

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA

**IMPLEMENTAÇÃO, VALIDAÇÃO E APLICAÇÃO DE UM MODELO DE FORÇA
DE LUBRIFICAÇÃO EM SIMULAÇÕES CFD-DEM DE UM LEITO FLUIDIZADO**

João Pedro Ferreira de Campos

Trabalho de Graduação apresentado ao
departamento de Engenharia Química da
Universidade Federal de São Carlos

Orientadora: Prof^ª. Gabriela Cantarelli Lopes

São Carlos – SP

2020

BANCA EXAMINADORA

Orientadora: Prof^a. Dra. Gabriela Cantarelli Lopes, DEQ - UFSCar

Convidado: Eng. Victor Oliveira Ferreira, DEQ - UFSCar

Professora da Disciplina: Prof^a. Dra. Paula Rúbia Ferreira Rosa, DEQ – UFSCar

Trabalho de Graduação apresentado no dia 15 de Dezembro de 2020 perante a seguinte banca examinadora:

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a minha família que sempre me encorajou a buscar conhecimento e me apoiou durante toda a graduação. Pode ser um clichê, mas tenho que dizer que sem eles não estaria onde estou hoje.

Agradeço a Professora Gabriela pelos quase três anos de orientação e por todas as oportunidades que me ofereceu, com certeza a pessoa que mais contribuiu para meu crescimento acadêmico. Agradeço ao amigo, parceiro de pesquisa e as vezes mentor Victor pelas discussões, conselhos e orientações. Aos amigos de laboratório Ricardo e Karla, que me receberam de braços abertos no grupo de pesquisa.

Agradeço a todos os meus amigos que estiveram comigo durante a graduação, em especial a certo grupo muito próximo que sempre conseguiu me manter de bom humor com discussões de cunho duvidoso.

RESUMO

Reatores de leito fluidizado são equipamentos empregados largamente na indústria química, em geral em processos que requerem altas taxas de transferência de massa, uma característica inerente do equipamento. No entanto, pouco se sabe sobre o comportamento microscópico desses sistemas, em especial da dinâmica colisional de partículas fluidizadas. Nesse contexto, o coeficiente de restituição destaca-se por ser o parâmetro que determina a dissipação energética que ocorre em uma colisão. Sabe-se que fluidos viscosos (como misturas aquosas, por exemplo) tendem a afetar negativamente a restituição quando partículas se chocam devido à força de lubrificação. O presente trabalho teve como objetivo implementar um modelo de força de lubrificação em um código aberto CFD-DEM (*computational fluid dynamics – discrete elements modelling*) para avaliar sua influência na dinâmica de um leito fluidizado. O modelo foi implementado diretamente na biblioteca do DEM e foram feitas simulações de validação cujos resultados foram comparados com dados experimentais de outros trabalhos. Após a validação, o modelo foi aplicado na simulação de um leito fluidizado usando um líquido de alta viscosidade e partículas densas. O modelo implementado apresentou boa concordância com os dados experimentais. A análise preliminar dos resultados da simulação do leito apontou que a força de lubrificação teve impacto significativo na dinâmica do leito, influenciando a distribuição de fração de vazios, porosidade e velocidade das partículas, destacando sua importância na simulação de aplicações que envolvam líquidos viscosos e sólidos dispersos.

ABSTRACT

Fluidized bed reactors are commonly used in chemical industry applications, especially in reactions involving heterogeneous catalysis. These equipments have been extensively studied and literature describing its macroscopic dynamic behaviors is largely available. However, the literature regarding the effect of microscopic interactions on these systems is sparse, such as the collisional dynamics of particles immersed in viscous fluids. In this context, the restitution coefficient is an effective way to account for energy dissipation caused by collisions. It is known that the presence of an interstitial viscous fluid when particles collide causes an increase in energy dissipation due to the lubrication force, and thus resulting in a much lower restitution coefficient. The present work aimed to implement a lubrication force model in an open-source CFD-DEM (*computational fluid dynamics – discrete elements modelling*) code in order to evaluate its effect in fluidized beds. The model was implemented directly into the DEM library and calibrated using experimental data from other works. Once validated, the model was applied in a fluidized bed simulation using viscous liquid and dense particles. The model was in good accordance to experimental data and the fluidized bed simulation results were significantly different when the force was included. It was observed that bed porosity decreased while average particle velocity increased, likely due to an increase in particle agglomeration. Overall the results show that the lubrication force should be taken into account when simulating such systems.

SUMÁRIO

Banca Examinadora	i
Agradecimentos	ii
Resumo	iii
Abstract	iv
Sumário	v
Lista de Figuras	vi
Lista de Tabelas e Quadros	vii
Nomenclatura	viii
1- INTRODUÇÃO E OBJETIVOS	1
2- REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	3
2.1- Fluidodinâmica Computacional	3
2.2- Método dos Elementos Discretos	5
2.3- CFD-DEM	7
2.3.1- Força de Lubrificação	9
2.3.2- Leitos Fluidizados	11
3- METODOLOGIA	13
3.1- CFDEM@coupling	13
3.2- Implementação da Força de Lubrificação	17
3.2- Validação do Modelo de Lubrificação	18
3.2.1- Método Colisional	18
3.2.2- Validação	19
3.3- Leito Fluidizado	21
4- RESULTADOS E DISCUSSÃO	24
5- CONCLUSÕES E SUGESTÕES	32
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	33
APÊNDICE A – SCRIPT DA IMPLEMENTAÇÃO DA FORÇA DE LUBRIFICAÇÃO	36

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Geometria não discretizada de uma bifurcação.	4
Figura 2.2	Geometria discretizada de uma bifurcação.	5
Figura 2.3	Modelo atenuador-mola de duas esferas em contato.	6
Figura 2.4	Diferentes casos de tamanho célula/partícula	8
Figura 2.5	Regimes de lubrificação: Hidrodinâmico (III), Misto (II) e de Fronteira (I).	10
Figura 3.1	Detalhe da malha de queda livre (a) e malha do pêndulo (b).	19
Figura 3.2	Vista lateral (a) e superior (b) da malha do leito.	22
Figura 3.3	Coeficiente de restituição em função do número de Stokes.	25
Figura 3.4	Distância, força resultante e de lubrificação em função do tempo para a solução 74% (m) de glicerol.	26
Figura 3.5	Distância, força resultante e de lubrificação em função do tempo para água.	26
Figura 3.6	Detalhe do leito após 30s com (a) e sem a força de lubrificação (b).	28
Figura 3.7	Distribuição de fração de vazios para o leito com (a) e sem (b) a força de lubrificação.	29
Figura 3.8	Histograma da fração de vazios.	30
Figura 3.9	Energia cinética ao longo do tempo para cada simulação.	31

LISTA DE TABELAS E QUADROS

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1	Dados de entrada para as partículas de aço.	19
Tabela 3.2	Parâmetros de entrada da fase fluida.	20
Tabela 4.1	Coefficientes medidos nas simulações para cada método colisional.	24
Tabela 4.2	Energia cinética, velocidade média e número de Stokes da fase sólida	30

NOMENCLATURA

d_p	Diâmetro da partícula	[m]
E	Módulo de Young	[Pa]
f_D	Força de arraste	[N]
$f_{c,ij}$	Força Elástica	[N]
$f_{d,ij}$	Força de atenuação viscosa	[N]
f_l	Força de lubrificação	[N]
$f_{\nabla P}$	Força devido ao gradiente de pressão	[N]
$f_{\nabla \tau}$	Força devido a tensão de cisalhamento do fluido	[N]
p	Pressão da fase fluida	[Pa]
r_{ef}	Raio efetivo	[m]
r_p	Raio da partícula	[m]
u_f	Velocidade do fluido	[m/s]
u_s	Velocidade da fase sólida	[m/s]
ΔV	Volume da célula da malha	[m ³]
F_{pf}	Força volumétrica partícula-fluido	[N m ⁻³]
g	Aceleração gravitacional	[m s ⁻²]
h	Distância relativa	[m]
m_i	Massa da partícula	[kg]
$M_{t,ij}$	Torque tangencial	[N m]
k_c	Número de partículas em contato com a partícula i	[-]

Símbolos gregos

ρ_p	Densidade da partícula	[kg m ⁻³]
ρ	Densidade do fluido	[kg m ⁻³]
β	Coefficiente de fricção	[kg m ⁻³ s ⁻¹]
σ	Parâmetro de distância mínima	[m]
ε	Fração volumétrica da fase fluida	[-]
ω	Velocidade angular	[rad s ⁻¹]
μ_f	Viscosidade do fluido	[Pa s]
α	Coefficiente multiplicativo do raio de contato	[-]

Números adimensionais

e	Coeficiente de restituição
Re_p	Número de Reynolds da partícula
St	Número de Stokes
e_{fit}	Coeficiente de restituição ajustado

Abreviações

CFD	Fluidodinâmica computacional
DEM	Método dos elementos discretos
CFD-DEM	Acoplamento fluidodinâmica computacional – método dos elementos discretos

1- INTRODUÇÃO E OBJETIVOS

Leitos fluidizados são equipamentos muito comuns na indústria química e consistem basicamente de um leito de partículas - em geral usadas como suporte para catalisadores, biofilmes ou mesmo como reagentes - livres no interior de um recipiente por onde passa um fluxo contínuo de fluido ascendente. A força de arraste e o empuxo resultantes da interação das partículas com o fluido faz com que ocorra a fluidização, em que a dinâmica do material sólido apresenta comportamento macroscópico parecido ao de um fluido. Essa operação tem como grande vantagem o baixo tempo de residência e grande superfície de contato, desde que projetado corretamente.

Dessa forma, o comportamento desses sistemas está intrinsecamente ligado às interações fluido-partícula e partícula-partícula. No contexto de interações entre sólidos, o coeficiente de restituição é uma propriedade colisional muito empregada no estudo da dinâmica de corpos rígidos (AGUILAR-CORONA et al, 2011). Trata-se de um parâmetro adimensional que quantifica a fração de energia dissipada na colisão de dois corpos e que não é uma propriedade inerente a materiais específicos, e depende fortemente do tipo e do ambiente em que as colisões ocorrem. Em geral, o material particulado de leitos fluidizados pode ser composto de partículas rígidas como cinzas volantes (ROY et al, 2019) ou macias como polímeros de alginato (WU et al, 2020) que costumam apresentar coeficientes de restituição muito diferentes.

Quando corpos colidem em um meio viscoso, como um líquido, por exemplo, ambos estarão sujeitos a uma força dissipativa conhecida como força de lubrificação (ZHANG et al, 2005). Isso ocorre devido ao gradiente de pressão do filme de fluido que preenche o espaço entre as duas partículas, que é comprimido para fora quando os corpos se aproximam, e “puxado” para dentro quando se afastam. Por conta disso, a força afeta diretamente a restituição das partículas que pode ser quantificada pelo coeficiente de restituição.

A abordagem CFD-DEM têm se mostrado promissora na simulação de leitos fluidizados. Trata-se de um método de acoplamento de simulações utilizando a Fluidodinâmica Computacional (CFD) e o Método dos Elementos Discretos (DEM) para a fase particulada. No entanto, os trabalhos que empregam esta abordagem raramente exploram

os efeitos colisionais (KERST et al, 2017; MA et al, 2019; YANG et al, 2017) além de frequentemente usarem fluidos de baixa viscosidade, como o ar. O trabalho de Lopes et al. (2018) mostrou experimentalmente que o coeficiente de restituição das partículas influencia a dinâmica do leito, e que partículas com baixa restituição tendem a formar um leito de maior heterogeneidade, ressaltando a importância de incluir a força de lubrificação nas simulações. Dessa forma, o presente trabalho teve como objetivo implementar e validar um modelo de força de lubrificação em um programa de simulações CFD-DEM de código aberto, além de aplicá-lo em simulações de um leito fluidizado para que a influência da força possa ser analisada.

2- REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Como o método CFD-DEM está presente em todo o trabalho, este capítulo trata de seus aspectos fundamentais inicialmente de forma separada e em seguida sobre o acoplamento dessas técnicas. Além disso, a força de lubrificação será apresentada juntamente com uma justificativa para o método de implementação utilizado. Por fim, será feita uma revisão sobre leitos fluidizados e CFD-DEM.

