 - Grelha da geometria 3D

3.8. Configuração das simulações para as geometrias em estudo

Como referido na secção 3.4., a configuração deste modelo teve por base o tutorial descrito na documentação do Fluent. No entanto, foi necessário realizar algumas alterações. A primeira alteração consistiu na utilização da dupla precisão na resolução de equações, de forma a diminuir o erro do balanço de massa de gotículas, visto que, com a precisão simples, tal não foi conseguido. As opções do *Solver*, da turbulência e as condições de operação foram mantidas.

Enquanto no modelo anterior se começou por utilizar o modelo Mistura para obter uma solução inicial, nestas geometrias tal não foi possível. Uma das razões é que o modelo mistura só é capaz de resolver escoamentos multi-fásicos se a fase contínua e a fase dispersa mantiverem sempre o mesmo sentido ao longo do escoamento (Ansys 2009). Por essa razão, o modelo euleriano foi utilizado desde o início das simulações, o que implicou um maior custo computacional. Um procedimento aconselhado pelo manual do Fluent, para diminuir o custo computacional, é resolver, numa primeira fase, o escoamento relativo à fase contínua, e só depois de obter a solução inicial para esse escoamento, resolver as equações relativas à fase dispersa. Para isso, antes de se dar início à resolução do escoamento, desactivou-se a equação relativa ao Fracção Volumica¹³ nas opções do *solver*. Depois de se obter a solução para o escoamento da fase contínua, activou-se a Fracção

¹³ Solve -> Controls -> Solution -> Equations -> Volume Fraction

Volúmica, obtendo-se assim a solução para todo o escoamento (englobando a fase dispersa e contínua).

Os factores de relaxamento (ver Tabela 4) foram diminuídos para facilitar a convergência das simulações. Definiu-se o valor de 0,8 para quase todos os parâmetros (aconselhado para escoamentos multi-fásicos, Ansys 2009).

Tabela 4 - Factores de Relaxamento

Factores de Relaxamento	
Pressão	0,4
Densidade	0,8
Forças de massa	0,8
Quantidade de Movimento	0,6
Fracção Volúmica	0,2
Energia Cinética Turbulenta	0,8
Taxa de dissipação de Turbulência	0,8
Viscosidade de Turbulência	0,8

Tal como na simulação referente ao tutorial, utilizou-se ar (fase contínua) e água (fase dispersa) como materiais desta simulação. O diâmetro das gotículas de água foi calculado através das equações 1 e 3 tendo-se obtido 59 μm . Os factores referidos anteriormente, são comuns a todas as geometrias. As condições de fronteira para as geometrias 2D têm elementos comuns que podem ser vistos na Tabela 5. As restantes condições de fronteira, específicas de cada simulação, são apresentadas na Tabela 6. As condições de fronteira da geometria 3D podem ser visualizadas na Tabela 7.

De referir que todas as simulações, com excepção à simulação efectuada com a geometria X, foram realizadas em regime estacionário. A simulação em que se utilizou a geometria X, foi realizada num regime transiente com um *time step* de 0,001s, de forma a garantir um número de *Courant* de 0,25.

Estudo numérico da dispersão de aerossóis produzidos por ultra-sons

Tabela 5 - Condições de fronteira comuns às geometrias em 2D

Zona	Condição de Fronteira	Mistura	Ar	Gotículas
Entrada 1	Velocidade de entrada	Método Específico – Intensidade e Diâmetro Hidráulico	<i>Momentum</i>	<i>Momentum</i>
			Método específico de velocidade - Magnitude, Normal à condição de fronteira	Método específico de velocidade - Magnitude, Normal à condição de fronteira
			Quadro de referência – Absoluto	Quadro de referência – Absoluto
				<i>Multifásico</i> Fracção Volúmica
Entrada 2	Velocidade de entrada	Método Específico – Intensidade e Escala característica de comprimento	<i>Momentum</i>	<i>Momentum</i>
			Método específico de velocidade - Magnitude, Normal à condição de fronteira	Método específico de velocidade - Magnitude, Normal à condição de fronteira
			Quadro de referência – Absoluto	Quadro de referência – Absoluto
				<i>Multifásico</i> Fracção Volúmica
Saída	Velocidade de entrada	<i>Pressão relativa</i> – 0		
		<i>Método específico da direcção a recirculação</i> – Normal à condição de fronteira		
		Método Específico – Intensidade e Diâmetro Hidráulico		
Paredes	Parede	Movimento da parede – Parede estacionária Condições de corte – não escorregamento		

Estudo numérico da dispersão de aerossóis produzidos por ultra-sons

Tabela 6 - Condições de Fronteira para cada geometria em 2D

	Entrada 1	Entrada 2	Saída
Geometria I	caso 1: $U_{ar} = 0,5 \text{ m/s}$ Intensidade de Turbulência ¹⁴ = 1% Diâmetro Hidráulico ¹⁵ = 0,039 m	$U_{ar} = 0,01 \text{ m/s}$ $U_{got} = 0,5 \text{ m/s}$ Intensidade de Turbulência = 6% Escala característica de comprimento = 0,015 m Fracção Volúmica = 2%	Intensidade de Turbulência = 5% Diâmetro Hidráulico = 0,24 m
	caso 2: $U_{ar} = 0,5 \text{ m/s}$ Intensidade de Turbulência = 1% Diâmetro Hidráulico = 0,039 m	$U_{ar} = 0,5 \text{ m/s}$ $U_{got} = 0,5 \text{ m/s}$ Intensidade de Turbulência = 6% Escala característica de comprimento = 0,015 m Fracção Volúmica = 50%	Intensidade de Turbulência = 5% Diâmetro Hidráulico = 0,24 m
Geometria II	caso 1: $U_{ar} = 0,5 \text{ m/s}$ Intensidade de Turbulência = 6% Diâmetro Hidráulico = 0,1818 m	$U_{ar} = 0,5 \text{ m/s}$ $U_{got} = 0,5 \text{ m/s}$ Intensidade de Turbulência = 6% Escala característica de comprimento = 0,047 m Fracção Volúmica = 50%	Intensidade de Turbulência = 6% Diâmetro Hidráulico = 0,1818 m
Geometria III e IV	caso 1: $U_{ar} = 0,5 \text{ m/s}$ Intensidade de Turbulência = 6% Diâmetro Hidráulico = 0,1818 m	$U_{ar} = 0,01 \text{ m/s}$ $U_{got} = 0,5 \text{ m/s}$ Intensidade de Turbulência = 6% Escala característica de comprimento = 0,036 m Fracção Volúmica = 2%	Intensidade de Turbulência = 6% Diâmetro Hidráulico = 0,1818 m
	caso 2: $U_{ar} = 0,5 \text{ m/s}$ Intensidade de Turbulência = 6% Diâmetro Hidráulico = 0,1818 m	$U_{ar} = 0,01 \text{ m/s}$ $U_{got} = 0,5 \text{ m/s}$ Intensidade de Turbulência = 6% Escala característica de comprimento = 0,036m Fracção Volúmica = 25%	Intensidade de Turbulência = 6% Diâmetro Hidráulico = 0,1818 m
	caso 3: $U_{ar} = 0,5 \text{ m/s}$ Intensidade de Turbulência = 6% Diâmetro Hidráulico = 0,1818 m	$U_{ar} = 0,01 \text{ m/s}$ $U_{got} = 0,5 \text{ m/s}$ Intensidade de Turbulência = 6% Escala característica de comprimento = 0,036m Fracção Volúmica = 50%	Intensidade de Turbulência = 6% Diâmetro Hidráulico r = 0,1818 m
	caso 4: $U_{ar} = 0,2 \text{ m/s}$ Intensidade de Turbulência = 6% Diâmetro Hidráulico = 0,1818 m	$U_{ar} = 0,01 \text{ m/s}$ $U_{got} = 0,5 \text{ m/s}$ Intensidade de Turbulência = 6% Escala característica de comprimento = 0,036m Fracção Volúmica = 50%	Intensidade de Turbulência = 6% Diâmetro Hidráulico = 0,1818 m
	caso 5: $U_{ar} = 0,75 \text{ m/s}$ Intensidade de Turbulência = 6% Diâmetro Hidráulico = 0,1818 m	$U_{ar} = 0,01 \text{ m/s}$ $U_{got} = 0,5 \text{ m/s}$ Intensidade de Turbulência = 6% Escala característica de comprimento = 0,036m Fracção Volúmica = 50%	Intensidade de Turbulência = 6% Diâmetro Hidráulico = 0,1818 m

$$^{14} I_t = 0,16 \times Re \left(\frac{1}{8} \right)$$

$$^{15} D_h = \frac{4A}{P} \quad A - \text{Área}; P - \text{Perímetro}$$

Estudo numérico da dispersão de aerossóis produzidos por ultra-sons

Tabela 7 - Condições de Fronteira para a geometria X e XI

Zona	Condição de Fronteira	Mistura	Ar	Gotículas
Entrada 1	Velocidade de entrada	Método Específico – Intensidade de turbulência = 6% Diâmetro hidráulico = 0,1818 m	Momentum $U_{ar} = 0,5$ m/s Método específico de velocidade - Magnitude, Normal à condição de fronteira Quadro de referência – Absoluto	Momentum Método específico de velocidade - Magnitude, Normal à condição de fronteira Quadro de referência – Absoluto Multifásico Fracção Volúmica
	Velocidade de entrada	Método Específico – Intensidade de turbulência = 6% Comprimento de vórtice = 0,036 m	Momentum $U_{ar} = 0,01$ m/s Método específico de velocidade - Magnitude, Normal à condição de fronteira Quadro de referência – Absoluto	Momentum $U_{got} = 0,5$ m/s Método específico de velocidade - Magnitude, Normal à condição de fronteira Quadro de referência – Absoluto Multifásico Fracção Volúmica = 50%
Saída	Pressão à saída	Pressão Relativa – 0 Método específico da direcção a recirculação – Normal à condição de fronteira Método Específico – Intensidade de turbulência = 6% Diâmetro hidráulico = 0,1818 m		
Paredes	Parede	Movimento da parede – Parede estacionária Condições de corte – não escorregamento		
Simetria	Simetria			

4. Apresentação e Discussão de Resultados

4.1. Geometria 2D

Após a realização das simulações, analisaram-se os resultados de vários parâmetros: pressão total, pressão estática, velocidade das gotículas, velocidade do ar e fracção volúmica de gotículas.

A primeira simulação foi efectuada com base na geometria I. Tal como estabelecido, um dos critérios de convergência exige que todas as equações tenham resíduos inferiores a 10^{-5} . Através da Figura 29a pode confirmar-se que este critério não foi alcançado. Apesar disso, o erro do balanço de massa (Figura 29b) era inferior ao erro máximo definido no critério de convergência respectivo (0,1%). Assim, o balanço verifica-se, mas a solução poderá estar totalmente errada.

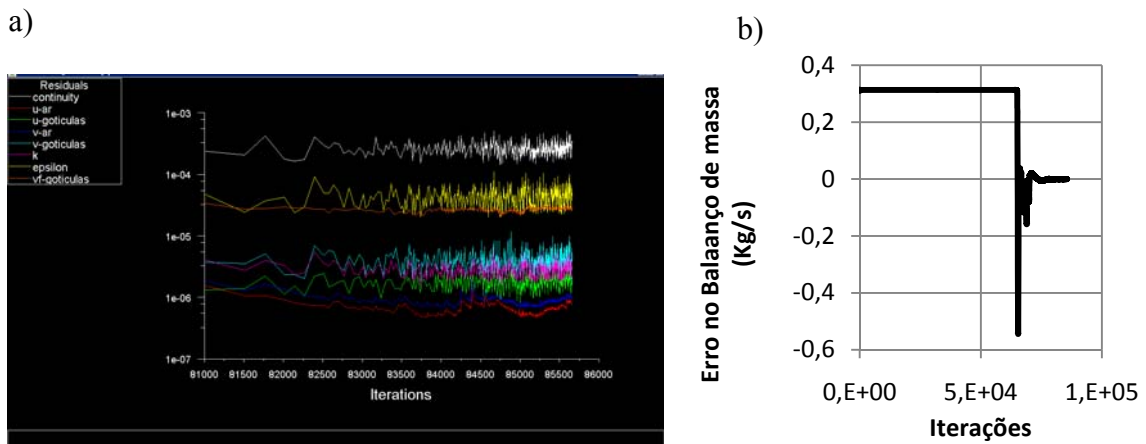


Figura 29 – a) Valor dos Resíduos da Geometria I; b) Erro no balanço de massa entre entradas e saída

Esta geometria foi abandonada uma vez que os resíduos apresentavam uma variação oscilante cíclica, o que poderá estar relacionada com o facto de a geometria em causa poder dar origem a escoamentos pulsantes, devido à libertação alternada de vórtices junto às extremidades do obstáculo ao escoamento. Refira-se que se fosse esse o caso, poder-se-ia fazer simulações em estado transiente que, no entanto, acarretariam um aumento dramático do custo computacional associado ao trabalho. Por esta razão, optou-se por abandonar a geometria I. Com a geometria II, os critérios de convergência nunca foram atingidos. Após a análise dos isolinhas, imediatamente antes dos resíduos escalarem, visualiza-se a formação de uma película de filme de água a montante da entrada 2. Presume-se que é devido a esse facto que a convergência não ocorre (uma vez que a condição de fronteira na entrada 1 deixa de ser cumprida).

Com o objectivo de evitar os problemas de convergência referidos anteriormente, decidiu-se diminuir o ângulo da entrada 2 em 20° relativamente à vertical, obtendo-se assim a geometria III (Figura 21b). Após esta alteração, as dificuldades de convergência diminuíram consideravelmente. A Figura 30 apresenta os resultados de simulação obtidos para valores crescentes de fracção volúmica de gotículas na entrada 2.

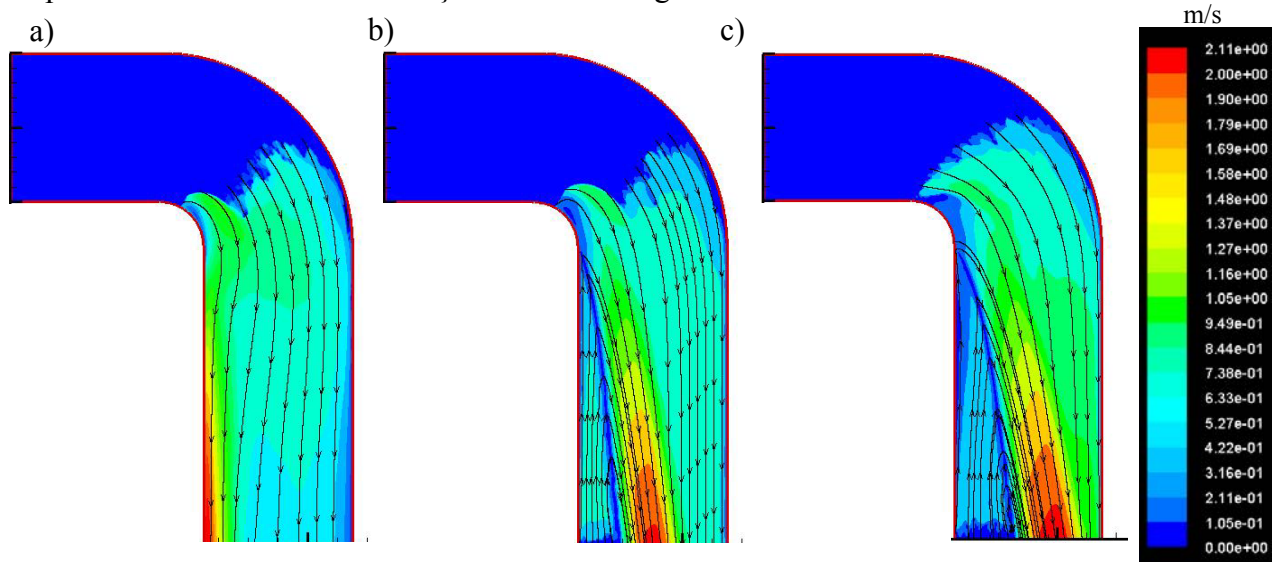


Figura 30 - a) Velocidade das gotículas ao longo do domínio do escoamento, para diversos valores de fracções volúmicas na entrada 2; a) 2%; b) 25%; c) 50%

Através da Figura 30 pode concluir-se que, ao longo da conduta, ocorre uma aceleração das gotículas devido ao efeito da gravidade, atingindo-se a velocidade máxima de 2,11 m/s à saída da conduta, para 50% de fracção volúmica de gotículas. Para uma fracção volúmica de 2% (Figura 30a), a velocidade das gotículas aumenta apenas junto à parede contígua à entrada, onde é visível o jacto das gotículas (Figura 31a). Na zona em que as gotículas estão mais dispersas, a velocidade das gotículas mantém-se próxima de 0,5 m/s. É visível nas Figura 30b e Figura 30c a ocorrência de uma recirculação, à esquerda do jacto de gotículas. Para verificar se essa recirculação é de facto uma realidade física do escoamento ou se se deve à proximidade da fronteira de domínio, foram feitos novos testes com a geometria IV, que serão discutidos posteriormente. É ainda possível observar na Figura 30 a presença de gotículas em toda a conduta a jusante da entrada, o que não era possível na Figura 31, devido à escala usada na representação.

