

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA

ENOS YUITI OGASAWARA

COMPARAÇÃO DE MODELOS PARA O CÁLCULO DA
POROSIDADE LOCAL EM
SIMULAÇÕES CFD-DEM DE UM LEITO FLUIDIZADO
LÍQUIDO

SÃO CARLOS - SP
2021

ENOS YUITI OGASAWARA

COMPARAÇÃO DE MODELOS PARA O CÁLCULO DA POROSIDADE LOCAL EM
SIMULAÇÕES CFD-DEM DE UM LEITO FLUIDIZADO LÍQUIDO

Trabalho de conclusão de curso
apresentado ao Departamento de
Engenharia Química da Universidade
Federal de São Carlos, para obtenção do
título de bacharel em Engenharia
Química.

Orientadora: Prof.^a Dr.^a Gabriela
Cantarelli Lopes

Coorientador: Eng. Victor Oliveira
Ferreira

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Departamento de Engenharia Química

Folha de aprovação

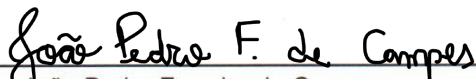
Assinatura dos membros da comissão examinadora que avaliou e aprovou o Trabalho de Conclusão de Curso do candidato Enos Yuiti Ogasawara, realizada em 28/06/2021:



Prof. Dr. Gabriela Cantarelli Lopes
UFSCar



Prof. Dr. Ernesto Antonio Urquieta Gonzalez
UFSCar



Eng. João Pedro Ferreira de Campos
UFSCar

DEDICATÓRIA

Aos que futuramente trabalharem nesta área, espero que este trabalho lhes seja útil.

AGRADECIMENTO

Gostava de agradecer ao Senhor Deus, pois não me negou Seu favor e não me abandonou até aqui. Pelo contrário, por causa de Jesus, tem mostrado cuidado e renovo de misericórdia a cada dia.

Ao meu coorientador Victor, por todo o apoio, disposição, incentivo, puxões de orelha e paciência ao longo desse semestre.

À Prof. Dr. Gabriela, pela paciência, confiança e compreensão ao longo desta trajetória de estágio e trabalho de graduação.

À minha família, especialmente aos meus pais, Jorge e Elza, por todo o amor, apoio e paciência, especialmente nas horas de maior crise.

Aos meus amigos de ABU/GBU, de igreja, de graduação, de República, de intercâmbio. Vocês tiveram papel crucial nessa longa jornada. Agradeço a cada um, pois que me contribuíram de forma permanente, não apenas nesse curso, mas na vida e para além dela.

Aproveito o espaço para também pedir perdão a esses que agradeço: não penso que meu reconhecimento e gratidão condizem com todo o apoio que me ofereceram. Diversas vezes preferi caminhar sozinho quando poderia contar com o apoio de todos estes. Agradeço-lhes também a compreensão.

“Quando o Senhor restaurou a sorte de Sião,
ficamos como quem sonha.

Então, a nossa boca se encheu de riso,
e a nossa língua, de júbilo; então, entre as nações se dizia:

Grandes coisas o Senhor tem feito por eles.

Com efeito, grandes coisas fez o Senhor por nós;
por isso estamos alegres.

Restaura, Senhor, a nossa sorte, como as torrentes no Neguebe.

Os que com lágrimas semeiam com júbilo ceifarão.

Quem sai andando e chorando, enquanto semeia,
voltará com júbilo, trazendo os seus feixes.”

Salmo 126

RESUMO

No presente trabalho, executou-se a simulação de um leito fluidizado líquido com o acoplamento CFD-DEM não-resolvido, avaliando-se a aplicação de três métodos para o cálculo da porosidade local e com seis níveis de refino da malha usada nas simulações. Testou-se diferentes vazões de fluido para as possíveis combinações de métodos e malhas: 35 L/min, 55 L/min e 75 L/min. Para isso, usou-se o *software* CFDEM@coupling. Para a avaliação dos resultados, comparou-se os valores de porosidade média obtidos com os valores preditos pela Equação de Richardson-Zaki. Fez-se também o monitoramento da flutuação dos sinais de pressão e da taxa de fluxo mássico normalizado. Por fim, procurou-se identificar o método e a malha que trouxe resultados mais próximos do que se era esperado. Através dos resultados obtidos, recomenda-se, para este escoamento sólido-fluido, o uso do método 'Dividido' com a malha 5-5-120, especialmente no que diz respeito à maior concordância com Richardson-Zaki, ao apresentar desvios de 1,35%, -1,42% e -1,39% para as vazões de 35 L/min, 55 L/min e 75 L/min, respectivamente. Além disso, o método Dividido apresentou também maior estabilidade na flutuação dos sinais de pressão, com maior similaridade entre os valores de pressão média para uma mesma velocidade e diferentes refinamentos de malha, bem como menor desvio padrão comparado aos outros métodos. Quanto à taxa de fluxo mássico normalizado, as conclusões foram divergentes. Para 75 L/min, observou-se decréscimo do desvio conforme o refinamento da malha, para todos os métodos. Para 55 L/min, observou-se melhor resultado para as malhas 5-5-120 a 8-8-180, enquanto que para 35 L/min, observou-se melhor resultado para a malha 4-4-100.

Palavras-chave: Fluidodinâmica computacional. Método dos elementos discretos. Esquemas de acoplamento. Leito fluidizado líquido.

ABSTRACT

In the present study, a liquid fluidized bed was simulated using the Unresolved CFD-DEM approach, evaluating the application of three local void fraction calculation methods with six refinement levels for the mesh used in the simulations. Different fluid flow rates were tested for the possible combinations between method and mesh refinement levels: 35 L/min, 55 L/min and 75 L/min. The CFDEM®coupling software was used for the simulations. For the results analysis, the average void fraction values obtained in the simulations were compared to the values predicted by the Richardson-Zaki empirical equation. The local pressure fluctuation and the net mass flow rate were also monitored. Finally, the most satisfactory method applied was identified, as well as the most satisfactory mesh refinement level. Based on the results, it is recommended, for this solid-fluid flow, the use of the so called 'Divided' method with the 5-5-120 mesh, specifically regarding the agreement with the Richardson-Zaki equation, in which the errors presented were 1,35%, -1,42% and -1,39% for the flow rates of 35 L/min, 55 L/min and 75 L/min, respectively. In addition, the 'Divided' method also showed superior stability with respect to the local pressure fluctuation, once the average pressure values, for a given flow rate, were more similar between different grid refinement levels compared to the other local void fraction calculation methods, the 'Divided' method also showed smaller standard deviation in pressure fluctuations when compared to the other methods. Concerning the net mass flow rate, the conclusions conflicted. With 75 L/min, it can be observed that the bigger the mesh refinement level, the smaller the errors, for all methods. With 55 L/min, the 5-5-120 to 8-8-180 meshes showed better results, while for 35 L/min, the best result was observed for the 4-4-100 mesh.

Keywords: Computational Fluid dynamics. Discrete element method. Coupling schemes. Liquid fluidized bed.

LISTA DE SÍMBOLOS E SUBSCRITOS

Símbolos

Ar	Número de Arquimedes
C_D	Coeficiente de arrasto
D	Diâmetro da coluna
d_p	Diâmetro da partícula
F_{pf}	Parcela de força de interação sólido-fluido
f_c	Força de contato
f_D	Força de arrasto
f_{pf}	Força de interação partícula-fluido
f_g	Força gravitacional
g	Aceleração da gravidade (m/s^2)
I	Momento de inércia
k	Parâmetro de correção da Equação de Richardson-Zaki
M_c	Torque de deslizamento
M_r	Torque de fricção de rolamento
m	Massa
n	Coeficiente angular da Equação de Richardson-Zaki linearizada
p	Pressão
Re	Número de Reynolds
Re_0	Número de Reynolds da partícula em velocidade terminal
r	Raio
S_c	Dimensão equivalente da célula
S_d	Dimensão equivalente do domínio
t	Tempo
U	Velocidade de entrada do fluido em módulo
U_0	Velocidade terminal do fluido em módulo
\mathbf{u}	Vetor velocidade do fluido (m/s)
V	Volume
\mathbf{v}	Vetor velocidade da partícula (m/s)
x	Vetor posição

Símbolos (letras gregas)

β_{pf}	Coeficiente de troca de momento entre fluido e partícula
ε_c	Porosidade local
ε_F	Porosidade local da face
ε_m	Porosidade do leito
Ψ_m	Varição relativa da vazão mássica de fluido (<i>Net mass flow rate</i>)
Λ_F	Vazão mássica através da face da célula
μ	Viscosidade dinâmica (Pa.s)
ρ	Densidade (kg/m^3)

τ	Tensor de tensões viscosas
ω	Velocidade angular

Subscritos

f	Fluido
i	Partícula i
j	Partícula j
ij	Partículas i e j
iw	Partícula i e parede
mf	Mínima fluidização
p	Partícula
w	Parede

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	12
1.1 Contextualização e motivação	12
1.2 Objetivos	12
2 REVISÃO DE LITERATURA	14
2.1 Fluidodinâmica Computacional	14
2.1.1 Equações de Navier-Stokes	14
2.1.2 Discretização do domínio e soluções numéricas	15
2.2 Método dos Elementos Discretos.....	17
2.3 Método de acoplamento CFD-DEM não resolvido	18
2.3.1 Forças de interação sólido-fluido	19
2.3.2 Relação entre tamanho do domínio/célula/partícula	19
2.3.3 Porosidade local (ϵ)	22
2.4 Estudos relacionados.....	22
3 MODELAGEM MATEMÁTICA.....	24
3.1 Método de acoplamento CFD-DEM não resolvido	24
3.2 Forças de interação sólido-fluido	28
3.3 Métodos de cálculo de porosidade local	29
4 METODOLOGIA.....	32
4.1 Simulações	32
4.2 Estimativas e validação.....	34
4.2.1 Flutuação de sinais de pressão	34
4.2.2 Taxa de fluxo mássico normalizado.....	35
4.2.3 Equação de Richardson-Zaki.....	36
5 RESULTADOS E DISCUSSÕES	39
5.1 Flutuação dos sinais de pressão.....	40
5.2 Porosidade média do leito.....	43
5.3 Taxa de fluxo mássico normalizado	46
6 CONCLUSÕES	49
REFERÊNCIAS.....	50
APÊNDICE A – TABELAS COMPLEMENTARES.....	53

1 INTRODUÇÃO

1.1 Contextualização e motivação

Simulações numérico-computacionais possuem papel fundamental no projeto de equipamentos da indústria química. Nesse sentido, o acoplamento CFD-DEM para simulação de sistemas multifásicos tem se mostrado uma ferramenta com grande potencial para simulação de sistemas sólido-fluido conhecidos, com destaque para o leito fluidizado.

A técnica utiliza a Fluidodinâmica Computacional (CFD, do inglês *Computational Fluid Dynamics*) e o Método dos Elementos Discretos (DEM, do inglês *Discrete Element Method*) para representação das fases contínua (fluida) e discreta, respectivamente, modelando as forças de interação sólido-fluido, prevendo o comportamento do sistema e oferecendo melhor compreensão dos fenômenos presentes nos equipamentos, também com objetivo de reduzir a necessidade de experimentos envolvidos.

Entretanto, este resultado depende da precisão do modelo escolhido para o cálculo da porosidade local, variável importante tanto para a estabilidade das soluções numéricas como para o cálculo da força de arraste, força motriz do fenômeno de fluidização. Além disso, a escolha do modelo possui efeito no custo computacional da simulação. Considerando que há vários modelos de porosidade local, é desejável identificar um que produza resultados mais confiáveis para determinado sistema, uma vez que diferentes modelos possuem diferentes condições de aplicação.

1.2 Objetivos

De forma geral, o presente trabalho tem por objetivo avaliar a aplicação de diferentes modelos de porosidade local na simulação CFD-DEM de um leito fluidizado líquido através do *software* CFDEM®coupling.

Com o fim de alcançar este objetivo geral, propõe-se trabalhar através dos seguintes objetivos específicos:

- Simulação do leito fluidizado em diferentes condições de velocidade e refino de malha (três valores de vazão de fluido e seis níveis de refinamento);
- Análise da flutuação dos sinais de pressão;

- Avaliação da porosidade média do leito a partir dos valores preditos pelo modelo empírico da Equação de Richardson-Zaki;
- Verificação da obediência das simulações à lei de conservação de massa pelo monitoramento da taxa de fluxo mássico normalizado.

2 REVISÃO DE LITERATURA

Neste capítulo, apresenta-se os fundamentos teóricos que são necessários ao desenvolvimento deste trabalho. As técnicas de Fluidodinâmica Computacional e Método dos Elementos Discretos são introduzidas, assim como o chamado acoplamento não-resolvido, que se utiliza de ambas as técnicas para a modelagem de sistemas multifásicos. Também se apresenta alguns estudos na área, que serviram de motivação e direção para estes estudos.

2.1 Fluidodinâmica Computacional

A Fluidodinâmica computacional (CFD, do inglês *Computational fluid dynamics*) é o estudo de métodos computacionais para a simulação de fenômenos que envolvem fluidos (FORTUNA, 2000). De outra forma, trata-se de uma ferramenta que simula o comportamento de fluidos em movimento, visando obter sua distribuição de velocidade, pressão e temperatura na região de escoamento.

Para este fim, em CFD, utiliza-se métodos numéricos para resolver as Equações de Navier-Stokes, equações que modelam o escoamento de fluidos, para assim se obter as grandezas físicas (pressão e velocidade) interessantes ao fenômeno a cada passo de tempo.

2.1.1 Equações de Navier-Stokes

As Equações de Navier-Stokes são um conjunto de equações diferenciais parciais (EDPs) que descrevem a dinâmica de fluidos, modelando o fenômeno a partir das grandezas físicas relevantes para o escoamento. Seu desenvolvimento deriva de dois princípios físicos clássicos: conservação de massa e conservação de quantidade de movimento.

