

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

JOÃO PEDRO FERREIRA DE CAMPOS

DESENVOLVIMENTO E ESTUDO DA INFLUÊNCIA DE
UM MODELO DE FORÇA DE LUBRIFICAÇÃO EM UM
LEITO FLUIDIZADO LÍQUIDO UTILIZANDO CFD-DEM
NÃO-RESOLVIDO



SÃO CARLOS -SP
2023

JOÃO PEDRO FERREIRA DE CAMPOS

DESENVOLVIMENTO E ESTUDO DA INFLUÊNCIA DE UM MODELO DE FORÇA DE LUBRIFICAÇÃO EM UM LEITO FLUIDIZADO LÍQUIDO UTILIZANDO CFD-DEM NÃO RESOLVIDO

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos, para obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientadora: Profa. Dra. Gabriela Cantarelli Lopes.



São Carlos-SP
2023



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

Folha de Aprovação

Defesa de Dissertação de Mestrado do candidato João Pedro Ferreira de Campos, realizada em 28/02/2023.

Comissão Julgadora:

Profa. Dra. Gabriela Cantarelli Lopes (UFSCar)

Prof. Dr. Dyrney Araújo dos Santos (UFG)

Profa. Dra. Líliliana de Luca Xavier Augusto (UTFPR)

AGRADECIMENTOS

Agradeço à meus pais pelo apoio durante todos os anos de estudo, da graduação ao mestrado. À Professora Gabriela pelos anos de orientação, e aos amigos de laboratório pelo companheirismo e risadas. À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES), Código de Financiamento 001; à Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis – ANP – e à Financiadora de Estudos e Projetos – FINEP – por meio do Programa de Formação de Recursos Humanos da ANP para o Setor de Petróleo, Gás e Biocombustíveis – PRH-ANP/MCTI, e em particular ao PRH 39 do Departamento de Engenharia Química da UFSCar.

RESUMO

Escoamentos multifásicos do tipo sólido-fluido são recorrentes em aplicações de engenharia química. Devido à escala e dinamicidade dos fenômenos inerentes a esse tipo de sistema, efeitos microscópicos envolvendo partículas individuais são difíceis de serem estudados experimentalmente. Nesse sentido, ferramentas numéricas que usam a abordagem CFD-DEM (do inglês Fluidodinâmica Computacional – Método dos Elementos Discretos) têm se mostrado promissoras na compreensão dessas interações, já que simulam a fase sólida em uma microescala. No entanto, a grande maioria dos trabalhos nessa área utilizam fluidos de baixa viscosidade, como gases, devido à complexidade da modelagem de interações sólido-fluido em meios mais viscosos. Pouco se sabe sobre a influência da força de lubrificação, um efeito dissipativo que atua na colisão entre partículas na dinâmica de escoamentos concentrados. Dessa forma, o presente trabalho buscou desenvolver, implementar e validar um modelo de força de lubrificação não-resolvido em CFD-DEM, além de verificar sua validade para a simulação de escoamentos sólido-líquido em sistemas caóticos como um leito fluidizado. Inicialmente, um modelo da força de lubrificação foi implementado e testado. A partir dos resultados obtidos, uma modificação foi proposta e validada com sucesso a partir de dados experimentais da literatura, reproduzindo o comportamento de restituição após colisões observadas experimentalmente. Foram coletados dados experimentais da fluidização de partículas de alumina de 1 mm de diâmetro em água, em um leito fluidizado de 5 cm de diâmetro e 30 cm de altura. O equipamento experimental foi então simulado utilizando um programa CFD-DEM de código aberto, inicialmente sem a força de lubrificação, produzindo resultados de queda de pressão e porosidade próximos dos dados experimentais e previstos pela literatura. Em seguida, as simulações foram repetidas com a inclusão da lubrificação, porém para a fluidização em água não foram observadas mudanças significativas. As simulações foram então extrapoladas para condições além das experimentais utilizando uma solução de glicerol como fluido. Nesse caso, o aumento a viscosidade fez com que a inclusão da força de lubrificação reduzisse a expansão do leito, produzindo resultados mais próximos dos previstos por correlações empíricas. Os resultados obtidos demonstraram que a modelagem CFD-DEM é uma ferramenta que pode auxiliar no projeto e estudo de escoamentos sólido-líquidos complexos, como um leito fluidizado, prevendo suas características fundamentais com boa exatidão.

Palavras-chave: CFD-DEM; fluidização sólido-líquido; força de lubrificação.

ABSTRACT

Solid-fluid multiphase flows are common occurrences in chemical engineering applications. Due to the scale and unpredictability of the fundamental phenomena in these systems, microscopic interactions between individual particles and the surrounding fluid are not easy to study empirically. In this context, computational engineering tools like CFD-DEM (Computational Fluid Dynamics and Discrete Element Modelling) can offer a better understanding of such interactions due to its microscale approach. Most studies that employ CFD-DEM however focus on low viscosity fluids, such as gases, due to the increase in complexity that arises from interphase viscous forces with fluids like liquids. Because of this, little is known in terms of the influence of the lubrication force on the dynamics of concentrated solid-liquid flows, a dissipative force that increases the energy lost on particle-particle collisions. The present work aimed to develop, implement and validate an unresolved lubrication force model in CFD-DEM simulations, while also verifying its influence on chaotic solid-liquid flows such as a fluidized bed. Initially, a lubrication force model was implemented following an approach commonly found in literature and compared to experimental data from other authors. The model was then modified based on the results and validated successfully. Experimental fluidization data was collected for 1 mm alumina particles in water, in a fluidized bed with dimensions of 5 cm in diameter and 30 cm in length. The experimental setup was then simulated using an open-source unresolved CFD-DEM framework without the lubrication force. Once the simulation was successfully validated, they were repeated with the inclusion of the lubrication force model and results were compared between both sets of simulations but no significant change was observed. Fluidization conditions were then extrapolated by using a glycerin solution instead of water, thus increasing the fluid's viscosity. In this case, the lubrication force caused a reduction in bed expansion and porosity, and results were closer to those predicted by empirical correlations than those produced by simulations without the lubrication force model. Overall, the results show that unresolved CFD-DEM is capable of correctly predicting the behavior of complex concentrated flows, and can be used to aid in designing liquid-solid fluidized beds.

Keywords: CFD-DEM; liquid-solid fluidization; lubrication force.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Trabalhos publicados que usaram CFD-DEM na simulação de leitos fluidizados nos últimos 10 anos segundo o <i>Web of Science</i> .	2
Figura 2 - Esquema simplificado de um leito fluidizado.	5
Figura 3 - Comparativo entre os esquemas não resolvido (esquerda) e resolvido (direita).	14
Figura 4 - Esquema da força de lubrificação (f_{lub}) agindo sobre duas partículas.	17
Figura 5 - Esquema de uma colisão entre partículas.	18
Figura 6 - Aparato experimental de fluidização.	21
Figura 7 – Vista inferior da malha numérica do leito fluidizado, colorida por L/d_p .	28
Figura 8 – Porosidade em função da velocidade adimensional.	32
Figura 9 - Coeficiente de restituição simulado em função do número de Stokes de impacto para diferentes valores de α .	33
Figura 10 - Gráfico de α em função do número de Stokes.	35
Figura 11 - Coeficiente de restituição simulado em função do número de Stokes de impacto.	36
Figura 12 - Queda de pressão simulada sem (a) e com (b) a força de lubrificação, juntamente com o valor teórico obtido pela Equação 49.	37
Figura 13 - Perfil de pressão simulado ao longo da direção axial do leito para uma vazão de 4,27 L/min.	38
Figura 14 - Porosidade simulada para cada velocidade do fluido, para os casos com e sem a força de lubrificação.	39