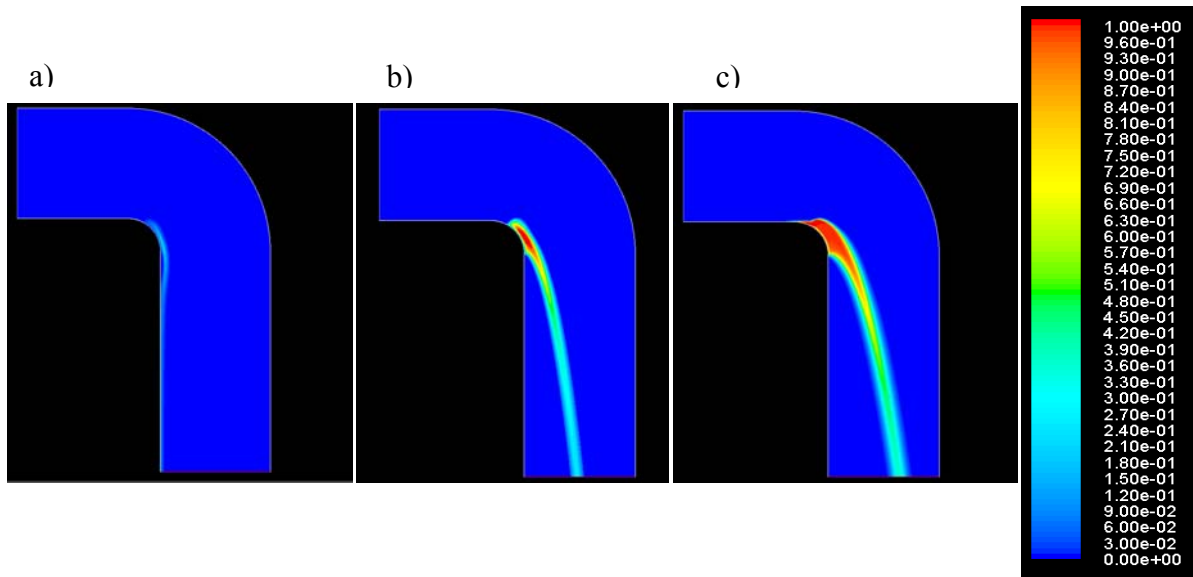


Figura 31 -a) Fração volúmica de gotículas ao longo do domínio para diversos valores de fracção de gotículas na entrada 2: a) 2%, b) 25% e c) 50%

Pode-se observar através da Figura 31 que com o aumento da fracção volúmica de gotículas, o escoamento distancia-se da parede (onde se encontra a entrada 2). Esse afastamento deve-se ao aumento do caudal efectivo de líquido, devido ao aumento de fracção volúmica de gotículas. Com fracção volúmica de gotículas de 2%, a dispersão da fase dispersa tem lugar ao longo da parede (Figura 31a). Pode-se constatar que existe uma acumulação de gotículas junto à entrada 2, na simulação com fracção volúmica de gotículas de 25% (Figura 31b). Com 50%, esse acumular de fase dispersa origina uma película de filme a montante da entrada 2 (Figura 31c). A jusante da acumulação de gotículas há uma diminuição global da fracção volúmica de fase dispersa, resultando mesmo assim num valor de fracção volúmica de gotículas superior ao que é introduzido na entrada 2. Na simulação em que existe introdução de uma corrente com fracção volúmica de gotículas de 25%, verifica-se o oposto, sendo o valor de saída inferior ao de entrada (Figura 31b). Salienta-se o facto de o modelo utilizado no estudo (modelo Euleriano-Euleriano) não contemplar a coalescência das gotículas, fenómeno que poderá ter lugar para as fracções volúmicas de gotículas maiores, devido à acumulação de gotículas junto à entrada 2.

A Figura 32 apresenta os resultados da velocidade do ar obtidos nas simulações, para valores crescentes de fracção volúmica de gotículas na entrada 2.

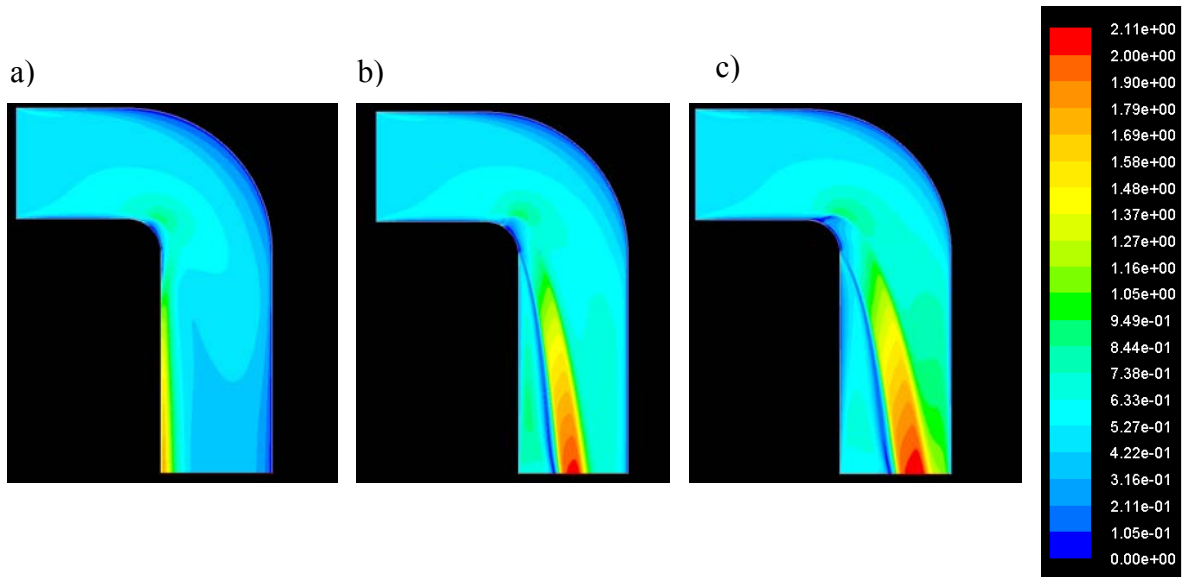


Figura 32 - Velocidade do ar ao longo do domínio do escoamento, para diversos valores de fracções volúmicas na entrada 2; a) 2%; b) 25%; c) 50%

Observa-se na Figura 32 que a velocidade do ar aumenta ao longo da conduta, tal como se verifica com a velocidade das gotículas, obtendo-se uma velocidade máxima de 2,11 m/s para fracção volúmica de gotículas de 25% e 50%. Com fracção volúmica de gotículas de 2%, a velocidade do ar atinge 1,78 m/s à saída. Esse aumento da velocidade só se verifica na presença da fase dispersa, o que indica que as gotículas têm um papel dominante na aceleração dos elementos de fluido em seu redor. Na Figura 32a, verifica-se que a velocidade do ar em torno do jacto de gotículas não atinge os valores observados para as estas. Presume-se que este facto esteja relacionado com a proximidade da parede (em que prevalece a condição de não deslizamento) e com o facto de a fracção volúmica de gotículas ser muito baixa (2%). Como já foi referido, os dados de velocidade do ar (Figura 32b e Figura 32c) mostram uma recirculação entre a parede (à esquerda) e o jacto de gotículas.

A Figura 33 apresenta os resultados de simulação obtidos para valores crescentes da velocidade do ar na entrada 1 (0,2 m/s; 0,5 m/s e 0,75 m/s) e valores constantes dos restantes parâmetros na entrada 2 ($U_{ar} = 0.01$ m/s, $U_{got} = 0,5$ m/s e fracção volúmica de gotículas de 50%).

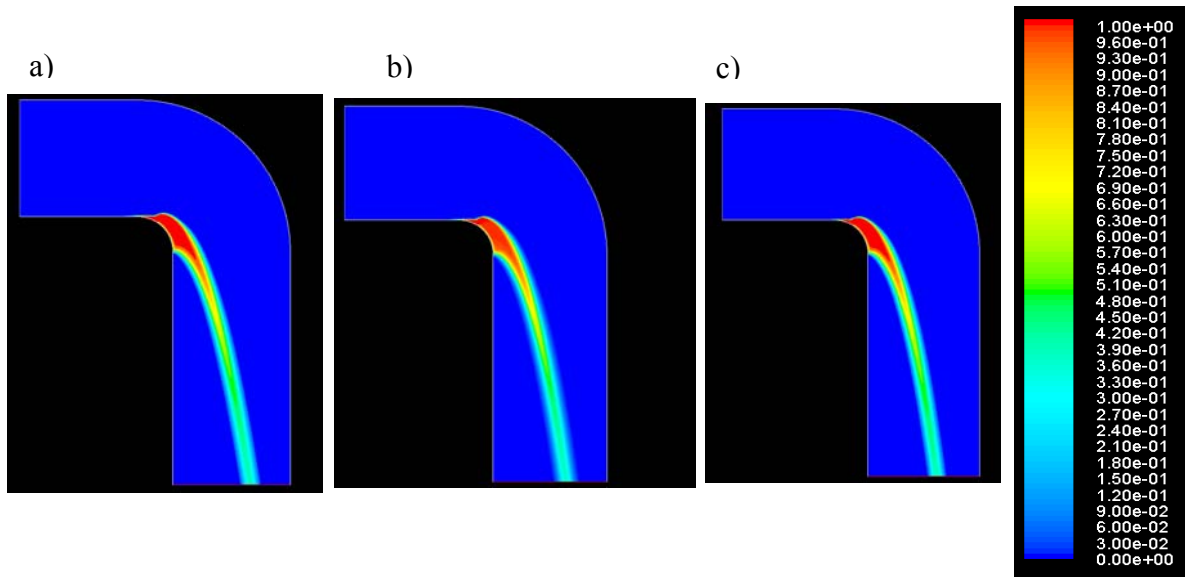


Figura 33 - Fracção volúmica de gotículas, para diferentes velocidades de ar (entrada 1); a) $U_{ar} = 0,2$ m/s; b) $U_{ar} = 0,5$ m/s; c) $U_{ar} = 0,75$ m/s

A análise da Figura 33 permite concluir que o aumento da velocidade do ar na entrada 1 não introduz alterações significativas na distribuição espacial da fracção volúmica de gotículas.

A Figura 34 apresenta os resultados da velocidade das gotículas obtidos nas simulações com valores crescentes da velocidade do ar na entrada 1.

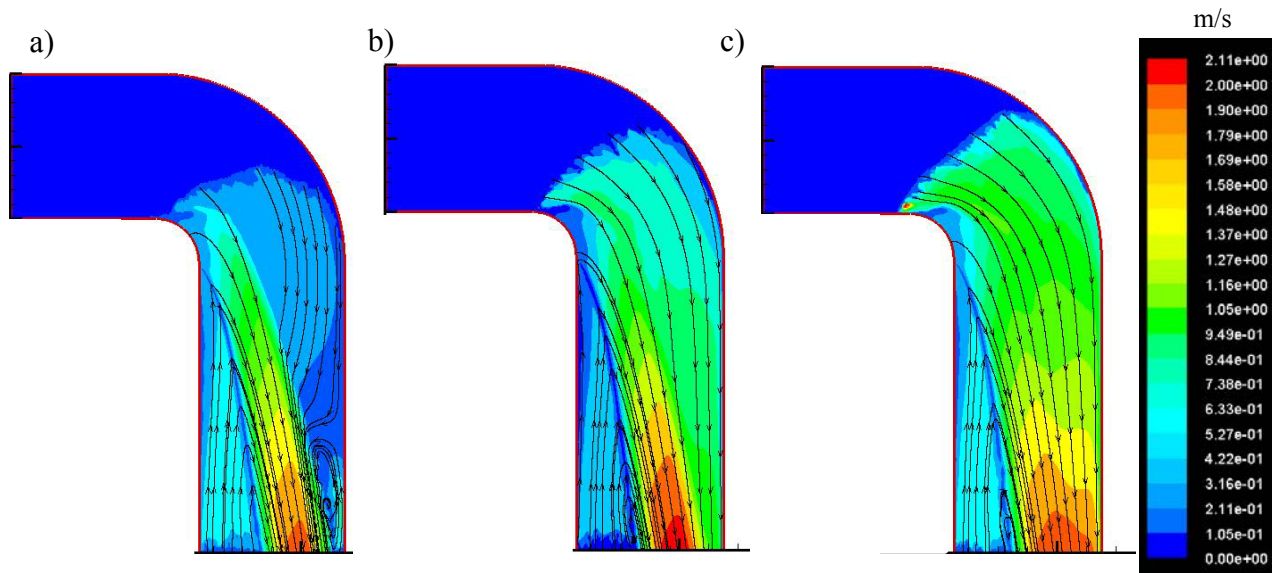


Figura 34 - a) Velocidade das gotículas para diferentes velocidades de ar na entrada 1; a) $U_{ar} = 0,2$ m/s b) $U_{ar} = 0,5$ m/s; c) $U_{ar} = 0,75$ m/s

Através da análise da Figura 34, verifica-se que com o aumento da velocidade do ar na entrada 1, aumenta a área em que as gotículas apresentam uma maior velocidade. Isto ocorre devido ao aumento do caudal de recirculação (à esquerda), com o aumento da velocidade do ar proveniente da entrada 1.

Analisando a Figura 30 e a Figura 34, observa-se que o aumento da velocidade do ar na entrada 1 não influencia a velocidade final das gotículas, visto que este valor é sensivelmente o mesmo para todos casos estudados ($U_{got} = 2,11$ m/s).