A equação que reflete o princípio da conservação de massa é chamada Equação da continuidade. A lógica usada para o desenvolvimento desta equação é conforme a Equação (1).

$$\begin{array}{l} \text{Variação temporal} \\ \text{de massa} \\ \text{num elemento de volume} \end{array} = \begin{array}{l} \text{Taxa de entrada} \\ \text{através das fronteiras} \end{array} - \begin{array}{l} \text{Taxa de saída} \\ \text{através das fronteiras} \end{array} \quad (1)$$

Resultando na Equação (2), a Equação da Continuidade.

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{u}_f) = 0 \quad (2)$$

Onde $\nabla \cdot (\rho_f \mathbf{u}_f)$ é o divergente do termo $\rho_f \mathbf{u}_f$, também chamado de fluxo de massa.

A equação que reflete o princípio da conservação de momento tem a lógica usada para o desenvolvimento conforme a Equação (3).

$$\begin{array}{l} \text{Variação temporal} \\ \text{de momento} \end{array} = \begin{array}{l} \text{Taxa de entrada} \\ \text{de momento} \\ \text{pelas fronteiras} \end{array} - \begin{array}{l} \text{Taxa de saída} \\ \text{de momento} \\ \text{pelas fronteiras} \end{array} + \begin{array}{l} \text{Força externa} \\ \text{agindo sobre} \\ \text{o fluido} \end{array} \quad (3)$$

Resultando na Equação (4), a Equação da Conservação de Momento.

$$\frac{\partial (\rho_f \mathbf{u}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{u}_f \mathbf{u}_f) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau_f + \rho_f \mathbf{g} \quad (4)$$

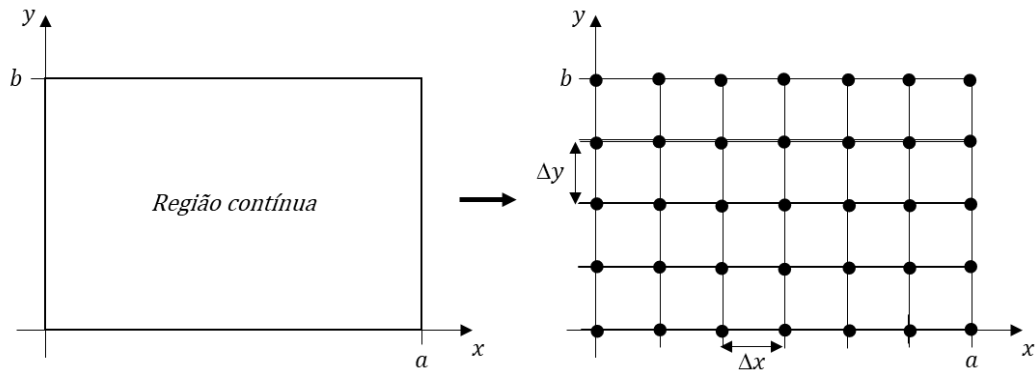
Onde o termo $\nabla \cdot (\rho_f \mathbf{u}_f \mathbf{u}_f)$ é chamado de termo convectivo, que considera a variação de quantidade de movimento num elemento pela ação de convecção. O termo ∇p diz respeito ao gradiente de pressão. O termo $\nabla \cdot \tau_f$ é o divergente do tensor τ_f , que representa as tensões viscosas agindo sobre o elemento de fluido. O termo $\rho_f \mathbf{g}$ representa a ação da força gravitacional sobre o fluido.

Tais equações são Equações Diferenciais Parciais (EDPs) não lineares, e são complexas a ponto de não possuírem soluções analíticas. Desta forma, em CFD, as equações de Navier-Stokes são resolvidas numericamente para prever o comportamento do fluido.

2.1.2 Discretização do domínio e soluções numéricas

No desenvolvimento das equações apresentadas, adotou-se a hipótese de que o meio em que se aplicam pode ser considerado contínuo. Entretanto, ao solucionar-se numericamente uma EDP, tradicionalmente escolhe-se alguns pontos do domínio e exclusivamente neles calcula-se a solução a cada passo de tempo. Este processo recebe o nome de discretização, e ao conjunto de pontos ou estrutura resultante deste processo se denomina malha (Figura 1).

Figura 1 – Exemplo do processo de discretização



Fonte: Autor, 2021.

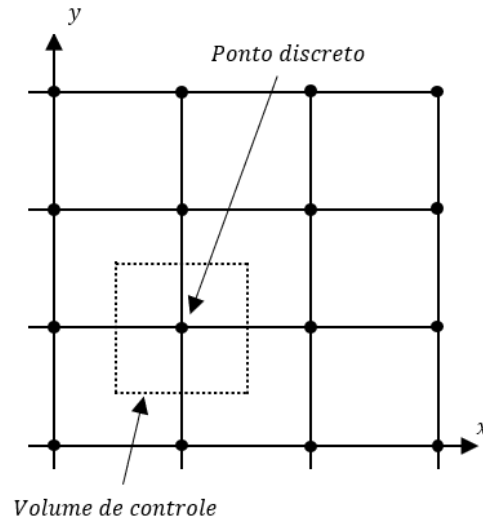
Antes de solucionar as equações de Navier-Stokes e obter os valores de velocidade e pressão em cada ponto, é necessário que se estabeleçam as condições iniciais e condições de contorno do sistema. Essas servirão de ponto de partida para o cálculo da solução.

Dessa forma, em CFD, uma vez estabelecidas as condições iniciais e condições de contorno, cada termo de derivada ou integral nas equações passa a ser representado por expressões algébricas, isto é, aproximações para os termos presentes em cada equação. Assim, para cada passo de tempo, obtém-se um sistema de equações algébricas a ser resolvido numericamente com o fim de se obter os valores de velocidade e pressão para o próximo passo de tempo.

Outro processo de discretização também relevante é o chamado Método dos volumes finitos, que é a abordagem utilizada neste trabalho. Nesta técnica, a EDP é integrada sobre uma região (ou volume de controle) do domínio da simulação, utilizando-se do conceito de fluxo (de massa ou momento) sobre esta região (Figura 2 – Discretização em volumes finitos).

Um dos motivos para a adoção desta técnica de discretização é possibilidade de ser aplicada em malhas não-uniformes, como é o caso de muitos trabalhos em CFD. Dessa forma, a partir da integração da EDP tanto no volume como no tempo, introduz-se as aproximações para as integrais e derivadas resultantes e posterior solução numérica das equações (FORTUNA, 2000).

Figura 2 – Discretização em volumes finitos



Fonte: Autor, 2021.

2.2 Método dos Elementos Discretos

Método dos elementos discretos (DEM, do inglês *Discrete element method*) é uma técnica para simulação da dinâmica de sólidos. De outra forma, trata-se de uma ferramenta que pode ser usada para simular o movimento de partículas num sistema.

Nesta técnica, cada partícula é tratada de forma individual. Logo, informações com respeito a cada partícula como suas propriedades físicas (raio, velocidade, velocidade angular, coeficiente de restituição) e trajetória são determinadas a cada passo de tempo. A este tipo de descrição do material se dá o nome de descrição Lagrangiana.

A evolução da trajetória de cada partícula é obtida pela aplicação da segunda lei de Newton do movimento de cada uma delas. Nesse sentido, para além da aceleração da gravidade, as forças de colisão partícula-partícula e partícula-superfície são consideradas e estimadas através de modelos de força que dependem de posição, velocidade e propriedades físicas das partículas. As equações usadas em DEM são as Equações (5), (6) e (7).

$$\frac{dx_i}{dt} = v_i \quad (5)$$

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = \sum_j f_{c,ij} + \sum_w f_{c,iw} + f_{g,i} \quad (6)$$

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_j (M_{c,ij} + M_{r,ij}) + \sum_w (M_{c,iw} + M_{r,iw}) \quad (7)$$

Onde x_i , v_i , ω_i , m_i e I_i referem-se à posição, velocidade, velocidade angular, massa e momento de inércia, respectivamente, da partícula i . $f_{c,ij}$, $f_{c,iw}$ e $f_{g,i}$ referem-se às forças resultantes da colisão entre as partículas i e j , forças resultantes da colisão entre a partícula i e a superfície ou fronteira do sistema e a força gravitacional, respectivamente. $M_{c,ij}$ e $M_{c,iw}$ correspondem ao torque gerado pela colisão entre partículas i e j e colisão entre partícula i e a superfície ou fronteira do sistema. $M_{r,ij}$ e $M_{r,iw}$ referem-se ao torque de fricção de rolamento gerado pela colisão entre partículas i e j e colisão entre partícula i e a superfície ou fronteira do sistema.

2.3 Método de acoplamento CFD-DEM não resolvido

O acoplamento não resolvido entre o CFD e o DEM (CFD-DEM) é um método que combina as técnicas de CFD e DEM para a simulação de um sistema sólido-fluido, utilizando a técnica de CFD para a fase Euleriana (fluido) e DEM para a fase Lagrangiana (particulada).

Neste método, para a fase sólida, as equações utilizadas são as mesmas em DEM. Entretanto, para além das forças de colisão partícula-partícula e partícula-superfície, considera-se também as forças de interação sólido-fluido relativas a cada partícula i , representando o acoplamento entre CFD e DEM (XU; YU, 1997).

Para a fase fluida, utiliza-se as chamadas Equações de Navier-Stokes baseadas em médias locais (VANS, do inglês *Volume averaged Navier-Stokes*), que se tratam de um modelo modificado das equações da Navier-Stokes, desenvolvido por ANDERSON e JACKSON (1967). Neste modelo, as variáveis vistas em pontos específicos são substituídas por variáveis em médias locais, que são obtidas ao se fazer médias destas variáveis em determinadas regiões do sistema. No caso deste trabalho, as médias das variáveis são feitas sobre cada célula da malha de CFD.

Vale ressaltar que as variáveis em médias locais, como mencionado, não caracterizam variáveis discretizadas, mas de variáveis desenvolvidas com base na

definição matemática formal de variáveis em médias locais, usadas com o propósito de desenvolver um modelo que descreva a dinâmica de um leito fluidizado sem a necessidade de considerar as variáveis pontualmente, e sim localmente (ANDERSON; JACKSON, 1967). Desta forma, nas equações VANS, as variáveis ainda passarão pelo processo de discretização, como abordado na introdução. Além disso, cabe mencionar que apesar do desenvolvimento deste modelo ter se tornado público em 1967, trabalhos pioneiros em suas aplicações para CFD-DEM são datados na década de 1990 (XU; YU, 1997).

2.3.1 Forças de interação sólido-fluido

Em um escoamento multifásico, como no caso de um leito fluidizado, as trocas de forças entre fases desempenham papel importante no fenômeno. As forças de interação sólido-fluido consideradas para a modelagem neste trabalho são: forças de arraste, força de tensões viscosas, força devido ao gradiente de pressão e força de empuxo.

A força de arraste é experienciada pela partícula através da interação com o fluido que escoar ao seu redor, sendo a força motriz do fenômeno de fluidização (ZHU *et al.*, 2007). A origem dessa força vem da diferença de velocidades entre a partícula e o fluido, e é independente de aceleração da partícula. Forças devidas a tensões viscosas em escoamentos líquido-sólido contribuem de forma significativa sobre uma partícula i quando a razão entre a densidade do líquido e a densidade do material tem ordem de grandeza da unidade.

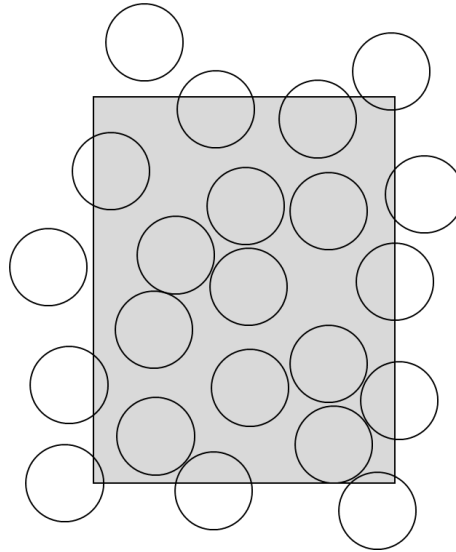
As forças devidas ao gradiente de pressão, de forma análoga às forças de tensão viscosa, são significativas quando a razão entre a densidade do líquido e a densidade do material tem ordem de grandeza da unidade, agindo sobre uma partícula i na direção do vetor gradiente de pressão (CROWE *et al.*, 2012). ANDERSON e JACKSON (1967) tratam as forças de gradiente de pressão junto da força de empuxo. Entretanto, ambas as parcelas de contribuição são importantes e consideradas neste trabalho.

2.3.2 Relação entre tamanho do domínio/célula/partícula

Em simulações com o acoplamento não-resolvido, em geral, usa-se diferentes

escalas de tempo e espaço para as fases sólida e fluida (ZHU *et al.*, 2007). Isto é, não apenas os passos de tempo aplicados às duas fases são diferentes numa mesma simulação, mas também as células de CFD podem ser definidas visando serem capazes de conter diversas partículas (Figura 3), de forma que os fenômenos das fases são solucionados em diferentes proporções (ZHOU *et al.*, 2010).

Figura 3 – Elemento de malha no acoplamento não-resolvido (em cinza)

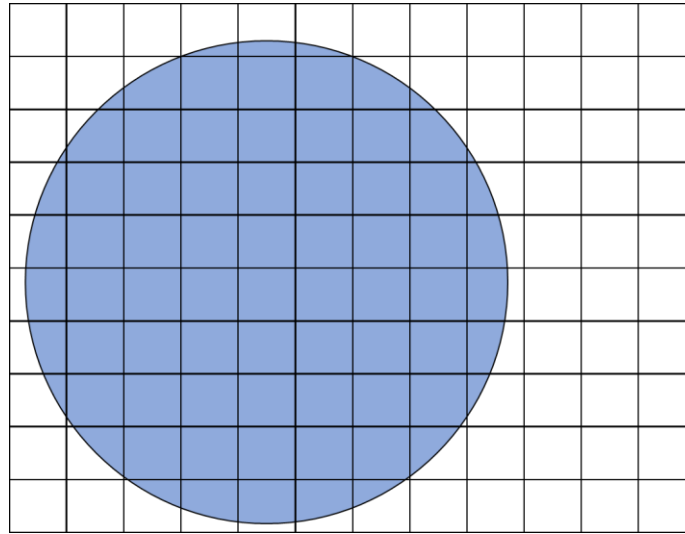


Fonte: Autor, 2021.