- Figura 15** - Histograma comparativo normalizado da porosidade média das células para a vazão de 4,27 L/min, para os casos com e sem a força de lubrificação. 40
- Figura 16** - Histograma comparativo normalizado da porosidade média das células para a vazão de 4,27 L/min, sem a força de lubrificação. 41
- Figura 17** - Histograma comparativo normalizado da porosidade média das células para a vazão de 7,92 L/min, para os casos com e sem a força de lubrificação. 42
- Figura 18** - Histograma comparativo normalizado da porosidade média das células para a vazão de 7,92 L/min, sem a força de lubrificação. 42
- Figura 19** - Força de arraste total ao longo do tempo para as simulações com e sem a força de lubrificação. 44
- Figura 20** - Desvio da porosidade simulada em relação as medidas experimentais para os casos com e sem a força de lubrificação. 45
- Figura 21** - Visualização instantânea das velocidades do fluido e das partículas, bem como da porosidade das células da malha para uma vazão de 7,92 L/min. 46
- Figura 22** - Porosidade simulada para fluidização em uma solução de glicerol 50%. 47
- Figura 23** - Velocidade média do fluido no leito de partículas para os últimos 5 segundos simulados, com a solução de glicerol 50%. 49

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Propriedades físicas da fase sólida.	24
Tabela 2 – Propriedades físicas do fluido.	25
Tabela 3 - Valores de α e de altura inicial de queda usados nas simulações.	26
Tabela 4 - Discretização da malha e contagem de células.	28
Tabela 5 - Condições iniciais e de contorno do fluido.	29
Tabela 6 - Propriedades físicas e de interação da fase sólida.	30
Tabela 7 – Funções de e por St ajustadas.	34
Tabela 8 - Resultados do teste t .	43
Tabela 9 - Resultados do teste t para fluidização com solução de glicerol 50%.	48
Tabela 10 - Tabela 10: Comparativo entre as porosidades simuladas e a porosidade prevista pela Equação 4, para a fluidização com solução de glicerol 50%.	50

LISTA DE SÍMBOLOS

ρ_b – Densidade combinada do leito (kg/m³)

ρ_p – Densidade das partículas (kg/m³)

ε – Porosidade

ρ_f – Densidade do fluido (kg/m³)

$-\Delta p_f$ – Queda de pressão (Pa)

L – Altura do leito (m)

g – Aceleração gravitacional (m/s²)

U_f – Velocidade do fluido (m/s)

U_{p0} – Velocidade terminal da partícula (m/s)

n_p – Número de partículas

r_p – Raio da partícula (m)

R – Raio do leito (m)

F_d – Força de arraste (N)

F_{f-p} – Termo de troca de momento entre fases (N/m²)

μ – Viscosidade (Pa.s)

C_d – Coeficiente de arraste

m_i – Massa da partícula i (kg)

I_i – Momento de inércia da partícula i (kg.m²)

ω_i – Velocidade angular da partícula i (rad/s)

V_{pi} – Volume da partícula i (m³)

ΔV – Volume da célula numérica (m³)

e – Coeficiente de restituição

St – Número de Stokes

α – Parâmetro de distância mínima (m)

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1: INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 2: FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	4
2.1 FLUIDIZAÇÃO SÓLIDO-LÍQUIDO	4
2.2 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL E MODELAGEM DE ELEMENTOS DISCRETOS (CFD-DEM)	8
2.3 FORÇA DE LUBRIFICAÇÃO	15
CAPÍTULO 3: METODOLOGIA	21
3.1 PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL	21
3.2 PROCEDIMENTO NUMÉRICO	23
3.2.1 Força de Lubrificação	23
3.2.2 Leito Fluidizado	27
CAPÍTULO 4: RESULTADOS E DISCUSSÕES	32
4.1 RESULTADOS EXPERIMENTAIS DE POROSIDADE NO LEITO FLUIDIZADO	32
4.2 VALIDAÇÃO DO MODELO DE FORÇA DE LUBRIFICAÇÃO A PARTIR DA COLISÃO DE PARTÍCULAS	33
4.3 APLICAÇÃO DO MODELO DE FORÇA DE LUBRIFICAÇÃO NA SIMULAÇÃO DE UM LEITO FLUIDIZADO	36
CAPÍTULO 5: CONCLUSÕES	51
REFERÊNCIAS	53

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

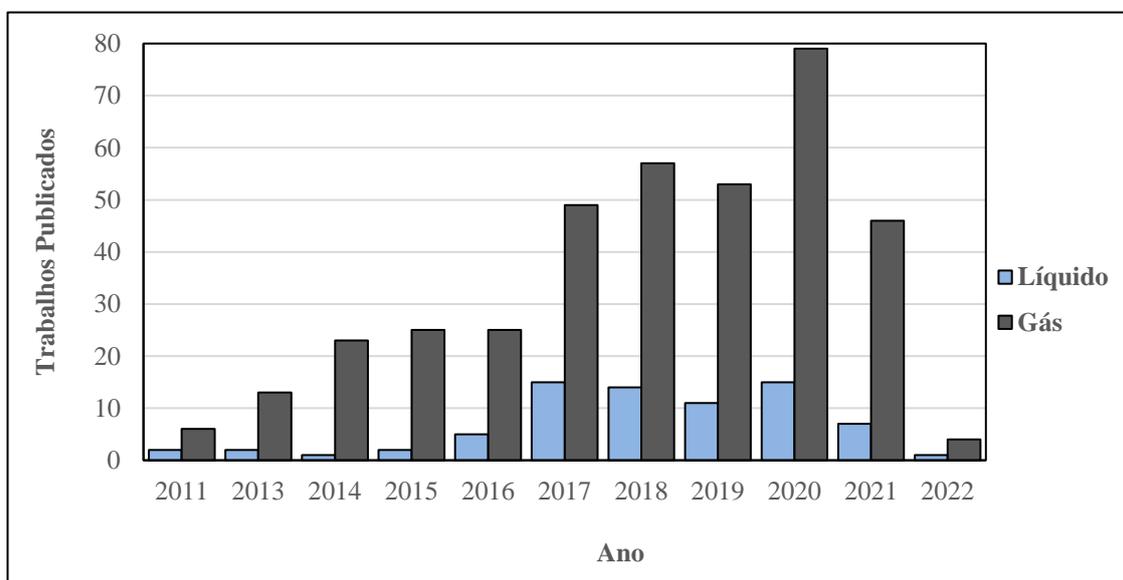
Escoamentos sólido-fluido estão presentes em uma grande variedade de aplicações na indústria química. Um exemplo de aplicação é o leito fluidizado, que, por sua versatilidade e boa eficiência em processos de transferência de calor e massa, tem sido utilizado no desenvolvimento e produção de biocombustíveis como etanol (GABARDO *et al.*, 2012), hidrogênio em foto biorreatores (REN *et al.*, 2013) ou ainda na produção de bioenergia a partir de vinhaça (AKRAM *et al.*, 2015) e glicerol (GIBSON *et al.*, 2019). Seu comportamento macroscópico é amplamente investigado na literatura através do desenvolvimento de correlações empíricas e modelos fenomenológicos para predição da expansão, porosidade e queda de pressão na dinâmica do leito (EPSTEIN, 2003). Por outro lado, fenômenos em pequena escala como colisões partícula-partícula e interações entre o fluido e partículas individuais e sua influência no comportamento do leito são difíceis de serem estudados experimentalmente.

É nesse contexto que ferramentas numéricas de engenharia podem auxiliar na compreensão e no projeto desse tipo de equipamento. Em especial, a modelagem CFD-DEM, que consiste no acoplamento entre os modelos de Fluidodinâmica Computacional (CFD) e de Elementos Discretos (DEM), se destaca em situações em que interações de pequena escala como colisões ou a força de arraste sobre partículas individuais predominam na dinâmica do sistema (Ostermeier *et al.*, 2019; Chen e Wang, 2014), e é usado na literatura para simular aplicações que vão desde sedimentação (SUN e XIAO, 2016) até a gaseificação de biomassa (CHEN *et al.*, 2020).