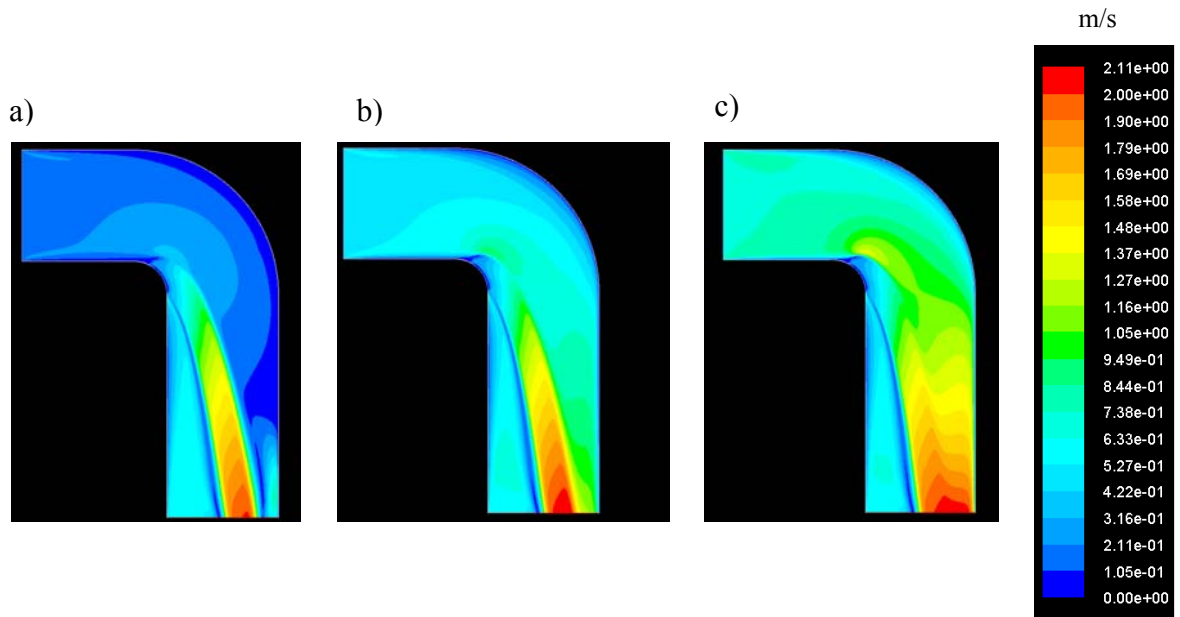


Figura 35 - Velocidade do ar ao longo do domínio do escoamento; a) $U_{ar} = 0,2$ m/s; b) $U_{ar} = 0,5$ m/s; c) $U_{ar} = 0,75$ m/s

Através da análise da Figura 35a, verifica-se que o campo de velocidades do ar, proveniente da entrada 1, é afectado pela corrente introduzida na entrada 2. A montante da entrada 2 ocorre uma aceleração do ar, devido ao facto de a corrente com gotículas funcionar como um obstáculo ao escoamento gasoso. A jusante da entrada 2, o ar que se encontra do lado direito do jacto das gotículas sofre uma aceleração ao entrar em contacto com o jacto, o que leva à formação de uma zona de recirculação no final da conduta (lado direito). Também é possível observar uma recirculação de ar, do lado esquerdo do jacto de gotículas. Este fenómeno será discutido aquando da apresentação dos resultados obtidos com a geometria IV. O ar que está em contacto com o jacto de gotículas sofre uma aceleração até atingir a velocidade das gotículas.

A Figura 35b mostra que, para a velocidade do ar de 0,5m/s, o campo de velocidades também é afectado pelo jacto de gotículas. No entanto, na Figura 35b não é visível uma recirculação à direita do jacto de gotículas, apenas do lado esquerdo. Em ambas as simulações, o ar que contacta com o jacto de gotículas acelera até atingir a velocidade destas.

Para todas as simulações, o ar atinge a saída uma velocidade de 2,11 m/s.

Para verificar se o escoamento não é afectado pela condição de fronteira imposta à saída, procedeu-se a uma extensão e alargamento na zona final da conduta, obtendo-se assim uma nova geometria (geometria IV). Os resultados obtidos foram comparados com os da geometria III.

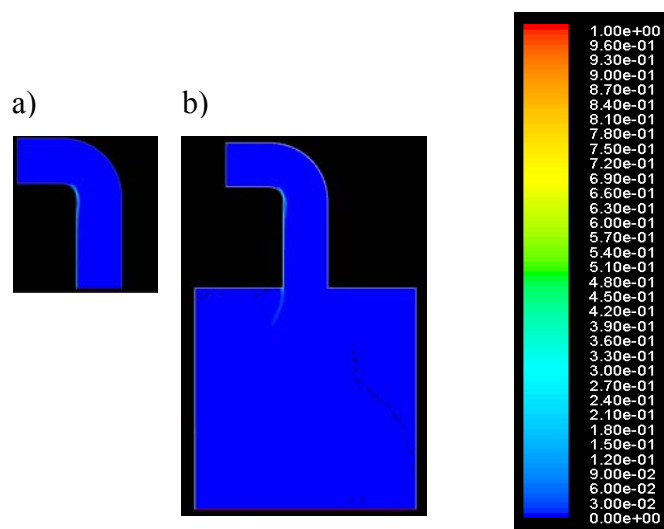


Figura 36 – a) Resultados obtidos na geometria III, para uma fracção volúmica de gotículas com 2% de gotículas na entrada 2; b) Resultados obtidos na geometria IV, para uma fracção volúmica de gotículas com 2% de gotículas na entrada

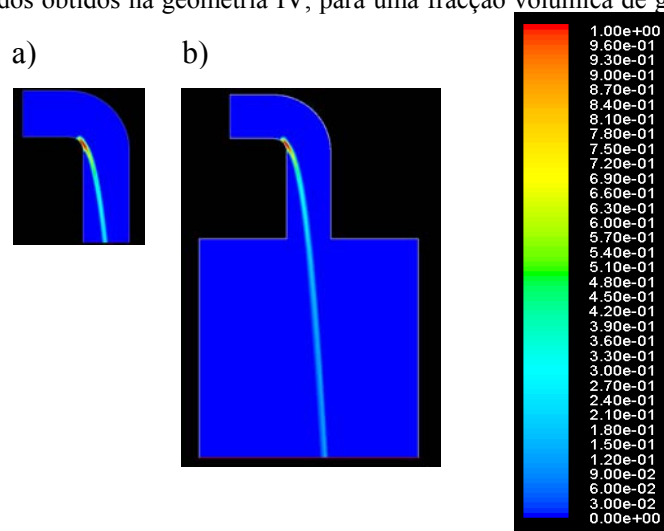


Figura 37 - a) Resultados obtidos na geometria III, para uma fracção volúmica de gotículas com 25% de gotículas na entrada 2; b) Resultados obtidos na geometria IV, para uma fracção volúmica de gotículas com 25% de gotículas na entrada 2

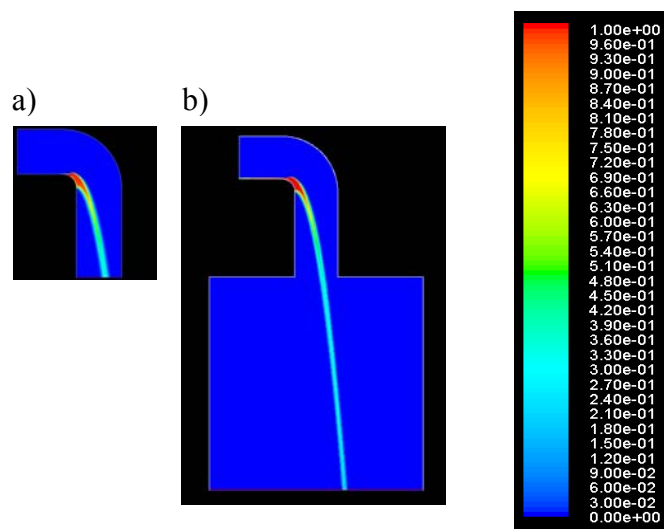


Figura 38 - a) Resultados obtidos na geometria III, para uma fracção volúmica de gotículas com 50% de gotículas na entrada 2; b) Resultados obtidos na geometria IV, para uma fracção volúmica de gotículas com 50% de gotículas na entrada 2

Como se pode visualizar através das Figura 36, Figura 37 e Figura 38, o resultado da fracção volúmica de gotículas é idêntico para as duas geometrias, o que indica que o escoamento resultante da geometria III representa a realidade física do escoamento. Perante os resultados obtidos, seleccionou-se a geometria III como base para a geometria a 3 dimensões (geometria X), o que resultaria num menor custo computacional.

A Figura 39 apresenta os resultados da velocidade das gotículas, obtidos nas simulações, com valores crescentes de fracção volúmica de gotículas na entrada 2.

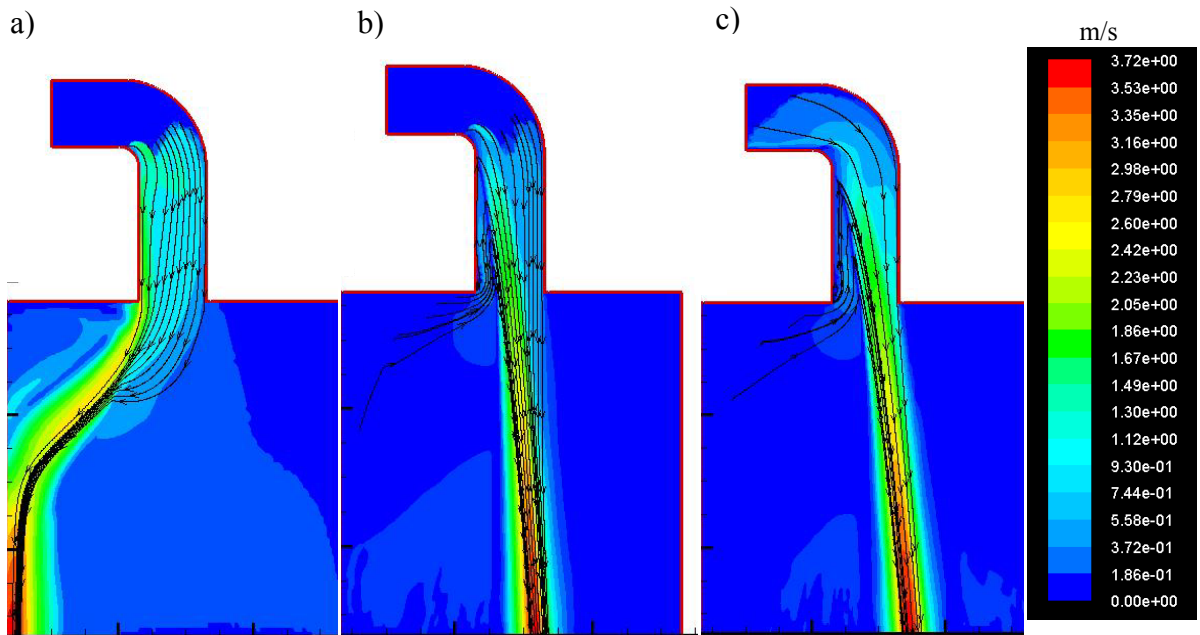


Figura 39 - a) Velocidade das gotículas ao longo do domínio do escoamento, para diversos valores de fracções volúmicas na entrada 2; a) 2%; b) 25%; c) 50%

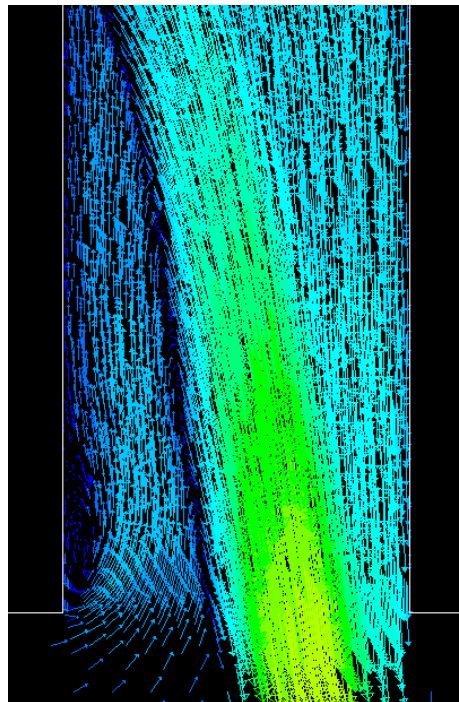


Figura 40 – Zoom da zona do escoamento (Figura 39), em que se verifica a recirculação

Como é visível na Figura 39b e Figura 39c, a recirculação também ocorre para esta geometria (Figura 40). Isto indica que a recirculação é uma realidade física do escoamento, que resulta da conservação de massa (a conservação de massa obriga a que o somatório do caudal de ar que entra no domínio seja igual ao que sai. Como o caudal em torno do jacto à saída é superior ao que se introduz na entrada 1 e 2, para assegurar a conservação de massa, o ar tem que entrar pela zona de saída. Isto ocorre, porque o é acelerado pelas gotículas).

Para verificar se a velocidade das gotículas à saída da geometria IV (Figura 39) estava dentro dos valores esperados, considerou-se as gotículas como um grave, cuja trajectória pode ser descrita através das equações:

$$y = y_0 + U_{0y}t + \frac{1}{2}gt^2 \quad (24)$$

$$U_y = U_{0y} + gt \quad (25)$$

Através das equações anteriores, obteve-se um valor para a velocidade à saída da conduta de 3,77 m/s, o que difere dos valores obtidos na simulação em menos de 1,3%. O facto de a força gravítica ser responsável por cerca de 99% da velocidade máxima das gotículas, levou a que se questionasse a correcção da implementação do efeito da força de arrasto sobre o movimento das gotículas. Para confirmar a existência do efeito da força de arrasto, foi realizada uma simulação em que se mantiveram as condições de entrada e saída iguais às do caso 2 (ver tabela 6), e reduziu-se o diâmetro das gotículas 10 vezes (de $5,9 \times 10^{-5}$ m para $5,9 \times 10^{-6}$ m). Sabendo que a força de arrasto varia com D^2 e a força gravítica com D^3 , ao efectuar o decréscimo no diâmetro das gotículas, aumenta-se a relevância da força de arrasto em relação à força gravítica (ao diminuir-se 10 vezes o diâmetro das gotículas, diminui-se a força de arrasto 100 vezes e a força gravítica 1000 vezes). A Figura 41 apresenta os resultados destas simulações. Como se pode verificar, a trajectória das gotículas é completamente diferente na simulação com gotículas mais pequenas. De facto, nesta simulação o jacto de gotículas desce ao longo da parede, o que indica que a força de arrasto tem um papel dominante na alteração da trajectória das gotículas, imediatamente após a sua entrada no domínio da simulação.

Na velocidade das gotículas à saída a diferença não é tão significativa (0,7%), isto ocorre porque, ao longo do movimento descendente das gotículas, há aceleração dos elementos de fluído em seu redor, o que faz com que a força de arrasto que actua sobre as gotículas seja pouco relevante (ar e gotículas têm sensivelmente a mesma velocidade).