Esta abordagem do acoplamento não-resolvido diferencia-se do chamado acoplamento resolvido, onde as células de CFD são definidas com o objetivo de possuírem volume significativamente menor em comparação com as partículas, que devem ocupar, por exemplo, ao menos 10 células da malha nesta abordagem (KLOSS *et al.*, 2012).

No acoplamento resolvido, as técnicas de CFD e DEM também são combinadas com o objetivo de simular escoamento sólido-fluido. Entretanto, seu uso pode ser recomendado para o caso onde as partículas ou os corpos simulados possuem grande diâmetro quando comparado com o restante do domínio. Além disso, este método permite alta resolução do escoamento de fluido apesar de trazer um alto custo computacional (HAGER *et al.*, 2012). A Figura 4 – *Elementos de malha em acoplamento resolvido* traz uma ilustração do acoplamento resolvido.

Figura 4 – Elementos de malha em acoplamento resolvido



Fonte: Autor, 2021.

Dessa forma, voltando ao acoplamento não-resolvido, as relações de tamanho entre domínio, célula e partícula possuem papel importante na obtenção de resultados consistentes em simulações. Segundo PENG *et al.* (2014), comparado à escala do domínio, a malha deve ser refinada o suficiente a ponto de estar sensível às características e estruturas de menor escala no escoamento de fluido. Com o fim de mensurar o quão refinado o tamanho de célula deve estar em relação ao domínio da simulação, costuma-se definir S_d e S_c , denominados dimensão característica do domínio e dimensão característica da célula, respectivamente, dados pelas Equações (8) e (9). Desse modo, é possível quantificar a proporção da malha com relação ao domínio (S_d/S_c) para verificar sua capacidade de solucionar apropriadamente o escoamento de fluido.

$$S_d = \sqrt[3]{V_d} \quad (8)$$

$$S_c = \sqrt[3]{V_c} \quad (9)$$

$$V_c = \frac{V_d}{n_T} \quad (10)$$

Onde V_d é o volume total do domínio da simulação e V_c o volume médio de uma célula da malha. V_c é calculado a partir do volume total do domínio dividido por n_T , que é a quantidade total de células (Equação (10)).

Por outro lado, também é necessário que o tamanho das células seja grosseiro

o suficiente para que haja a separação de escalas entre fases (PENG *et al.*, 2014), como mencionado anteriormente. Assim, também é necessário que haja um parâmetro com o fim de comparar a escala das células com a escala das partículas. Para isso, usa-se a razão S_c/d_p , em que d_p é o diâmetro da partícula.

2.3.3 Porosidade local (ϵ)

A porosidade local em uma célula pode ser definida como a fração de volume ocupada pelo fluido (em relação ao seu volume total). Quando se aplica o acoplamento CFD-DEM, esta variável está presente não apenas nas equações VANS, como também no modelo da força de arraste, força motriz no processo de fluidização, influenciando na troca de momento entre as fases sólida e fluida (equações e modelos que são mostrados com mais detalhes no Capítulo 3). Logo, é uma variável essencial das simulações desenvolvidas neste trabalho. Desse modo, a forma como as partículas são projetadas sobre a malha de CFD deve ter especial atenção para que haja precisão do método CFD-DEM, uma vez que essa projeção determina o cálculo da porosidade local (PENG *et al.*, 2014). Assim, para o presente trabalho, serão abordados três destes métodos de projeção: o método de Centroide da partícula, o método Dividido e o método Binário, disponíveis no *software* CFDEM®coupling (GONIVA *et al.*, 2010) que serão explicitados com maiores detalhes no Capítulo 3.

2.4 Estudos relacionados

PENG *et al.* (2014) investigou a precisão de dois métodos de cálculo de porosidade local em leito fluidizado gasoso, os métodos Centroide e o Analítico, avaliando os resultados obtidos em comparação com dados experimentais. Eles mostraram que se $S_c/d_p > 3,82$ o método Centroide é capaz de produzir resultados coerentes. Entretanto, em caso contrário, observa-se instabilidade numérica e resultados inconsistentes.

O estudo mostra também a importância da razão S_d/S_c para o método Centroide, como um critério para a resolução da fase fluida. Conclui-se que se $S_d/S_c > 19,3$ o método Centroide é capaz de produzir bons resultados. Se, porém, este critério não é atendido, a modelagem de aspectos importantes de um leito fluidizado como formação de bolhas e de vórtices ficam comprometidos.

CLARKE *et al.* (2018) investigou a aplicação de diversos métodos de cálculo de porosidade local em leito fluidizado, incluindo o método Centroide e o método Dividido para as razões S_c/d_p iguais a 3,5 e 1,6. Neste estudo, os dois métodos apresentaram boa concordância com os valores exatos de porosidade local obtidos experimentalmente para a malha de razão $S_c/d_p = 3,5$. Entretanto, para a malha com $S_c/d_p = 1,6$, o método Dividido apresentou melhores resultados.

O método Dividido também foi testado por KLOSS *et al.* (2012) e BLAIS *et al.* (2016) para a simulação de um leito de jorro e de um tanque de mistura sólido-líquido, respectivamente, mostrando que esse método tem potencial para ser utilizado na simulação de outros equipamentos tradicionais em Engenharia Química que envolvam escoamentos multifásicos.

Para além dos métodos usados neste trabalho, há outros também oferecidos pelo *software* CFDEM®coupling e ainda outros também encontrados na literatura. No método Gaussiano, por exemplo, a porosidade local das células é determinada a partir da divisão do volume da partícula com base na distribuição gaussiana a partir do seu centroide. Dessa forma, uma partícula pode contribuir com porções do seu volume a células distantes (CLARKE *et al.*, 2018). Segundo desenvolvedores do *software* CFDEM®coupling, recomenda-se este método quando o tamanho de partícula é maior que a célula de CFD (CFDEM®COUPLING, [s.d.]).

No método Analítico, usa-se técnicas baseadas em geometria para prever, através de fórmulas (por isso o nome), a exata porção de volume que é ocupada por cada partícula em cada célula. Entretanto, este método possui grandes restrições. É amplamente limitado a malhas em uma e duas dimensões, sendo aplicável a simulações em 3D apenas em malhas regulares e bem estruturadas, o que não é o caso das malhas utilizadas neste trabalho. Além disso, é restrito a partículas esféricas (PENG *et al.*, 2014).

3 MODELAGEM MATEMÁTICA

Neste capítulo, apresenta-se a modelagem matemática do problema, isto é, as equações e modelos empíricos adotados para a descrição do problema.

3.1 Método de acoplamento CFD-DEM não resolvido

Como mencionado na revisão da bibliografia, as equações utilizadas para a fase sólida do acoplamento são as mesmas da técnica DEM, acrescidas, entretanto, das forças de interação sólido-fluido. Dessa forma, as Equações (5) e (7) se mantêm, enquanto que Equação (6), para o acoplamento não-resolvido, é modificada para a Equação (11),

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = \sum_j f_{c,ij} + \sum_w f_{c,iw} + f_{pf,i} + f_{g,i} \quad (11)$$

$$f_{pf,i} = f_D + f_p + f_\tau \quad (12)$$

Onde adiciona-se o termo $f_{pf,i}$, que é relativo às forças de interação sólido-fluido agindo sobre uma partícula i . O termo f_D é a força de arraste, o termo f_p é a força devida aos gradientes de pressão e empuxo e o termo f_τ refere-se às forças de tensões viscosas.

No presente trabalho, os modelos de contato partícula-partícula ($f_{c,ij}$) usados seguem o padrão de modelos do DEM, segundo a Equação (13).

$$f_{c,ij} = k_{n,ij} |\delta_{n,ij}|^a \delta_{n,ij} + \gamma_{n,ij} |\delta_{n,ij}|^b \dot{\delta}_{n,ij} + k_{t,ij} |\delta_{n,ij}|^c \delta_{t,ij} + \gamma_{t,ij} |\delta_{n,ij}|^d \dot{\delta}_{t,ij} \quad (13)$$

Onde as duas primeiras parcelas referem-se a forças normais (isto é, forças que agem na direção normal ao plano tangente gerado pela colisão entre as partículas), e as duas últimas referem-se a forças tangenciais, agindo paralelamente ao plano de colisão entre as partículas. Além disso, com relação aos parâmetros mostrados, $k_{n,ij}$ e $k_{t,ij}$ são os coeficientes de rigidez normal e tangencial, respectivamente, $\gamma_{n,ij}$ e $\gamma_{t,ij}$ são os coeficientes de amortecimento normal e tangencial, respectivamente, $\dot{\delta}_{n,ij}$ e $\dot{\delta}_{t,ij}$ são as derivadas temporais dos parâmetros $\delta_{n,ij}$ e $\delta_{t,ij}$, chamados sobreposição normal e sobreposição tangencial, respectivamente. As constantes a , b , c e d são não negativas e dependem do modelo escolhido.

Na técnica DEM, para o cálculo das forças de interação partícula-partícula,

considera-se que há uma pequena sobreposição entre as partículas que colidem (Figura 5). O parâmetro $\delta_{n,ij}$ é uma medida da magnitude desta sobreposição na direção normal, da mesma forma, o parâmetro $\delta_{t,ij}$. As Equações (14) a (20) definem os parâmetros.

$$\delta_{n,ij} = ((r_i + r_j) - |x_i - x_j|)n \quad (14)$$

$$\delta_{t,ij} = - \int_{t_{c,ij}}^t v_{t,ij} dt \quad (15)$$

$$v_{t,ij} = v_{ij} - v_{n,ij} \quad (16)$$

$$v_{n,ij} = v_{ij} \cdot n \quad (17)$$

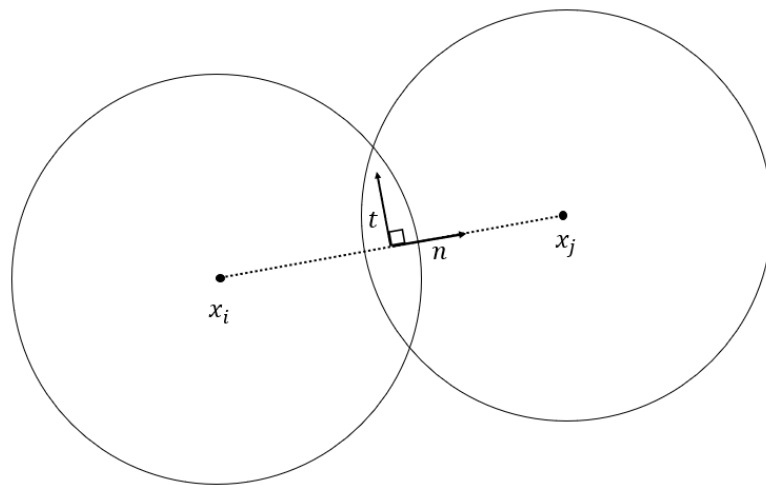
$$v_{ij} = v_i - v_j + (R_i \omega_i + R_j \omega_j) \times n \quad (18)$$

$$n = \frac{x_i - x_j}{|x_i - x_j|} \quad (19)$$

$$t = \frac{v_{t,ij}}{|v_{t,ij}|} \quad (20)$$

Onde n e t são os vetores unitários normal e tangencial, r_i e r_j os raios das partículas i e j , v_{ij} a velocidade relativa entre as partículas i e j , R_i e R_j os raios das as partículas i e j .

Figura 5 – Ilustração de sobreposição das partículas em DEM



Fonte: Autor, 2021.

O modelo de colisão usado neste trabalho é o modelo *hertz* para a parcela

normal e *history* para a parcela tangencial, disponíveis pelo *software* CFDEM®coupling. Nestes modelos, a Equação (13) é transformada na Equação (21), onde os coeficientes de rigidez e de amortecimento são calculados com base nas propriedades das partículas.

$$f_{c,ij} = k_{n,ij}\delta_{n,ij} + \gamma_{n,ij}\dot{\delta}_{n,ij} + k_{t,ij}\delta_{t,ij} + \gamma_{t,ij}\dot{\delta}_{t,ij} \quad (21)$$

Os parâmetros relativos às propriedades das partículas (fase sólida), são mostrados na Tabela 1.

Tabela 1 – Propriedades físicas das partículas

Propriedade	Valor
Módulo de Young (Pa)	2,83.10 ⁹
Coefficiente de Poisson	0,3
Coefficiente de restituição	0,7
Coefficiente de atrito	0,1
Coefficiente de atrito de rolamento	0,003

Em relação à fase fluida do acoplamento, as equações utilizadas (VANS) são dadas pelas Equações (22) e (23). Que são as equações da fase fluida para o acoplamento.

$$\frac{\partial(\varepsilon_c \rho_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_c \rho_f \mathbf{u}_f) = 0 \quad (22)$$

$$\frac{\partial(\varepsilon_c \rho_f \mathbf{u}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_c \rho_f \mathbf{u}_f \mathbf{u}_f) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_f + \mathbf{F}_{pf} + \varepsilon_c \rho_f \mathbf{g} \quad (23)$$

Nota-se a similaridade entre as equações VANS e as equações de Navier-Stokes, onde o termo ε é a porosidade local, e adiciona-se o termo \mathbf{F}_{pf} , relativo às forças de interação entre partícula e fluido em cada célula, sendo definida pela Equação (24) (XU; YU, 1997)

$$\mathbf{F}_{pf} = \frac{1}{\Delta V} \sum_{i=1}^n f_{pf,i} \quad (24)$$

Onde ΔV é o volume da célula, n a quantidade de partículas contidas em cada

célula e $f_{pf,i}$ a força total de interação sólido-fluido agindo sobre a partícula i .

Na simulação da fase fluida do acoplamento, o *software* CFDEM®coupling se utiliza do *software* OpenFOAM (THE OPENFOAM FOUNDATION, [s.d.]), que demanda condições iniciais e de contorno, como dito anteriormente. A Tabela 2 apresenta as condições usadas para o OpenFOAM.