O leito fluidizado é um caso clássico de aplicação e validação de modelos CFD-DEM na literatura (ZHOU *et al.*, 2010). A grande maioria desses trabalhos trata de escoamentos sólido-gás, que possuem modelagem mais simples, já que as interações predominantes se reduzem à força de arraste e à força devido ao gradiente de pressão (KU *et al.*, 2015; WANG *et al.*, 2021; ZHOU *et al.*, 2020). Um obstáculo que costuma ser destacado em trabalhos que usam CFD-DEM para escoamentos com fluidos líquidos mais viscosos é a falta de modelos confiáveis para interações complexas como a sustentação e a massa virtual (ZBIB *et al.*, 2018). A Figura 1 ilustra a disparidade entre a quantidade de trabalhos publicados da aplicação de

CFD-DEM na simulação de leitos fluidizados líquidos e gasosos nos últimos 10 anos.

Figura 1 – Trabalhos publicados que usaram CFD-DEM na simulação de leitos fluidizados nos últimos 10 anos segundo o *Web of Science*.



Fonte: Elaborado pelo autor

Devido à sua complexidade, uma força de interação multifásica pouco estudada é a chamada força de lubrificação. Trata-se de uma força dissipativa causada pelo escoamento do fluido intersticial que preenche o espaço entre duas partículas, atuando na direção contrária de seu movimento relativo e que está diretamente relacionada à viscosidade do fluido.

Estudos experimentais demonstram que essa força é responsável por uma perda considerável de energia em colisões entre partículas (JOSEPH, 2003; RUIZ-ÂNGULO e HUNT, 2010; SUN e XIAO, 2016; ZHANG *et al.*, 2005), que pode ser quantificada pelo coeficiente de restituição, um número adimensional calculado pela razão entre a energia cinética da partícula imediatamente após e antes do impacto. Como a força de lubrificação depende das características do escoamento intersticial, sua implementação em CFD-DEM apresenta alguns obstáculos, especialmente no caso em que as partículas estão próximas o suficiente para impedir que o fluido intersticial seja plenamente capturado pela discretização numérica usada para a fase fluida. Existem duas classes principais de CFD-DEM que diferem pela escala de solução da fase fluida. Chama-se de “resolvida” a abordagem que resolve o fluido em uma escala inferior ao diâmetro das partículas, já que nesse caso o escoamento ao

redor dos sólidos é plenamente capturado. Em contrapartida, o acoplamento “não resolvido” busca reduzir o custo computacional ao resolver a fase fluida em uma escala mais “grosseira”, de 3 a 4 vezes maior que o diâmetro das partículas, de forma que o escoamento próximo à superfície das partículas não é calculado. Adicionalmente, faltam na literatura mais estudos que tratem da implementação e validação da força de lubrificação em CFD-DEM não-resolvido, ou ainda de seu impacto em aplicações como o leito fluidizado.

Tendo em vista o que foi exposto até então, o objetivo geral do presente trabalho é desenvolver e implementar um modelo para a força de lubrificação em simulações CFD-DEM envolvendo fluidos mais viscosos, além de avaliar sua influência na simulação de leitos fluidizados líquidos. Para tal, os objetivos específicos incluem: implementar um modelo de força de lubrificação não-resolvido em CFD-DEM; validar o modelo a partir de dados experimentais da literatura; levantar dados experimentais de fluidização; simular e validar o leito fluidizado experimental em CFD-DEM; usar o modelo validado para avaliar a influência da força de lubrificação na dinâmica do leito fluidizado.

CAPÍTULO 2

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

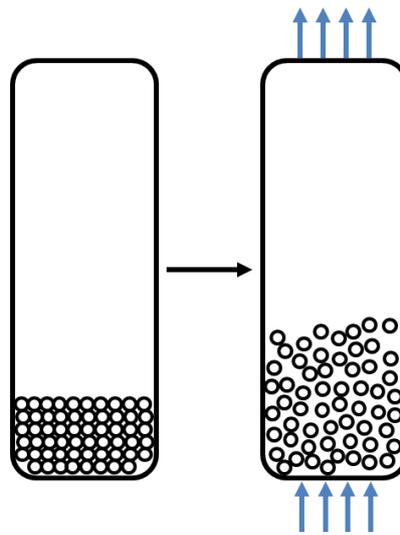
Esse capítulo trata dos aspectos teóricos relevantes para este trabalho. Primeiramente são introduzidos conceitos fundamentais de fluidização sólido-líquido, seguidos por uma introdução da modelagem CFD-DEM e avanços recentes da literatura. Por fim, é apresentada a teoria por trás da força de lubrificação e estudos relevantes encontrados na literatura.

2.1 FLUIDIZAÇÃO SÓLIDO-LÍQUIDO

Embora de origem incerta, a aplicação de fluidização do tipo sólido-líquido pode ser rastreada até meados do século XVI, documentada como uma forma de separar minérios por densidade e tamanho usando uma peneira através da qual passava um fluxo intermitente de líquido (EPSTEIN, 2003). Atualmente, esse tipo de fluidização pode ser encontrado em diversos equipamentos da indústria química e é o princípio fundamental de funcionamento de um leito fluidizado líquido, equipamento que foi inicialmente desenvolvido para uso em sistemas sólido-gás em processos de gaseificação, mas que atualmente tem aplicações envolvendo fluidos de maior viscosidade, como no tratamento de esgoto doméstico em biorreatores (KIM *et al.*, 2011).

A fluidização ocorre quando um fluido passa por uma camada de partículas sólidas inicialmente estacionárias. Devido às forças interfaciais como a de arraste, o leito de partículas passa a apresentar comportamento caótico com dinâmica semelhante a de um fluido, daí o termo “fluidização”. Em leitos fluidizados, esse fluxo de líquido é macroscopicamente unidirecional e ascendente, de forma que o leito de partículas expande na direção do escoamento, como ilustra a Figura 2.

Figura 2 – Esquema simplificado de um leito fluidizado



Fonte: Elaborado pelo autor

A perda de pressão no leito devido à fricção entre o fluido e as fronteiras ou por eventuais obstruções na entrada e saída podem ser negligenciadas quando comparadas com a perda de carga provocada pela fricção entre o fluido e as partículas. Isso significa que o gradiente de pressão axial, $\partial p_f / \partial z$, pode ser escrito a partir do balanço de forças como uma função do peso específico do leito, calculado pela densidade combinada ρ_b (EPSTEIN, 2003), menos a pressão da coluna de fluido, conforme apresentado nas Equações 1 e 2 a seguir:

$$\rho_b = \rho_p(1 - \varepsilon) + \rho_f \varepsilon \quad (1)$$

$$-\frac{\partial p_f}{\partial z} = \rho_b \mathbf{g} - \rho_f \mathbf{g} \quad (2)$$

em que ε é a fração de fluido do leito de partículas, também chamada de porosidade, g a aceleração gravitacional e ρ_f a densidade do fluido. O sinal negativo indicado no gradiente evidencia a redução de pressão ao longo do comprimento do leito. Supondo-se que a porosidade é constante ao longo da altura, a integração da Equação 2 em combinação com a Equação 1 leva ao perfil de queda de pressão devido ao leito de partículas em função da altura L do leito, apresentado na Equação 3:

$$-\Delta p_f = L (1 - \varepsilon)(\rho_p - \rho_f) \mathbf{g} \quad (3)$$

A Equação 3 evidencia dois aspectos importantes da fluidização: a queda de pressão devido à fricção com a fase sólida não depende explicitamente da velocidade do fluido e depende linearmente da altura do leito de partículas; fica clara também a importância da expansão do leito (ou porosidade) como uma variável de projeto para a estimativa da queda de pressão, ou vice e versa. Existem equações empíricas desenvolvidas para prever a porosidade do leito de partículas em fluidização líquida, sendo a correlação de Richardson e Zaki (1954) provavelmente a mais difundida e estudada na literatura. A Equação 4 traz a forma geral da correlação:

$$U_f = U_{p0} \varepsilon^n \quad (4)$$

em que U_f é a velocidade de entrada do fluido, U_{p0} a velocidade terminal da partícula e n um coeficiente empírico. A Equação 5 traz a definição de n em função do número de Reynolds terminal da partícula, calculado como $Re_t = U_{p0} \rho_f d_p / \mu$, segundo a correlação desenvolvida por Rowe (1987) usando os dados de fluidização líquida de Richardson e Zaki para situações em que os efeitos de parede são desprezíveis, ajustada para valores de Re_t de 0,01 até o limite do infinito:

$$n = 2,35 \frac{2 + 0,175 Re_t^{3/4}}{1 + 0,175 Re_t^{3/4}} \quad (5)$$

e a altura do leito pode então ser estimada a partir da porosidade sabendo-se o número de partículas n_p :

$$L = \frac{n_p}{(1 - \varepsilon)} \frac{4 r_p^3}{3 R^2} \quad (6)$$

em que r_p corresponde ao raio da partícula e R ao raio do leito.