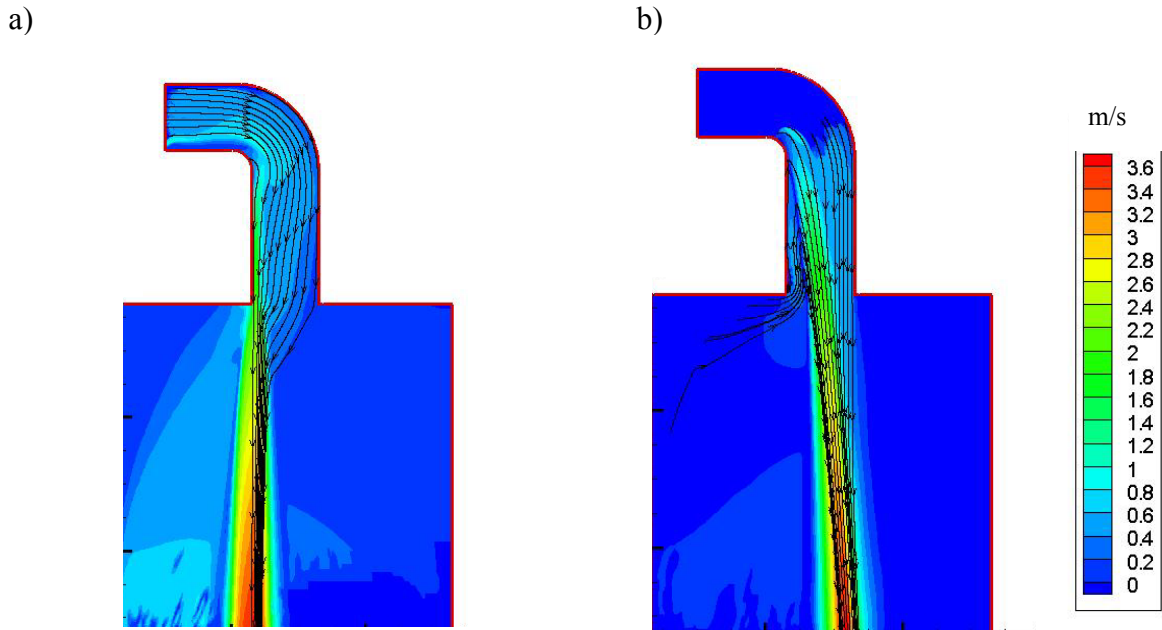


Figura 41 - a) Velocidade das gotículas com diâmetro de 5,9 μm ; b) Velocidade das gotículas com diâmetro de 59 μm

Para estudar a influência do comprimento da conduta vertical na dispersão espacial das gotículas, efectuaram-se simulações considerando valores crescentes deste parâmetro (entre 20 cm e 1 m). Mantiveram-se as condições de fronteira da geometria III e consideraram-se os parâmetros de simulação do caso 3 (ver Tabela 5 e Tabela 6).

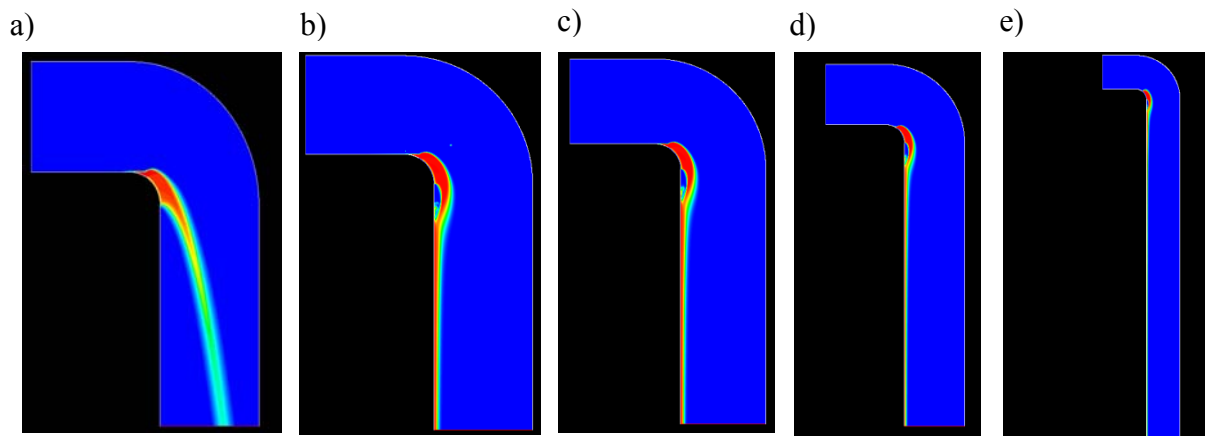


Figura 42 – Fração volúmica de gotículas para geometrias com diferentes comprimentos de conduta vertical a) geometria III; b) geometria VI; c) geometria VII; d) geometria VIII; e) geometria IX

A Figura 42 mostra que o comprimento da conduta influencia a dispersão espacial do jacto de gotículas. De facto, quando a porção vertical da conduta é mais comprida do que 25cm, o jacto de gotículas escoia ao longo da parede esquerda da conduta. Esse efeito não é o desejado para o atomizador, pois poderá resultar numa perda do líquido a atomizar visto que algum líquido poderá ficar na parede das condutas. Por outro lado o efeito da atomização é perdido pois forma-se uma película de filme líquido que escoia pela parede da conduta.

4.2. Geometria 3D

A Figura 43, mostra os resultados obtidos para a simulação com a geometria X.

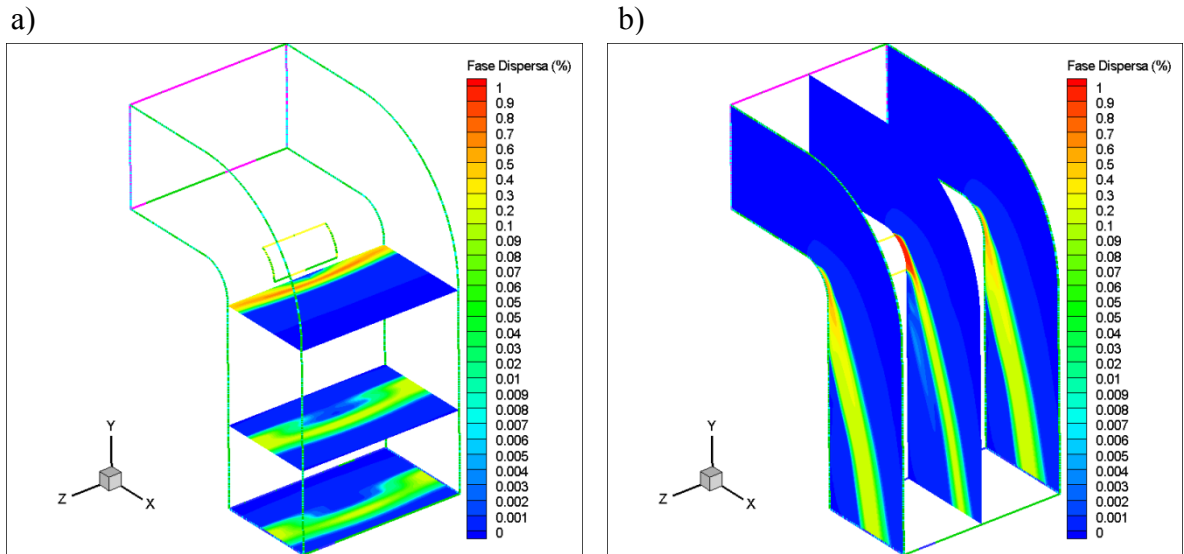


Figura 43 - Valores da fracção volúmica de gotículas ao longo do domínio, apresentando na entrada 1 $U_{ar}=0,5\text{m/s}$ e na entrada 2 $U_{got}=0,5\text{m/s}$, $U_{ar}=0,01\text{m/s}$ e com uma fracção volúmica de gotículas de 50% a) planos XZ; b) planos XY (a figuras não se encontram à escala 1:1)

Na Figura 43b, observa-se a formação de um jacto de gotículas, tal como se visualiza nos resultados obtidos nas simulações em 2D para as geometrias III e IV. A concentração de gotículas a jusante da entrada 2, também se verifica nesta geometria. Observa-se uma dispersão de gotículas de forma homogénea para ambos os lados da entrada 2. Isto ocorre porque a corrente introduzida na entrada 2 funciona como um obstáculo ao escoamento do ar, o que altera a sua trajectória para os lados e para cima. Ao longo da conduta a concentração das gotículas diminui, obtendo-se na saída da conduta uma fracção volúmica de gotículas de sensivelmente 20%

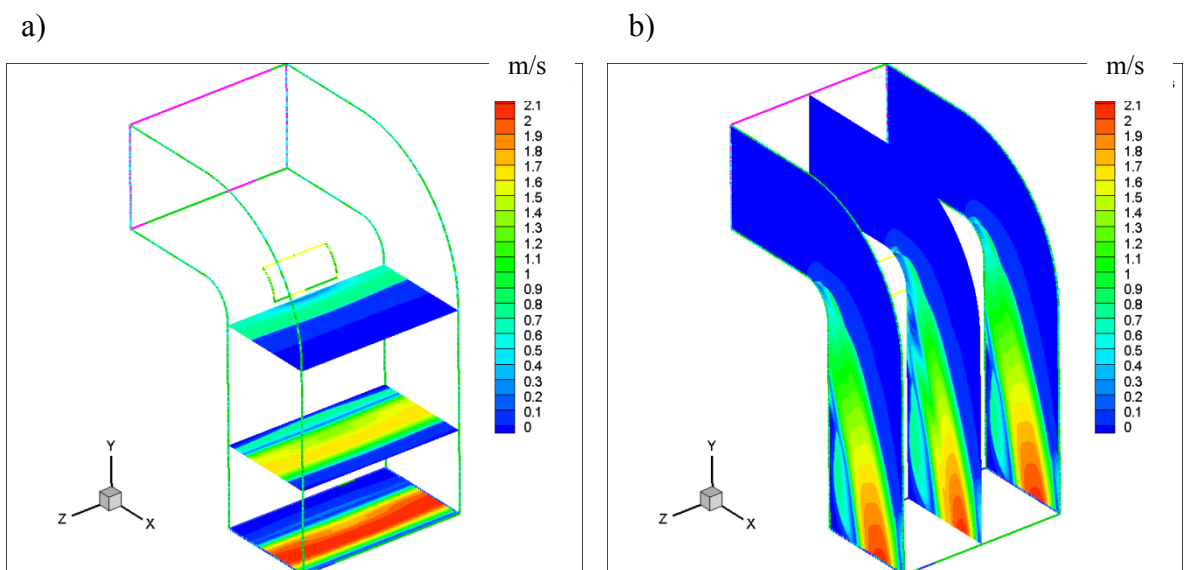


Figura 44 - Valores da velocidade de gotículas ao longo do domínio, apresentando na entrada 1 $U_{ar}=0,5\text{m/s}$ e na entrada 2 $U_{got}=0,5\text{m/s}$, $U_{ar}=0,01\text{m/s}$ e com uma fracção volúmica de gotículas de 50% a) planos XZ; b) planos XY (a figuras não se encontram à escala 1:1)

Na Figura 44, podemos observar que a velocidade das gotículas na simulação com a geometria X, são semelhantes às obtidas nas simulações com a geometria III e IV. Tal como esperado, as gotículas aceleram ao longo da conduta atingindo uma velocidade no final da conduta de 2,05m/s. Observa-se também uma recirculação entre a parede contígua à entrada das gotículas e o jacto formado.

Para verificar a influência da conduta de inserção do líquido a atomizar sobre o escoamento, realizou-se uma simulação em que a velocidade do ar na entrada 1 é de 0,5m/s e na entrada 2 de 0,01m/s, a velocidade de gotículas é de 0,5m/s e com uma fracção volúmica de gotículas de 50% na entrada 2.

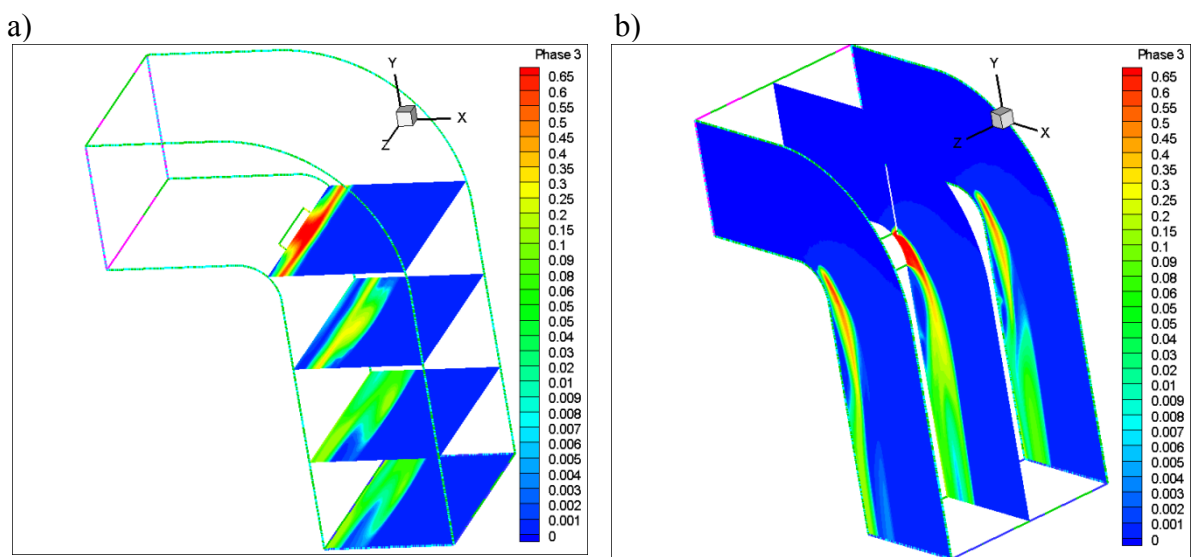


Figura 45 – Valores da fracção volúmica de gotículas ao longo do domínio, apresentando na entrada 1 $U_{ar}=0,5m/s$ e na entrada 2 $U_{got}=0,5m/s$, $U_{ar}=0,01m/s$ e com uma fracção volúmica de gotículas de 50% a) planos XZ; b) planos XY (a figuras não se encontram à escala 1:1)

Na Figura 45a, verifica-se que à saída da entrada 2, também ocorre uma acumulação de gotículas. Contudo, a fracção volúmica de gotículas obtida nessa zona não atinge os valores observados nas simulações anteriores. Ao longo da conduta a concentração das gotículas diminui, obtendo-se na saída da conduta, uma fracção volúmica de gotículas de 5%, numa pequena área junto da parede contígua à entrada 2.

Através da Figura 45b, observa-se que as gotículas não formam o jacto que se obteve com as simulações em 2D (Figura 33) e na geometria X (Figura 43). A jusante da entrada 2 o jacto de gotículas, começa a aproximar-se da parede da conduta, fluindo ao longo desta. Presume-se que o tubo de alimentação do líquido (com um diâmetro de 2mm) funciona como uma obstrução para o escoamento, introduzindo uma perda de carga que retira assim energia ao escoamento (Figura 46), o que condiciona o desenvolvimento do jacto.

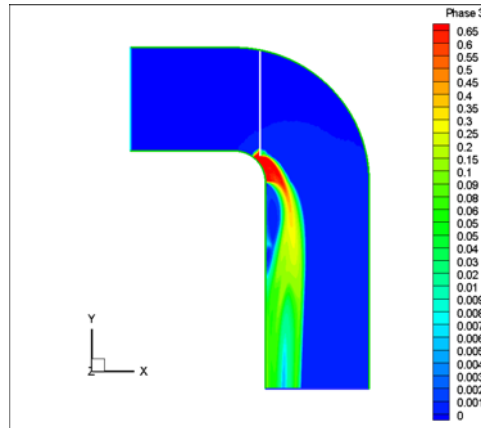


Figura 46 – Efeito da introdução da conduta de alimentação do líquido a atomizar, sobre o jacto de gotículas

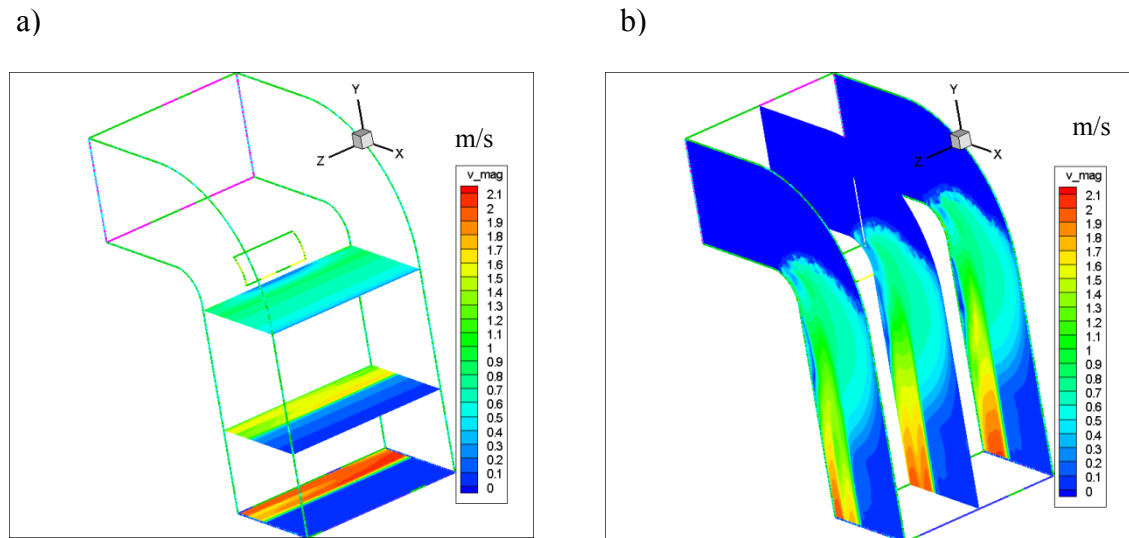


Figura 47 – Valores da velocidade de gotículas ao longo do domínio, apresentando na entrada 1 $U_{ar}= 0,5m/s$ e na entrada 2 $U_{got}= 0,5m/s$, $U_{ar}=0,01m/s$ e com uma fracção volúmica de gotículas de 50% a) planos XZ; b) planos XY (a figuras não se encontram à escala 1:1)

Pode-se observar um aumento gradual da velocidade das gotículas, ao longo da conduta, devido ao efeito da gravidade. A velocidade das gotículas à saída (2,1 m/s) é consistente com a obtida nas restantes simulações. Nas Figura 47a e 45b, é visível uma aceleração das gotículas, quando estas entram em contacto com o jacto proveniente da entrada 2.