Tabela 2 – Condições de contorno e condições iniciais para fase fluida

Variável	Tipo de fronteira	Condição de contorno	Condição inicial
Pressão cinemática (m ² /s ²)	Entrada	<i>zeroGradient</i>	0
	Parede	<i>zeroGradient</i>	0
	Saída	<i>fixedValue</i>	0
Velocidade (m/s)	Entrada	<i>uniformFixedValue</i>	(0 0 0) a (0 0 U)
	Parede	<i>noSlip</i>	(0 0 0)
	Saída	<i>zeroGradient</i>	(0 0 0)

Onde a condição *zeroGradient* significa um gradiente nulo do valor da variável na direção normal da superfície (seja entrada, saída ou parede), a condição *fixedValue* significa o estabelecimento de um valor específico para a variável durante a simulação, a condição *uniformFixedValue* estabelece uma variação uniforme do valor da variável, a condição *noSlip* significa a condição de não deslizamento, fixando valor nulo de velocidade na parede no leito. No caso da condição *uniformFixedValue* para a velocidade, U representa o valor final da velocidade correspondente a cada vazão (7,427.10⁻² m/s, 1,167.10⁻¹ m/s e 1,592.10⁻¹ m/s para 35 L/min, 55 L/min e 75 L/min, respectivamente).

Considerando que o número de Reynolds para o tubo foi de 7,4.10³ para a menor velocidade (35 L/min), caracterizando um regime turbulento, utilizou-se o modelo de turbulência $k - \varepsilon$ (k-Epsilon) para todas as simulações deste trabalho. Tal modelo é amplamente usado em simulações CFD e também recomendado para escoamentos multifásicos (ARGYROPOULOS; MARKATOS, 2015).

A Tabela 3 traz outras informações quanto às fases sólida e fluida, bem como quanto ao acoplamento.

Tabela 3 – Propriedades das fases e acoplamento

	Densidade (kg/m ³)	998,2
Fase fluida	Viscosidade cinemática (m ² /s)	1.10 ⁻⁶
	<i>Timestep</i> (s)	1.10 ⁻⁴
	Densidade (kg/m ³)	1822
Fase sólida	Diâmetro da partícula (m)	5,95.10 ⁻³
	<i>Timestep</i> (s)	1.10 ⁻⁵
	Quantidade de partículas	8000
Acoplamento	Frequência	100

Onde a frequência do acoplamento diz respeito à quantidade de *timesteps* simulados entre a troca de informações das fases CFD e DEM. Isto é, uma vez que o *timestep* da fase sólida é 1.10⁻⁵ s e sendo a frequência 100, a troca de informações quanto forças de interação sólido-fluido, por exemplo, acontecem a cada 1.10⁻³ s, permitindo a separação de escalas, como mencionado anteriormente, e tornando o esquema de acoplamento mais flexível a cada aplicação (KLOSS et al., 2012).

3.2 Forças de interação sólido-fluido

Expressões do modelo de arraste utilizado neste trabalho foram dadas pelo modelo de GIDASPOW (1994), desenvolvido com base na Equação de ERGUN (1952) e nos trabalhos de WEN e YU (1966), representado pelas Equações (25), (26) e (27).

$$f_D = \frac{\beta_{pf}(\mathbf{u}_f - \mathbf{v})}{\rho_f} \quad (25)$$

$$\beta_{pf} = \begin{cases} 150 \frac{(1 - \varepsilon_c)^2 \mu}{\varepsilon_c d_p^2} + 1,75 \left[(1 - \varepsilon_c) \frac{\rho_f}{d_p} |\mathbf{u}_f - \mathbf{v}| \right] & \varepsilon_c \leq 0,8 \\ 0,75 \frac{C_D |\mathbf{u}_f - \mathbf{v}| \rho_f (1 - \varepsilon_c)}{d_p} \varepsilon_c^{-2,65} & \varepsilon_c \geq 0,8 \end{cases} \quad (26)$$

$$C_D = \begin{cases} \frac{24(1 + 0,15Re_p^{0,687})}{Re_p} & Re_p \leq 1000 \\ 0,44 & Re_p > 1000 \end{cases} \quad (27)$$

Onde f_D é a força de arraste, β_{pf} é o coeficiente de troca de momento entre as fases, \mathbf{u}_f é a velocidade do fluido, \mathbf{v} é a velocidade da partícula, ρ_f é a massa específica do fluido, ε_c a porosidade local da célula (fração de volume de fluido em relação ao volume total de célula), C_D o coeficiente de arraste, relacionado ao número de Reynolds da partícula (Re_p) por ROWE (1961), e dado pela Equação (28).

$$Re_p = \frac{\varepsilon_c \rho_f (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}) d_p}{\mu} \quad (28)$$

Para o cálculo das forças de tensão viscosa, utiliza-se a Equação (29). (CROWE *et al.*, 2012; ZHOU *et al.*, 2010).

$$f_\tau = V_i \frac{\partial \tau}{\partial x} = -\frac{\pi}{6} d_p^3 \nabla \cdot \tau \quad (29)$$

Onde $\nabla \cdot \tau$ é o divergente do tensor de tensões viscosas e V_i o volume da partícula i .

As forças devidas ao gradiente de pressão (que incluem a força de empuxo) são dadas pela Equação (30).

$$f_p = -V_i \frac{dp}{dx} = -V_i \left(\rho_f \mathbf{g} + \rho_f \frac{d\mathbf{u}_i}{dx} \right) \quad (30)$$

Onde o termo à esquerda do lado direito da Equação (30) trata da força de empuxo, quanto que o termo direito trata do gradiente de pressão.

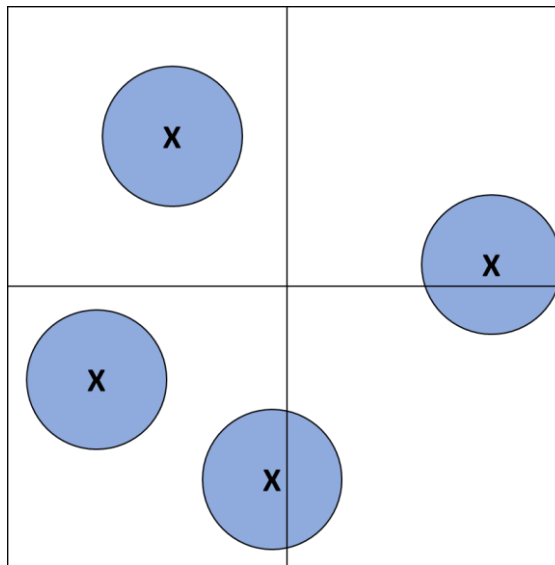
3.3 Métodos de cálculo de porosidade local

Como mencionado na seção 2.3, os métodos de cálculo de porosidade local devem receber especial atenção no acoplamento CFD-DEM não-resolvido. Neste trabalho, os métodos a serem aplicados nas simulações com o *software* CFDEM@coupling e relevantes para a compreensão deste trabalho são: o método do Centróide da partícula, o método Dividido e o método Binário.

O método do Centróide da partícula (PCM, do inglês *particle centroid method*) é o mais simples dos métodos (CLARKE *et al.*, 2018; PENG *et al.*, 2014), e escolhido para os testes deste trabalho por ser frequentemente utilizado em comparações com outros métodos nos trabalhos que foram analisados. Esse método consiste em considerar o volume total das partículas cujos centróides se encontram no interior da

célula para o cálculo da fração de vazios. De acordo com PENG *et al.* (2014), apresenta bons resultados se $S_c/d_p > 3,82$, podendo conduzir à uma simulação instável e resultados não coerentes caso não se atenda a este critério. Uma desvantagem no uso do modelo é ter de tornar o grid grosseiro demais a ponto de se não solucionar corretamente o campo de fluido (CFDEM@COUPLING, [s.d.]). A Figura 6 ilustra o funcionamento do método Centroide. O parâmetro *alphaMin* (limite mínimo de valor para porosidade local) estabelecido foi de 0,1.

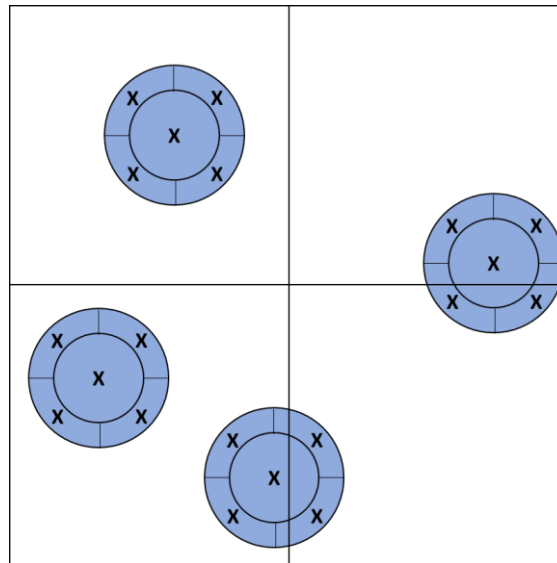
Figura 6 – Ilustração em 2D simplificada da projeção pelo método Centroide



Fonte: Autor, 2021.

No método Dividido (do inglês *divided*) a partícula é subdividida em 29 pseudopartículas menores e de igual volume. Os centroides de cada uma dessas subdivisões são, então, utilizados para atribuir o volume proporcional das partículas ao cálculo da fração de partículas na célula em que esses centroides se encontram (Figura 7). Dessa forma, parte do volume de uma partícula poderá ser atribuído à(s) célula(s) vizinha(s) se o seu centroide se encontrar suficientemente próximo da fronteira de uma célula (CFDEM@COUPLING, [s.d.]). Tal abordagem, comparada ao primeiro modelo, tem maior capacidade de produzir campos de porosidade local mais suaves, como também valores de F_{pf} , termo de forças de interação sólido-fluido, mais suaves (BLAIS *et al.*, 2016; KLOSS *et al.*, 2012). Além disso, tendo em vista recomenda-se o uso deste método onde a partícula e a célula da malha estejam em escalas semelhantes (CFDEM@COUPLING, [s.d.]) escolheu-se também testar o método Dividido. O parâmetro *alphaMin* estabelecido para este método foi de 0,1.

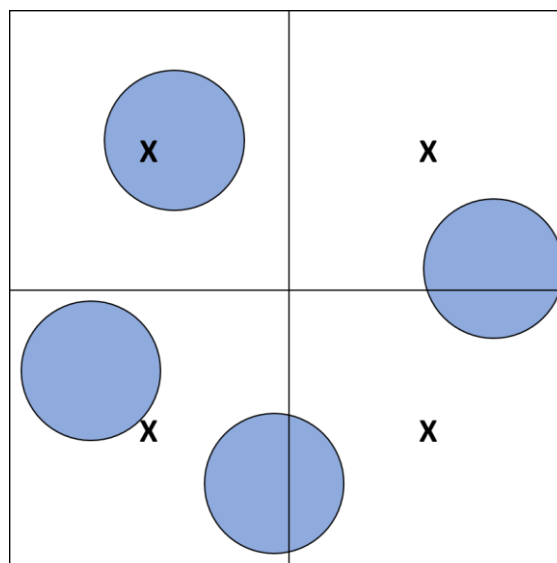
Figura 7 – Ilustração em 2D simplificada da projeção pelo método Dividido



Fonte: Autor, 2021.

No método Binário, a porosidade local atribuída a uma célula será binária (será 0 ou 1). Para a atribuição de valor 0, o centro da célula deve estar presente em alguma partícula. Caso contrário, o valor atribuído à célula será 1. Tal abordagem foi escolhida para verificar os efeitos de se superestimar, bem como subestimar os valores locais de porosidade. A Figura 8 traz uma ilustração do funcionamento do método Binário. Recomenda-se que, para resultados mais precisos, adote-se o modelo em sistemas com $S_c/d_p < 1/8$ (CFDEM@COUPLING, [s.d.]). O parâmetro *alphaMin* estabelecido para este método foi de 0,1.

Figura 8 – Ilustração em 2D simplificada da projeção pelo método Binário



Fonte: Autor, 2021.

4 METODOLOGIA

4.1 Simulações

No presente trabalho, a modelagem apresentada foi aplicada no intuito de investigar o comportamento de um leito fluidizado de geometria cilíndrica, cujas características e parâmetros serão apresentadas nesta seção. A Tabela 4 apresenta os parâmetros do leito.

Tabela 4 – Parâmetros do leito cilíndrico

Diâmetro (m)	Altura (m)	Volume (m ³)
0,1	1	7,854.10 ⁻³

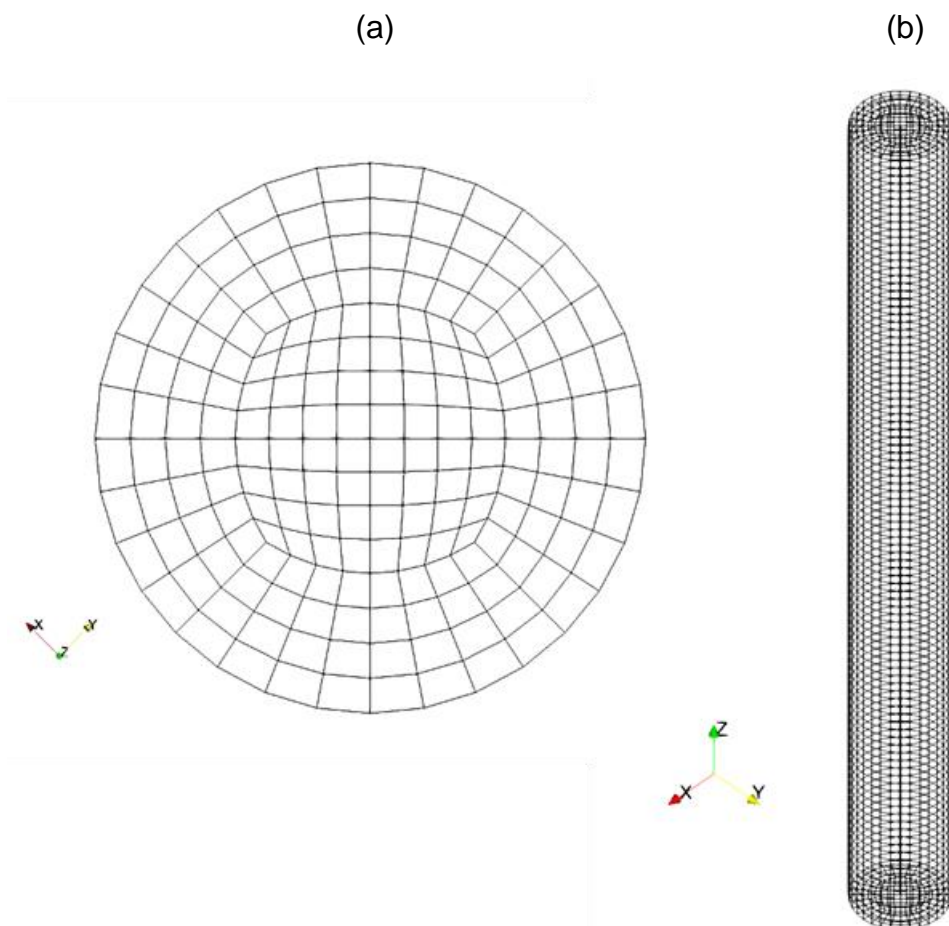
As malhas e geometrias usadas nas simulações foram geradas pela ferramenta *blockMesh*, fornecida pelo *software* OpenFOAM. A Figura 9(a) mostra a vista da secção transversal de uma das malhas aplicadas às simulações. Visualmente, é possível distinguir entre duas regiões: a central (semelhante a um quadrado de arestas torcidas) e a periférica, que a cerca. A partir de uma linha imaginária entre o centro da secção até a sua extremidade superior, conta-se quatro células presentes na região central e quatro células na região periférica. Também nesta mesma malha, conta-se cem seções de células ao longo da altura do cilindro (Figura 9(b)). Desta forma, dá-se o nome desta malha de 4-4-100.