2.1- Fluidodinâmica Computacional

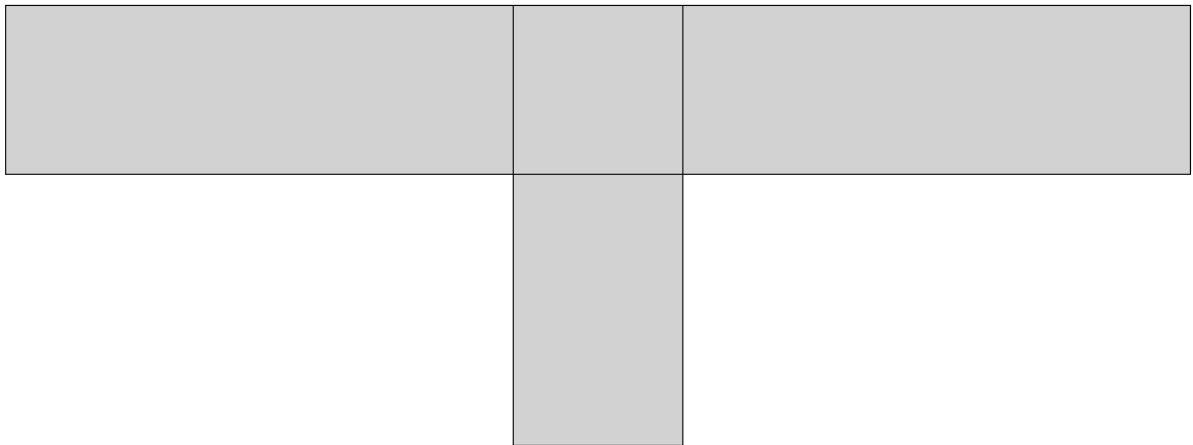
O termo Fluidodinâmica Computacional compreende uma série de métodos para simulação numérica de sistemas fluidos. A maioria das abordagens de CFD se baseia na discretização de equações de conservação (como massa, momento e energia), em geral equações diferenciais parciais de complexa (ou impossível) solução analítica. Uma forma de discretização muito comum é a dos volumes finitos, uma abordagem conhecida como Euleriana, assim definida por se basear em um tratamento da matéria como um contínuo. Esta técnica consiste em dividir o domínio da simulação em pequenos volumes geométricos fictícios (malha numérica), que servirão de base para a integração das equações de conservação (NEILL e HASHEMI, 2018; PATANKAR, 1980).

A integração das equações de conservação nos volumes fictícios, juntamente a métodos numéricos de interpolação e derivação permitem que o sistema de equações diferenciais parciais seja reduzido a um sistema de equações algébricas. Para que o sistema seja resolvido é necessário que sejam fornecidas as condições iniciais e de contorno do problema. No caso do escoamento de um fluido newtoniano incompressível em um tubo cilíndrico, por exemplo, as condições iniciais seriam os campos de velocidade e pressão no interior do tubo no instante 0, enquanto que as condições de contorno seriam os valores dos campos na entrada, saída, e na proximidade das paredes do tubo.

Uma simulação de CFD pode ser dividida em 3 etapas principais: o pré-processamento, solução e pós-processamento. Na primeira etapa, a geometria do problema é construída usando *softwares* de modelagem 3D e em seguida dividida em volumes fictícios usando algoritmos

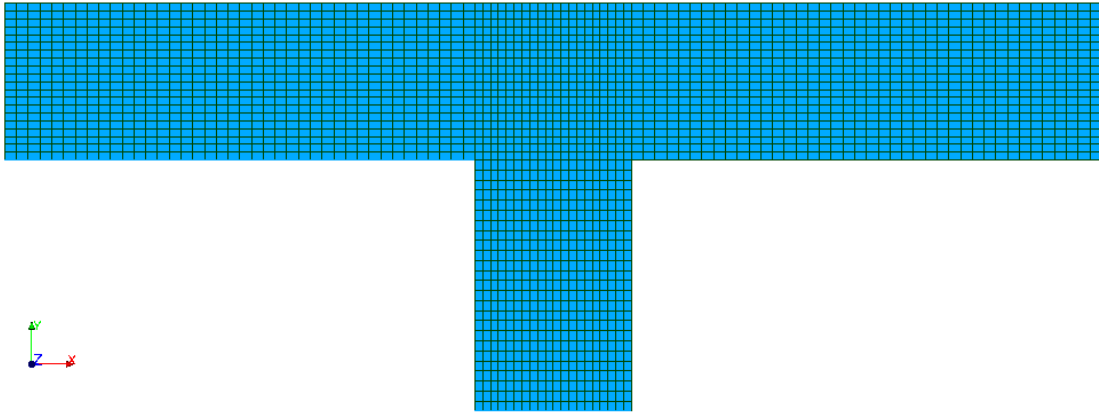
geradores de malha, geralmente presentes nos próprios programas de modelagem. É nesta etapa que se deve definir quais regiões da geometria permitirão a passagem de fluido e quais serão tratadas como paredes ou objetos sólidos. É importante ressaltar que fatores como a exatidão e tempo de simulação estão diretamente ligados ao tamanho dos volumes – também chamados de células – da malha, e, portanto deve-se tomar o devido cuidado de refinar regiões críticas da geometria. As células da malha podem ser de qualquer formato geométrico desde que seja compatível com o programa usado na etapa de solução. Em geral células hexaédricas oferecem melhor convergência e tempos de solução, porém requerem maior trabalho para geração em comparação com elementos tetraédricos. A Figura 2.1 traz um exemplo de geometria de uma bifurcação bidimensional, e a Figura 2.2 traz a mesma geometria, porém já discretizada em volumes finitos. As divisões no interior da geometria da Figura 2.1 são usadas para quebrar a geometria em regiões, facilitando o refino local na discretização.

Figura 2.1. Geometria não discretizada de uma bifurcação.



Fonte: Acervo pessoal.

Figura 2.2. Geometria discretizada de uma bifurcação.



Fonte: Acervo pessoal.

Tendo-se pronta a malha e as condições iniciais e de contorno do problema, parte-se para a etapa de solução. Atualmente existem várias ferramentas comerciais e *open-source* para solução de problemas multifísicos que suportam aplicações de CFD, e quase sempre essas ferramentas oferecem mais de um algoritmo de solução. É nesta etapa também que o passo de tempo (se aplicável) é selecionado, em conjunto com os esquemas numéricos a serem usados, ambos os fatores importantes para a estabilidade e convergência do problema.

É comum que os resultados da etapa de solução sejam salvos em arquivos de texto contendo as variáveis que foram resolvidas para cada volume da malha em cada instante de tempo. A visualização desses resultados requer programas de pós-processamento que são capazes de interpretá-los e renderizá-los, além de disponibilizarem diversas ferramentas para análise e tratamento.

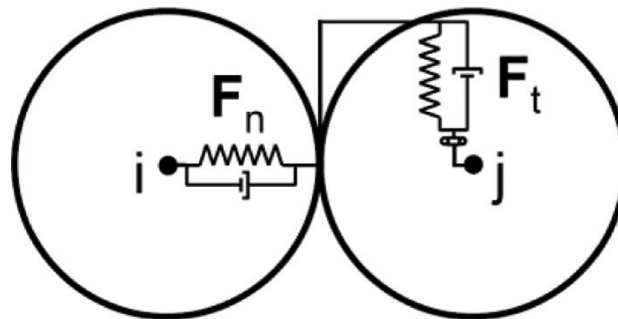
2.2- Método dos Elementos Discretos

O método dos elementos discretos é uma abordagem Lagrangiana, na qual corpos são acompanhados individualmente ao longo de sua trajetória não fixa no espaço. Trata-se de um

ramo bem estabelecido do estudo da dinâmica de sistemas granulares. O DEM se baseia nas leis de Newton da mecânica clássica, nesta técnica os vetores de velocidade e a posição de cada corpo são calculados e atualizados em cada passo de tempo através do balanço de forças.

A aplicação mais simples do DEM está na simulação de colisões de corpos esféricos. Uma abordagem comum para esse tipo de sistema é o modelo de Hertz-Mindlin, que descreve as forças normais e tangenciais sobre uma partícula esférica usando uma junção das equações desenvolvidas por Hertz (1882) e Mindlin (1949). De forma simplificada, as colisões são modeladas por sistemas do tipo atenuador-mola e as deformações elásticas são aproximadas pela sobreposição das partículas. A Figura 2.3 ilustra essa abordagem, em que F_n é a força normal e F_t a força tangencial, ambas esquematizadas pela associação em paralelo de uma mola e um atenuador.

Figura 2.3. Modelo atenuador-mola de duas esferas em contato.



Fonte: Adaptado de Kloss et al, 2012.

Assumindo que nenhum outro modelo de força seja incluído, o pré-processamento de simulações DEM é relativamente simples quando comparado com CFD, já que não requer a discretização do domínio. Além da geometria, é necessário especificar os parâmetros de entrada, que, no caso do modelo de Hertz-Mindlin, são o módulo de Young, o coeficiente de fricção estática, o coeficiente de restituição e a razão de Poisson.

O módulo de Young e a razão de Poisson são características inerentes aos tipos de materiais que compõe os sólidos, enquanto o coeficiente de atrito estático depende do par de materiais em contato. O primeiro é também conhecido como módulo de elasticidade, e relaciona a tensão sofrida pelo corpo com sua deformação elástica (medido em unidades de

pressão), enquanto o segundo é um parâmetro adimensional que relaciona as taxas de deformação axial e transversal de um sólido.

Já o coeficiente de restituição, assim como o de atrito, depende do par de materiais que interagem. Trata-se de um parâmetro adimensional que varia de 0 a 1 que quantifica a energia dissipada em uma colisão, e pode ser avaliado pela relação entre as velocidades normais de afastamento e de aproximação após uma colisão (AGUILAR-CORONA et al., 2011). Quanto mais próximo de 1 for o coeficiente, mais elástica é a colisão.

A fonte da dissipação de energia em colisões em meio seco (ar) pode ser atribuída a duas fontes principais, dependendo do tipo da colisão. Em colisões plásticas, o corpo sofre deformação irreversível reduzindo sua energia cinética. Esse tipo de colisão não está presente em simulações DEM e requer uma abordagem mais complexa. Já em colisões elásticas, o principal meio de dissipação é a propagação de ondas elásticas ao longo da superfície, cuja velocidade é proporcional ao módulo de Young do material. Isso significa que corpos mais macios tem uma tendência a apresentarem menor coeficiente de restituição (WEIR e TALLON, 2005).

O programa aberto LIGGGHTS é um pacote computacional construído especificamente para simulações DEM baseado no algoritmo de Kloss et al (2012). Sua estrutura modular permite que outros modelos de força sejam facilmente implementados, sejam eles de contato ou não, como forças de coesão por exemplo.

2.3- Acoplamento CFD-DEM

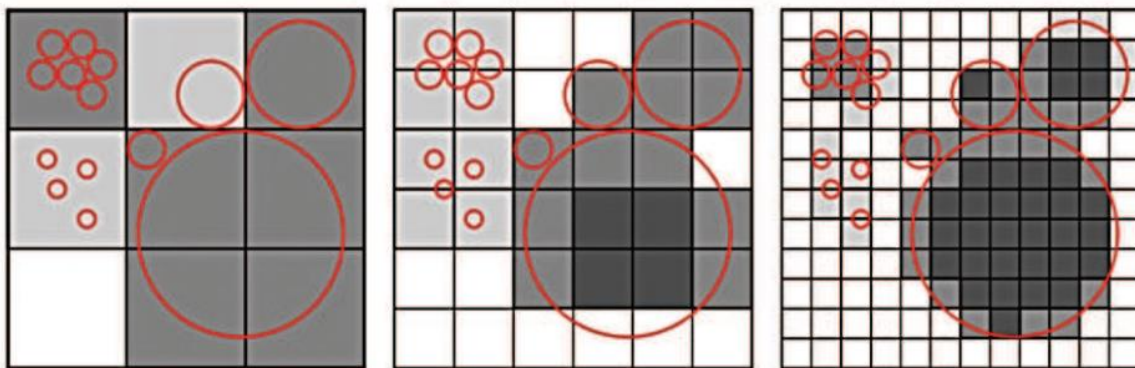
A abordagem CFD-DEM é, como o próprio nome indica, um acoplamento entre as técnicas de CFD e DEM para simulações numéricas de sistemas fluido-granulares. Programas que suportam o acoplamento completo incluem a transferência de momento para interações partícula-fluido, além de incluir no balanço de forças do DEM as forças que o fluido exerce sobre a fase sólida.