Uma das interações fundamentais na fluidização é a força de arraste que atua sobre as partículas, causada pela fricção superficial devido à diferença de velocidade entre o fluido e o material sólido. O cálculo dessa força ainda permanece objeto de estudo na literatura, sendo a única solução exata até então a equação de Stokes-Einstein que calcula a força de arraste (F_d) sobre uma partícula esférica isolada em escoamento Stokesiano ($Re_p \approx 0$), dada pela Equação 7 (BEETSTRA *et al.*, 2007):

$$F_d = \frac{3 \pi \mu r_p \mathbf{u}_r}{2} \quad (7)$$

em que μ representa a viscosidade do fluido. Baseadas na Equação 7, existem duas classes principais de modelos para a força de arraste: a primeira focada em escoamentos no limite Stokesiano, e a segunda desenvolvida para escoamentos ao redor de uma esfera única. Essa última é estudada para uso em aplicações de fluidização, com foco em extensões e modificações para condições de baixa porosidade (escoamentos concentrados), e pode ser escrita genericamente como:

$$F_d = C_d \frac{\rho \mu \mathbf{u}_r r_p^2}{32} g(\varepsilon) \quad (8)$$

em que C_d é o coeficiente de arraste, \mathbf{u}_r a velocidade relativa entre a partícula e o fluido, e $g(\varepsilon)$ uma função de correção para escoamentos concentrados. Não há um modelo teórico para C_d , mas diversas correlações empíricas foram desenvolvidas ao longo dos anos como a de DallaValle (DALLAVALLE, 1948), apresentada na Equação 9, por exemplo, e válida para $Re_p < 2 \times 10^5$. Di Felice (1993) desenvolveu uma correlação empírica para a função de correção para escoamentos sólido-líquido, válida para $Re_p < 10^4$, e que é apresentada nas Equações 10 e 11.

$$C_d = \left(0,63 + \frac{4,8}{\sqrt{Re_p}} \right)^2 \quad (9)$$

$$g(\varepsilon) = \varepsilon^{-\beta} \quad (10)$$

$$\beta = 3,7 - 0,65 \exp \left[-\frac{(1,5 - \log_{10} Re_p)^2}{2} \right] \quad (11)$$

Em suma, o comportamento caótico da fluidização líquida e a natureza das interações entre partículas individuais e o escoamento ao seu redor dificultam a modelagem matemática de leitos fluidizados. O projeto desses equipamentos, apesar de extensamente pesquisado, permanece atrelado a correlações empíricas e à necessidade de coleta de dados experimentais.

2.2 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL E MODELAGEM DE ELEMENTOS DISCRETOS (CFD-DEM)

No contexto de escoamentos multifásicos do tipo sólido-fluido, a modelagem CFD-DEM é uma ferramenta promissora para a simulação numérica desse tipo de sistema. Em oposição a abordagens do tipo Euler-Euler, como a teoria de dois fluidos, a fase sólida é tratada como um meio discreto e a trajetória de cada partícula é calculada individualmente a partir do balanço de forças, de forma que interações sólido-sólido, como colisões, são plenamente resolvidas.

A Fluidodinâmica Computacional (CFD) compreende um conjunto de técnicas numéricas e algoritmos para simular o escoamento de um meio contínuo. A técnica de volumes finitos é a forma mais usada na literatura de CFD para discretizar espacialmente e temporalmente o fluido usando uma malha numérica composta de volumes individuais, usados para a integração numérica das equações de Navier-Stokes e da continuidade no caso de fluidos Newtonianos (escoamentos mais complexos requerem equações adicionais para a viscosidade e taxa de deformação do fluido). A exatidão desse método está diretamente atrelada à qualidade da malha, que é afetada por fatores como o tamanho dos elementos, sua forma, razão de aspecto e ortogonalidade.

Por outro lado, a Modelagem de Elementos Discretos foi desenvolvida para simular numericamente a trajetória e a interação de partículas individuais, proposta pela primeira vez por Cundall e Strack (1979) para estudar o escoamento de meios granulares. Cada partícula é

simulada individualmente através da integração numérica no tempo do balanço de forças nas direções normal e tangencial, conforme mostram as Equações 12 e 13:

$$m_i \frac{d\mathbf{u}_{p,i}}{dt} = \sum_{j=1}^N \mathbf{f}_c + \mathbf{f}_g + \mathbf{f}_f \quad (12)$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum_{j=1}^N \mathbf{M} \quad (13)$$

sendo m_i a massa, I_i o momento de inércia, \mathbf{M} momentos causados por forças tangenciais, $\mathbf{u}_{p,i}$ a velocidade linear e $\boldsymbol{\omega}_i$ a velocidade angular da partícula i . Os termos do lado direito da Equação 12 representam, respectivamente, as forças de contato, a força gravitacional e as forças de interação entre as fases, caso o problema seja multifásico. As forças de contato entre duas partículas i e j são comumente modeladas como um sistema mola – amortecedor, ou seja, possuem um componente elástico e outro dissipativo, conforme apresentado na Equação 14:

$$\mathbf{f}_c = -\mathbf{K}_n \boldsymbol{\delta}_n - \boldsymbol{\gamma}_n \mathbf{v}_n - \mathbf{K}_t \boldsymbol{\delta}_t - \boldsymbol{\gamma}_t \mathbf{v}_t \quad (14)$$

em que K é o coeficiente de elasticidade, δ a deformação elástica, γ o coeficiente de amortecimento e v a velocidade de colisão, avaliados nas direções normal (índice n) e tangencial (índice t). Existem diversos modelos na literatura para cada um dos coeficientes da Equação 14, sendo o mais utilizado uma combinação entre o modelo de Tsuji *et al.* (1992) para a direção normal e o de Mindlin (1953) para a direção tangencial, apresentados nas Equações 15 a 18:

$$\mathbf{K}_n = \frac{4}{3} Y^* \sqrt{R^* \boldsymbol{\delta}_n} \quad (15)$$

$$\gamma_n = -2 \sqrt{\frac{5}{6}} \beta \sqrt{S_n m^*} \quad (16)$$

$$K_t = 8G^* \sqrt{R^* \delta_n} \quad (17)$$

$$\gamma_t = -2 \sqrt{\frac{5}{6}} \beta \sqrt{S_t m^*} \quad (18)$$

em que os coeficientes S_n , S_t , m^* , G^* , Y^* , R^* e β dependem das propriedades físicas e de interação dos materiais e são definidos nas Equações 19 a 25:

$$S_n = 2Y^* \sqrt{R^* \delta_n} \quad (19)$$

$$S_t = 8G^* \sqrt{R^* \delta_n} \quad (20)$$

$$\beta = \frac{\ln(e)}{\sqrt{\ln^2(e) + \pi^2}} \quad (21)$$

$$\frac{1}{Y^*} = \frac{(1 - v_i^2)}{Y_i} + \frac{(1 - v_j^2)}{Y_j} \quad (22)$$

$$\frac{1}{G^*} = \frac{2(2 - v_i)(1 + v_i)}{Y_i} + \frac{2(2 - v_j)(1 + v_j)}{Y_j} \quad (23)$$

$$\frac{1}{R^*} = \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j} \quad (24)$$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j} \quad (25)$$

em que Y corresponde ao módulo de elasticidade ou módulo de Young, propriedade física do material que constitui a partícula e que quantifica sua resistência a deformações elásticas axiais; e é o coeficiente de restituição, parâmetro adimensional que mede a fração de energia restituída na colisão entre dois materiais; ν é a razão de Poisson, adimensional que relaciona as taxas de deformação transversal e axial do material; R e m representam o raio e a massa da partícula, respectivamente; e G^* representa o módulo de cisalhamento ou de elasticidade transversal, que quantifica a razão entre a tensão de cisalhamento e a razão de Poisson. A deformação elástica δ não é calculada de fato no DEM, uma vez que para isso seria necessário discretizar cada partícula individualmente utilizando modelos de elementos finitos, por exemplo. Ao invés disso, a deformação é aproximada pela sobreposição virtual das partículas e possíveis deformações plásticas não são levadas em consideração na modelagem.