Neste trabalho foram usadas seis malhas, refinadas de forma semelhante ao exemplo apresentado, a partir do padrão $n - n - (20 + 20n)$, onde a malha mais grosseira utilizada foi a 3-3-80 e a malha mais fina, 8-8-180 (Tabela 5).

Tabela 5 – Propriedade das malhas

Malha	Número de elementos	Razão S_d/S_c	Razão S_c/d_p
3-3-80	8640	20,5	1,628
4-4-100	19200	26,8	1,248
5-5-120	36000	33,0	1,012
6-6-140	60480	39,3	0,851
7-7-160	94080	45,5	0,735
8-8-180	138240	51,7	0,646

Figura 9 – Estrutura da malha 4-4-100



Fonte: Autor, 2021.

Para cada malha, aplicou-se três vazões de entrada de fluido: 35 L/min, 55 L/min, 75 L/min, vazões cujas velocidades superam a velocidade de mínima

fluidização, mas não superaram a velocidade terminal. Além disso, para cada velocidade, testou-se os três métodos de cálculo de porosidade local, totalizando 54 simulações.

O tempo total em cada simulação foi de 30 s. Entretanto, o algoritmo do *software* de alojamento das partículas dentro do leito faz de forma de estejam dispersas de início, longe de uma condição de empacotamento. Assim, esperou-se um tempo de 3 s para acomodação e descida das partículas no leito para então aplicar a vazão especificada.

4.2 Estimativas e validação

Para a avaliação e análise dos resultados, a etapa de pós-processamento foi realizada no *software* de visualização ParaView (AHRENS; GEVECI; LAW, 2005). Obteve-se, para cada simulação, a porosidade média do leito para ser comparada com os valores obtidos pela Equação de Richardson-Zaki (modelo empírico). Além disso, com o objetivo de comparar a qualidade dos resultados para cada malha e a precisão entre os métodos de cálculo de porosidade local bem, avaliou-se também a flutuação dos sinais pressão e a taxa de fluxo mássico normalizado.

4.2.1 Flutuação de sinais de pressão

A flutuação de sinais de pressão caracteriza a dinâmica de fluidização num leito, mostrando o seu comportamento ao longo do tempo. Desta forma, a análise destas flutuações é significativa para a escolha apropriada de condições para o leito, além de evidenciar a qualidade das modelagens feitas para o sistema. Assim, monitorou-se a pressão local 0,001 m acima da base do leito, medindo-se o seu valor a cada 1 s a partir dos 10 s de simulação até o tempo total (30 s). Calculou-se a média aritmética destes valores, bem como os desvio padrões relativos a cada uma destas médias.

Além disso, para verificar a coerência dos valores medidos, calculou-se a queda de pressão teórica de acordo com os parâmetros do leito considerado neste trabalho. Segundo EPSTEIN (2003), para um leito fluidizado, a queda de pressão constante é dada pela Equação (31).

$$-\Delta p = L(1 - \varepsilon_m)(\rho_p - \rho_f)g \quad (31)$$

Onde $-\Delta p$ é a queda de pressão, L a altura do leito, ε_m a porosidade média do leito e ρ_p a densidade da partícula.

Se a massa total de partículas é dada por M , a fração volumétrica média de sólidos (isto é, a unidade subtraída da porosidade média), é dada pela Equação (32).

$$1 - \varepsilon_m = \frac{M}{\rho_p AL} \quad (32)$$

Onde A é a área da secção transversal do leito.

Dessa forma, faz-se a substituição do termo $L(1 - \varepsilon_m)$ da Equação (31) a partir da Equação (32), o que resulta na Equação (33), que é a equação usada para o cálculo teórico da queda de pressão esperada no leito.

$$-\Delta p = \frac{M}{\rho_p A} (\rho_p - \rho_f) g \quad (33)$$

Sabendo que a quantidade de partículas é de 8000, que são esféricas e de densidade 1822 kg/m^3 , chegou-se a uma queda de pressão teórica de $906,98 \text{ Pa}$.

4.2.2 Taxa de fluxo mássico normalizado

Com o objetivo de verificar a obediência dos resultados à lei da conservação de massa, a variação do fluxo mássico normalizado foi avaliada (NMFR, do inglês *Net mass flow rate*). Esse parâmetro consiste na diferença entre a vazão mássica de entrada e de saída da célula, dividida pela vazão mássica de entrada, dado pela Equação (34).

$$\Psi_m = \frac{\sum \Lambda_{F,in} - \sum \Lambda_{F,out}}{\sum \Lambda_{F,in}} \quad (34)$$

$$\Lambda_F = \rho_f \mathbf{u}_f \mathbf{n}_f A_f \varepsilon_f \quad (35)$$

Onde Λ_F é a vazão mássica através de uma face da célula, \mathbf{n}_f o vetor unitário normal à face da célula, A_f a área da face da célula, ε_f o termo de porosidade local da face, obtido através de uma média entre as células que lhe fazem fronteira. Nessa, ε_f é fundamental para mostrar obediência à lei de conservação de massa, caso contrário, os resultados podem não condizer com a realidade.

De forma análoga à flutuação dos sinais de pressão, monitorou-se o NMFR ao medir-se seu valor a cada 1 s a partir dos 10 s de simulação até o tempo total (30 s). Calculou-se também a média aritmética destes valores, bem como os desvio padrões relativos a cada uma destas médias.

4.2.3 Equação de Richardson-Zaki

A Equação empírica proposta por RICHARDSON e ZAKI (1954) é frequentemente aplicada na predição da expansão de leito fluidizado líquido, relacionando dados de velocidade de fluido e porosidade média do leito, sendo a sua forma mais comum sendo dada pela Equação (36). Como dito anteriormente, aplicou-se diferentes vazões de fluido (35 L/min, 50 L/min e 75 L/min) às simulações. Dessa forma, com o fim de avaliar a expansão do leito predita por cada simulação, obteve-se valores de ε correspondentes a cada vazão a partir da Equação de Richardson-Zaki, comparando os resultados obtidos por simulação e pelo modelo empírico.

$$\frac{U}{U_0} = \varepsilon_m^n \quad (36)$$

Onde U é a velocidade do fluido, ε_m a porosidade do leito, U_0 a velocidade terminal da partícula.

Teoricamente, a partir da equação, se espera que se $\varepsilon = 1$, então $U = U_0$. Entretanto, a partir de experimentos e extrapolações feitas para $\varepsilon = 1$ em plotagens $\log U \times \log \varepsilon$, $\log U$ atinge um valor diferente e menor que $\log U_0$. Assim, introduz-se um parâmetro de correção $k \leq 1$ para a Equação (36), sendo modificada para a Equação (37), a ser utilizada por este trabalho (EPSTEIN, 2003).

$$\frac{U}{U_0} = k \varepsilon_m^n \quad (37)$$

Assim, para usar a Equação (37) com o fim de estimar o valor de ε , é necessário se conhecer os valores de velocidade terminal (U_0), do índice n e do parâmetro de correção k . A velocidade terminal é obtida através de correlação empírica para o cálculo de Re_0 (Equação (38)), para partículas esféricas (TURTON; CLARK, 1987):

$$Re_0 = \frac{d_p U_0 \rho_f}{\mu} = Ar^{1/3} \left[\left(\frac{18}{Ar^{2/3}} \right)^{0,824} + \left(\frac{0,321}{Ar^{1/3}} \right)^{0,412} \right]^{-1,214} \quad (38)$$

Onde Ar é o número de Arquimedes, definido pela Equação (39).

$$Ar = \frac{g d_p^3 \rho_f (\rho_p - \rho_f)}{\mu^2} \quad (39)$$

KHAN e RICHARDSON (1989) propuseram uma equação para o cálculo do

parâmetro n a partir do número de Arquimedes (Equação (40)).

$$\frac{4,8 - n}{n - 2,4} = 0,043Ar^{0,57} \quad (40)$$

Quanto ao parâmetro k , ainda existe alguma incerteza relacionada ao seu cálculo. Segundo EPSTEIN (2003), a depender do valor de Re_0 usa-se diferentes equações empíricas. São elas: a Equação (41), proposta por KHAN e RICHARDSON (1989), e as Equações (42) e (43), desenvolvidas a partir dos trabalhos de RAPAGNÀ *et al.* (1989).

$$k = 1 - 1,15 \left(\frac{d_p}{D} \right)^{0,6} \quad (41)$$

$$k = 1,09 - 0,11 \log Re_0 \quad (42)$$

$$k = \left(\frac{7}{Re_0} \right) + 0,8 \quad (43)$$

Dessa forma, a recomendação é que, se $Re_0 < 35$, k seja calculado a partir da Equação (41), ou $k = 1$, se desconsiderar o efeito das paredes do leito. Se $35 \leq Re_0 \leq 100$, k deve ser tomado como o valor mínimo obtido a partir das Equações (41) e (43). Se $100 < Re_0 < 1000$, Re_0 deve ser tomado como o valor mínimo obtido a partir das Equações (41) e (42). Se $Re_0 \geq 1000$, recomenda-se o uso da Equação (41). Neste trabalho, a partir das equações e parâmetros dados, chega-se a $Re_0 = 2178,5$. Assim, usou-se a Equação (41) para o cálculo do parâmetro k .

Para o cálculo de porosidade média das simulações, calculou-se a média temporal dos valores de pressão desde a base do leito até o topo a cada 0,06 m. Da mesma forma que a flutuação dos sinais de pressão, tomou-se valores desde os 10 s até o fim da simulação (30 s). Entretanto, os valores foram avaliados a cada *timestep* da fase fluida (10^{-4} s). Para isso, usou-se a ferramenta *fieldTimeAverage*, já oferecida pelo *software* CFDEM®coupling.

Ao se observar novamente a Equação (31), nota-se a relação de linearidade entre a queda de pressão ($-\Delta p$) e a altura do leito (L). Dessa forma, a partir dos valores de queda de pressão médios em cada nível de altura, constrói-se a linha de tendência com o fim de se encontrar o coeficiente angular da relação, que é $(1 - \varepsilon_m)(\rho_p - \rho_f)g$.

Portanto, chamando de a o valor obtido para o coeficiente angular, encontra-

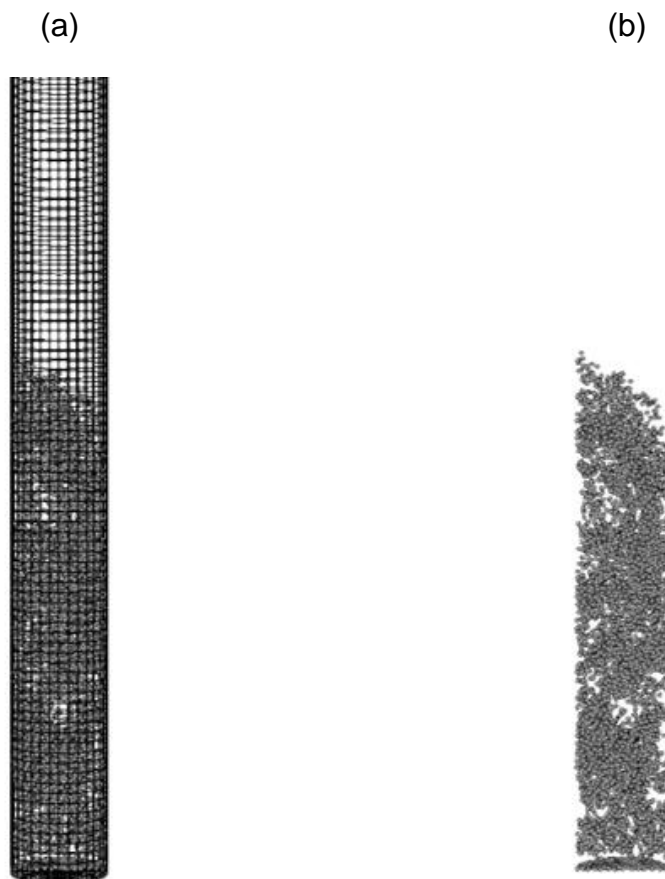
se a porosidade média da simulação pela Equação (44), com o fim de compará-la com a Equação de Richardson-Zaki.

$$\varepsilon_m = 1 - \frac{a}{(\rho_p - \rho_f)g} \quad (44)$$

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Nesta seção são apresentados os resultados das simulações de um leito fluidizado, cujas dimensões e parâmetros das fases fluidas e sólidas são apresentados na seção 4.1. Para cada velocidade de fluido (35 L/min, 55 L/min, 75 L/min), testou-se seis malhas e três métodos de cálculo da variável porosidade local, totalizando dezoito simulações para cada velocidade. Visando buscar um tamanho ótimo de malha, bem como identificar o método do cálculo de porosidade local que gere resultados mais consistentes, avaliou-se a porosidade média do leito fluidizado, para ser comparado com o modelo empírico da Equação de Richardson-Zaki. Também se avaliou a flutuação dos sinais de pressão logo acima do distribuidor e a taxa de fluxo mássico normalizado. A Figura 10 mostra um instante da simulação pelo método Dividido, na malha 4-4-100, a título de ilustração.