A implementação deste tipo de acoplamento requer atenção a uma série de detalhes. Primeiramente, é necessário que haja um algoritmo capaz de rastrear a posição das partículas e as células da malha que ocupam, para que a fração de vazios da célula seja estimada

corretamente. O trabalho de Kloss et al (2012) apresenta alguns métodos de rastreamento e distribuição do volume ocupado pelas partículas na malha.

Quando o volume das partículas é próximo ou maior que as células do domínio, têm-se problemas de convergência já que parte das células serão completamente cobertas e terão fração de vazio nula, causando instabilidade numérica. Em Kuruneru et al (2018), o autor aponta que não há um consenso acadêmico da proporção ideal, e ao mesmo tempo sugere que o problema da fração de vazio nula pode ser contornado incorporando um valor mínimo da fração de vazio aos algoritmos de distribuição de partículas. A Figura 2.4 ilustra diferentes situações de tamanho relativo da malha e das partículas. As partículas são representadas pelas linhas vermelhas e as células pelas linhas pretas, sendo coloridas de acordo com a fração de vazios.

Figura 2.4. Diferentes casos de tamanho célula/partícula.



Fonte: Kuruneru et al, 2018.

Quando o tamanho das células está próximo da ordem de grandeza do material particulado, têm-se o que se chama de acoplamento não resolvido. Isso significa que forças causadas pela pressão, tensão de cisalhamento e arraste do fluido não são diretamente calculadas pelas equações governantes, e precisam ser incluídas separadamente como modelos. A grande vantagem de simulações não resolvidas é seu reduzido custo computacional, já que permitem um número menor de elementos na malha (BLAIS et al. 2016).

Existem técnicas que possibilitam a solução do escoamento resolvido. Ainda em Kloss et al (2012), os autores apresentam uma abordagem de volumes fictícios baseada no método de fronteira imersa (do inglês *immersed boundary*), que, de maneira simplificada, consiste de um algoritmo que refina a malha dinamicamente ao redor das partículas. Dessa forma, a simulação terá maior exatidão já que não precisa de modelos pois todas as forças que o fluido exerce sobre as partículas serão calculadas diretamente, porém aumenta o custo computacional exponencialmente ao ponto de limitar as simulações a centenas de partículas.

Outro ponto importante do acoplamento CFD-DEM está no passo de tempo. A escala de tempo de colisões entre partículas é da ordem de 10^{-6} a 10^{-5} segundos, consideravelmente inferior a escala de grande parte das aplicações de CFD. Por este motivo, é comum que programas que oferecem esse tipo de simulação permitam que os passos de tempo sejam independentes, ou seja, o acoplamento só ocorre a cada n passos de tempo do DEM.

Um algoritmo geral para simulações CFD-DEM não resolvidas é (KLOSS et al., 2012):

- O DEM calcula a posição e velocidade das partículas;
- As células da malha que contém partículas são mapeadas;
- A fração de vazio das células bem como a velocidade média das partículas em seu interior são calculados;
- As forças do fluido sobre as partículas são calculadas e enviadas ao DEM;
- O momento das partículas é transferido ao fluido;
- O CFD calcula os campos de pressão e velocidade do fluido levando em conta as frações de vazio, resolvendo o passo de tempo e voltando para a etapa inicial.

2.3.1- Força de Lubrificação

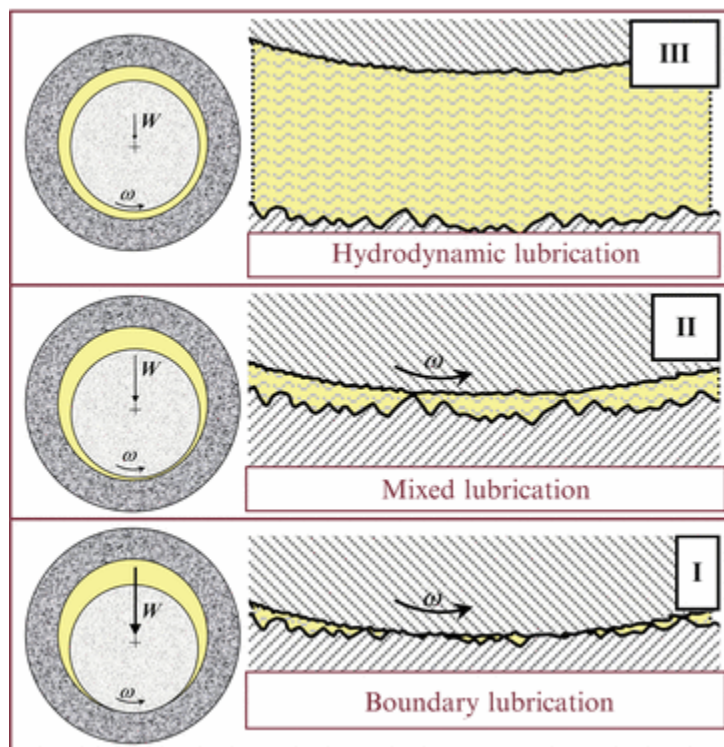
Quando dois corpos imersos em um fluido viscoso interagem, o fluido intersticial exerce uma força contrária ao movimento relativo dos corpos devido ao gradiente de pressão causado pelo esvaziamento ou preenchimento do espaço entre eles. Este fenômeno já foi observado experimentalmente e é responsável por aumentar consideravelmente a dissipação energética de colisões, fazendo com que partículas que são quase perfeitamente elásticas (coeficiente de restituição próximo da unidade) em meio seco apresentassem coeficientes de restituição

reduzidos quando imersas em um fluido viscoso (JOSEPH, 2003; RUIZ-ANGULO e HUNT, 2010; SUN e XIAO, 2016; ZHANG et al., 2005).

Devido à rugosidade superficial dos materiais, quando a força que causa sua aproximação é suficientemente grande o fluido intersticial é completamente expulso com a exceção de pequenos “bolsos” de fluido que se formam entre os picos e depressões da superfície rugosa. Nesse tipo de situação o fluido ainda exerce pressão sobre os corpos mas a maior parte da carga é suportada pelos próprios corpos em contato.

O tipo de lubrificação entre dois corpos é classificado em relação à espessura do filme de fluido intersticial, e pode ser separado em três categorias (LENARD, 2006): a primeira é quando há total separação entre os corpos e é chamada de lubrificação hidrodinâmica, que em geral ocorre quando a pressão intersticial é suficiente para manter os corpos afastados; a lubrificação mista ou elastohidrodinâmica ocorre quando a carga é parcialmente suportada pelo fluido e pelas asperezas da superfície, que sofrem deformação elástica além de formarem alguns bolsos de fluido; e por fim, a lubrificação de fronteira ocorre quando há contato e deformação plástica das asperezas, resultando em uma camada de fluido de apenas algumas moléculas de espessura. A Figura 2.5 ilustra os regimes de lubrificação:

Figura 2.5. Regimes de lubrificação: Hidrodinâmico (III), Misto (II) e de Fronteira (I).



Fonte: Adaptado de Wang e Chung., 2013.

A formulação desta força deriva da já consolidada teoria da lubrificação, e pode ser implementada em simulações CFD-DEM por dois métodos diferentes. O primeiro método é um híbrido que acopla simulação numérica direta e um modelo analítico que independe do escoamento para escalas inferiores a resolução da malha. Isso significa que quando dois corpos estão a uma distância superior ao espaçamento das células, a força de lubrificação é resolvida diretamente pelas equações governantes da fase fluida que capturam os gradientes de pressão e tensão sobre a partícula, e quando se aproximam até um limite pré-determinado, a força passa a ser calculada usando o modelo. Essa abordagem foi usada no trabalho de Lambert et al (2017), em que o autor aponta que o tamanho mínimo da malha nesse caso deve ser de cerca de um milésimo do diâmetro das partículas para que a camada de fluido intersticial seja resolvida.

O segundo método consiste da implementação direta das equações teóricas no DEM. Dessa forma, qualquer que seja a distância dos dois corpos ou o espaçamento das células, a

força será sempre calculada de maneira independente do escoamento. Esse método requer consideravelmente menos células na malha do que o primeiro já que se baseia em uma abordagem não resolvida, permitindo que muito mais partículas sejam simuladas. Em contrapartida, tem menor exatidão, principalmente por não modelar a movimentação do fluido intersticial que pode afetar o escoamento de partículas adjacentes.

2.3.2- Leitos Fluidizados

Leitos fluidizados são equipamentos amplamente usados e estudados na área de processos químicos. Sua grande vantagem está na grande superfície de interação entre as fases sólida e líquida, permitindo maior conversão e rendimento de reações. São comumente usados para tratamento de água residuária e produção de metano verde (GAVRILESCU, 2002; NADAIS et al., 2011), em um processo em que partículas recobertas por biofilmes de bactérias ou algas (CHANDRASHEKHAR e PANDEY, 2017) são fluidizadas por líquidos ricos em matéria orgânica e óleos.

Embora estudos experimentais desses sistemas já tenham sido feitos extensivamente, ainda pouco se sabe da influência de interações microscópicas sobre o comportamento do leito. Isso se deve principalmente a dificuldade de coleta e análise de dados, ficando na maioria das vezes restrita a observações visuais. Nesse sentido, simulações CFD-DEM são ferramentas poderosas para estudar e prever características importantes como a distribuição de vazios, formação de caminhos preferenciais e interações colisionais entre as partículas. Wang et al (2011) aponta o potencial desta abordagem no estudo da formação de vórtices e sua influência na mistura do material por exemplo.

A força de lubrificação tem um papel importante na dinâmica de leitos fluidizados por líquidos viscosos, especialmente em situações de baixo número de Stokes. No trabalho de Liu et al (2015), os autores apontam que a grande maioria das simulações de leitos líquidos por CFD-DEM consideram um valor fixo para o coeficiente de restituição, o que não é representativo de observações experimentais, já que a restituição é afetada pelo fluido intersticial. Os autores, no entanto propuseram uma abordagem alternativa: ao invés de implementar a força de lubrificação, optaram por usar um coeficiente de restituição dinâmico em função do número de Stokes no momento de impacto. Os resultados mostraram que

simulações que usaram o coeficiente de restituição fixo apresentaram maior porosidade e altura do leito expandido.

3- METODOLOGIA

Todas as simulações deste trabalho foram realizadas usando o software aberto CFDEM®coupling que será descrito nessa seção. As equações e modelos considerados em cada um dos programas serão apresentados, bem como a implementação do modelo de força de lubrificação e os métodos de validação utilizados. Por fim, a simulação do leito fluidizado será explicada. O código usado na implementação será incluído no anexo A.

3.1- CFDEM®coupling

O CFDEM®coupling é um programa de biblioteca aberta desenvolvido pela DCS Computing GmbH. Trata-se uma interface de acoplamento entre os códigos abertos LIGGGHTS®, também feito pela DCS, e OpenFOAM® da empresa OpenCFD para simulações CFD-DEM de acoplamento completo.

O LIGGGHTS® é um pacote de ferramentas para simulação de partículas discretas que usa a abordagem DEM. Sua construção é modular e permite a implementação de modelos novos usando a linguagem de programação C++. As simulações são construídas a partir de um script de execução em que o usuário deve especificar parâmetros como o domínio, a geometria, quais modelos serão usados, as propriedades dos materiais envolvidos e a região em que as partículas serão criadas.