5. Conclusões e Perspectivas de Trabalhos Futuros

O principal objectivo deste trabalho foi estudar numericamente a dispersão espacial de um aerossol produzido por um atomizador por ultra-sons. O modelo Euleriano-Euleriano do programa Fluent foi utilizado para fazer este estudo. Foram realizados testes paramétricos, com base num tutorial presente na documentação do Fluent, para verificar se o modelo fora bem implementado. Nessa fase, concluiu-se que o modelo em causa tem um custo computacional muito elevado. Verificou-se que para realizar uma simulação em 2D com 203481 elementos, são necessárias 48 horas, de processamento num computador com um processador Intel Centrino Duo, 1,66GHz e 1GB de memória de RAM. Devido ao elevado custo computacional, as restantes simulações foram realizadas num computador com um processador Intel Core i7, 2.8GHz e 20GB de memória RAM.

Ao longo das simulações verificou-se que, a formação de uma película de filme líquido a montante da entrada 2, está frequentemente associada a dificuldades de convergência de simulação.

Na geometria III, em que todos os critérios de convergência foram atingidos, pode-se visualizar que a fase dispersa (gotículas) sai da entrada 2 em forma de jacto. Apenas quando a fase dispersa representa uma percentagem muito pequena do escoamento, é que esse jacto não se verifica. Nessa situação, as gotículas escoam junto à parede esquerda da conduta. No início do jacto de gotículas, observa-se uma concentração elevada destas, atingindo-se fracções volúmicas próximas de 100%. À medida que o jacto flui pela conduta, ocorre uma diminuição gradual da sua concentração. Com o aumento da fracção volúmica de gotículas, o jacto desloca-se para a direita da conduta.

A velocidade das gotículas aumenta ao longo da conduta devido ao efeito da gravidade, o que causa o aumento da velocidade do ar (em torno da fase dispersa). O aumento da velocidade de entrada do ar não tem efeito significativo sobre a distribuição espacial das gotículas (para a gama de velocidades de ar estudado).

Quando se aumenta o comprimento da conduta, tem lugar uma alteração da dispersão espacial das gotículas. Com o aumento do comprimento da conduta vertical, já não se visualiza o jacto de gotículas.

Nas simulações em 3D, verifica-se que imediatamente a jusante da entrada 2, ocorre acumulação de gotículas, como visualizado nas simulações em 2D. Observa-se uma dispersão de gotículas de forma homogénea para ambos os lados da entrada 2. Ao longo da conduta, visualiza-se um decréscimo da concentração das gotículas, obtendo-se no final da conduta uma fracção volúmica de 20%. Observa-se que as gotículas formam o mesmo jacto que se visualiza nas simulações a 2D.

O tubo de alimentação do líquido a atomizar funciona como uma obstrução, o que condiciona o desenvolvimento do jacto.

No decorrer deste trabalho surgiram algumas limitações temporais, o que impossibilitou a análise detalhada de outras geometrias e outros parâmetros (exemplo: diâmetro de gotículas; variação da velocidade de gotículas mais abrangente, inserindo velocidades mais elevadas e mais baixas), que podem influenciar a dispersão de aerossóis.

No âmbito desta temática, surgem perspectivas para trabalhos futuros nomeadamente:

- Realizar um estudo em 3D na geometria X em regime transiente, com vários diâmetros de gotículas em simultâneo;
- Realizar um estudo em 3D na geometria X, que contemple a coalescência entre gotículas;
- Realizar um estudo 3D com profundidades superiores a 1cm para verificar se ainda se observa homogeneização da dispersão das gotículas;
- Realizar um estudo em 3D na geometria X que englobe a evaporação e a coalescência das gotículas;

6. Referências e Bibliografia

- Adiga, K. C., J. Hatcher, R. F., Robert, F., Sheinson, Ronald, S., Williams, Frederick, W., Ayers e Scott, (2007). "A computational and experimental study of ultra fine water mist as a total flooding agent." Fire Safety Journal **42**(2): 150-160.
- ANSYS (2009). "ANSYS FLUENT 12.0 Theory Guide."
- Ansys (2009). "Ansys Fluent 12.0 User's Guide."
- Awaru, B., Patil, M. N., Mohan, N., Gogate, Parag, Pandit, R. e Aniruddha, B., (2006). "Ultrasonic atomization: Effect of liquid phase properties." Ultrasonics **44**(2): 146-158.
- Behzadi, A., Issa, R. I. e Rusche, H., (2004). "Modelling of dispersed bubble and droplet flow at high phase fractions." Chemical Engineering Science **59**(4): 759-770.
- Chapron, D., Girtan M., Le pommelec, J.-y. e Bouteville A., (2007). Droplet dispersion calculations for ultrasonic spray pyrolysis depositions. Bucuresti, INOE 2000.
- Delele, M. A., Jaeken, P., Debaer, C., Baetens, K., Endalew, A. Melese, Ramon, H., Nicolai, B. M. e Verboven, P., (2007). "CFD prototyping of an air-assisted orchard sprayer aimed at drift reduction." Computers and Electronics in Agriculture **55**(1): 16-27.
- Delele, M. A., Schenk, A., Tijskens, E., Ramon, H., Nicolai, B. M. e Verboven, P., (2009). "Optimization of the humidification of cold stores by pressurized water atomizers based on a multiscale CFD model." Journal of Food Engineering **91**(2): 228-239.
- Dobre, M. e Bolle, L., (1998). "Theoretical prediction of ultrasonic spray characteristics using the maximum entropy formalism."
- Endalew, A. M., Debaer, C., Rutten, N., Vercammen, J., Delele, M. A., Ramon, H., Nicolai, B. M. e Verboven, P., (2010). "Modelling pesticide flow and deposition from air-assisted orchard spraying in orchards: A new integrated CFD approach." Agricultural and Forest Meteorology **150**(10): 1383-1392.
- Fédiaevski, C.; Voitkounski, I. e Faddéev, Y., (1979). Mecânica dos Fluidos. Porto: Lopes da Silva.
- Fletcher, D. F., Guo, B., Harvie, D. J. E., Langrish, T. A. G., Nijdam, J. J. e Williams, J., (2006). "What is important in the simulation of spray dryer performance and how do current CFD models perform?" Applied Mathematical Modelling **30**(11): 1281-1292.
- Hall, S., (1993). Biomecânica Básica. Rio de Janeiro: Guanabara Koogan.
- Huang, L. X., Kumar, K. e Mujumdar, A. S., (2006). "A comparative study of a spray dryer with rotary disc atomizer and pressure nozzle using computational fluid dynamic simulations." Chemical Engineering and Processing **45**(6): 461-470.
- Huang, L. X., Passos, M. L., Kumar, Kurichi e Mujumdar, A. S., (2005). "A Three-Dimensional Simulation of a Spray Dryer Fitted with a Rotary Atomizer." Drying Technology: An International Journal **23**(9): 1859 - 1873.
- Jiang, X., Siamas, G. A., Jagus, K. e Karayiannis, T. G., (2010). "Physical modelling and advanced simulations of gas-liquid two-phase jet flows in atomization and sprays." Progress in Energy and Combustion Science **36**(2): 131-167.
- Koskela, H., (2004). "Momentum source model for CFD-simulation of nozzle duct air diffuser." Energy and Buildings **36**(10): 1011-1020.
- Lang, R. J., (1962). "Ultrasonic Atomization of Liquids." The Journal of the Acoustical Society of America **34**(1): 6-8.
- Lyngshansen, P., Alstr, Oslash e Preben, M., (1997). "Perturbation theory of parametrically driven capillary waves at low viscosity." Journal of Fluid Mechanics **351**(-1): 301-344.
- Marrucci, G., (1969). "A theory of coalescence." Chemical Engineering Science **24**(6): 975-985.
- Mezhericher, M., Levy, A. e Borde, I., (2009). "Modeling of Droplet Drying in Spray Chambers Using 2D and 3D Computational Fluid Dynamics." Drying Technology: An International Journal **27**(3): 359 - 370.
- MPInterconsulting. "MMM Ultrasonic's." Acedido a 19/01/2011, a partir de <http://www.mpi-ultrasonics.com/mmm-ultrasonics.html#>.
- Munson, B., Young, D., e Okiishi, T., (2004). Fundamentos da Mecânica

dos Fluidos 4ª Edição. São Paulo: Edgard Blücher.

- Nijdam, J. J., Guo, B., Fletcher, David F., Langrish e Tim A. G.. (2006). "Lagrangian and Eulerian models for simulating turbulent dispersion and coalescence of droplets within a spray." Applied Mathematical Modelling **30**(11): 1196-1211.
- Nijdam, J. J., Langrish, T. A. G. e Fletcher, D. F., (2008). "Assessment of an Eulerian CFD model for prediction of dilute droplet dispersion in a turbulent jet." Applied Mathematical Modelling **32**(12): 2686-2705.
- Peskin, R. L. e Raco, R. J., (1963). "Ultrasonic Atomization of Liquids." The Journal of the Acoustical Society of America **35**(9): 1378-1381.
- Qi, A., L. Y. Yeo, Friend e James R., (2008). "Interfacial destabilization and atomization driven by surface acoustic waves." Physics of Fluids **20**(7): 074103-074114.
- Qian, L., J. Lin, Xiong e Hongbing, (2009). "Simulation of Droplet-gas Flow in the Effervescent Atomization Spray with an Impinging Plate." Chinese Journal of Chemical Engineering **17**(1): 8-19.
- Rajan, R. e Pandit, A. B., (2001). "Correlations to predict droplet size in ultrasonic atomisation." Ultrasonics **39**(4): 235-255.
- Sindayihebura, D., Dobre, M. e Bolle, L., (1997). "Experimental study of thin liquid film ultrasonic atomization."
- Sommerfeld, M. e Qiu, H. H., (1998). "Experimental studies of spray evaporation in turbulent flow." International Journal of Heat and Fluid Flow **19**(1): 10-22.
- Von Berg, E., W. Edelbauer, Alajbegovic, Ales, Tatschl, Reinhard, Volmajer, Martin, Kegl, Breda, Ganippa e Lionel C., (2005). "Coupled Simulations of Nozzle Flow, Primary Fuel Jet Breakup, and Spray Formation." Journal of Engineering for Gas Turbines and Power **127**(4): 897-908.
- Wang, W. N., Purwanto, A., Lenggoro, I. W., Okuyama, K., Chang, H. e Jang, H. D., (2008). "Investigation on the correlations between droplet and particle size distribution in ultrasonic spray pyrolysis." Industrial and Engineering Chemistry Research **47**(5): 1650-1659.
- Yule, A. J. e Y. Al – Suleimani (2000). "On droplet formation from capillary waves on a vibrating surface." Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences **456**(1997): 1069-1085.

Anexo A

Anexo A.1. Diâmetro médio e suas aplicações

Tabela 8 - Diâmetro médio de gotículas e suas aplicações.

Símbolo	Nome do diâmetro médio	Expressão	Aplicação
D_{10}	Aritmético	$\frac{\sum n_i D_i}{\sum n_i}$	Comparações
D_{20}	Superficial	$\left(\frac{\sum n_i D_i^2}{\sum n_i}\right)^{1/2}$	Controlo da área superficial
D_{30}	Volumétrico	$\left(\frac{\sum n_i D_i^3}{\sum n_i}\right)^{1/3}$	Controlo de volume hidrologia
D_{21}	Superfície - Aritmético	$\frac{\sum n_i D_i^2}{\sum n_i}$	Absorção
D_{31}	Volume - Aritmético	$\left(\frac{\sum n_i D_i^3}{\sum n_i D_i}\right)^{1/2}$	Evaporação
D_{32}	Sauter (SMD)	$\frac{\sum n_i D_i^3}{\sum n_i D_i^2}$	Transferência de massa, reacção
D_{43}	De Brouckere ou Herdan	$\frac{\sum n_i D_i^4}{\sum n_i D_i^3}$	Combustão equilíbrio

n_i - número de unidades de gotículas de um determinado tamanho

D_i - diâmetro das gotículas

Anexo A.2. Diâmetros representativos

Para a maioria dos propósitos em engenharia, a distribuição do tamanho das gotas (DTG) num aerossol pode ser representada concisamente como uma função a dois parâmetros, um dos quais é um diâmetro representativo e o outro é uma medida da gama de ocorrência do tamanho das gotas. Em alguns casos pode ser vantajoso introduzir outro termo, tal como um parâmetro para exprimir o tamanho mínimo da gota, mas necessitamos de dois parâmetros para a descrição da DTG.

Existem muitas escolhas possíveis de diâmetros representativos, cada um sendo responsável por uma faceta da definição da DTG. As várias possibilidades incluem:

Estudo numérico da dispersão de aerossóis produzidos por ultra-sons

- $D_{0,1}$ - Diâmetro da gota tal que 10% do volume total do líquido encontra-se em gotas de diâmetros menores.
- $D_{0,5}$ - Diâmetro da gota tal que 50% do volume total do líquido encontra-se em gotas de diâmetros menores. Este é o diâmetro médio mássico (MMD)
- $D_{0,632}$ - Diâmetro da gota tal que 63,2% do volume total do líquido encontra-se em gotas de diâmetros menores.
- $D_{0,9}$ - Diâmetro da gota tal que 90% do volume total do líquido encontra-se em gotas de diâmetros menores.
- $D_{0,999}$ - Diâmetro da gota tal que 99,9% do volume total do líquido encontra-se em gotas de diâmetros menores.
- D_{pico} - Valor de D correspondente ao pico (máximo) da DTG.

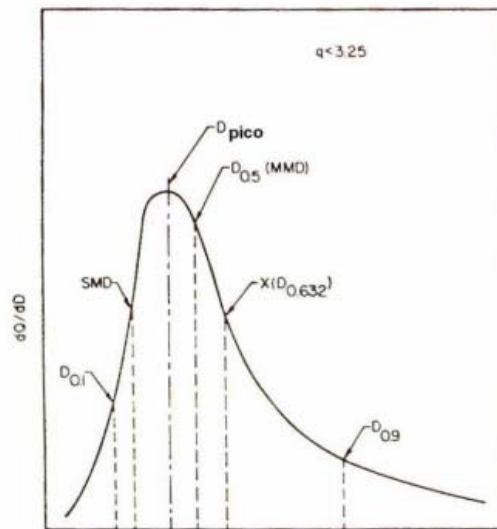


Figura 48 - Localização de vários tipos de diâmetros.