Figura 10 – Captura de tela de simulação: (a) Com a malha; (b) Sem a malha.

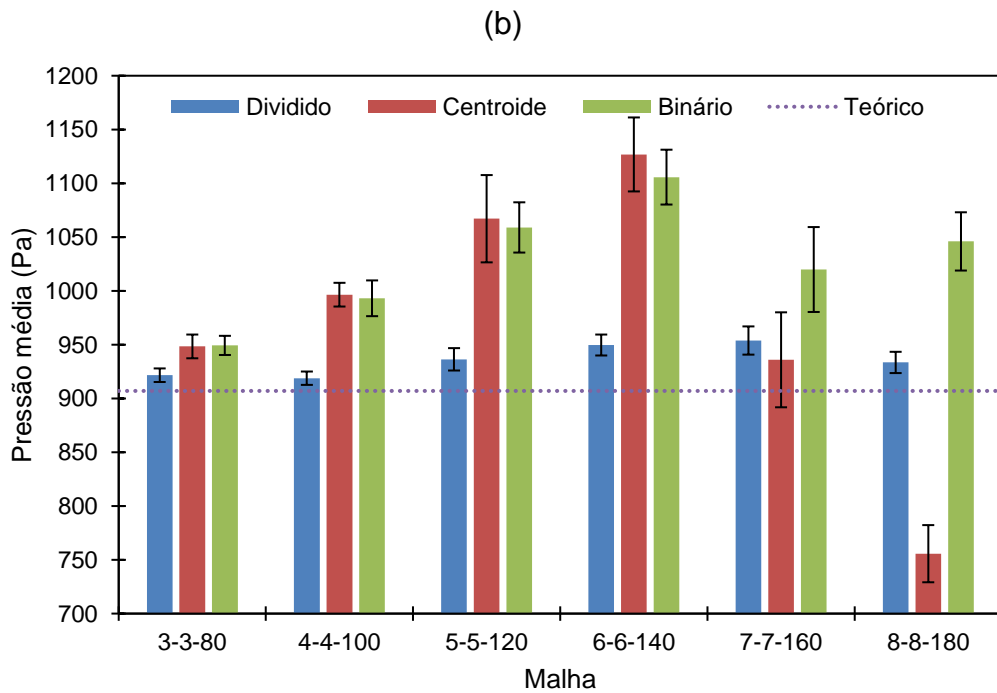
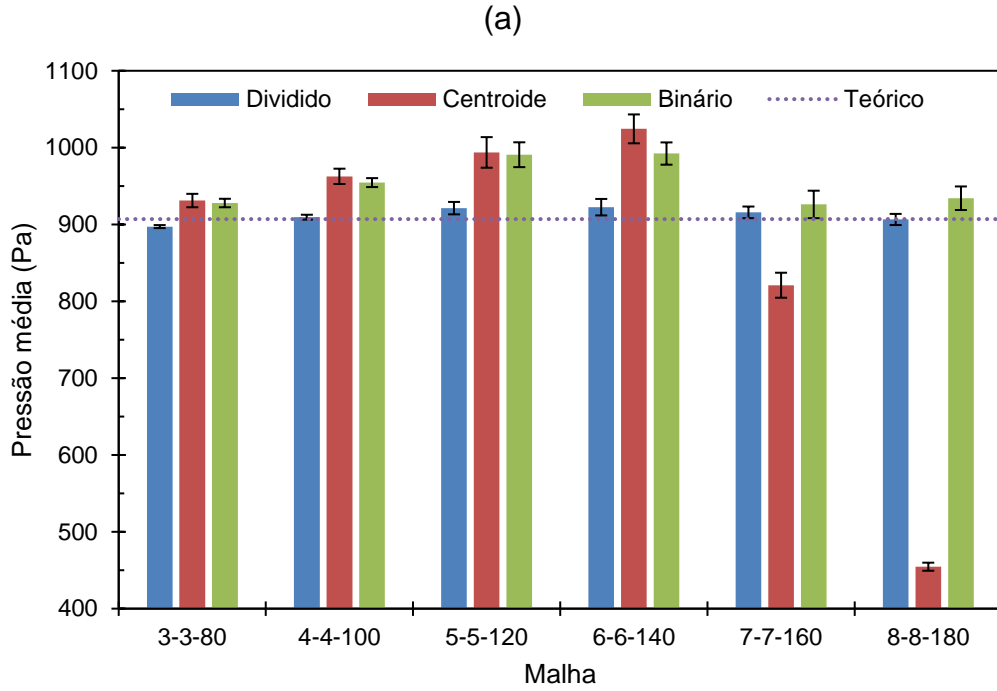


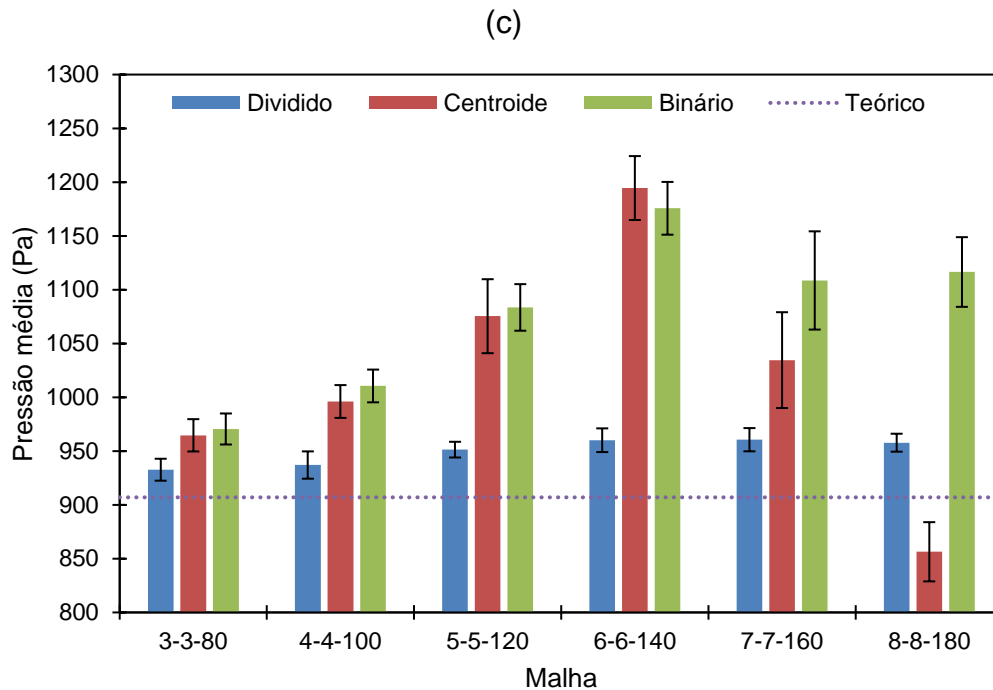
Fonte: Autor, 2021.

5.1 Flutuação dos sinais de pressão

Verificou-se a flutuação dos sinais de pressão para as simulações a partir do tempo de 10s até o final da simulação (30s). Os valores médios de pressão, bem como os desvios padrões, são representados graficamente na Figura 7.

Figura 11 – Pressão média nas simulações: (a) 35 L/min; (b) 55 L/min; (c) 75 L/min.





Fonte: Autor, 2021.

Com relação à velocidade de 35 L/min (Figura 11(a)), observa-se maior estabilidade do método Dividido com relação aos métodos Centroide e Binário, apresentando valores médios menos variantes com o refinamento de malha, como também menores desvios padrões em relação aos outros métodos. Nota-se também um resultado inconsistente para o método Centroide com a malha mais fina 8-8-180, com valor médio de pressão em 454,57 Pa. O mesmo padrão é observado para as velocidades de 55 L/min e 75 L/min (Figura 11(b) e 7(c)), de forma mais evidente. A maior estabilidade do método Dividido é evidenciada com relação aos outros não apenas na variação da pressão com o refinamento da malha, mas também observando os valores de desvio padrão.

De fato, segundo PENG *et al.* (2014), a aplicação do método Centroide em simulações do acoplamento não-resolvido, onde a razão S_c/d_p é menor que 3,82, as soluções apresentam instabilidade devido aos valores irrealistas de porosidade local, podendo ser tanto alto como baixos. Quando uma partícula se estende por mais de um elemento da malha, ainda assim o método Centroide atribuirá todo o volume desta partícula à célula em que se encontrar o seu centroide. Desta forma, numa situação onde o tamanho de célula é semelhante ou até menor que uma partícula, os valores de porosidade local calculados podem ser tanto superestimados como subestimados, podendo conduzir a valores de força de arraste não condizentes com a realidade, bem

como a altas variações de porosidade local em uma célula, deixando o processo de solução das Equações VANS instável (PENG *et al.*, 2014).

De forma análoga, Clarke *et al.* (2016), ao avaliar os campos de porosidade local na simulação de um leito fluidizado com $S_c/d_p = 1,6$, com o método Centroide, verificou que discrepância entra os resultados obtidos e os resultados experimentais, considerando o método impróprio para a utilização nestas condições de S_c/d_p .

Este erro, entretanto, passa a ser insignificante quando o tamanho de célula é maior comparado ao tamanho da partícula. Nessas circunstâncias, uma partícula cruzar fronteiras de células não produz grande variação nos valores de porosidade local, dado o maior tamanho do elemento de malha (PENG *et al.*, 2014), a variável porosidade local, neste caso, é calculada com maior precisão, aspecto importante para o acoplamento CFD-DEM.

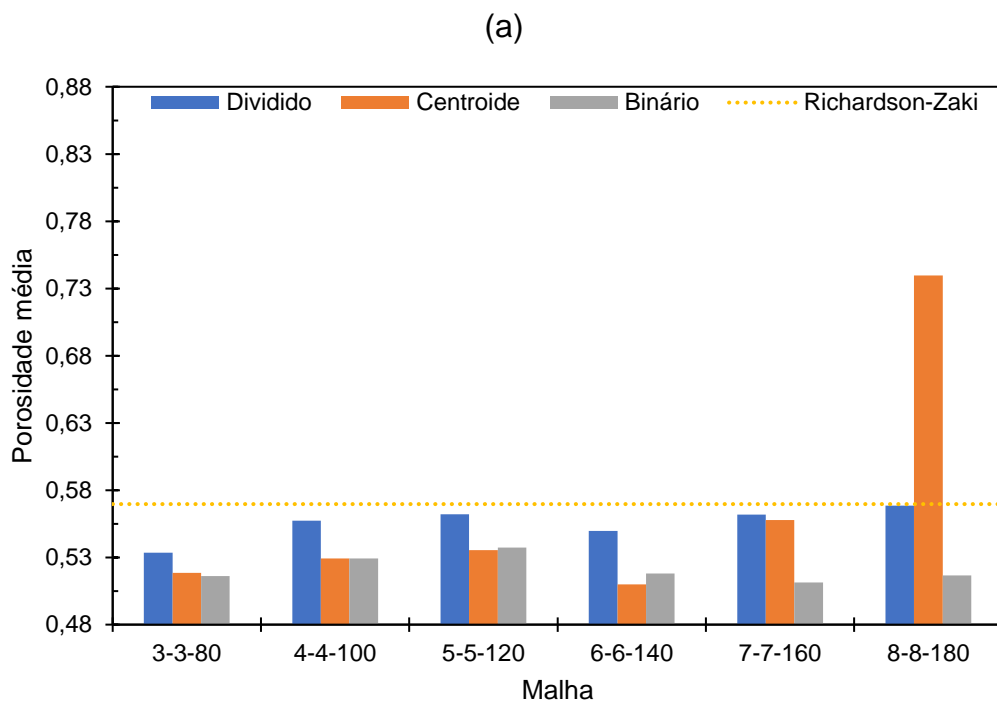
De forma semelhante, a instabilidade para método Binário também pode ser atribuída aos valores irrealis de porosidade local calculados. Segundo informações dos desenvolvedores do CFDEM®COUPLING, recomenda-se que a razão S_c/d_p seja menor que 0,125 para simulações com este método (CFDEM®COUPLING, [s.d.]). Para o caso das simulações deste trabalho, S_c/d_p variou entre 0,646 e 1,628, o que provocou estimativas irrealis de porosidade local, prejudicando o cálculo de interações sólido-fluido. Além disso, algo que é altamente desejável para um método de cálculo de porosidade local é que este seja capaz de gerar campos suaves desta variável ao longo do domínio. Isto também não é observado no método Binário (uma vez que o valor atribuído é 0 ou 1), podendo causar instabilidades nas simulações e gerar resultados físicos inconsistentes.