Quando usado na interface do CFDEM®coupling, Equações 3.1 e 3.2 são usadas para modelar a dinâmica de uma partícula i , de densidade ρ_p , massa m_i , momento de inércia I_i e raio r_p :

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = F_{pf} \Delta V + (\rho_p - \rho_f) \frac{4\pi r_p^3}{3} g + \sum_{j=1}^{k_c} [(f_{c,ij}^n + f_{d,ij}^n) + (f_{c,ij}^t + f_{d,ij}^t)] \quad (3.1)$$

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_{j=1}^{k_c} (M_{t,ij}) \quad (3.2)$$

Onde v_i e ω_i representam as velocidades linear e angular respectivamente, e k_c o número de partículas em contato com a partícula i . Os termos dentro dos somatórios são provenientes diretamente do DEM e dependem do modelo de contato usado, e são, em ordem, a força elástica normal, a força de atenuação normal, a força elástica tangencial e a força de atenuação tangencial. Já o termo F_{pf} é onde são computadas as forças provenientes das interações partícula-fluido calculadas pelo CFDEM@coupling e enviadas ao LIGGGHTS®, e é expandido nas Equações 3.3 a 3.6:

$$F_{pf} = \frac{1}{\Delta V} (f_D + f_{\nabla p} + f_{\nabla \cdot \tau}) \quad (3.3)$$

$$f_D = \beta |u_s - u_f| \Delta V \quad (3.4)$$

$$f_{\nabla p} = -\nabla p \frac{\pi d_p^3}{6} \quad (3.5)$$

$$f_{\nabla \cdot \tau} = -(\nabla \cdot \tau) \frac{\pi d_p^3}{6} \quad (3.6)$$

Os termos dentro da Equação 3.3 são, respectivamente, a força de arraste, a força do gradiente de pressão p e a força devido ao gradiente de tensão de cisalhamento τ . Em fluidos de baixa viscosidade, essas forças não costumam serem significativas, porém devem ser consideradas em escoamentos solido-líquido (CROWE ET AL, 2011). O coeficiente de fricção β da Equação 3.4 é estimado pelo modelo de arraste de Gidaspow (GIDASPOW, 1994):

$$\beta = 150 \frac{(1-\varepsilon)^2 \mu_f}{\varepsilon (d_p \phi)^2} + 1,75 \frac{\rho_f |u_f - u_s| (1-\varepsilon)}{d_p \phi}, \text{ para } \varepsilon < 0,8 \quad (3.7)$$

$$\beta = \frac{3}{4} C_D \frac{\varepsilon |u_f - u_s| \rho_f (1-\varepsilon)}{d_p} \varepsilon^{-2,65}, \text{ para } \varepsilon > 0,8 \quad (3.8)$$

$$C_D = \frac{24}{Re_p} [1 + 0,15 Re_p^{0,687}], \text{ para } Re_p < 1000 \quad (3.9)$$

$$C_D = 0,44, \text{ para } Re_p \geq 1000 \quad (3.10)$$

Onde:

$$Re_p = \frac{\varepsilon \rho_f (u_f - u_s) d_p}{\mu_f} \quad (3.11)$$

Em que ε representa a fração de vazio do líquido, u_f e u_s as velocidades do fluido e do sólido.

As forças de contato e o torque $M_{t,ij}$ que agem sobre a partícula são baseados no modelo de Hertz-Mindlin (GELNAR e ZEGZULKA, 2019), e são apresentados nas Equações 3.12 a 3.16:

$$f_{c,ij}^n = \frac{4}{3} E' \sqrt{r_p \delta_n} \cdot \delta_{n,ij} \quad (3.12)$$

$$f_{d,ij}^n = 2r_p^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{10m_i E'}{6}} \frac{\ln(e)}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2(e)}} \delta_n^{\frac{1}{4}} v_{n,ij} \quad (3.13)$$

$$f_{c,ij}^t = 8G' \sqrt{r_p \delta_n} \cdot \delta_{t,ij} \quad (3.14)$$

$$f_{d,ij}^t = 2r_p^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{20m_p G'}{3}} \frac{\ln(e)}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2(e)}} \delta_n^{\frac{1}{4}} v_{t,ij} \quad (3.15)$$

$$M_{t,ij} = r_{p,ij} (f_{c,ij}^t + f_{d,ij}^t) \quad (3.16)$$

Onde E é o módulo de Young, δ_n a sobreposição normal de duas partículas, que é a forma como o algoritmo trata deformações elásticas, v_n e v_t as razões de Poisson normal e tangencial, G o módulo de cisalhamento, e o coeficiente de restituição e m_p a massa da partícula. A força tangencial que atua sobre a partícula é limitada pelo produto do coeficiente de atrito estático e a força normal.

O algoritmo do LIGGGHTS® é baseado em uma lista de “vizinhos” que é atualizada com uma frequência definida pelo usuário. Essa lista contém os pares de partículas i e j cuja distância de separação de seus centros de massa é igual ou menor que um valor dado por:

$$d_{min} = \alpha(r_i + r_j) + s \quad (3.17)$$

Em que α é um coeficiente maior ou igual a 1 que pode ser definido pelo usuário dependendo da distância em que os modelos de não contato atuam. Como as simulações de validação consistiam de apenas uma partícula, o valor de α não influenciou o custo computacional e foi usado arbitrariamente como 100 para garantir que a força fosse completamente capturada. Já nas simulações do leito, para evitar que o número de interações detectadas por partícula por passo de tempo excedesse o limite do algoritmo de 8000, o valor de 1,1 foi utilizado seguindo a recomendação da documentação do *software*. S é um parâmetro de distância que permite alterar d_{min} de forma mais direta, para que os pares não sejam construídos apenas quando há contato. Essa abordagem reduz o custo computacional já que o programa não precisa buscar e identificar quais partículas estão interagindo a cada passo de tempo, além de permitir que o raio de atuação de forças de não contato seja limitado. O parâmetro s foi nulo em todas as simulações.

O software OpenFOAM® é uma ferramenta aberta de simulações multifísicas para problemas que incluem transferência de energia, massa e quantidade de movimento. No caso das simulações deste trabalho, apenas as equações de transferência de momento e de continuidade (Navier-Stokes) foram consideradas.

A fase fluida usa como parâmetros de entrada a densidade e viscosidade cinemática. As regiões da malha que correspondem a paredes, entradas e saídas devem ser corretamente estabelecidas para que as condições de contorno sejam aplicadas. O programa oferece uma grande seleção de condições de contorno pré-implementadas, como a função *zeroGradient* por exemplo, que especifica que as condições do fluxo na fronteira serão determinadas pelo fluxo adjacente, geralmente usada para o interior da malha e regiões onde o fluido sai do sistema.

Além disso, deve-se ainda determinar qual método de solução será usado para as equações de Navier-Stokes. Todas as simulações deste trabalho fizeram uso do *cfdemSolverPiso*, baseado no algoritmo PISO (do inglês *Pressure-Implicit with Splitting of*

Operators) que resolve o acoplamento pressão-velocidade em um processo iterativo. Trata-se de um *solver* apropriado para simulações transientes, com passo de tempo pequeno e que suporta modelos de turbulência do tipo RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*).

O CFDEM®coupling oferece diferentes abordagens para rastreamento das partículas e cálculo das frações de vazios nas células da malha. O algoritmo escolhido neste trabalho foi o *voidfractionModel_dividedVoidFraction* que divide cada partícula em 29 regiões não sobrepostas e as rastreia individualmente pelo seu centroide. As frações de vazios são interpoladas em cada passo de tempo, usando a fração atual e a anterior. O acoplamento em todas as simulações foi não resolvido.

3.2– Implementação da Força de Lubrificação

A força de lubrificação foi implementada diretamente na biblioteca de modelos do LIGGGHTS®, entrando como um dos componentes dentro do somatório na Equação 3.1. O modelo usado é baseado na solução analítica das equações de lubrificação para a componente normal da força apresentada por Davis et al (1986):

$$f_{lub} = -\frac{6\pi\mu_f r_{ef} v_n}{h} \quad (3.18)$$

Em que μ_f , v_n e h são a viscosidade do fluido, a velocidade normal relativa e a distância entre os dois corpos respectivamente. O raio efetivo r_{ef} é dado por:

$$\frac{1}{r_{ef}} = \frac{1}{r_i} + \frac{1}{r_j} \quad (3.19)$$

Pela Equação 3.18 é possível notar o comportamento assintótico da força: tende a 0 quando h aumenta e a infinito quando h diminui. Este comportamento deriva da hipótese de que o escoamento intersticial está no regime de Stokes, o que implica que dois corpos imersos em fluidos viscosos nunca se tocarão em uma quantidade finita de tempo. Isso significa que a implementação deste modelo requer limites superiores e inferiores para a variável h de forma a evitar erros numéricos. O limite superior é dado pelo termo α da Equação 3.17, e o inferior por

um novo parâmetro de entrada σ definido no modelo. Quando a distância entre os corpos é menor que o parâmetro limitante (σ), ele substituirá o valor da distância na variável h . O trabalho de Zhang et al (2005) sugere que uma boa estimativa para a distância mínima de contato é a rugosidade superficial dos materiais.

3.3- Validação do Modelo de Lubrificação

3.3.1- Método Colisional

O modelo implementado foi validado usando os dados experimentais apresentados em Joseph (2003), em que um pêndulo imerso em fluidos de diferentes viscosidades foi usado para colidir partículas de aço com uma parede de material cerâmico.

Em geral, a restituição de partículas é investigada experimentalmente usando-se o método de queda livre, em que uma esfera sai do repouso em uma altura pré-determinada e colide com uma parede plana (FOERSTER et al, 1994; HASTIE, 2013; SONDERGAARD et al, 1990; WANG et al, 2015). Este método, no entanto, pode gerar erros experimentais atrelados a rugosidade e imperfeições superficiais que causam desvios na trajetória das partículas.

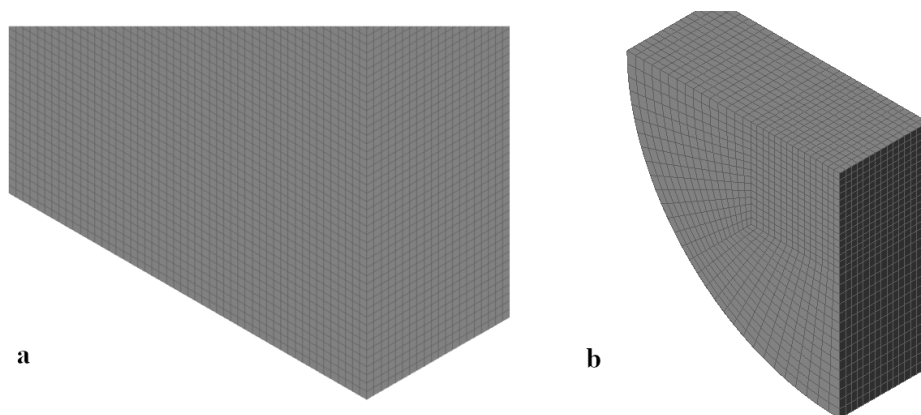
Simular impactos usando um pêndulo é um trabalho consideravelmente mais complexo do que simplesmente utilizar o método de queda livre. Dessa forma, primeiramente foi investigado se o método colisional usado influencia nos resultados do coeficiente de restituição medido, para verificar a possibilidade de usar a geometria de queda livre para comparação com dados experimentais produzidos pelo pêndulo. Sabe-se que o coeficiente de restituição experimental pode variar consideravelmente dependendo do método usado para a colisão (HLOSTA et al, 2018), porém como as partículas são perfeitamente esféricas nas simulações, é possível que essa diferença seja desprezível.

O CFDEM® não oferece suporte para pêndulos, e, portanto o sistema foi aproximado por uma superfície curva que será apresentada a seguir. A partícula parte do repouso e “escorrega” pela superfície curva de um cilindro que foi considerada perfeitamente lisa e

elástica (coeficiente de atrito nulo e coeficiente de restituição igual a 1). A geometria consistiu de um quarto de cilindro de 24 cm de raio e 10 cm de largura, de onde as partículas iniciam sua queda a uma altura de 23,5 cm.

A geometria usada na queda livre foi uma caixa retangular de dimensões 50 x 20 x 160 cm, discretizada de maneira a criar volumes fictícios regulares de exatamente 1 cm³, valor próximo ao volume das células da malha do pêndulo. As partículas foram geradas a uma distância de 23,5 cm da parede inferior da caixa. Ambas as malhas foram criadas usando o software livre SALOME.

Figura 3.1. Detalhe da malha de queda livre (a) e malha do pêndulo (b).



Fonte: Acervo próprio.

Os dados de entrada usados para a partícula, exceto o coeficiente de restituição que foi variado de 0,9 a 0,3 são apresentados na Tabela 3.1:

Tabela 3.1. Dados de entrada para as partículas de aço.

Densidade (kg/m³)	Diâmetro (mm)	Módulo de Young (Pa)	Coefficiente de restituição
7780	6,35	1×10^9	0,97

Fonte: Adaptado de Joseph (2003).

A força de lubrificação não foi levada em consideração nessa etapa e o fluido usado foi ar a 20°C e pressão uniforme de 1 atm por todo o domínio, com densidade de 1,204 kg/m³ e

viscosidade cinemática de $1,516 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$. O passo de tempo do DEM foi de 10^{-5} s e do CFD de 10^{-3} s . O escoamento foi considerado laminar e incompressível.