Anexo B

Anexo B.1. Teste de grelha à geometria do Tutorial

Para verificar se os resultados obtidos são independentes da grelha fornecida pelo tutorial, foram construídas mais 5 grelhas, com número de elementos compreendido entre 3200 e 201105 (Figura 49). Para as simulações correspondentes a cada grelha, foram retirados valores da pressão estática, da velocidade das gotículas, da velocidade do ar e da fracção volúmica de gotículas no escoamento (Figura 51 e Figura 52) em duas linhas (a linha aa' na coordenada $Y=0.07$; e o plano bb' na coordenada $X=0.026$).

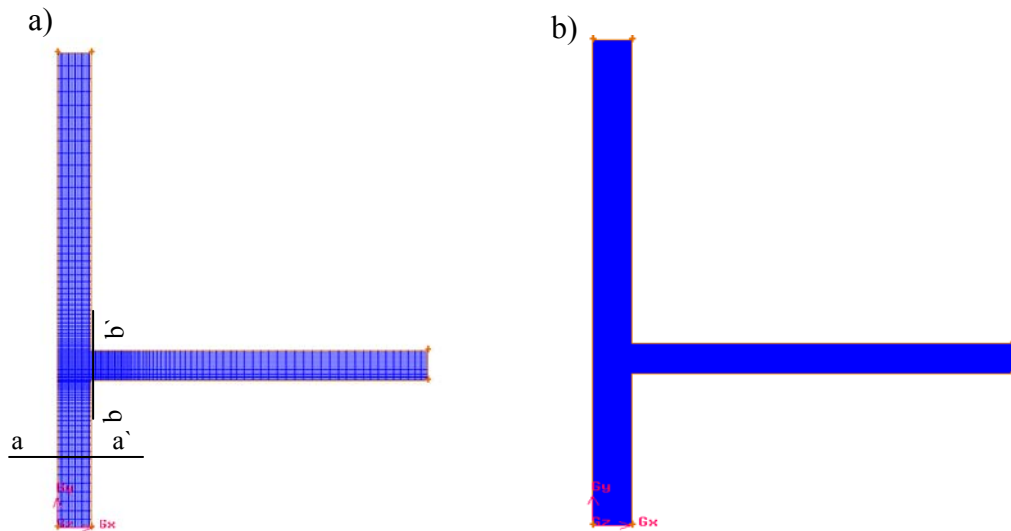


Figura 49 - a) Malha original do Tutorial; b) 5ª Malha do Estudo

Tabela 9 – Tipo de Grelha

Tipo	Nº Elementos	Características	Tempo de Simulação
Grelha I	3200	<i>Espaçamento entre cada célula</i>	1 hora
Grelha II	10400	<i>Espaçamento entre cada célula</i> ¹⁶ = 0,001125	5 horas
Grelha III	65000	<i>Espaçamento entre cada célula</i> = 0,0006	12 horas
Grelha IV	90310	<i>Espaçamento entre cada célula</i> = 0,0005	24 horas
Grelha V	101901	<i>Espaçamento entre cada célula</i> = 0,0004	36 horas
Grelha VI	203481	<i>Espaçamento entre cada célula</i> = 0,0004 com um novo refinamento na zona do vórtice	48 horas

¹⁶ Parâmetro de construção da grelha no Gambit.

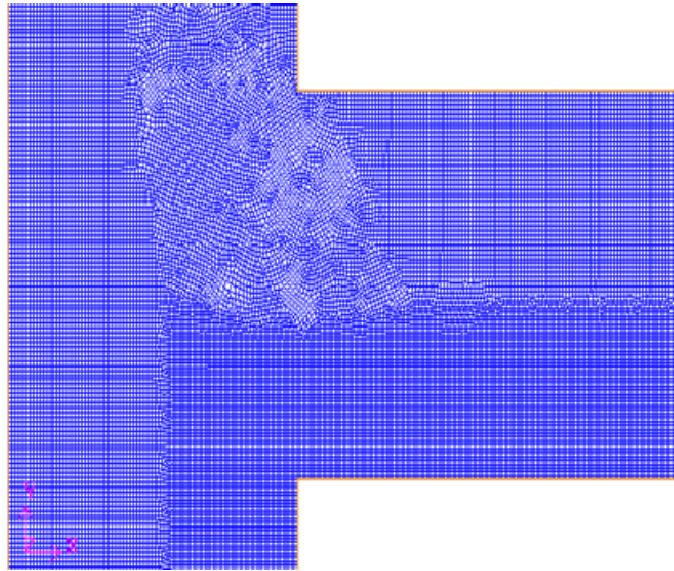


Figura 50 - Zoom da 5ª malha, na junção dos dois tubos

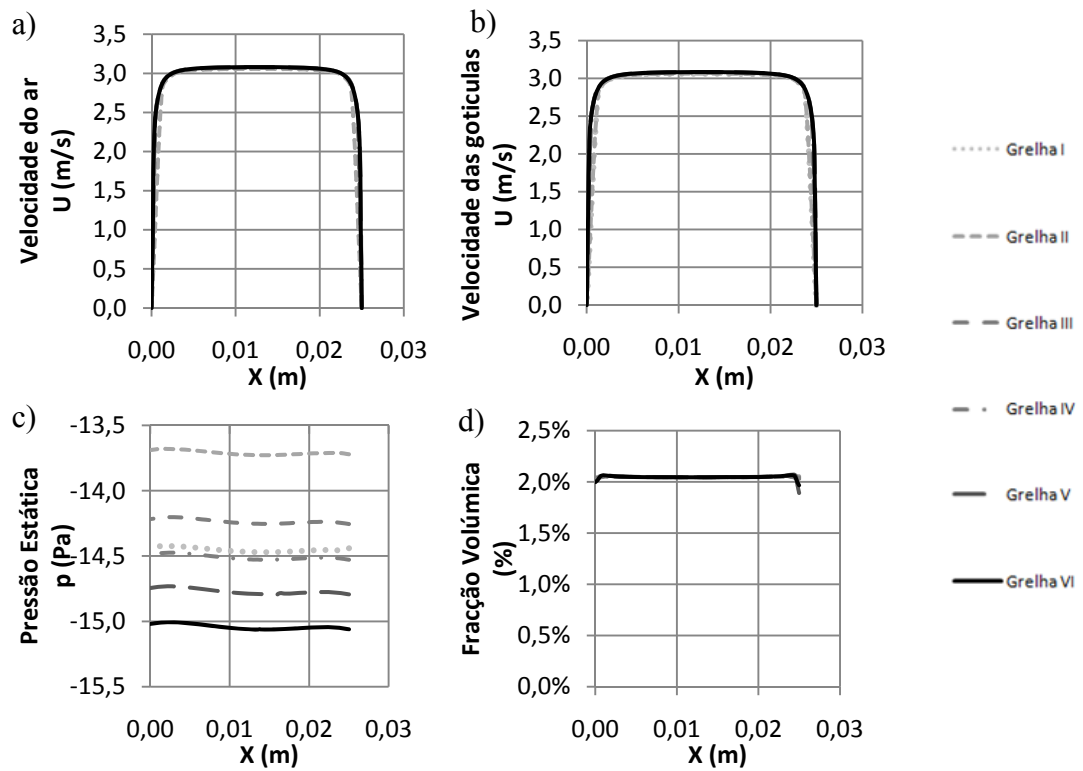


Figura 51 – Parâmetros ao longo da linha ; a) Velocidade do ar, b) Velocidade das gotículas, c) Pressão estática, d) Fração Volúmica de gotículas no escoamento

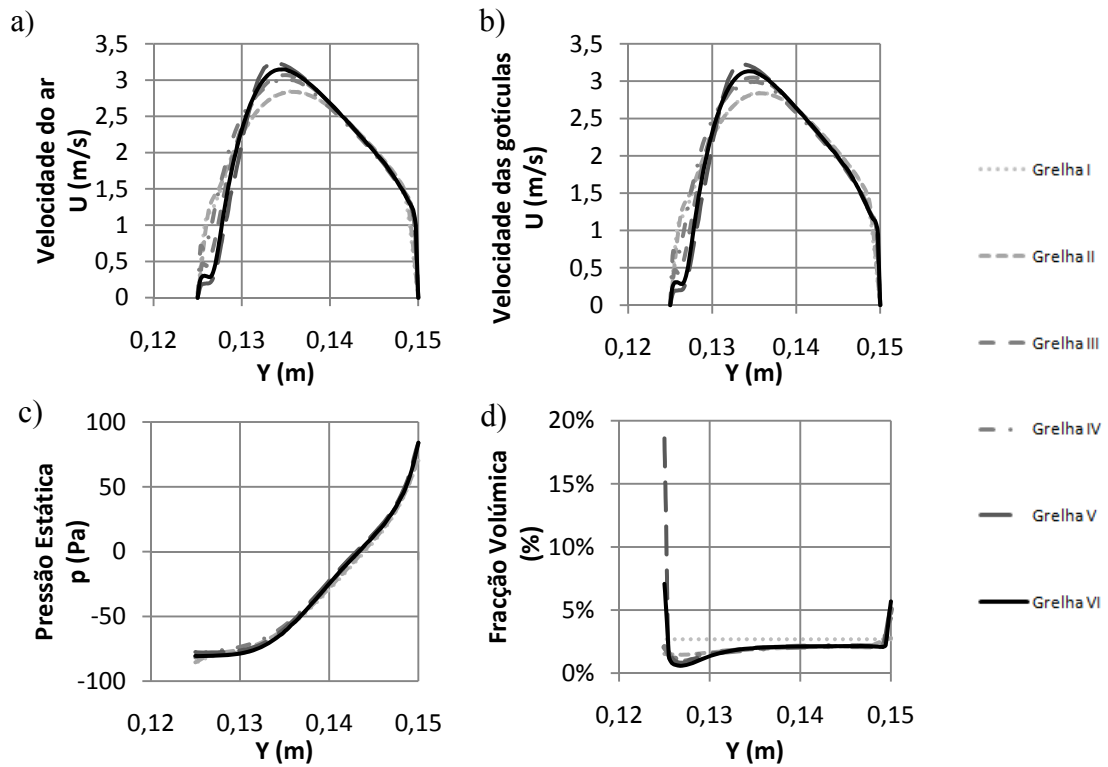


Figura 52- Parâmetros ao longo da linha \overline{bb} ; a) Velocidade do ar, b) Velocidade das gotículas, c) Pressão estática; d) Fração Volúmica de gotículas no escoamento

Pode constatar-se que a partir da quinta grelha, os resultados deixam de variar com os refinamentos sucessivos da grelha, ou seja, foram atingidos os critérios de convergência. Isso significa que os resultados deixam de depender da grelha escolhida, passando a ter significado físico, por esse motivo utilizou-se a grelha V para as restantes simulações. Ao longo dos testes de grelha, verificou-se que a convergência do problema foi de difícil obtenção, provavelmente devido a um vórtice formado na junção dos dois tubos.

Anexo C

Anexo C.1. Teste de grelha à geometria I

No sentido de conhecer o comportamento do escoamento na geometria I Figura 53, realizou-se um estudo introduzindo ar com uma velocidade de 0,5 m/s. Para verificar se os dados não dependiam da grelha utilizada, foi realizado um teste de grelha, analisando se a densidade era a adequada ao estudo em questão. Para isso foram construídas 4 grelhas com um número de elementos compreendido entre 6065 (Figura 54) e 97893. Foram retirados dos planos ($Y = 0,03$ m) e ($Y = -0,06$ m), os valores da pressão total, pressão estática e velocidade Figura 55 e Figura 57.

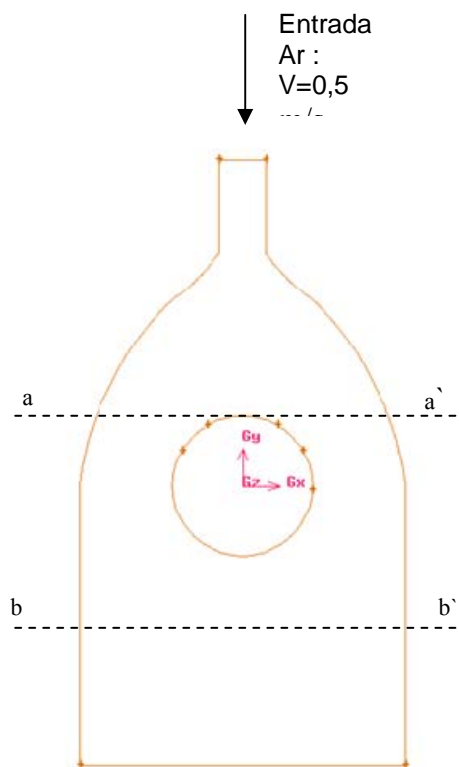


Figura 53 - Geometria I.

Tabela 10 – Tipo de Grelha para a geometria I.

Tipo	Nº Elementos	Características	Tempo de Simulação
Grelha I	6065	<i>Espaçamento</i> ¹⁷ = 0,002	1 hora
Grelha II	24361	<i>Espaçamento</i> = 0,001	5 horas
Grelha III	67880	<i>Espaçamento</i> = 0,0006	8 horas
Grelha IV	97893	<i>Espaçamento</i> = 0,0005	12 horas

¹⁷ Parâmetro de construção da grelha no Gambit.

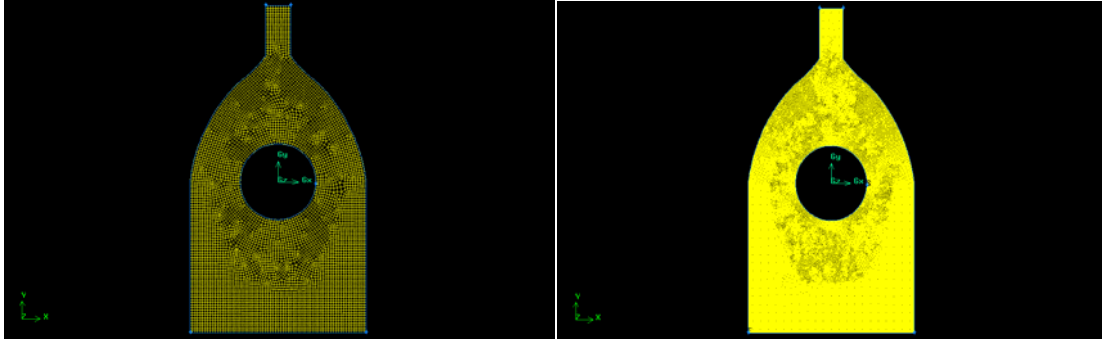


Figura 54 – a) Grelha I; b) Grelha IV.