Eventuais forças de não contato que podem ser adicionadas à Equação 12 incluem as causadas por campos magnéticos e forças coesivas como a de Van der Waals por exemplo. As forças causadas por interação entre as fases podem incluir a força de arraste, empuxo, lubrificação e sustentação (*lift*), sendo tratadas no acoplamento como um par ação e reação, de acordo com a terceira lei de Newton.

A fase fluida utiliza o mesmo equacionamento proposto por Anderson e Jackson (1967) para o Modelo de Dois Fluidos (TFM), desenvolvido para simular escoamentos multifásicos em que todas as fases são tratadas como meios contínuos. Essa abordagem leva em conta a fração volumétrica (ϵ) que cada fase ocupa das células da malha numérica para o cálculo de valores médios, e, por essa razão, essas equações são conhecidas como a Média Volumétrica das Equações de Navier-Stokes (VANS). Segundo Zhou *et al.* (2010), existem duas variações da formulação VANS para CFD-DEM que diferem no tratamento dado para o gradiente de pressão e para o divergente do tensor de tensão viscosa. Em ambos os casos, para um fluido incompressível, a equação da continuidade é a mesma, apresentada na Equação 26:

$$\frac{\partial \varepsilon_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_f \mathbf{u}_f) = 0 \quad (26)$$

em que \mathbf{u}_f representa o vetor velocidade do fluido e ε_f sua fração volumétrica na célula da malha. A equação de *momentum* para a primeira variação do VANS é apresentada na Equação 27:

$$\frac{\partial(\rho_f \varepsilon_f \mathbf{u}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \varepsilon_f \mathbf{u}_f \otimes \mathbf{u}_f) = -\nabla \mathbf{p} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \mathbf{F}_{f-p} + \varepsilon_f \rho_f \mathbf{g} \quad (27)$$

em que F_{f-p} contém a média volumétrica dos termos de forças interfases, como por exemplo o arraste (F_d), o empuxo e as causadas pelo gradiente de pressão ($F_{\nabla p}$) e o divergente do tensor de tensão viscosa ($F_{\nabla \tau}$) de cada partícula i , como apresentado na Equação 28. A força de massa virtual (ou massa adicionada) pode ser desprezada para escoamentos em que o sólido é consideravelmente mais denso que o fluido, assim como a força de sustentação para situações em que a velocidade angular das partículas é baixa em relação a velocidade do fluido. O cálculo da força de arraste dependerá da abordagem de acoplamento usada, conforme será discutindo mais adiante.

$$\mathbf{F}_{f-p} = \frac{1}{\Delta V} \sum_{i=1}^n (\mathbf{F}_{di} + V_p \mathbf{g} \rho + \mathbf{F}_{\nabla p i} + \mathbf{F}_{\nabla \tau i}) \quad (28)$$

sendo ΔV o volume da célula da malha numérica. Os dois últimos termos do somatório da Equação 28 são definidos na Equação 29:

$$\frac{1}{\Delta V} \sum_{i=1}^n (\mathbf{F}_{\nabla p i} + \mathbf{F}_{\nabla \tau i}) = \sum_{i=1}^n \frac{-V_{pi} \nabla \mathbf{p}}{\Delta V} + \sum_{i=1}^n \frac{V_{pi} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}}{\Delta V} \quad (29)$$

sendo a tensão viscosa τ dada por:

$$\boldsymbol{\tau} = \mu(\nabla \mathbf{u}_f + \nabla \mathbf{u}_f^T) - \frac{2}{3} \mu \nabla \mathbf{u}_f I \quad (30)$$

definindo a fração de sólidos ε_p em função do volume das partículas V_p contidas em uma célula da malha como sendo:

$$\varepsilon_p = \frac{1}{\Delta V} \sum_{i=1}^n V_{pi} \quad (31)$$

a Equação 29 se torna:

$$\sum_{i=1}^n \frac{-V_{pi} \nabla \mathbf{p}}{\Delta V} + \sum_{i=1}^n \frac{V_{pi} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}}{\Delta V} = -\varepsilon_p \nabla \mathbf{p} + \varepsilon_p \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (32)$$

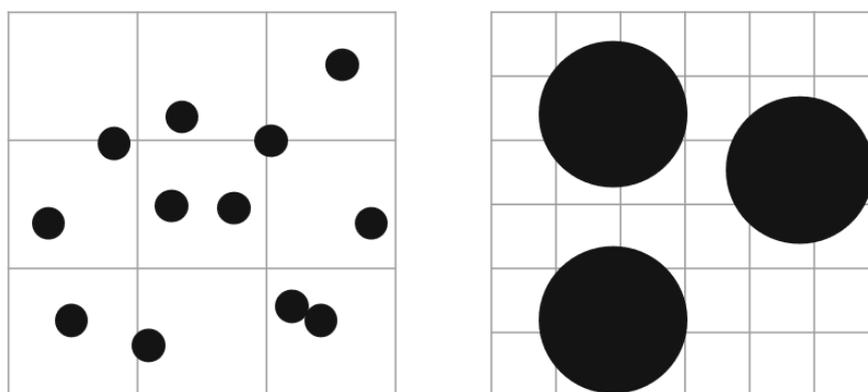
que se somada explicitamente à Equação 27 fora do termo de forças interfases, e considerando que $\varepsilon_f = 1 - \varepsilon_p$, resulta na segunda variação do VANS:

$$\frac{\partial(\rho_f \varepsilon_f \mathbf{u}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \varepsilon_f \mathbf{u}_f \otimes \mathbf{u}_f) = -\varepsilon_f \nabla \mathbf{p} + \varepsilon_f \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \mathbf{F}_{f-p} + \varepsilon_f \rho_f \mathbf{g} \quad (33)$$

Existem duas formas de realizar o acoplamento CFD-DEM no que diz respeito à escala de discretização da fase fluida. Quando o tamanho das células da malha numérica é uma fração do diâmetro do material sólido, tem-se um acoplamento chamado de resolvido, já que o escoamento ao redor de cada partícula é plenamente capturado, permitindo que forças como a de arraste sejam calculadas diretamente utilizando as condições de contorno do problema sem a necessidade de modelos empíricos. Embora essa abordagem forneça maior exatidão para a simulação da fase fluida e do escoamento, seu alto custo computacional acaba limitando o número de partículas nas simulações a alguns milhares, e sua aplicação em escoamentos concentrados permanece incerta (BLAIS *et al.*, 2016).

Por outro lado, o acoplamento não-resolvido utiliza células consideravelmente maiores que as partículas. Nessa abordagem, como o escoamento ao redor de cada partícula não é calculado em detalhes, há a necessidade do uso de modelos empíricos ou semiempíricos, como o da Equação 8, por exemplo. Segundo o estudo de Peng *et al.* (2014), a razão ótima entre o comprimento característico das células e o diâmetro das partículas é de 3,86 para o método não-resolvido, e recomenda-se que essa proporção seja pelo menos 3. Por utilizar um menor grau de discretização da fase fluida e assim reduzir seu custo computacional, esse acoplamento é ideal para escoamentos com grande número de partículas. A Figura 3 traz uma comparação entre as duas abordagens.