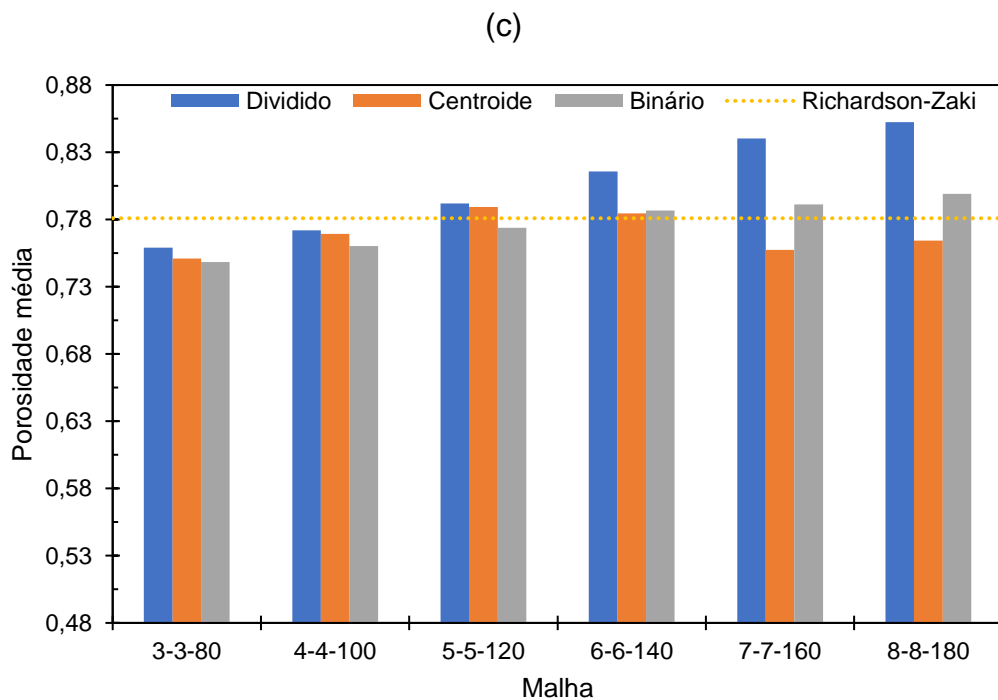
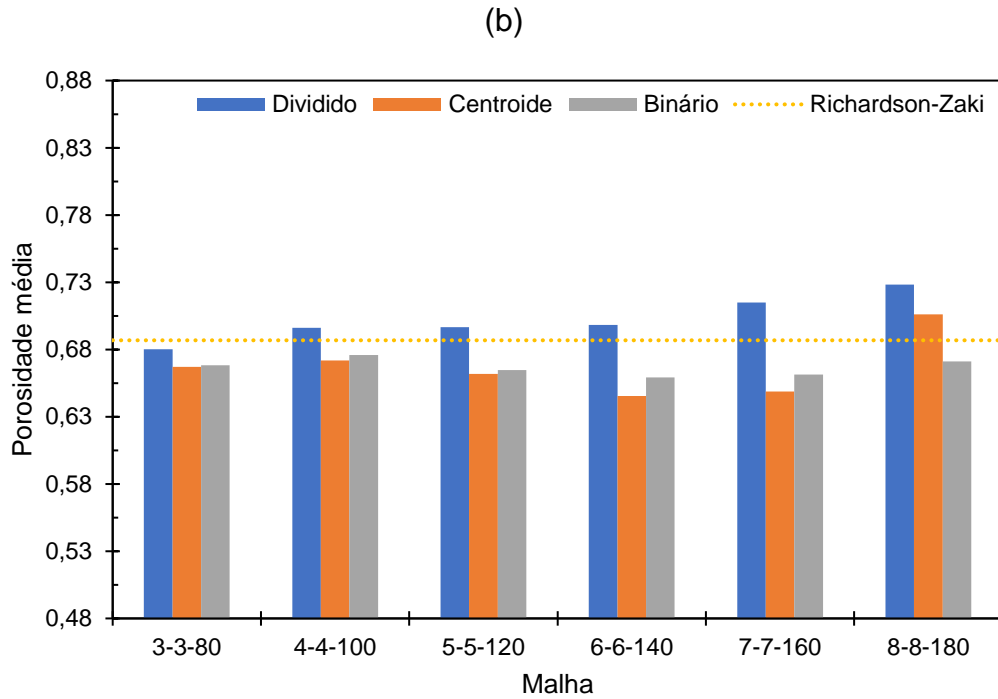
Observou-se menor variação de pressão média com o refino da malha a partir do método Dividido, podendo ser explicado duas razões. A primeira é que o intervalo de valores da razão S_c/d_p aplicados nas simulações aproximam-se mais da condição ideal para o método, isto é, $S_c/d_p \approx 1$ (CFDEM®COUPLING, [s.d.]). A segunda é que, distintamente dos métodos Centroide e Binário, o método Dividido gera campos de porosidade local mais suaves, especialmente para o intervalo de valores de S_c/d_p usados neste trabalho, conduzindo a simulações menos instáveis (KLOSS *et al.*, 2012; SUN; XIAO, 2015).

5.2 Porosidade média do leito

Um dos métodos mais usados para a predição da expansão do leito fluidizado líquido é a equação proposta por RICHARDSON e ZAKI (1954), que relaciona dados de velocidade do fluido a partir da porosidade do leito, ou vice-versa. Dessa forma, comparou-se os valores de porosidade média do leito obtidos pela simulação do acoplamento CFD-DEM com os valores preditos pela Equação de Richardson-Zaki para cada velocidade. Os resultados são apresentados na Figura 12.

Figura 12 – Predição da expansão do leito nas simulações: (a) 35 L/min; (b) 55 L/min; (c) 75 L/min.





Fonte: Autor, 2021.

A Figura 12(a) mostra, para a vazão de 35 L/min, um melhor resultado para o método Dividido, apresentando menores desvios para todas as malhas testadas, se comparado aos métodos Centroide e Binário nesta velocidade (o maior desvio foi de 6,36%, para malha 3-3-80). Entretanto, com a vazão em 55 L/min (Figura 12(b)), o método Dividido apresentou menores desvios para as malhas 3-3-80 a 6-6-140,

apresentando já desvios maiores para as malhas 7-7-160 e 8-8-180 (-4,07% e -6,02%), onde o método Binário apresentou valores mais próximos do que era esperado (3,72% e 2,28%).

Com a vazão de 75 L/min (Figura 12(c)), também se observou boa concordância do método Dividido e Centroide com a Equação de Richardson-Zaki para as malhas mais grosseiras (3-3-80 a 5-5-120) e boa concordância do método Binário para as malhas 5-5-120 a 8-8-180.

É possível notar uma tendência indefinida nos valores obtidos pelos métodos Centroide e Binário, sem um crescimento ou diminuição de porosidade média conforme o refinamento da malha. De forma análoga à flutuação dos sinais de pressão, essa instabilidade pode ser atribuída aos valores superestimados ou subestimados de porosidade local, que afetam o cálculo da força de arraste, gerando valores inconsistentes (PENG *et al.*, 2014).

Entretanto, com relação ao método Dividido, observa-se um padrão crescente nos valores de porosidade com o refinamento, especialmente com as vazões de 55 L/min e 75 L/min. Isso pode ser explicado pelos maiores valores de força de arraste, devido ao menor volume médio dos elementos da malha. Pelo modelo empírico desenvolvido por GIDASPOW (1994) (Equações (25), (26) e (27)), vê-se que o coeficiente de troca de momento β_{pf} é inversamente proporcional à porosidade local ε_c se $\varepsilon_c \leq 0,8$. Dessa forma, dado que o processo de refinamento da malha diminui o volume médio das células, os valores calculados de ε_c aproximam-se mais de zero, uma vez que células e partículas estão em escalas similares, resultando numa força de arraste superestimada em determinadas situações, bem como em maior expansão do leito fluidizado.

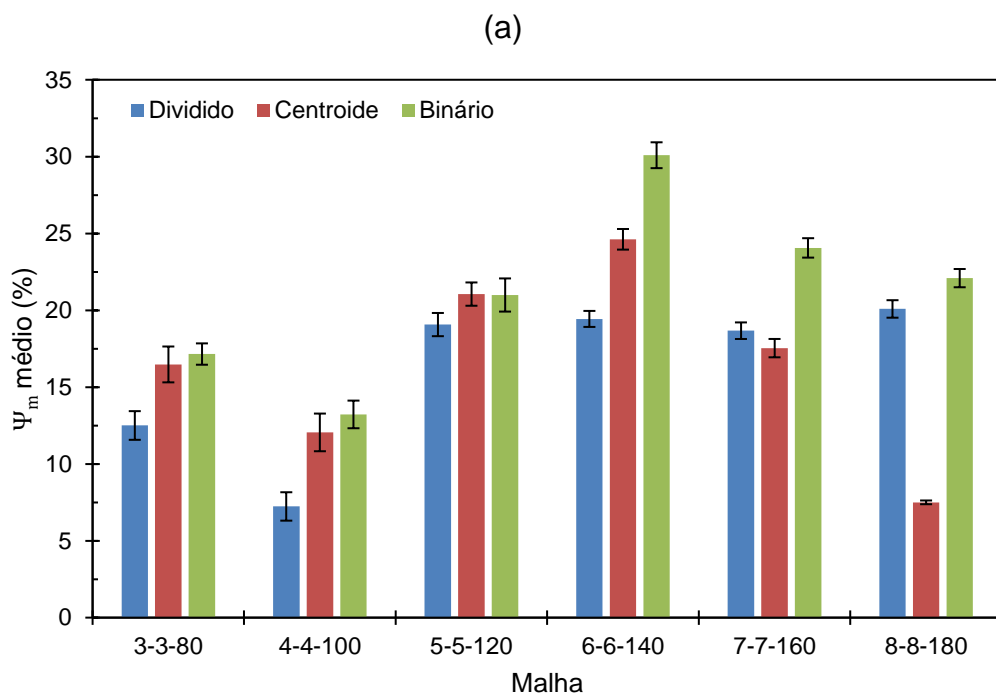
Além disso, ao considerar que o processo de refinamento pode gerar valores menores de porosidade local, observa-se que a Equação de WEN e YU acaba por ser subutilizada, uma vez que é aplicada pelo modelo de GIDASPOW em $\varepsilon_c > 0,8$, deixando de ser aplicada por vezes em situações necessárias. Considerando também que a porosidade média de máximo empacotamento aproxima-se de 0,395 (YANG, 2003), o uso da Equação de ERGUN para valores de porosidade menores que este resulta no cálculo de valores irrealistas para a força de arraste. De fato, para as malhas 6-6-140 a 8-8-180, ao considerar o volume médio dos elementos de malha, células que comportem uma só partícula já apresentam porosidades menores que 0,395,

valores não coerentes de porosidade local.

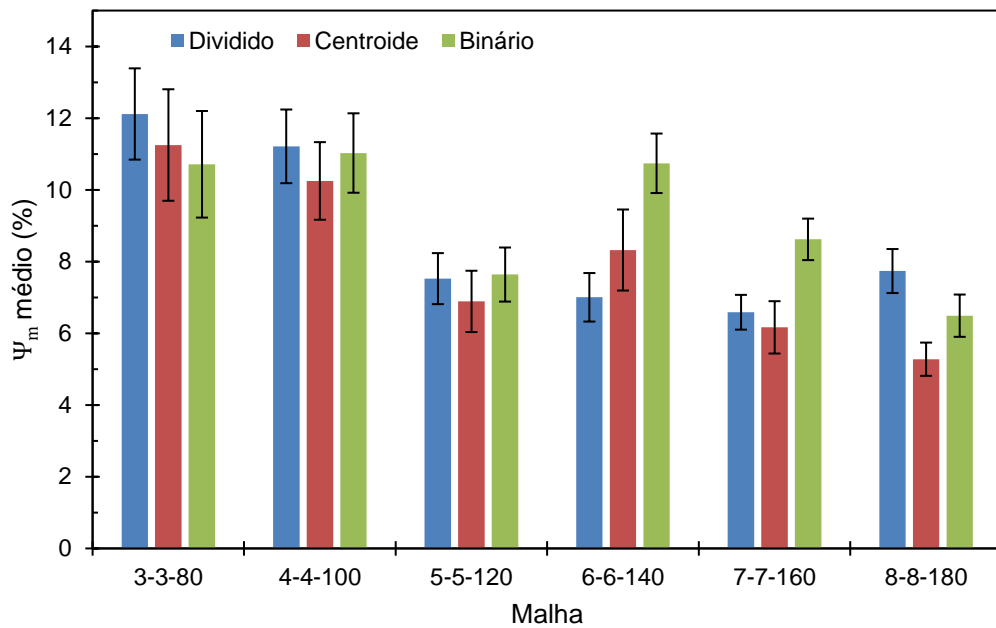
5.3 Taxa de fluxo mássico normalizado

Nesta seção, apresenta-se os gráficos de monitoramento da taxa de fluxo mássico normalizado como verificação da obediência da simulação à lei de conservação de massa, bem como da estabilidade numérica da solução (PENG *et al.*, 2014). Os resultados são apresentados graficamente na Figura 13.

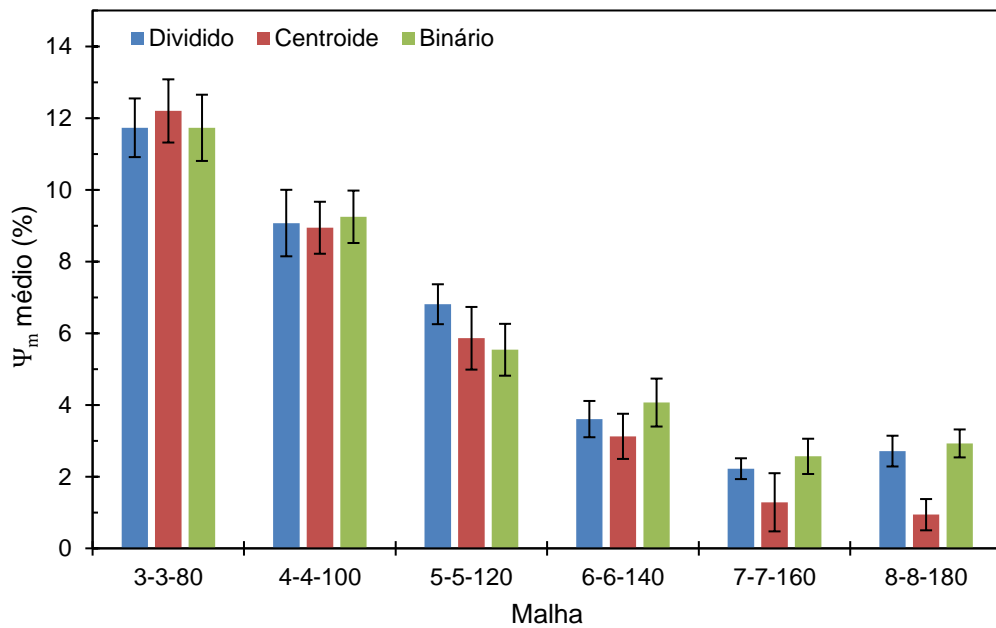
Figura 13 – Taxa de fluxo mássico normalizado: (a) 35 L/min; (b) 55 L/min; (c) 75 L/min.