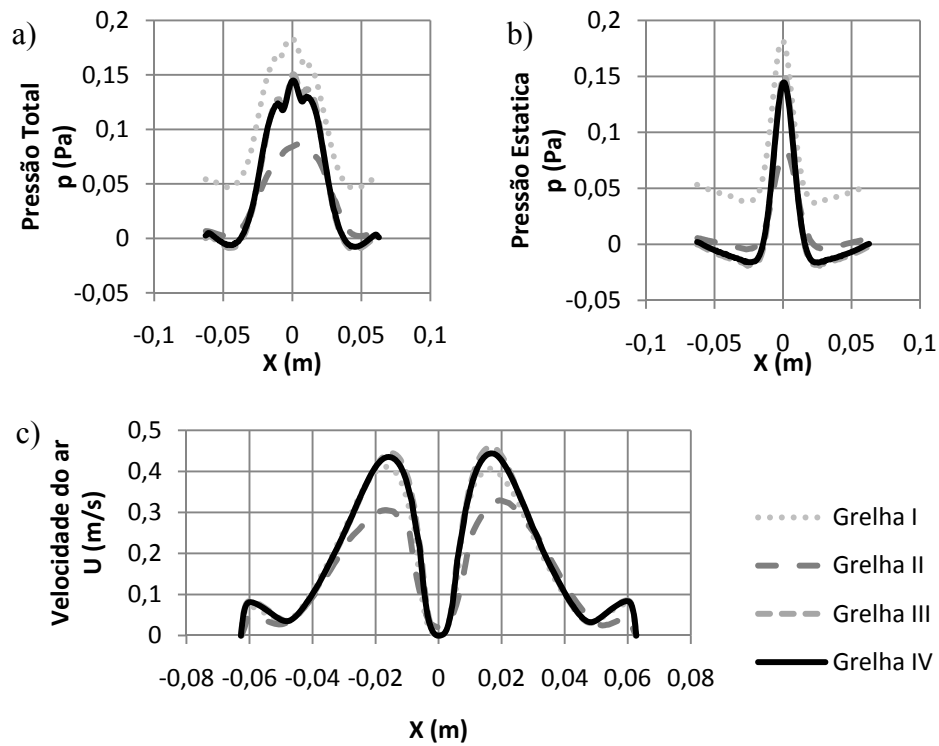


Figura 55 - a) Pressão Total na linha \overline{aa} ; b) Pressão Estática no Plano \overline{aa} ; c) Velocidade do ar no Plano \overline{aa} .

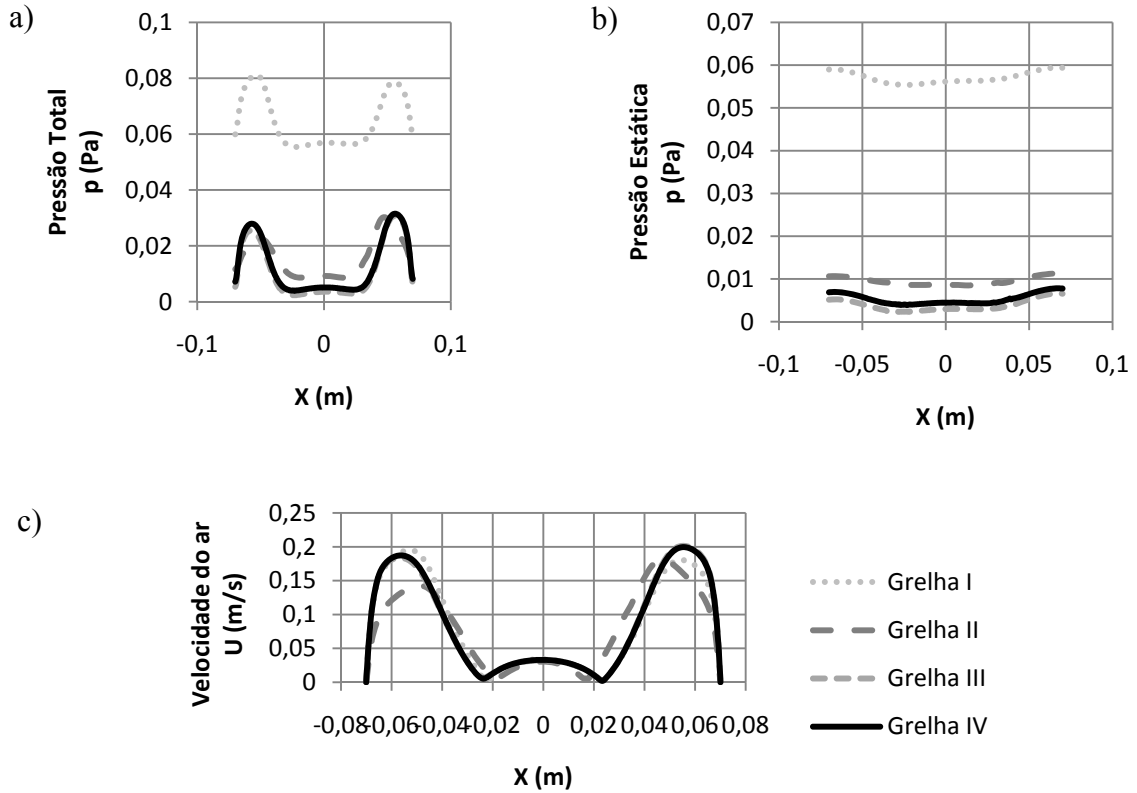


Figura 56 - a) Pressão Total no Plano \overline{bb} ; b) Pressão Estática no Plano \overline{bb} ; c) Velocidade do ar no Plano \overline{bb} .

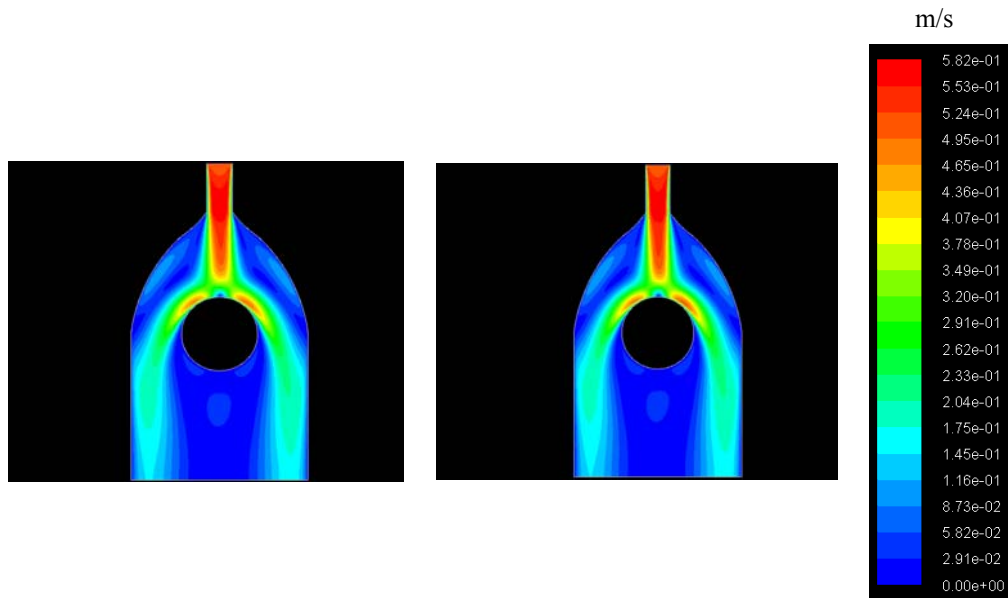


Figura 57 – a) Campos de velocidades na grelha III retirado do Fluent ; b) Campos de velocidades na grelha IV retirado do Fluent.

Através da análise dos gráficos, verifica-se que a partir da 3ª grelha o aumento da densidade não influencia os resultados, ou seja, estes deixam de depender da grelha

Estudo numérico da dispersão de aerossóis produzidos por ultra-sons passando a ter um significado físico. Assim, podemos concluir que esta é adequada à geometria em estudo.

Verificou-se no decorrer dos testes de grelha, que o valor dos resíduos para se obter a convergência das simulações foi de 1×10^{-5} (para todos os parâmetros). Este valor difere do reportado no manual do Fluent (1×10^{-3} para escoamentos simples; ANSYS 2009).

Anexo D

Anexo D.1. Teste de grelha à geometria III

Antes de se proceder à análise do escoamento na geometria II foram efectuados testes de grelha, para verificar se os dados obtidos na simulação não dependiam da grelha que estava a ser utilizada. Foram construídas 3 grelhas com um número de elementos compreendido entre 78750 e 201600 elementos.

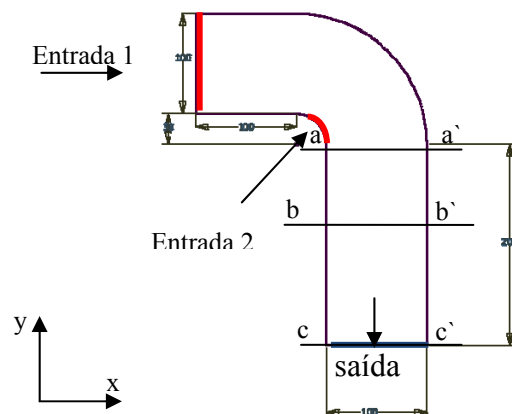


Figura 58 - Geometria III

Tabela 11 – Tipo de grelha para a geometria II.

Tipo	Nº Elementos	Características	Tempo de Simulação
Grelha I	78750	<i>Espaçamento = 0,0008</i>	12 horas
Grelha II	102960	<i>Espaçamento = 0,0007</i>	16 horas
Grelha III	201600	<i>Espaçamento = 0,0005</i>	24 horas

Estudo numérico da dispersão de aerossóis produzidos por ultra-sons

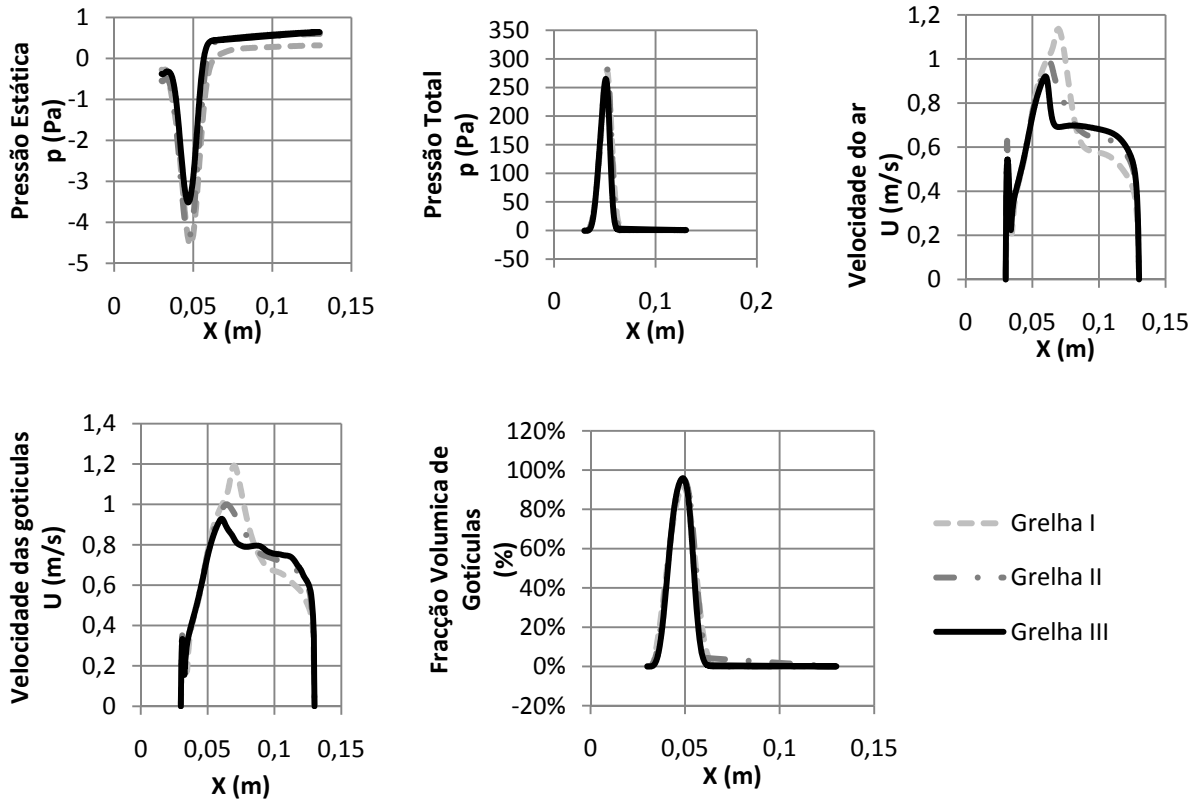


Figura 59 - a) Pressão Estática no Plano \overline{aa} ; b) Pressão Total no Plano \overline{aa} ; c) Velocidade do ar no Plano \overline{aa} ; d) Velocidade das gotículas no Plano \overline{aa} ; e) Fração volúmica de gotículas no Plano \overline{aa} ,

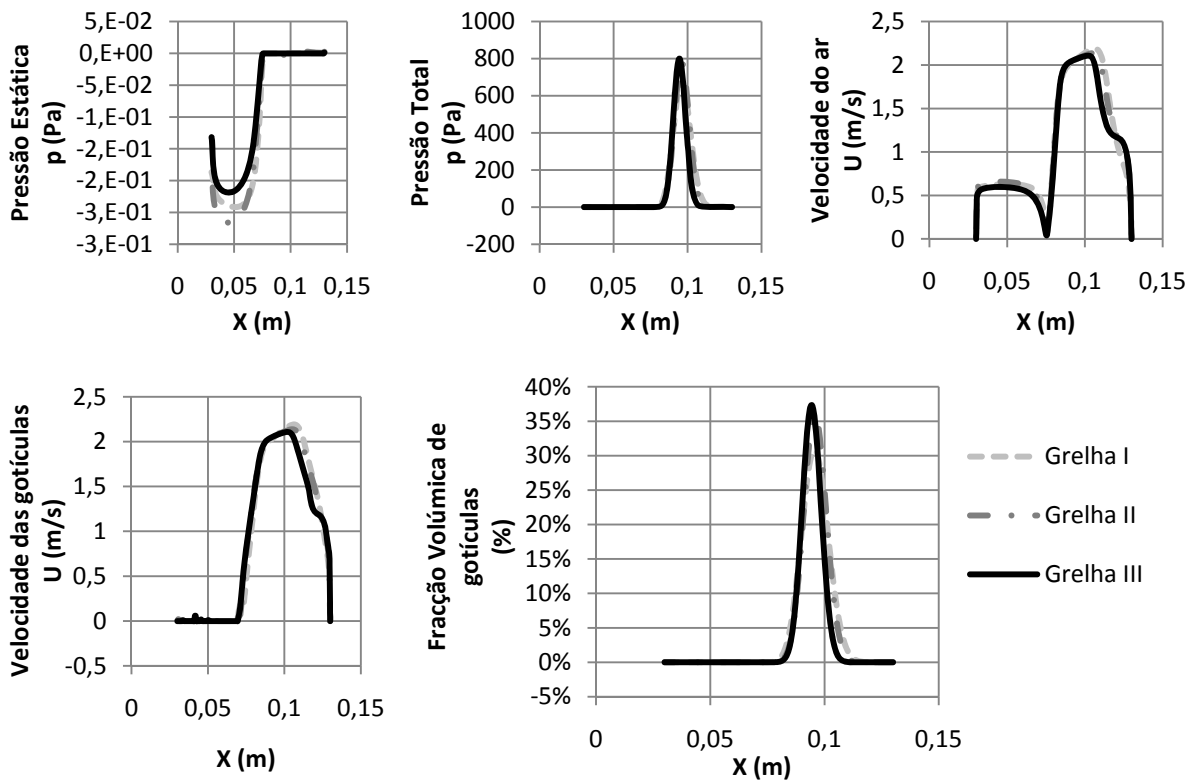


Figura 60 -; a) Pressão Estática no Plano \overline{bb} ; b) Pressão Total no Plano \overline{bb} ; c) Velocidade do ar no Plano \overline{bb} ; d) Velocidade das gotículas no Plano \overline{bb} ; e) Fração volúmica de gotículas no Plano \overline{bb} ,

Estudo numérico da dispersão de aerossóis produzidos por ultra-sons

A análise das Figura 59 e Figura 60 mostra que os resultados obtidos com a grelha II não são totalmente independentes da densidade da mesma. No entanto, por uma questão de compromisso entre tempo de computação e precisão de resultados, optou-se por prosseguir os estudos tendo por base a grelha III.