Figura 3 – Comparativo entre os esquemas não-resolvido (esquerda) e resolvido (direita).



Fonte: Elaborado pelo autor

Pelo equacionamento da fase fluida e o esquema da Figura 3, fica evidente a importância do cálculo da fração de sólidos nas células para a estabilidade e precisão do CFD-DEM. O algoritmo mais simples para determinar o volume ocupado pelas partículas é o método do centroide, ou *Particle Center Method* (PCM) em inglês, em que o volume de uma partícula é atribuído à célula que contiver seu centro de massa. Para escoamentos concentrados, o PCM pode resultar em frações de sólido irrealistas, levando a erros de até 50% (PENG *et al.*, 2014) e causando erros de continuidade. Uma alternativa para suavizar a distribuição de partículas nas células é o método de subdivisões, em que cada partícula é dividida em frações de mesmo volume que são rastreadas pela posição de seus centroides, de forma que o volume de cada subdivisão é projetado para a célula que contiver seu centro de massa, como por exemplo no trabalho de Blais *et al.* (2016) em que cada partícula de um tanque de mistura continha 27 subvolumes. Outras formas de calcular a fração de sólidos

incluem distribuições estatísticas ou ainda modelos analíticos para calcular exatamente o volume ocupado por cada partícula nas células.

2.3 FORÇA DE LUBRIFICAÇÃO

Como mencionado anteriormente, é comum que a energia restituída em colisões entre corpos seja quantificada por um número adimensional conhecido como coeficiente de restituição. Por ser um parâmetro de interação e não uma propriedade inerente de um material, seu valor depende do par de materiais e do meio circundante, e pode ser definido como a razão entre a magnitude das velocidades imediatamente após (v_2) e antes (v_1) do impacto, conforme apresentado na Equação 34:

$$e = \frac{|v_2|}{|v_1|}, \quad 0 \leq e \leq 1 \quad (34)$$

sendo 0 uma colisão inelástica e 1 uma colisão perfeitamente elástica. Segundo o estudo de Ruiz-Ângulo e Hunt (2010), para velocidades de impacto baixas o suficiente para não produzirem deformações plásticas nos materiais, o coeficiente de restituição permanece praticamente constante e apresenta valores, em geral, entre 0,8 e 1. Esse coeficiente foi extensamente estudado e costuma ser medido na literatura por experimentos realizados em vácuo ou em gases de baixa viscosidade (GONDRET *et al.*, 2002) para eliminar efeitos dissipativos devido ao fluido, sendo comumente chamado de coeficiente de restituição a seco.

É comum que trabalhos na literatura envolvendo a simulação de escoamentos sólido-líquido em CFD-DEM utilizem o coeficiente de restituição a seco. No trabalho de Zbib *et al.* (2018) os autores realizaram uma investigação sobre a influência de parâmetros da fase sólida na simulação em CFD-DEM de um leito fluidizado sólido-líquido, incluindo o coeficiente de restituição. Foi observado que os resultados das simulações ficaram mais próximos de dados experimentais com a introdução de um valor de e inferior ao medido a seco, indicando que a influência do fluido na dissipação de energia em colisões é importante para a correta predição da dinâmica do leito.

Por outro lado, estudos experimentais como o de Joseph (2003), Gondret *et al.* (2002) e Ruiz-Ângulo e Hunt (2010) buscaram verificar como o coeficiente de restituição pode ser

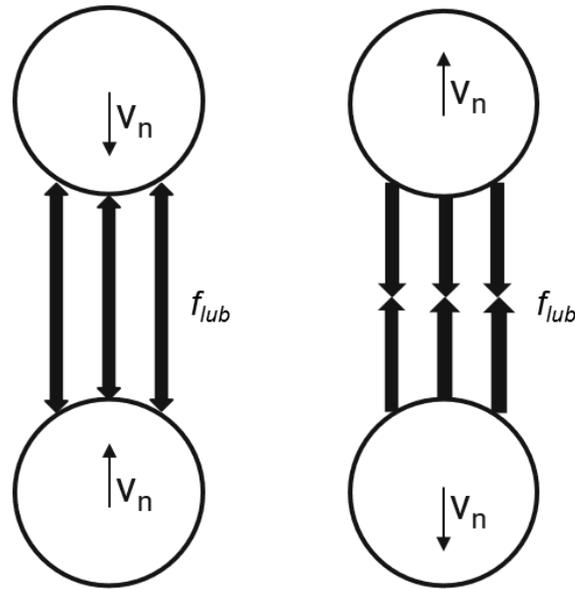
afetado pelo meio em que as partículas colidem. Os testes foram realizados através da colisão de partículas de diferentes materiais imersas em fluidos viscosos, como soluções de glicerol por exemplo. Observou-se que há uma dependência entre a energia dissipada nas colisões e a viscosidade do fluido e a velocidade de impacto. Uma forma de relacionar essas duas variáveis é através do número de Stokes no momento de impacto, um número adimensional definido como a razão entre a inércia da partícula e a resistência viscosa do fluido, apresentado na Equação 35:

$$St = \frac{\rho_p U_{p,i} d_p}{9 \mu_f} \quad (35)$$

em que ρ_p corresponde à densidade da partícula, U_p sua velocidade no momento de impacto e d_p seu diâmetro. Mais precisamente, verificou-se que quase não há restituição na colisão para valores de St na região de 10 a 20, sendo toda a energia de impacto dissipada pelo choque e pelo fluido, ao passo que para valores de Stokes na região de 5000 a 10000 o coeficiente de restituição se aproxima assintoticamente do valor medido a seco.

A explicação para esse fenômeno é uma força causada pelo escoamento do fluido intersticial conhecida como força de lubrificação (JOSEPH, 2003; RUIZ-ÂNGULO e HUNT, 2010; SUN e XIAO, 2016; ZHANG *et al.*, 2005). Trata-se de uma força dissipativa, que age no sentido contrário ao movimento relativo das partículas, devido ao gradiente de pressão do fluido, que é “empurrado” para fora na aproximação, e “puxado” para dentro no rebote após a colisão. A Figura 4 ilustra a ação da força de lubrificação nas duas situações.

Figura 4 – Esquema da força de lubrificação (f_{lub}) agindo sobre duas partículas



Fonte: Elaborado pelo autor.

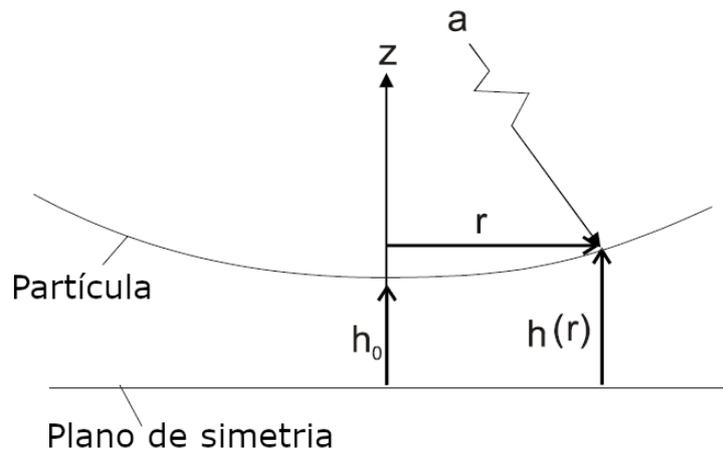
Por definição, a força de lubrificação é calculada pela integral da pressão intersticial sobre a superfície das esferas e pode ser implementada diretamente em códigos CFD-DEM resolvidos, já que nesse tipo de acoplamento o perfil de pressão ao redor e entre as esferas é plenamente capturado. Essa implementação foi feita no trabalho de Lambert *et al.* (2018) e validada com sucesso, porém requer uma discretização do domínio similar à usada em simulações numéricas diretas (DNS) com espaçamento entre células de cerca de um milésimo do raio das partículas, inviabilizando sua aplicação em escoamentos concentrados.