O parâmetro de análise utilizado foi o coeficiente de restituição medido nas simulações, definido como a razão entre as velocidades imediatamente antes e após o impacto.

3.3.2- Validação

No trabalho de Joseph (2003), o autor colide partículas individuais usando um pêndulo imerso em soluções aquosas com diferentes concentrações de glicerol para medir o efeito do fluido no coeficiente de restituição. Cada coeficiente obtido foi então associado a um número de Stokes no momento do impacto, dado por:

$$St = \frac{\rho_f v_i r_p}{9\mu_f} \quad (3.20)$$

Em que v_i é a velocidade da partícula imediatamente antes do impacto. Os dados experimentais obtidos pelo autor para partículas de aço foram aproximados por uma curva em função do número de Stokes de impacto (Ruiz-Angulo e Hunt, 2010):

$$e_{fit} = 1 - \frac{8.65}{St^{0.75}} \quad (3.21)$$

O método de queda livre foi o escolhido para a validação do modelo de lubrificação, utilizando a mesma malha descrita na seção anterior. Como Joseph (2003) não apresenta em sua metodologia as alturas iniciais ou os ângulos de soltura do pêndulo, a altura inicial das partículas nas simulações foi arbitrariamente fixada em 15 cm. Os parâmetros de entrada para as partículas foram apresentados na Tabela 3.1. Três valores para o limite de distância mínima no cálculo da força foram testados: 0,5 μm , 1,0 μm e 2,0 μm , para soluções de 4 concentrações diferentes de glicerol cujas propriedades são apresentadas na Tabela 3.2:

Tabela 3.2. Parâmetros de entrada da fase fluida.

Solução de Glicerol (%m)	Densidade (Kg/m ³)	Viscosidade (Pa.s)
74	1189,25	0,025200
67	1170,20	0,014276
50	1123,75	0,005000
0	997,10	0,000893

Fonte: Adaptado de Joseph (2003).

A pressão do fluido no domínio foi considerada inicialmente uniforme e igual a 1 atm. O escoamento foi considerado laminar, isotérmico e incompressível, com passo de tempo de 10^{-3} s para o fluido e 10^{-5} s para a fase sólida. Os coeficientes de restituição medidos nas simulações foram comparados com a curva experimental apresentada na Equação 3.21.

3.4- Leito Fluidizado

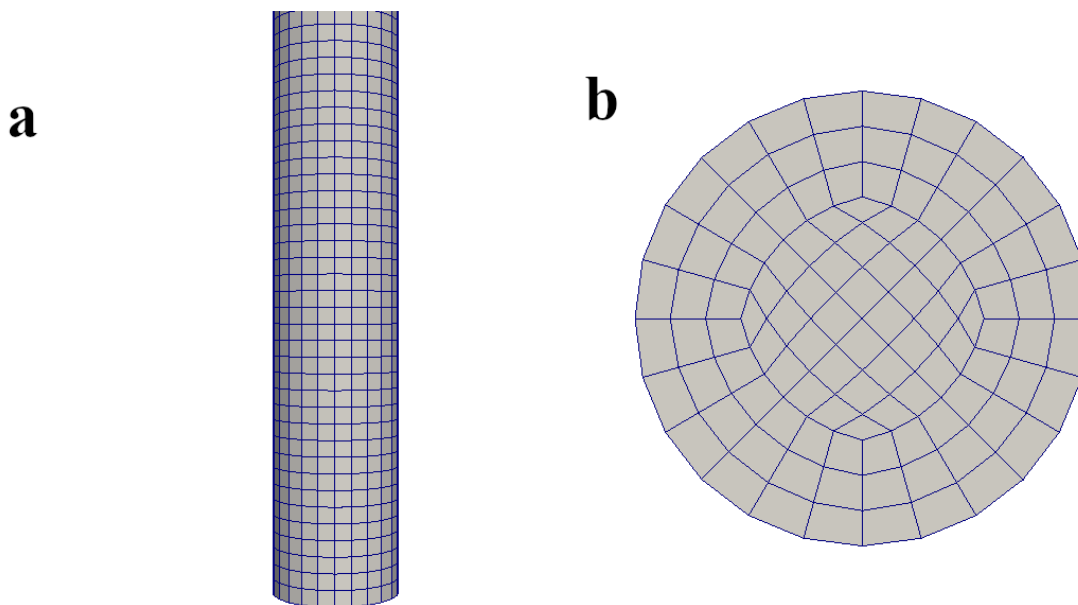
Foram feitas duas simulações de leito fluidizado, sendo que uma delas não incluiu a força de lubrificação na modelagem. O material particulado consistiu das mesmas partículas de aço, e o fluido foi uma solução de glicerol de 74% em massa. As dimensões do leito cilíndrico foram arbitrárias e definidas como 10 cm de diâmetro e 1 m de altura. O espaço foi discretizado de forma a manter a relação l/d_p dada pela Equação 3.22 inferior a 1,60:

$$\frac{l}{d_p} = \frac{\sqrt[3]{\left(\frac{r_l}{n_r}\right)^2 \left(\frac{h}{n_h}\right)}}{d_p} \quad (3.22)$$

Onde r_l , h , n_r e n_h são respectivamente o raio e altura do leito, e o número de divisões da malha ao longo do raio e da altura, que foram 6 e 80 resultando em um valor de l/d_p igual a 1,502. A malha teve um total de 5796 elementos e foi feita usando o *blockMesh*, ferramenta

padrão do openFOAM® e visualizada no programa livre Paraview. A malha é apresentada na seguir:

Figura 3.2. Vista lateral (a) e superior (b) da malha do leito.



Fonte: Acervo pessoal.

Inicialmente, 8000 partículas são criadas em posições aleatórias no interior do leito preenchido por fluido em repouso. Após um tempo de 2s inicia-se um fluxo de fluido pelo fundo do leito a uma taxa fixa de 100 litros por minuto distribuída uniformemente, resultando em uma velocidade superficial de aproximadamente 0,21 m/s e número de Reynolds no tubo igual a 991.

A condição de contorno da velocidade no topo e interior do leito foi a de *zeroGradient*, enquanto que para as paredes a condição de *noSlip* que fixa a velocidade como nula foi aplicada. Inicialmente a pressão no interior do leito foi igual a atmosférica (pressão manométrica nula), com condição *zeroGradient* na entrada, paredes e interior, e valor fixo na saída igual ao inicial.

O escoamento foi modelado como isotérmico, newtoniano, incompressível e turbulento usando o modelo de turbulência *k-epsilon*. Trata-se de um modelo do tipo RANS de duas equações, uma para descrever a energia cinética turbulenta e outra para o termo de taxa de dissipação de energia turbulenta. Apesar do número de Reynolds do escoamento no tubo ser

relativamente baixo, a presença do material particulado contribui fortemente para formação de regiões turbulentas.

A simulação teve um tempo total de 30s, com passo de tempo de $5 \cdot 10^{-4}$ para o fluido e 10^{-5} s para a fase particulada. O parâmetro de distância mínima σ usado foi de $0,5 \mu\text{m}$ e o parâmetro α da Equação 3.17 foi igual de 1,1, ou seja, a força de lubrificação é calculada quando a distância entre a superfície de duas partículas é menor ou igual a um décimo da soma de seus raios.

A energia cinética e as coordenadas da posição de cada partícula foram computadas a cada 100 passos de tempo do DEM. As informações de pressão, velocidade, fração de vazios e os parâmetros de turbulência da fase fluida foram coletados ao final de cada segundo simulado.

4- RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados da comparação dos métodos colisionais são apresentados na Tabela 4.1:

Tabela 4.1. Coeficientes medidos nas simulações para cada método colisional.

$\epsilon_{\text{entrada}}$	$\epsilon_{\text{medido,pênd.}}$	Desvio	$\epsilon_{\text{medido,queda livre}}$	Desvio
0,30	0,29	3,3%	0,27	10,0%
0,50	0,47	6,0%	0,47	6,0%
0,70	0,70	0,0%	0,70	0,0%
0,90	0,90	0,0%	0,90	0,0%

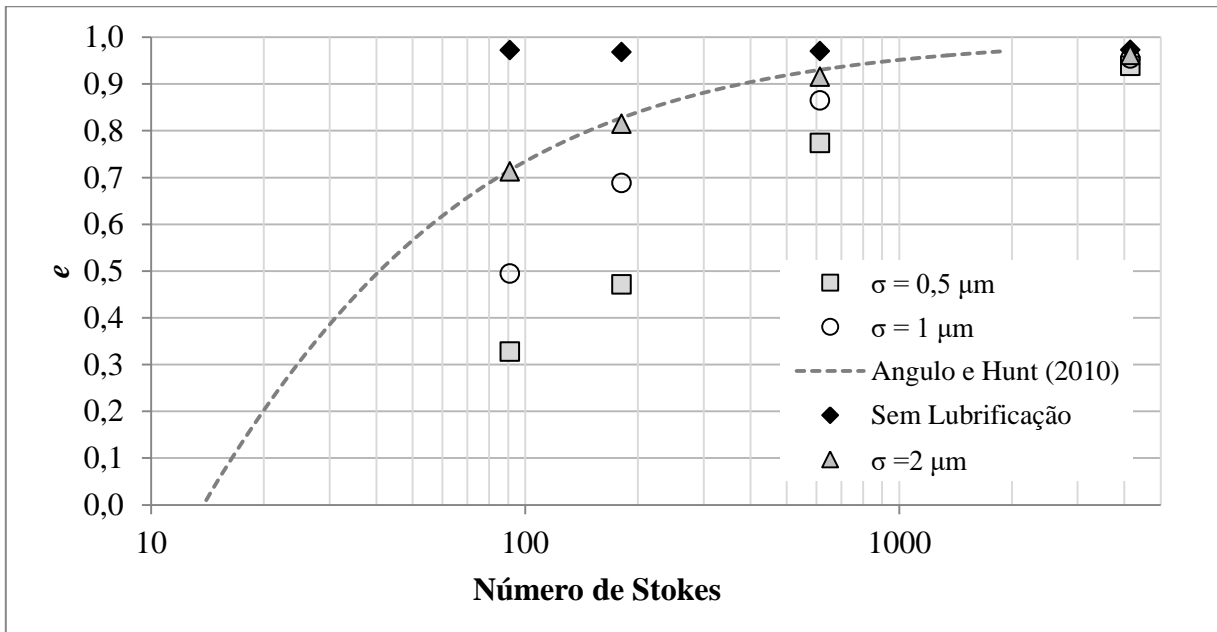
Fonte: Acervo pessoal.

Os resultados mostraram que o coeficiente de restituição medido teve variação pequena com o método de colisão empregado. Isso era esperado já que as partículas são perfeitamente simétricas e não apresentam rugosidade superficial, fatores que em testes experimentais podem causar as diferenças observadas entre os procedimentos de colisão. Os desvios calculados relativos aos valores de entrada são justificados pela frequência com que os resultados da simulação foram salvos. Neste caso, a coleta de dados acontecia a cada 10 passos de tempo das partículas (equivalente a 10^{-4} segundos) o que provavelmente fez com que o momento exato da restituição, que depende da velocidade de rebote e consequentemente do coeficiente de restituição, fosse capturado nas simulações que apresentaram desvios.

Como os resultados não demonstraram dependência significativa do método de colisão empregado optou-se por questão de simplicidade utilizar as simulações de queda livre para validar o modelo de lubrificação.

A Figura 3.3 apresenta um gráfico do coeficiente de restituição medido em função do número de Stokes de impacto para cada valor do parâmetro de distância mínima usado na validação, além do ajuste dos dados experimentais da Equação 3.21.

Figura 3.3. Coeficiente de restituição em função do número de Stokes.



Fonte: Acervo pessoal.

Pelo gráfico da Figura 3.3 é possível observar que a simulação teve boa concordância com os dados experimentais para o parâmetro de distância mínima de $2 \mu\text{m}$, indicando que o modelo da força de lubrificação implementado foi suficiente para capturar o efeito do fluido intersticial na colisão. O gráfico ressalta ainda a importância de levar essa força em consideração, já que o coeficiente de restituição simulado foi praticamente igual ao de entrada para todos os números de Stokes de impacto no caso das simulações sem a força.