Anexo E

Anexo E.1 – Resultados obtidos com a geometria V

Foi realizada a partir da geometria IV uma variação da saída do escoamento (Figura 22). Enquanto que no primeiro modelo da geometria IV, a saída do escoamento só se dava pela parte inferior da conduta, neste novo modelo a saída do escoamento realiza-se não só pela parte inferior, mas também pelas laterais da extensão da conduta. A simulação realizada teve por base as condições do caso 3 para a geometria IV (Tabela 6).

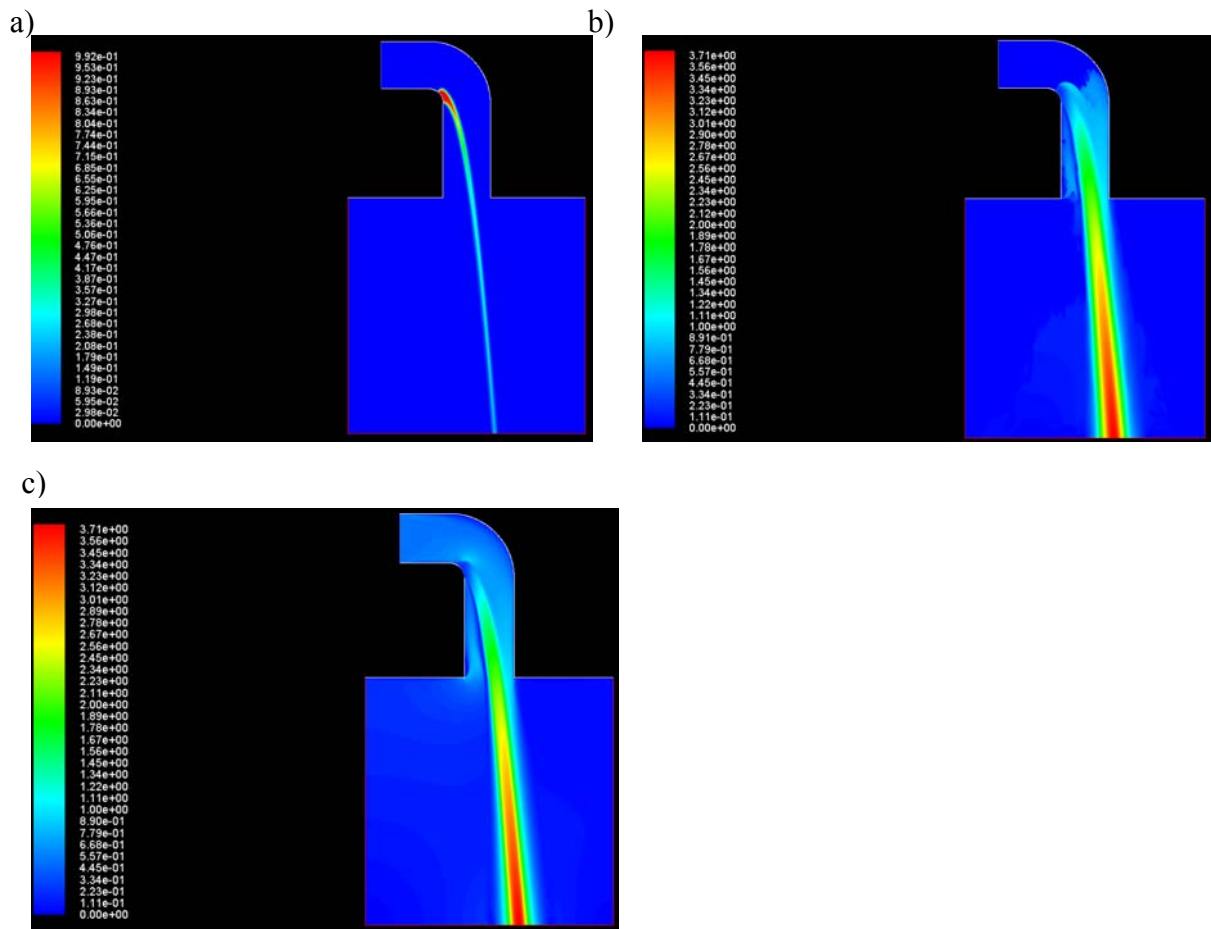


Figura 61 - a) Valores da fracção volúmica de gotículas ao longo do domínio, apresentando na entrada 1 $U_{ar} = 0,5\text{m/s}$ e na entrada 2 $U_{got} = 0,5\text{m/s}$, $U_{ar} = 0,01\text{m/s}$ e com uma fracção volúmica de gotículas de 50%; b) Valores da velocidade das gotículas ao longo do domínio, apresentando na entrada 1 $U_{ar} = 0,5\text{m/s}$ e na entrada 2 $U_{got} = 0,5\text{m/s}$, $U_{ar} = 0,01\text{m/s}$ e com uma fracção volúmica de gotículas de 50% Velocidade das gotículas; c) Valores da velocidade do ar ao longo do domínio, apresentando na entrada 1 $U_{ar} = 0,5\text{m/s}$ e na entrada 2 $U_{got} = 0,5\text{m/s}$, $U_{ar} = 0,01\text{m/s}$ e com uma fracção volúmica de gotículas de 50%

Pode-se visualizar na Figura 61 que esta alteração na saída não trouxe alterações no escoamento das gotículas. Na Figura 61a) observa-se que o jacto de gotículas se mantém, como nos casos anteriores (Figura 31 e Figura 36). Na velocidade das gotículas (Figura 61b), verificam-se fenómenos já ocorridos, como a recirculação e o aumento da velocidade ao longo da conduta resultante do efeito da gravidade. Na Figura 61c), a velocidade do ar acelera na presença das gotículas como esperado e a recirculação de ar também se dá à esquerda do jacto de gotículas.

Anexo F

Anexo F.1. Teste de grelha à geometria XI

Antes de se proceder à análise do escoamento com a geometria III em 3D (geometria XI), foram efectuados testes de grelha na geometria. Foram construídas 4 grelhas com um número de elementos compreendido entre 297214 e 935239 elementos. Foram analisados os resultados obtidos ao longo das linhas de intersecção do plano $z=0,005$ com o plano $y=-0,035$, do plano $z=0,005$ com o plano $y=-0,15$ e do plano $z=0,005$ com o plano $y=-0,23$.

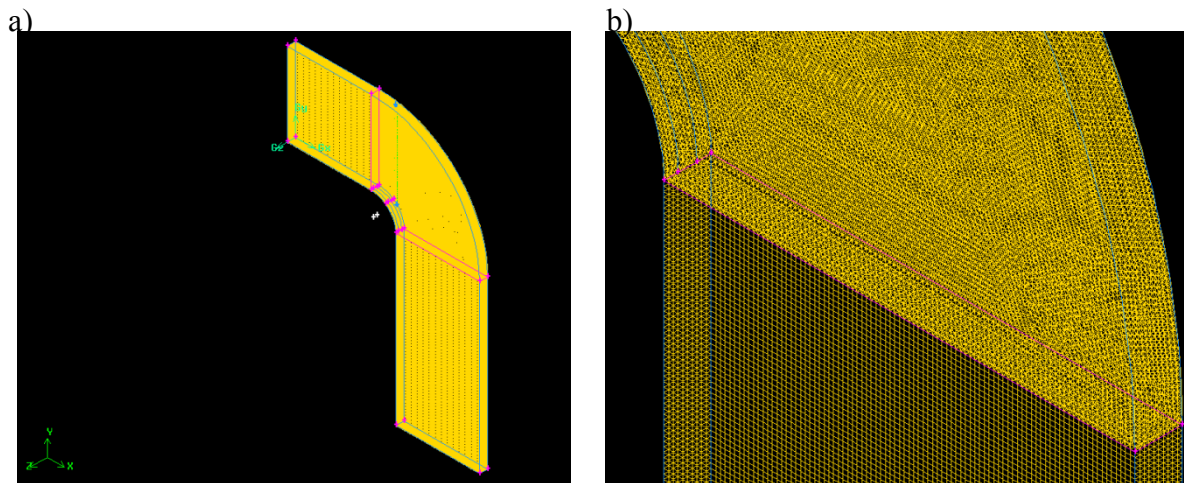


Figura 62 – a) Grelha IV concebida no Gambit; b) Zoom da zona de entrada 2

Tabela 12 - Diferentes grelhas, para a geometria 3D

Tipo	Nº Elementos	Características	Tempo de Simulação
Grelha I	297214	<i>Espaçamento = 0,0013</i>	24 horas
Grelha II	504416	<i>Espaçamento = 0,0012</i>	36 horas
Grelha III	721631	<i>Espaçamento = 0,0011</i>	62 horas
Grelha IV	935239	<i>Espaçamento = 0,001</i>	1 semana

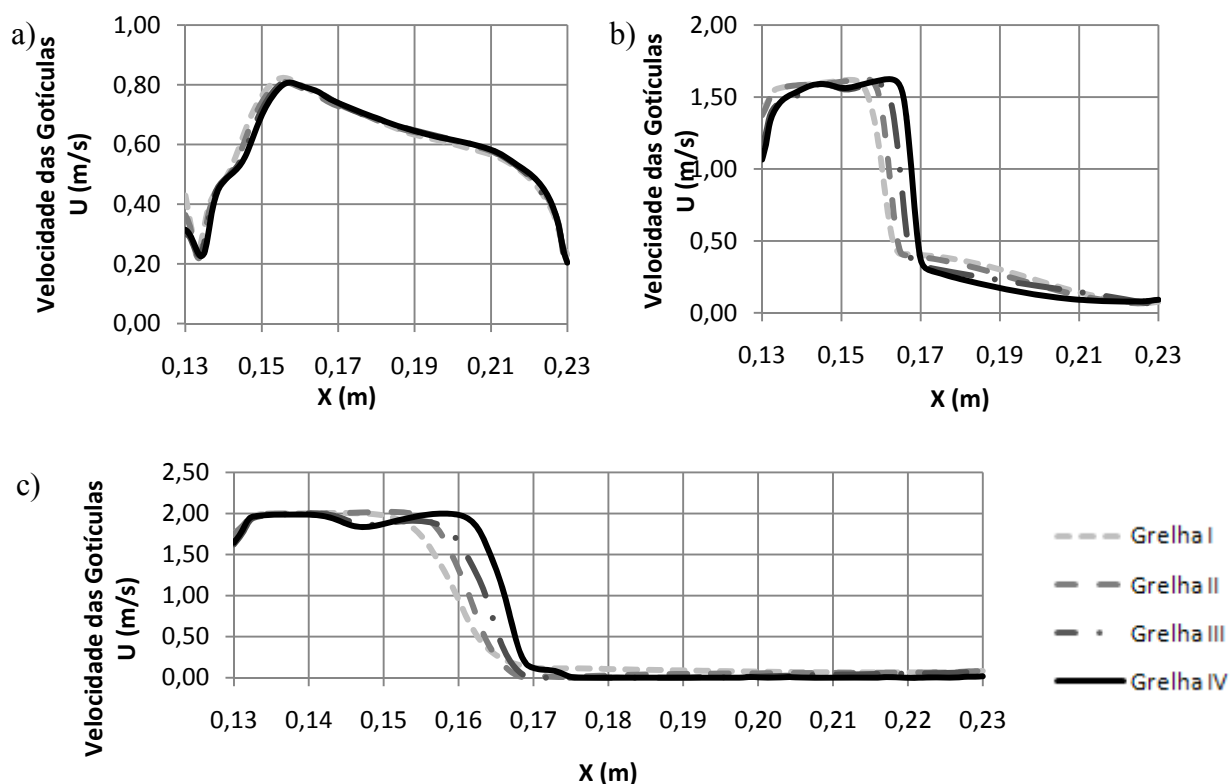


Figura 63 – a) Velocidade das gotículas na linha de intersecção do plano $z=0,005$ com o plano $y=-0,035$; b) Velocidade das gotículas na linha de intersecção do plano $z=0,005$ com o plano $y=-0,15$; Velocidade das gotículas na linha de intersecção do plano $z=0,005$ com o plano $y=-0,23$

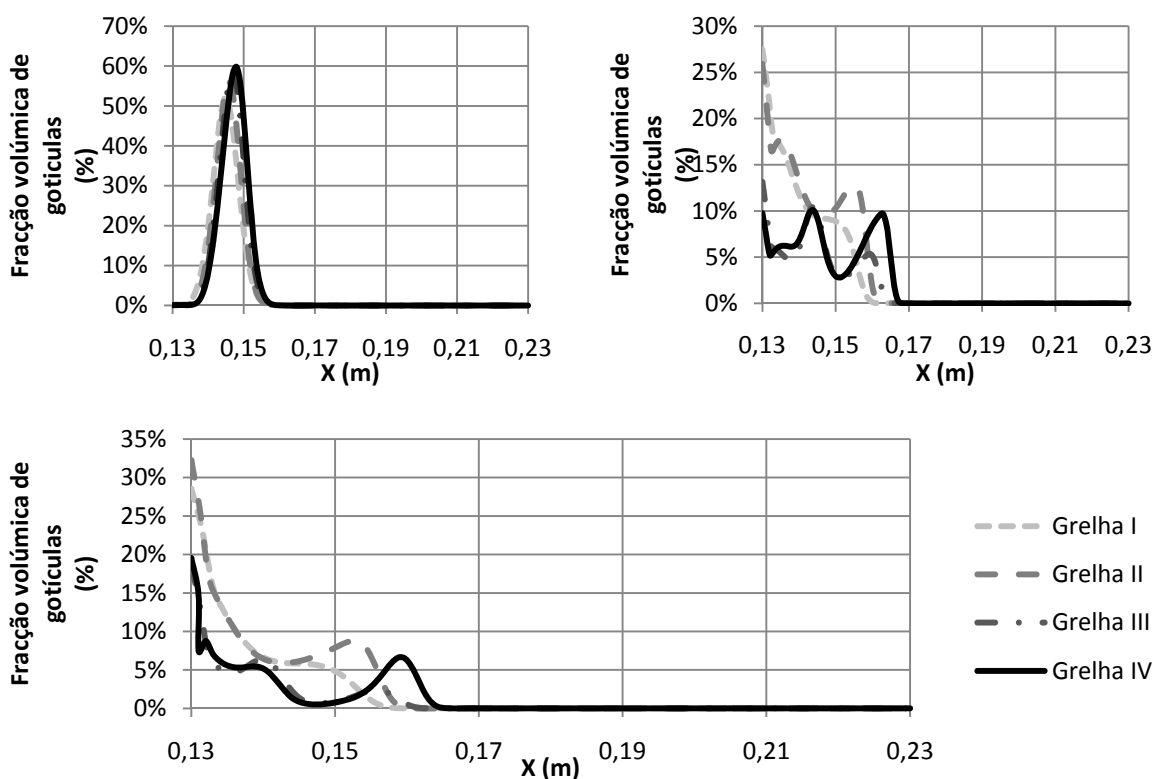


Figura 64 - a) Fracção volúmica das gotículas na linha de intersecção do plano $z=0,005$ com o plano $y=-0,035$; b) Fracção volúmica das gotículas na linha de intersecção do plano $z=0,005$ com o plano $y=-0,15$; Fracção volúmica das gotículas na linha de intersecção do plano $z=0,005$ com o plano $y=-0,23$

Estudo numérico da dispersão de aerossóis produzidos por ultra-sons

A análise das Figura 63 e Figura 64 mostra que os resultados obtidos com a grelha III não são totalmente independentes da densidade da mesma. No entanto, por uma questão de compromisso entre tempo de computação e precisão de resultados, optou-se por prosseguir os estudos tendo por base a grelha IV.