Alternativamente, no trabalho de Davis *et al.* (1986), os autores estabeleceram uma parte fundamental da teoria de colisões elastohidrodinâmicas usada para desenvolver o modelo analítico da força de lubrificação. Essa formulação adota o seguinte conjunto de hipóteses: a distância a partir da qual a força se torna significativa é uma fração pequena do raio das partículas; os corpos estão imersos em um escoamento Stokesiano sem ação de forças externas, ou seja, efeitos viscosos predominam; a superfície das partículas é perfeitamente lisa e pode ser aproximada por um parabolóide; e o fluido intersticial pode ser considerado um meio contínuo independente da distância entre as superfícies das partículas. A partir disso, assumindo que o movimento das partículas se dá ao longo do eixo z e que o perfil de pressão é estritamente radial, a equação de Navier-Stokes em coordenadas cilíndricas pode ser reduzida a (CROWE *et al.*, 2012):

$$\frac{dp}{dr} = \mu_f \frac{\partial^2 u_{f,r}}{\partial z^2} \quad (36)$$

em que $u_{f,r}$ é a componente radial da velocidade do fluido. A Figura 5 traz um esquema do problema para uma partícula de raio a .

Figura 5 – Esquema de uma colisão entre partículas.



Fonte: Adaptado de Crowe *et al.* (2012).

A partir da Figura 5, têm-se que as condições de contorno para a Equação 36, dada uma distância h entre as partículas, são:

$$\begin{cases} \frac{\partial u_{f,r}}{\partial z} = 0, & z = 0 \\ u_{f,r} = 0, & z = h \end{cases} \quad (37)$$

e a integração da Equação 36 sob essas condições no limite de 0 até h resulta em:

$$u_{f,r} = \frac{1}{2\mu} \frac{dp}{dr} (z^2 - h^2) \quad (38)$$

O balanço de massa na região cilíndrica delimitada pelo raio r e o plano de simetria é dado por:

$$2 \pi r \int_0^h u_{f,r} dz + \pi r^2 \frac{dh}{dt} = 0 \quad (39)$$

sendo que o termo dh/dt corresponde à velocidade relativa das partículas U_p . Substituindo $u_{f,r}$ na Equação 39 pela Equação 38 e integrando novamente em z resulta em:

$$\frac{dP}{dr} = \frac{3 \mu r}{2 h^3} U_p \quad (40)$$

A diferença de pressão $P - P_0$ pode então ser obtida integrando a Equação 40 de r até a , conforme Equação 41:

$$\Delta P = \mu_f \frac{3 U_p}{2} \int_a^r \frac{r}{h^3} dr \quad (41)$$

A integral do perfil de pressão dado pela Equação 41 na região delimitada por $\theta = 0 \rightarrow 2\pi$ e $r = 0 \rightarrow a$, com a aproximação de que $h - h_0 = r^2/2a$ (paraboloide), resulta na equação analítica da força de lubrificação que pode ser usada em acoplamentos não-resolvidos (Equação 42):

$$F_{lub} = - \frac{3 \pi \mu_f a^2 \mathbf{v}_{r,ij}}{2 h} \quad (42)$$

em que $\mathbf{v}_{r,i}$ é o vetor velocidade relativa entre as partícula i e j .

Uma característica importante da Equação 42 é que no limite em que $h \rightarrow 0$, ou seja, na iminência do contato, a força tende ao infinito. Esse comportamento é resultado das hipóteses assumidas, em especial as de que as forças externas são desprezíveis e que as

superfícies são livres de rugosidades. Nessas condições, o sistema de fato recairia no paradoxo de Stokes (ZHANG *et al.*, 2005), que dita que duas partículas imersas em um fluido viscoso nunca atingiriam contato num espaço finito de tempo devido à força de lubrificação infinita conforme se aproximam.

Porém, na prática, forças como a gravitacional ou as causadas pelo escoamento do fluido em que os corpos estão imersos permitem que o contato ocorra de fato. Além disso, o contato pode ocorrer não diretamente entre as superfícies, mas entre as rugosidades dos materiais. Possivelmente pelo exposto acima, a Equação 42 raramente é implementada em simulações usando o acoplamento CFD-DEM não-resolvido, e a força de lubrificação acaba sendo ignorada.

Uma solução comumente usada em implementações baseadas na formulação analítica é a introdução de um limite inferior para a distância h na Equação 42, que pode ser baseado aproximadamente, na rugosidade superficial do material (ZHANG *et al.*, 2005). Essa abordagem foi usada nos trabalhos de Wang *et al.* (2018a) e de Wang *et al.* (2018b) na simulação CFD-DEM de um leito de jorro invertido sólido-líquido e na dinâmica de partículas em um meio poroso, respectivamente. Nenhum dos dois trabalhos avaliou se esse método reproduz corretamente dados observados experimentalmente para a força de lubrificação. Sendo assim, não há um estudo conclusivo na literatura quanto à validade da implementação da Equação 42 e sua aplicação em simulações usando o acoplamento CFD-DEM não-resolvido, nem a respeito do uso de um limite para o valor da distância h .

Existem, ainda, alternativas indiretas para representar a força de lubrificação. No trabalho de Liu *et al.* (2016) os autores simularam um leito fluidizado sólido-líquido utilizando uma correlação semiempírica para o coeficiente de restituição em função do número de Stokes de impacto, para reproduzir as perdas de energia na colisão devido ao fluido. Similarmente, Song *et al.* (2017) simularam um leito fluidizado gás-sólido com partículas úmidas, também fazendo uso de uma correlação empírica para o coeficiente de restituição. Os autores observaram que a redução do coeficiente de restituição levou a um aumento na formação de aglomerados de partículas.

CAPÍTULO 3

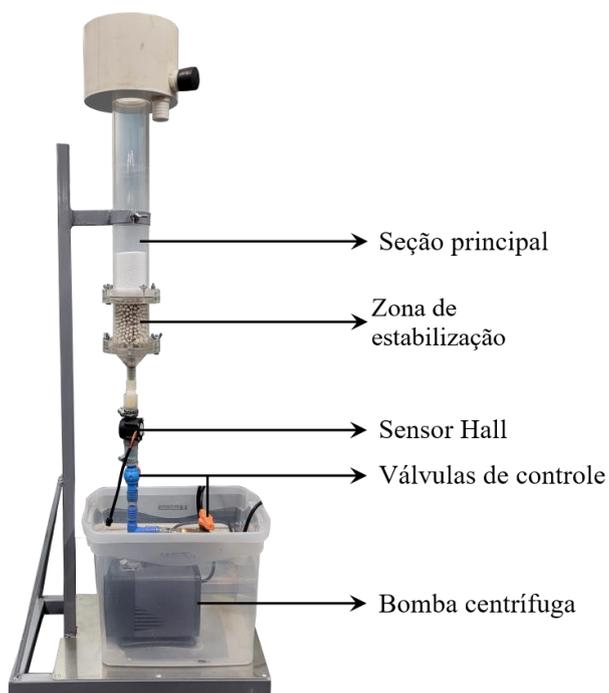
METODOLOGIA

O presente trabalho foi dividido entre etapas numéricas e experimentais. Neste capítulo são apresentadas as metodologias utilizadas no levantamento e tratamento de dados experimentais e numéricos.

3.1 PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

O foco da primeira etapa do projeto foi a construção e operação de um leito fluidizado experimental de pequena escala para coleta de dados de fluidização, como a expansão do leito para cada velocidade de entrada do fluido. O equipamento é apresentado na Figura 6.

Figura 6 – Aparato experimental de fluidização.



Fonte: elaborado pelo autor.