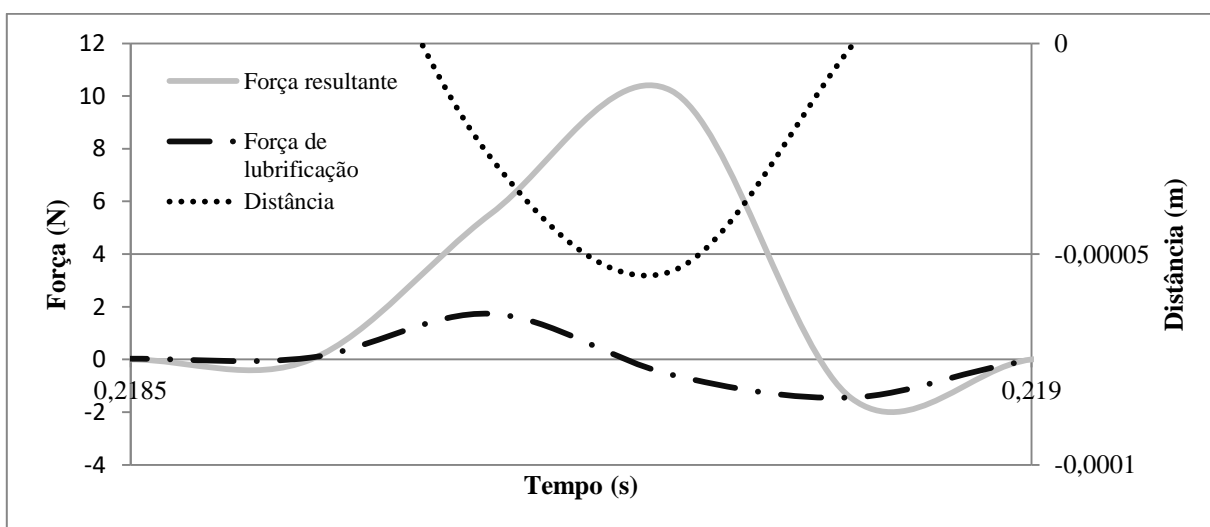
Nota-se ainda que pequenas variações no parâmetro σ alteram significativamente a dissipação de energia exceto nos casos em que o fluido que preenchia o domínio era água, representado pelo ponto de maior número de Stokes. Isso demonstra a importância de calibrar o parâmetro antes de utilizar o modelo em outras aplicações e o método de validação usado neste trabalho seria uma maneira simples e viável de calibrá-lo. O valor de σ que mais se aproximou da curva experimental é cerca de 100 vezes maior do que a rugosidade superficial das esferas de aço usadas por Joseph (2003) que foi de $0,0236 \mu\text{m}$, reforçando a necessidade de calibração do parâmetro.

A curva baseada em dados experimentais mostra que colisões em números de Stokes inferiores a 18 não restituem, e toda a energia é dissipada pela força de lubrificação. Esse

resultado ressalta novamente a importância da força na dinâmica do leito, já que partículas que colidirem nessa região de número de Stokes não restituirão o que pode levar a formação de aglomerados.

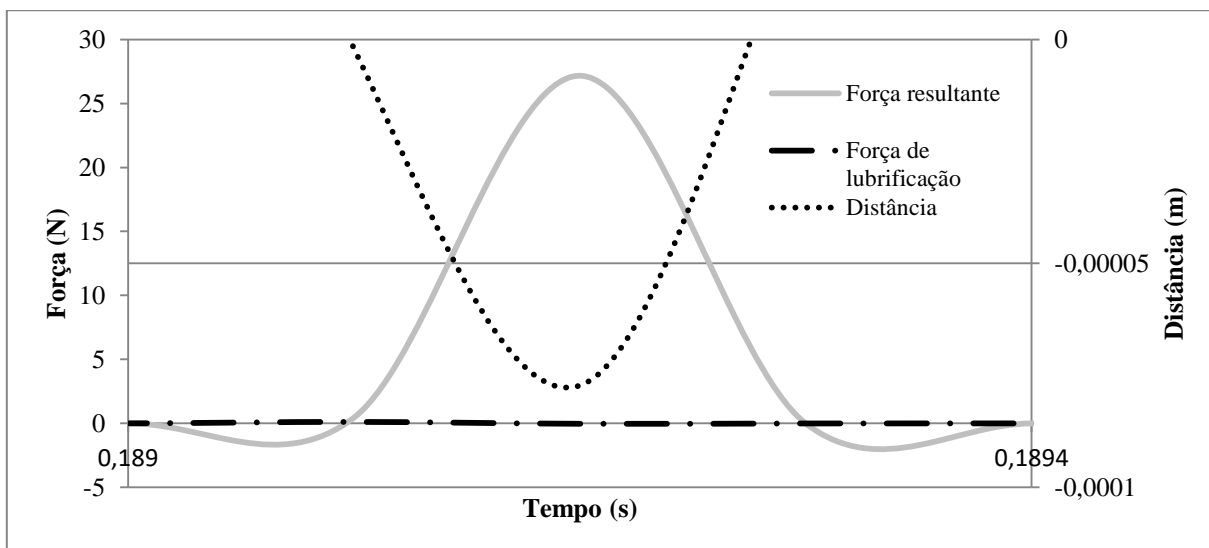
As Figuras 3.4 e 3.5 trazem gráficos das forças resultantes e de lubrificação, além da distância entre a partícula e a parede em função do tempo para $\sigma = 2 \mu\text{m}$ e fluidos de diferentes viscosidades.

Figura 3.4. Distância, força resultante e de lubrificação em função do tempo para a solução 74% (m) de glicerol.



Fonte: Acervo pessoal.

Figura 3.5. Distância, força resultante e de lubrificação em função do tempo para água.



Fonte: Acervo Pessoal.

Primeiramente, nota-se que em ambos os casos as partículas atingiram sua velocidade terminal, representada pela força resultante nula em regiões antes do impacto. É possível observar também que a distância entre as superfícies da partícula e da parede assume valores negativos na escala. Isso ocorre devido à abordagem do LIGGGHTS® que simula a deformação elástica como uma sobreposição, ou seja, a partícula se deformou elasticamente de forma que a distância de seu centro até a parede foi inferior ao seu raio. Como pode ser observado pela Equação 3.12 e pelo gráfico, a força normal de contato é máxima quando a deformação é máxima e a velocidade é nula, o que ocorre no exato instante em que se inicia a restituição. Neste ponto a força de lubrificação é nula e está na iminência de alterar seu sinal, tornando-se uma força atrativa já que as partículas estão prestes a se afastarem. Além disso, é possível observar a influência das forças viscosas, já que a deformação da partícula imersa na solução de glicerol é consideravelmente menor que em água, o que significa que sua velocidade de impacto também foi menor, resultado do aumento na força de arraste.

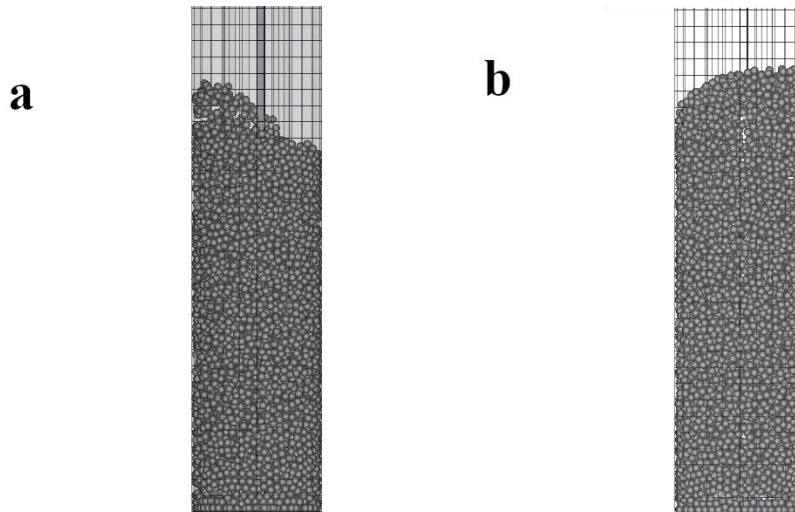
Nestas condições, a força de lubrificação começa a ser significativa quando a partícula está a uma distância de aproximadamente 0.00015 m da parede. Isso indica que a escolha do parâmetro α nas simulações do leito como 1,1 pode ter sido adequada, porém seu impacto nos resultados não foi avaliado.

Comparando os dois gráficos é possível observar a tendência apresentada na Figura 3.3: a força de lubrificação é praticamente inexistente quando o fluido é água, e significativa quando a viscosidade do fluido aumenta. No primeiro gráfico é possível perceber que a força continua atuando mesmo quando há contato, o que em teoria não ocorre nas simulações já que as superfícies são perfeitamente lisas e não há fluido intersticial. Isso, no entanto acaba sendo representativo da realidade conforme mostrado nos resultados da validação, indicando que mesmo fora do regime de lubrificação hidrodinâmica a força continua relevante.

É possível visualizar também o motivo do passo de tempo em simulações DEM ser tão reduzido. A colisão em ambos os casos durou menos de 0,5 ms, e não teria sido capturada se o passo de tempo não fosse de 10 μ s.

Os resultados da simulação do leito foram renderizados no Paraview. A Figura 3.6 traz uma imagem do leito após 30 s de simulação para ambos os casos simulados.

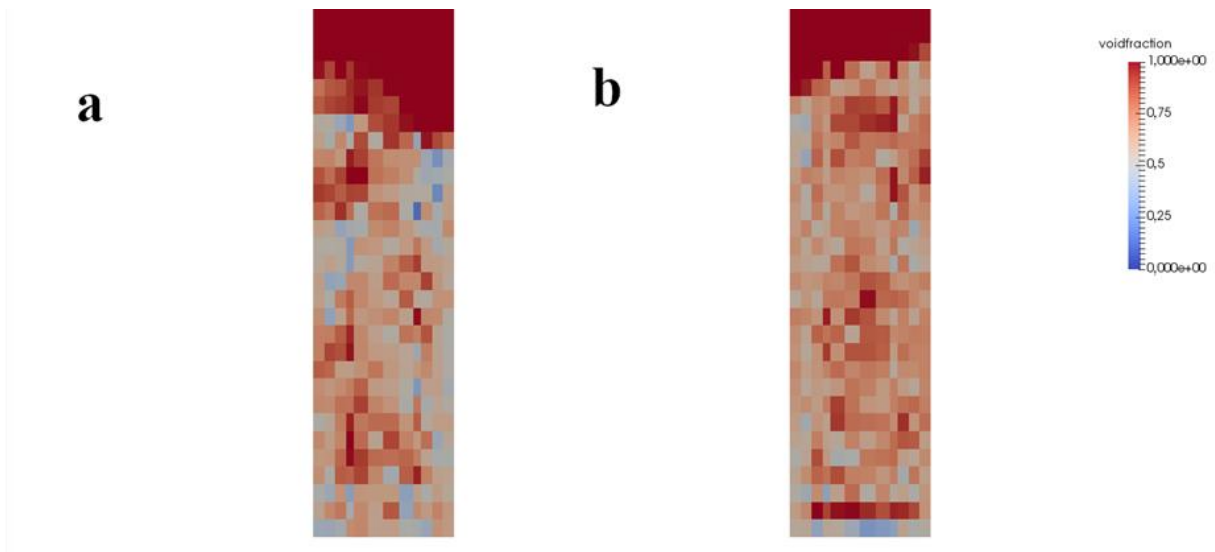
Figura 3.6. Detalhe do leito após 30s com (a) e sem a força de lubrificação (b).



Fonte: Acervo pessoal.

Nota-se que visualmente os leitos são muito parecidos. Outro resultado que pôde ser avaliado no Paraview foi a distribuição das frações de vazios no domínio. Para tanto, uma fatia plana com eixo normal em y passando exatamente no meio de ambos os leitos foi renderizada levando em conta a fração de vazios por célula, e são apresentadas na Figura 3.7. Neste caso, uma fração de vazio igual a 1 representa uma célula completamente preenchida por fluido e portanto sem partículas em seu interior.