(b)



(c)



Fonte: Autor, 2021.

Para a velocidade de 35 L/min (Figura 13(a)), nota-se que as malhas mais grosseiras (3-3-80 e 4-4-100) apresentaram melhores resultados, com destaque para o método Dividido, com NMFR de 7,23% para a malha 4-4-100. As malhas restantes apresentaram resultados mais distantes do esperado, com o método Binário chegando a uma média de 30,09% para a malha 6-6-140. É possível, porém, ver uma exceção pelo método Centroide para a malha 8-8-180 (7,50%). Entretanto,

considerando outras informações quanto à esta simulação (valor de pressão médio e porosidade média do leito), é mais provável que trate de um resultado fisicamente inconsistente.

Para a velocidade de 55 L/min (Figura 13(b)) melhores resultados foram obtidos entre as malhas 5-5-120 e 8-8-180. Com relação à velocidade de 75 L/min (Figura 13(c)), observa-se que a taxa tem tendência ao decréscimo conforme o refinamento da malha, desde a 3-3-80 até a 7-7-160, para todos os métodos.

Segundo Peng, Moghtaderi e Doroodchi (2016), mesmo um valor de 4% para a taxa de fluxo mássico normalizado já pode ser caracterizado como insatisfatório, tendo em vista a lei de conservação de massa a ser obedecida. Para os autores e Peng *et al.* (2014), as simulações que tiveram esta taxa considerada como satisfatória teve valores cuja porcentagem estava na ordem de 10^{-4} (0,0005%).

Tendo em vista que os valores obtidos para a taxa de fluxo mássico normalizado estão notavelmente fora do aceitável, ainda que no caso do método Dividido (cuja faixa de valores ideais de S_c/d_p foi observada), vê-se que os erros observados para NMFR precisam ainda ser melhor investigados quanto à sua origem.

6 CONCLUSÕES

No presente trabalho, investigou-se a aplicação de três métodos para o cálculo da porosidade local na simulação de um leito fluidizado líquido a partir do método de acoplamento CFD-DEM não-resolvido com a aplicação três velocidades. Observou-se também o efeito do refino de malha sobre os resultados. Com as informações obtidas, comparou-se os dados de porosidade média do leito com o valor previsto pela Equação de Richardson-Zaki, avaliando-se também a flutuação dos sinais de pressão e a taxa de fluxo mássico normalizado. Por fim, procurou-se identificar o método e a malha que trouxe resultados mais próximos do que se era esperado.

A partir da análise da flutuação dos sinais de pressão, observou-se instabilidade crescente para os métodos Centroide e Binário conforme maior refinamento da malha. Entretanto, neste quesito, o método Dividido mostrou-se mais estável em todas as malhas em comparação aos métodos anteriores. Na predição de porosidade média do leito, observou-se que os valores com maior desvio do previsto pela Equação de Richardson-Zaki foram obtidos na malha mais grosseira (3-3-80) e nas malhas mais finas (7-7-160 e 8-8-180), sugerindo que um tamanho ótimo de malha esteja fora deste conjunto. A partir da avaliação da taxa de fluxo mássico normalizado, observou-se uma queda na instabilidade conforme o refinamento da malha para os métodos Dividido e Centroide, especialmente a partir da malha 4-4-100. Dessa forma, a partir dos resultados das simulações, conclui-se que o método Dividido para a malha 5-5-120 apresentou resultados mais satisfatórios dentre os outros métodos e malhas testadas.

Para trabalhos futuros, sugere-se o teste de outros métodos de cálculo de porosidade local, especialmente na avaliação da taxa de fluxo mássico normalizado, que mede a obediência dos resultados à lei de conservação de massa. Sugere-se também que os testes realizados no presente trabalho sejam aplicados para escoamento sólido-gás, visando ampliar as possibilidades de uso das simulações abordadas. Além disso, a realização dos testes com partículas menores é aconselhada, tendo em vista que as razões S_c/d_p das malhas usadas trabalho tiveram parte na instabilidade observada para o método Centroide.

Por último, sugere-se também uma adaptação do modelo de força de arraste, tendo em vista os erros observados, de forma que seja calculada em uma malha separada, mais grosseira do que a utilizada nos cálculos do escoamento de fluido.

REFERÊNCIAS

AHRENS, J.; GEVECI, B.; LAW, C. ParaView : An End-User Tool for Large-Data Visualization. In: **The Visualization Handbook**. 1. ed. Burlington: Elsevier Inc., 2005. p. 717–731.

ANDERSON, T. B.; JACKSON, R. O. Y. A Fluid Mechanical Description of Fluidized Beds. **Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals**, v. 6, n. 4, p. 527–539, 1967.

ARGYROPOULOS, C. D.; MARKATOS, N. C. Recent advances on the numerical modelling of turbulent flows. **Applied Mathematical Modelling**, v. 39, n. 2, p. 693–732, 2015.

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**, v. 318, p. 201–221, 2016.

CFDEM@COUPLING. **voidfractionModel_GaussVoidFraction command**.

Disponível em:

<https://www.cfdem.com/media/CFDEM/docu/voidFractionModel_GaussVoidFraction.html>. Acesso em: 7 jul. 2021a.

CFDEM@COUPLING. **voidfractionModel_centreVoidFraction command**.

Disponível em:

<https://www.cfdem.com/media/CFDEM/docu/voidFractionModel_centreVoidFraction.html>. Acesso em: 5 maio. 2021b.

CFDEM@COUPLING. **voidfractionModel_dividedVoidFraction command**.

Disponível em:

<https://www.cfdem.com/media/CFDEM/docu/voidFractionModel_dividedVoidFraction.html>. Acesso em: 5 maio. 2021c.

CFDEM@COUPLING. **voidfractionModel_bigParticleVoidFraction command**.

Disponível em:

<https://www.cfdem.com/media/CFDEM/docu/voidFractionModel_bigParticleVoidFraction.html>. Acesso em: 5 maio. 2021d.

CLARKE, D. A. et al. Investigation of Void Fraction Schemes for Use with CFD-DEM Simulations of Fluidized Beds. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 57, n. 8, p. 3002–3013, 2018.

CROWE, C. T. et al. **Multiphase Flows with Droplets and Particles**. 2. ed. Boca Raton: Taylor & Francis Group, 2012.

EPSTEIN, N. Liquid-Solids Fluidization. In: **Handbook of Fluidization and Fluid-**

- Particle Systems**. 1. ed. New York: Marcel Dekker, Inc., 2003. p. 707–766.
- ERGUN, S. Fluid flow through packed columns. **Chemical Engineering Progress**, v. 48, p. 89–94, 1952.
- FORTUNA, A. DE O. **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos**. 1. ed. São Paulo: Edusp, 2000.
- GIDASPOW, D. **Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions**. 1. ed. London: Academic Press Limited, 1994.
- GONIVA, C. et al. An Open Source CFD-DEM Perspective. 2010.
- HAGER, A. et al. Parallel Open Source CFD-DEM for Resolved Particle-Fluid Interaction. **Proc. 9th International Conference on Computational Fluid Dynamics in Minerals and Process Industries**, v. 7, n. December, p. 1–6, 2012.
- KHAN, A. R.; RICHARDSON, J. F. Fluid-particle interactions and flow characteristics of fluidized beds and settling suspensions of spherical particles. **Chemical Engineering Communications**, v. 78, n. 1, p. 111–130, 1989.
- KLOSS, C. et al. Models, algorithms and validation for opensource DEM and CFD-DEM. **Progress in Computational Fluid Dynamics**, v. 12, n. 2–3, p. 140–152, 2012.
- PENG, Z. et al. Influence of Void Fraction Calculation on Fidelity of CFD-DEM Simulation of Gas-Solid Bubbling Fluidized Beds. **AIChE Journal**, v. 60, n. 6, p. 2000–2018, 2014.
- PENG, Z.; MOGHADDERI, B.; DOROODCHI, E. A modified direct method for void fraction calculation in CFD-DEM simulations. **Advanced Powder Technology**, v. 27, n. 1, p. 19–32, 2016.
- RAPAGNÀ, S. et al. Steady-state expansion characteristics of monosize spheres fluidised by liquids. **Chemical Engineering Communications**, v. 79, n. 1, p. 131–140, 1989.
- RICHARDSON, J. F.; ZAKI, W. N. Sedimentation and Fluidisation : Part I. **Transactions of the Institution of Chemical Engineers**, v. 32, p. 35–53, 1954.
- ROWE, N. P. Drag Forces in a Hydraulic Model of a Fluidised Bed-Part II. **Trans. Instn. Chem. Engrs.**, v. 39, p. 175–180, 1961.
- SUN, R.; XIAO, H. Diffusion-based coarse graining in hybrid continuum-discrete solvers: Theoretical formulation and a priori tests. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 77, p. 142–157, 2015.

THE OPENFOAM FOUNDATION. **OpenFOAM**. Disponível em: <openfoam.org>. Acesso em: 2 jul. 2021.

TURTON, R.; CLARK, N. N. An explicit relationship to predict spherical particle terminal velocity. **Powder Technology**, v. 53, n. 2, p. 127–129, 1987.

WEN, C. H.; YU, Y. H. Mechanics of fluidization. **Chemical Engineering Progress Symposium Series**, v. 62, p. 100–111, 1966.

XU, B. H.; YU, A. B. Numerical simulation of the gas-solid flow in a fluidized bed by combining discrete particle method with computational fluid dynamics. **Chemical Engineering Science**, v. 52, n. 16, p. 2785–2809, 1997.

YANG, W.-C. Flow Through Fixed Beds. In: **Handbook of Fluidization and Fluid-Particle Systems**. 1. ed. New York: Marcel Dekker, Inc., 2003. p. 40–63.

ZHOU, Z. Y. et al. Discrete particle simulation of particle-fluid flow: Model formulations and their applicability. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 661, n. October, p. 482–510, 2010.

ZHU, H. P. et al. Discrete particle simulation of particulate systems: Theoretical developments. **Chemical Engineering Science**, v. 62, n. 13, p. 3378–3396, 2007.

APÊNDICE A – TABELAS COMPLEMENTARES

Tabela 6 – Valores pressão média para 35 L/min

Malha	Pressão média (Pa)		
	Dividido	Centroide	Binário
3-3-80	897,23	931,11	927,89
4-4-100	909,45	962,62	954,48
5-5-120	921,24	993,74	990,76
6-6-140	922,48	922,48	992,29
7-7-160	915,74	820,92	926,06
8-8-180	906,49	454,57	934,13

Tabela 7 – Valores pressão média para 55 L/min

Malha	Pressão média (Pa)		
	Dividido	Centroide	Binário
3-3-80	921,58	948,36	949,29
4-4-100	918,80	996,45	993,09
5-5-120	936,36	1067,07	1058,96
6-6-140	949,66	1126,82	1105,72
7-7-160	953,83	935,91	1019,83
8-8-180	933,46	755,68	1045,96

Tabela 8 – Valores pressão média para 75 L/min

Malha	Pressão média (Pa)		
	Dividido	Centroide	Binário
3-3-80	932,66	964,64	970,54
4-4-100	937,02	996,08	1010,54
5-5-120	951,33	1075,38	1083,52
6-6-140	960,08	1194,51	1175,68
7-7-160	960,57	1034,54	1108,60
8-8-180	957,78	856,39	1116,46

Tabela 9 – Desvio do valor estimado por Richardson-Zaki para 35 L/min

Malha	Porosidade (Richardson-Zaki)	Desvio do método (%)		
		Dividido	Centroide	Binário
3-3-80	0,570	6,36	8,99	9,38
4-4-100		2,17	7,09	7,11
5-5-120		1,35	6,02	5,67
6-6-140		3,48	3,48	9,07
7-7-160		1,35	2,09	10,23
8-8-180		0,20	-29,87	9,33

Tabela 10 – Desvio do valor estimado por Richardson-Zaki para 55 L/min

Malha	Porosidade (Richardson-Zaki)	Desvio do método (%)		
		Dividido	Centroide	Binário
3-3-80	0,687	0,95	2,89	2,70
4-4-100		-1,34	2,19	1,59
5-5-120		-1,42	3,65	3,21
6-6-140		-1,67	6,05	4,03
7-7-160		-4,07	5,54	3,72
8-8-180		-6,02	-2,81	2,28

Tabela 11 – Desvio do valor estimado por Richardson-Zaki para 75 L/min

Malha	Porosidade (Richardson-Zaki)	Desvio do método (%)		
		Dividido	Centroide	Binário
3-3-80	0,781	2,79	3,84	4,18
4-4-100		1,15	1,48	2,65
5-5-120		-1,39	-1,07	0,90
6-6-140		-4,45	-0,47	-0,73
7-7-160		-7,61	3,01	-1,30
8-8-180		-9,14	2,13	-2,32

Tabela 12 – Valores da taxa de fluxo mássico normalizado médio para 35 L/min

Malha	Ψ_m médio (%)		
	Dividido	Centroide	Binário
3-3-80	12,50	16,48	17,15
4-4-100	7,23	12,05	13,22
5-5-120	19,07	21,05	20,99
6-6-140	19,44	19,44	30,09
7-7-160	18,67	17,54	24,06
8-8-180	20,08	7,50	22,09

Tabela 13 – Valores da taxa de fluxo mássico normalizado médio para 55 L/min

Malha	Ψ_m médio (%)		
	Dividido	Centroide	Binário
3-3-80	12,12	11,25	10,71
4-4-100	11,21	10,25	11,03
5-5-120	7,52	6,89	7,64
6-6-140	7,00	8,32	10,74
7-7-160	6,59	6,17	8,62
8-8-180	7,74	5,28	6,49

Tabela 14 – Valores da taxa de fluxo mássico normalizado médio para 75 L/min

Malha	Ψ_m médio (%)		
	Dividido	Centroide	Binário
3-3-80	11,73	12,20	11,73
4-4-100	9,07	8,94	9,25
5-5-120	6,81	5,86	5,54
6-6-140	3,60	3,12	4,07
7-7-160	2,22	1,28	2,57
8-8-180	2,71	0,94	2,93