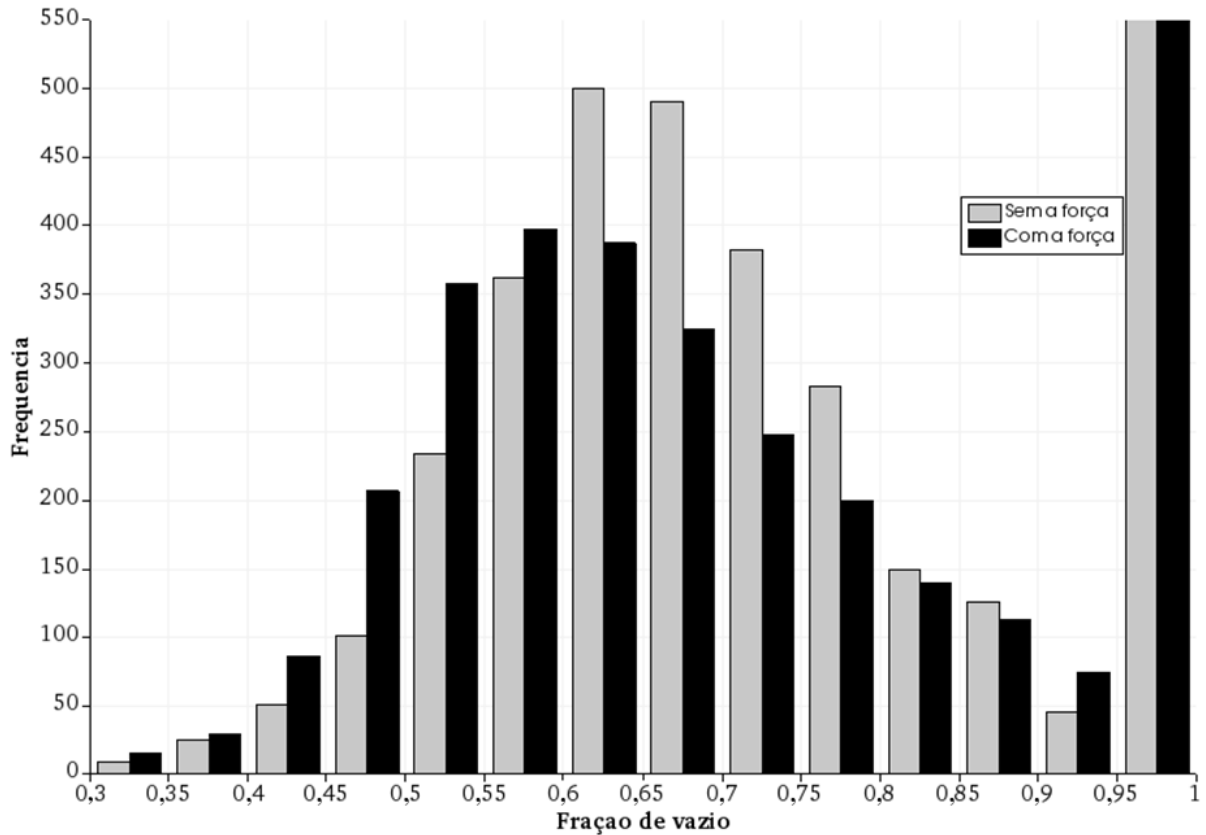
Figura 3.7. Distribuição de fração de vazios para o leito com (a) e sem (b) a força de lubrificação.



Fonte: Acervo pessoal.

A Figura 3.7 mostra que, ainda que apenas visualmente, houve uma diferença na distribuição das frações de vazios dos leitos na região analisada. A simulação com a força de lubrificação teve diversas áreas com altas concentrações de partículas (representadas em azul), enquanto que no outro caso, as partículas aparentam estar mais bem distribuídas. Este fenômeno pode ser mais bem observado no histograma da fração de vazios de todo o domínio para o mesmo instante de tempo, apresentado na Figura 3.8:

Figura 3.8. Histograma da fração de vazios.



Fonte: Acervo pessoal.

O histograma aponta que para ambas as simulações os valores mais frequentes de fração de vazios estão dentro do intervalo de 0,6 até 0,7. Nota-se, no entanto que os picos para a simulação que incluiu a força de lubrificação nessa região foram consideravelmente mais baixos, reflexo do aumento na frequência de células da malha com fração de vazios entre 0,3 e 0,55, o que significa que houve um aumento na formação de aglomerados de partículas. Os picos de frequência referentes às frações entre 0,95 e 1 estão fora da escala do gráfico, pois incluem as células a jusante do leito, onde há apenas fluido.

Uma possível explicação para este fenômeno está no gráfico da Figura 3.3. Nota-se que para números de Stokes suficientemente baixos a restituição é baixa ou quase nula, ou seja, quanto menor a velocidade de impacto uma maior porcentagem da energia da partícula é dissipada pela força de lubrificação. Nas simulações de validação, a partícula imersa no mesmo fluido do leito atingiu velocidade terminal de aproximadamente 0,84 m/s antes do

impacto, possivelmente muito superior à velocidade das partículas do leito considerando que a velocidade superficial do fluido era de apenas 0,21 m/s. Desta forma, pode-se assumir que a maioria das colisões entre as partículas ocorreu nas regiões de baixo número de Stokes. Isso significa que quando as partículas colidiam entre si não havia rebatimento significativo que fizesse com que se afastassem, resultando nas regiões de baixa fração de vazios observadas na Figura 3.7.

A média temporal da energia cinética total da fase sólida ao longo dos 30s de simulação foi calculada, juntamente com a velocidade média e número de Stokes correspondente das partículas. Os dados são apresentados na Tabela 4.2.

Tabela 4.2. Energia cinética, velocidade média e número de Stokes da fase sólida.

	Energia cinética média total (J)	Velocidade média (m/s)	Número de Stokes médio	Porosidade
Com a força	0,159	0,195	21,255	0,646
Sem a força	0,109	0,161	17.566	0,664

Fonte: Acervo pessoal.

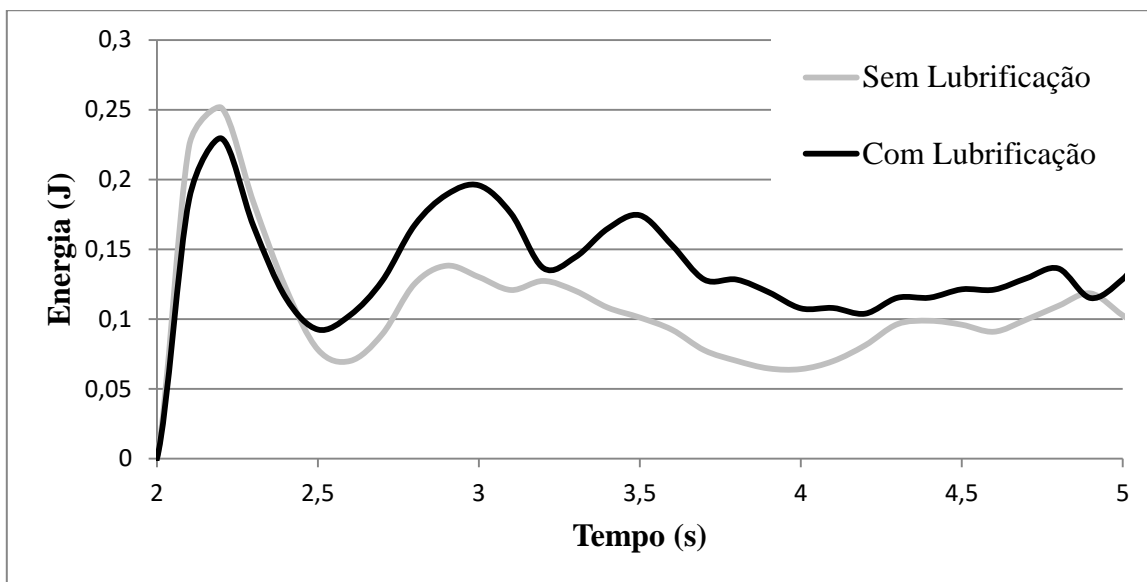
Dada à natureza dissipativa da força de lubrificação, a princípio esperava-se que a energia cinética das partículas fosse inferior quando esta força é considerada, o que não ocorreu. Isso, no entanto é um indicativo do que foi discutido anteriormente: segundo a Equação 3.21, um número de Stokes de 21,255 corresponde aproximadamente a um coeficiente de restituição de 0,11, ou seja, 89% da energia é dissipada durante as colisões. Para fins explicativos, se as colisões ocorressem na velocidade média calculada as partículas se afastariam após a colisão com uma velocidade de aproximadamente 0,021 m/s, um décimo da velocidade superficial de entrada do fluido.

Dessa forma, é possível que no início da fluidização as partículas não se afastavam após colidirem e passaram a se deslocar de maneira conjunta, reduzindo a frequência de colisões e consequentemente a dissipação de energia. A porosidade apresentada é uma média temporal estimada a partir da altura do leito obtida pela posição das partículas da camada mais superior do leito em cada passo de tempo. Na simulação em que a força foi incluída a porosidade foi ligeiramente inferior a da simulação sem esta força, resultado condizente com a hipótese de

que aglomerados de partículas foram predominantes nessa simulação e com o que foi observado nas Figuras 3.7 e 3.8.

A Figura 3.9 traz um gráfico da energia cinética de cada simulação nos primeiros segundos de fluidização, que se inicia aos 2s:

Figura 3.9. Energia cinética ao longo do tempo para cada simulação.



Fonte: Acervo pessoal.

O gráfico mostra que a energia cinética no início da fluidização é praticamente idêntica nas duas simulações. É possível que nesta etapa do processo que ocorra a formação dos aglomerados de partículas e que a taxa de colisões seja máxima. Essa hipótese estaria de acordo com os picos iniciais de energia: como os aglomerados ainda não se formaram, há um grande número de colisões em ambas as simulações, resultando na dissipação de energia pelo fluido intersticial no caso que incluiu a força de lubrificação. Em seguida, com os aglomerados já estabelecidos, a taxa de colisão diminui e consequentemente a energia cinética da fase sólida é maior do que no caso sem lubrificação.

5- CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Os resultados das simulações sugerem que a abordagem e o método de implementação utilizado para a força de lubrificação em simulações CFD-DEM foi apropriada, já que os resultados numéricos de validação foram muito próximos dos observados experimentalmente. Constatou-se ainda a necessidade de calibração dos parâmetros introduzidos, especialmente o de distância mínima.

Além disso, concluiu-se que a força de lubrificação teve impacto significativo sobre comportamentos macro e mesoscópicos do leito como a porosidade que foi menor com a inclusão da força, a distribuição das frações de vazios e a energia cinética das partículas que aumentou apesar do efeito dissipativo da força. Uma hipótese plausível que explica os efeitos observados é a de que a força de lubrificação reduz o coeficiente de restituição das partículas a ponto de fazer com que se mantenham próximas após a colisão ou que não restituam, formando regiões de aglomeração. Assume-se ainda que por esses motivos ocorram menos choques justificando a redução da dissipação de energia cinética observada.

Essa hipótese, no entanto ainda deve ser verificada. Uma sugestão de procedimento é avaliar a taxa de colisões por partícula ao longo do tempo, uma função que possivelmente poderia ser implementada diretamente no software. Pode-se ainda avaliar visualmente a fração de vazios do leito em diferentes posições e instantes de tempo, para comprovar se realmente ocorre a formação de aglomerados de partículas que se movem em conjunto. O comportamento do leito não foi validado experimentalmente por falta de dados, portanto não há como concluir qual das duas simulações é mais próxima da realidade. Em trabalhos futuros, sugere-se que a influência do coeficiente α seja estudada para que um método de calibração seja proposto baseado no tipo de aplicação.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AGUILAR-CORONA, C.; ZENIT, R; MASBERNAT, O. Collisions in a liquid fluidized bed. *Int. J. Multiph. Flow*, Vol. 37, No. 7, 695 – 705, 2011.

BLAIS, B. *et al.* Development of an unresolved CFD-DEM model for the flow of viscous suspensions and its application to solid-liquid mixing. *Journal of Computational Physics*, Vol. 318, 201-221, 2016.

CHANDRASHEKHAR, B.; PANDEY, R. A. Experimental modelling study of treatment and regeneration of ferrous-nitritoltriacetate solution scrubbed with nitric oxide by an upflow anaerobic biofilm reactor. *J. Clean Prod.*, Vol. 155, 179-188, 2017.

CROWE, C. T. *et al.* *Multiphase flows with droplets and particles*. 1 ed. Boca Raton: CRC Press, 2011.

DAVIS, R. H.; SERAYSSOL, J.; HINCH, E. J. The elasto-hydrodynamic collision of two spheres. *J. Fluid Mech.*, Vol. 163, 479-497, 1986.

FOERSTER, S. F. *et al.* Measurements of the collision properties of small spheres. *Phys. Fluids*, Vol. 6, No. 3, 1108-1115, 1994.

GAVRILESCU, M. Engineering Concerns and new developments in anaerobic wastewater treatment. *Clean Techn. Environ. Policy*, Vol. 3, 346-362, 2002.

GELNAR, D.; ZEGZULKA, J. *Discrete element method in the design of transport systems: verification and validation of 3D models*. 1 ed. Boston: Springer, 2019.

GIDASPOW, D. *Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions*. 1 ed. Cambridge: Academic Press, 1994.

HASTIE, D. B. Experimental Measurement of the coefficient of restitution of irregular shaped particles impacting on horizontal surfaces. *Chem. Eng. Sci.*, Vol 101, pp 828-836, 2013.

HERTZ, H. On the contact of elastic solids. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*. Vol. 92, 156-171, 1882.

HLOSTA, J. *et al.* Experimental determination of particle-particle restitution coefficient via double pendulum method. *Chem. Eng. Res. Des.*, Vol. 135, 222-233, 2018.

JOSEPH, G. *Collisional dynamics of macroscopic particles in a viscous fluid*. 2003. *Tese de doutorado* – California Institute of Technology, Pasadena, 2003.

KERST, K. *et al.* CFD-DEM simulations of a fluidized bed crystallizer. Chem. Eng. Sci., Vol. 165, 1-13, 2017.

KLOSS, C. *et al.* Models, algorithms and validation for opensource DEM and CFD-DEM. Progress in Computational Fluid Dynamics, Vol. 12, 140-152, 2012.

LAMBERT, B.; LISL, W.; BERGMANN, M. Local lubrication model for spherical particles within an incompressible Navier-Stokes flow. Research Report INRIA Bordeaux, 1-28, 2017.

LENARD, J. G. Metal Forming Science and Practice. 1 ed. Londres: Elsevier Science, 2002.

LIU, G. *et al.* CFD-DEM simulation of liquid-solid fluidized bed with dynamic restitution coefficient. Powder Technology, 2016.

LOPES, G. C. *et al.* Hydrodynamic characteristics of particles with different roughness and deformability in a liquid fluidized bed. Chem. Eng. Sci., Vol. 185, 50-63, 2018.

MA, H.; ZHAO, Y.; CHENG, Y. CFD-DEM modeling of rod-like particles in a fluidized bed with complex geometry. Powder Technol., Vol. 344, 673-683, 2019.

MINDLIN, R. D. Compliance of elastic bodies in contact. Journal of Applied Mechanics, Vol. 16, 259-268, 1949.

NADAIS, H. *et al.* Enhancing wastewater degradation and biogas production by intermittent operation UASB reactors. Energy, Vol. 36, No. 4, 2164-2168, 2011.

NEILL, S. P.; HASHEMI, M. R. Fundamentals of ocean renewable energy: Generating electricity from the sea. 1 ed. Londres: Elsevier Science, 2018.

PATANKAR, S. V. Numerical heat transfer and fluid flow. 1 ed. Nova Iorque: Hemisphere Publishing Corporation, 1980.

ROY, U; DAS, P; BHOWAL, A. Treatment of azo dye (congo red) solution in fluidized bed bioreactor with simultaneous approach of adsorption coupled with biodegradation: optimization by response surface methodology and toxicity assay. Clean Techn. Environ. Policy, Vol. 21, 1674-1686, 2019.

RUIZ-ANGULO, A.; HUNT, M. Measurements of the coefficient of restitution for particle collisions with ductile surfaces in a liquid. Granul. Matter, Vol.12, 185-191, 2010.

SAHAN, K. *et al.* A comparative study of mixed resolved-unresolved CFD-DEM and unresolved CFD-DEM methods for the solution of particle-laden liquid flows. Archives of Computational Methods in Engineering, 2018.

SONDERGAARD, R.; CHANEY, K.; BRENNEN, C. E. Measurements of solid spheres bouncing off flat plates. J. App. Mech., Vol. 112, No. 3, 694-699, 1990.

SUN, R.; XIAO, H.; SediFoam: A general purpose, open-source CFD-DEM solver for particle-laden flow with emphasis on sediment transport. *Comput. Geosci.*, Vol. 89, 207-2019, 2016.

WANG, L. *et al.* Experimental determination of parameter effects on the coefficient of restitution of differently shaped maize in three-dimensions. *Powder Technol.*, Vol. 284, 187-194, 2015.

WANG, Q. J.; CHUNG, Y. W. *Encyclopedia of Tribology*. 1 ed. Boston: Springer, 2013.

WANG, S. Y. *et al.* Simulation of flow behavior of liquid and particles in a liquid-solid fluidized bed. *Powder Technol.*, Vol. 224, 365-373, 2012.

WEIR, G.; TALLON, S. The coefficient of restitution for normal incident, low velocity particle impacts. *Chem. Eng. Sci.* Vol. 60, 3637-3647, 2005.

WU, J. *et al.* Textile wastewater bioremediation using immobilized *Chlorella* sp. Wu-G23 with continuous culture. *Clean Techn. Environ. Policy*, 2020.

YANG, Y. *et al.* CFD-DEM investigation of particle elutriation with electrostatic effects in gas-solid fluidized beds. *Powder Technol.*, Vol. 308, 422-433, 2017.

ZHANG, W.; NODA, R.; HORIO, M. Evaluation of lubrication force on colliding particles for DEM simulation of fluidized beds. *Powder Technol.*, Vol. 158, 92-101, 2005.

APÊNDICE A - SCRIPT DA IMPLEMENTAÇÃO DA FORÇA DE LUBRIFICAÇÃO

Lubrication force implemented based on
SJKR cohesion force model.
By João Pedro Ferreira de Campos
in July, 2019.
----- */

```
#ifdef COHESION_MODEL  
COHESION_MODEL(COHESION_LUB,lub,3)  
#else
```

```
#ifndef COHESION_MODEL_LUB_H_  
#define COHESION_MODEL_LUB_H_
```

```
#include "contact_models.h"  
#include "cohesion_model_base.h"  
#include <cmath>  
#include "neighbor.h"  
#include "global_properties.h"  
#include "fix_property_atom.h"
```

```
////////////////////////////////////
```

```
namespace MODEL_PARAMS  
{
```

```

inline static ScalarProperty* createFluidViscosityLub(PropertyRegistry & registry, const
char * caller, bool sanity_checks)
{
    ScalarProperty*          fluidViscosityScalar          =
MODEL_PARAMS::createScalarProperty(registry, "fluidViscosity", caller);
    return fluidViscosityScalar;
}

inline static ScalarProperty* createRoughnessLub(PropertyRegistry & registry, const char *
caller, bool sanity_checks)
{
    ScalarProperty* RoughnessScalar = MODEL_PARAMS::createScalarProperty(registry,
"Roughness", caller);
    return RoughnessScalar;
}

inline static ScalarProperty* createMinSeparationDistanceRatioLub(PropertyRegistry &
registry, const char * caller, bool sanity_checks)
{
    ScalarProperty*          minSeparationDistanceRatioScalar          =
MODEL_PARAMS::createScalarProperty(registry, "minSeparationDistanceRatio", caller);
    return minSeparationDistanceRatioScalar;
}
}

```

```

////////////////////////////////////

```

```

namespace LIGGGHTS {
namespace ContactModels {
using namespace std;
using namespace LAMMPS_NS;

```

```

template<
class CohesionModel<COHESION_LUB> : public CohesionModelBase {
public:
    CohesionModel(LAMMPS * Imp, IContactHistorySetup * hsetup, class ContactModelBase
* c) :
        CohesionModelBase(Imp, hsetup, c),
        fluidViscosity(0.0),
        Roughness(0.0),
        minSeparationDistanceRatio(0.0)
    {

    }

    void registerSettings(Settings& settings)
    {
        settings.registerOnOff("tangential_reduce",tangentialReduce_,false);
    }

    inline void postSettings(IContactHistorySetup * hsetup, ContactModelBase *cmb) { }

    void connectToProperties(PropertyRegistry & registry)
    {
        registry.registerProperty("fluidViscosity",
&MODEL_PARAMS::createFluidViscosityLub);
        registry.connect("fluidViscosity",          fluidViscosity,"cohesion_model
easo/capillary/viscous");

        registry.registerProperty("Roughness", &MODEL_PARAMS::createRoughnessLub);
        registry.connect("Roughness", Roughness,"cohesion_model easo/capillary/viscous");
    }
};

```

```

        registry.registerProperty("minSeparationDistanceRatio",
&MODEL_PARAMS::createMinSeparationDistanceRatioLub);
        registry.connect("minSeparationDistanceRatio",
minSeparationDistanceRatio,"cohesion_model easo/capillary/viscous");

    if(force->cg_active())
        error->cg(FLERR,"cohesion model lub");
        neighbor->register_contact_dist_factor(minSeparationDistanceRatio);
}

void surfacesIntersect(SurfacesIntersectData & sidata, ForceData & i_forces, ForceData &
j_forces)
{

    const double ri = sidata.radi;
        const double radj = scdata.is_wall ? radi : scdata.radj;
        const double rEff = radi*radj / (radi+radj);

    const double mult = -6*M_PI*fluidViscosity*rEff*rEff/Roughness;
    const double Fn_lub = mult*sidata.vn;

    if(tangentialReduce_) sidata.Fn += Fn_lub;

    if(sidata.contact_flags) *sidata.contact_flags |= CONTACT_COHESION_MODEL;

    // apply normal force
    const double fx = Fn_lub * sidata.en[0];
    const double fy = Fn_lub * sidata.en[1];
    const double fz = Fn_lub * sidata.en[2];

    i_forces.delta_F[0] += fx;

```

```

    i_forces.delta_F[1] += fy;
    i_forces.delta_F[2] += fz;

    j_forces.delta_F[0] -= fx;
    j_forces.delta_F[1] -= fy;
    j_forces.delta_F[2] -= fz;
}

inline void endSurfacesIntersect(SurfacesIntersectData &sidata, ForceData&, ForceData&)
{}

void beginPass(SurfacesIntersectData&, ForceData&, ForceData&){ }
void endPass(SurfacesIntersectData&, ForceData&, ForceData&){ }

void surfacesClose(SurfacesCloseData & sdata, ForceData & i_forces, ForceData &
j_forces)
{
    if(sdata.contact_flags) *sdata.contact_flags |= CONTACT_COHESION_MODEL;

    const double radi = sdata.radi;
    const double radj = sdata.is_wall ? radi : sdata.radj;
    const double r = sqrt(sdata.rsq);
    const double dist = sdata.is_wall ? r - radi : r - (radi + radj);
    const double rEff = radi*radj / (radi+radj);

    const double rinv = 1.0 / r;
    const double dx = sdata.delta[0];
    const double dy = sdata.delta[1];
    const double dz = sdata.delta[2];
    const double enx = dx * rinv;

```

```

const double eny = dy * rinv;
const double enz = dz * rinv;

const double vr1 = sdata.v_i[0] - sdata.v_j[0];
const double vr2 = sdata.v_i[1] - sdata.v_j[1];
const double vr3 = sdata.v_i[2] - sdata.v_j[2];

const double vn = vr1 * enx + vr2 * eny + vr3 * enz;
if (dist < Roughness)
    {
        if(sdata.contact_flags) *sdata.contact_flags &=
~CONTACT_COHESION_MODEL;
        return;
    }
const double mult = -6.*M_PI*fluidViscosity*rEff*rEff;
const double Fn_lub = mult*vn/std::max(Roughness,dist);

const double fx = Fn_lub * enx;
const double fy = Fn_lub * eny;
const double fz = Fn_lub * enz;

sdata.has_force_update = true;

i_forces.delta_F[0] += fx;
i_forces.delta_F[1] += fy;
i_forces.delta_F[2] += fz;

j_forces.delta_F[0] -= fx;
j_forces.delta_F[1] -= fy;
j_forces.delta_F[2] -= fz;
}

```

```
private:
    double fluidViscosity;
    double Roughness;
    double minSeparationDistanceRatio;
    bool tangentialReduce_;
};
}
}

#endif // COHESION_MODEL_LUB_H_
#endif
```