A seção principal do leito consiste de um tubo de acrílico de 30 cm de altura e 5 cm de diâmetro interno, precedida por uma seção de 10 cm utilizada para uniformizar e distribuir o fluxo ascendente de fluido, preenchida por um leito fixo de esferas de cerâmica de 3 mm de diâmetro. Foi utilizada uma bomba centrífuga de vazão nominal de 6000 L/h, cuja vazão era

controlada através de duas válvulas globo: a primeira em linha com o leito e uma segunda de *by-pass* que retorna o fluido para o reservatório, conectadas ao sistema por mangueiras de silicone de ½ polegada. A vazão de entrada no leito foi medida após a válvula em linha através de um sensor de efeito Hall modelo YF-S201, com faixa de operação de 1 a 30 L/min. O sensor consiste de uma pequena turbina com pás magnetizadas que geram um sinal elétrico a cada volta que é captado por um microcontrolador Arduino, que calcula a frequência do sinal e converte para vazão com até duas casas decimais de precisão, usando uma equação fornecida pelo fabricante. Uma tela de LCD foi também conectada ao Arduino que mostrava em tempo real a vazão instantânea medida pelo sensor em conjunto com uma média móvel dos últimos 5 segundos, para garantir que a vazão medida fosse estável.

O fluido utilizado foi água mantida a 24°C através do controle de temperatura do laboratório. O material sólido usado no leito foi partículas esféricas de alumina de 1 mm de diâmetro e densidade de 3586 kg/m³. A massa total de partículas utilizada nos experimentos foi de 324,15 g.

O procedimento de fluidização foi realizado em duas etapas: na primeira, ambas as válvulas eram totalmente abertas por 10 segundos, e em seguida fechadas vagarosamente até que a vazão de interesse fosse atingida. Uma vez que um regime pseudo-estacionário de fluidização fosse observado, a altura do leito era medida com um paquímetro de precisão de 0,02 mm, e o procedimento foi replicado cinco vezes para cada vazão. Foram estipuladas cinco vazões de entrada dentro do limite de operação da bomba, sendo elas de 4,27, 5,20, 6,00, 6,80 e 7,92 L/min. A porosidade do leito pode ser determinada a partir da altura usando a Equação 43:

$$\varepsilon = 1 - \left(\frac{m_s}{\rho_p r_l^2 \pi L} \right) \quad (43)$$

sendo r_l o raio do leito e m_s a massa total de sólidos de 324,15 g. Com o valor de ε e L , a queda de pressão no leito foi estimada pela Equação 3.

A velocidade terminal das partículas foi estimada pelo método de queda livre, em que as partículas eram soltas em um béquer de 1 litro preenchido com água. A trajetória de cada partícula foi gravada com uma câmera SONY DSC-RX100M de alta velocidade a uma

frequência de 960 quadros por segundo e os resultados foram analisados no software livre Tracker para 5 partículas de alumina de 1 mm em duplicata. A velocidade terminal média obtida nos experimentos foi usada para calcular a porosidade do leito fluidizado prevista pela Equação 4, para que pudesse ser comparada com a porosidade obtida experimentalmente.

3.2 PROCEDIMENTO NUMÉRICO

Essa seção está dividida em duas partes: a primeira trata da implementação e validação da força de lubrificação em CFD-DEM; e a segunda da simulação do equipamento experimental de fluidização. Todas as simulações foram realizadas utilizando o programa gratuito e de código aberto CFDEM[®]coupling (GONIVA *et al.*, 2012), que realiza o acoplamento entre o OpenFOAM[®] (CFD) e o LIGGGHTS[®] (DEM). Todas as visualizações e renderizações gráficas das simulações foram feitas utilizando o software aberto ParaView.

O acoplamento foi baseado na Equação 33 para a fase fluida. As forças de interação entre as fases consideradas foram as causadas pelos gradientes de pressão e pelo divergente do tensor da tensão viscosa, empuxo de Arquimedes e o arraste modelado pelas equações de Di Felice (Equações 8 a 11). O esquema de fração de vazios usado foi o de subvolumes, descrito na Seção 2.2.

3.2.1 Força de Lubrificação

A força de lubrificação baseada no modelo analítico da Equação 42 foi implementada diretamente no LIGGGHTS[®] como parte da biblioteca de modelos de interação, já que essa abordagem independe das características do escoamento. A implementação foi baseada no método descrito anteriormente, em que o valor da distância h tem um limite inferior fixo que deve ser introduzido pelo usuário, sendo uma boa aproximação para seu valor a rugosidade superficial do material. A validação dessa implementação foi feita através da reprodução dos experimentos de Joseph (2003), em que o autor avaliou a colisão entre esferas de aço imersas em soluções de glicerol de diferentes concentrações usando um pêndulo, para garantir que a trajetória das partículas fosse uniforme. Conforme apontado por Campos *et al.* (2021), em simulações CFD-DEM o método do pêndulo pode ser substituído por colisões simples de queda livre sem alterações nos resultados. O método de queda livre foi escolhido para as simulações por questão de simplicidade no que diz respeito à geração da geometria e da malha numérica.

O domínio das simulações consistiu de uma caixa retangular simples preenchida por fluido e de dimensões 10 x 10 x 20 cm. Para a fase fluida, a geometria e a malha foram criadas utilizando o programa blockMesh, parte do pacote do OpenFOAM®. A condição de não escorregamento foi atribuída a todas as 6 faces (paredes) e o domínio foi discretizado uniformemente de forma a produzir volumes numéricos de 1 cm³ cada, totalizando 2000 elementos. O critério descrito anteriormente que requer que a razão entre o comprimento característico das células e o diâmetro das partículas seja maior que 3 não foi seguida a risca nessas simulações, uma vez que trata-se de um escoamento disperso em fluido estagnado. Já o domínio da fase particulada foi criado diretamente no LIGGGHTS®, utilizando funções de geometrias primitivas, resultando em uma caixa idêntica à da fase fluida. Inicialmente, duas partículas foram criadas, uma em uma posição fixa no espaço onde permaneceu estacionária e a segunda acima da primeira, de onde iniciou queda livre até a colisão. As propriedades físicas das partículas e da fase fluida usadas nas simulações são apresentadas nas Tabelas 1 e 2, respectivamente (JOSEPH 2003). Embora os dados do trabalho de Joseph (2003) tenham sido levantados em condições diferentes das utilizadas no leito fluidizado desse trabalho, os experimentos cobriram uma faixa de número de Stokes de 19 até 1900, desde colisões praticamente inelásticas, até o limite elástico (restituição a seco).

Tabela 1 - Propriedades físicas da fase sólida.

Esferas de aço	
Módulo de Young (Pa)	1×10 ⁹
Razão de Poisson (-)	0,27
Coefficiente de restituição (-)	0,97
Coefficiente de fricção (-)	0,30
ρ (kg/m³)	7780,00
Diâmetro (mm)	6,35

Fonte: Joseph (2003).

Tabela 2 - Propriedades físicas do fluido.

Glicerol 74% m/m	
Viscosidade (Pa.s)	0,02520
ρ (kg/m³)	1189,25
Glicerol 50% m/m	
Viscosidade (Pa.s)	0,00504
ρ (kg/m³)	1123,75

Fonte: Joseph (2003).

É importante ressaltar que o coeficiente de restituição medido nas simulações, comumente chamado de coeficiente de restituição aparente na literatura, não é o mesmo que o coeficiente usado de entrada nas simulações. Este último permanece constante e não é alterado pela ação dissipativa da força de lubrificação, sendo utilizado para calcular as interações entre partículas durante o contato. A restituição aparente, por outro lado, é calculada como a razão entre a velocidade de afastamento e de aproximação das simulações, e depende das forças de interação presentes durante a colisão. Dessa forma, o coeficiente de restituição aparente medido nas simulações não será igual ao valor usado de entrada. O passo de tempo foi de 10^{-3} s para a fase fluida e de 10^{-6} s para a fase sólida, sem um critério específico, visando apenas garantir que as velocidades antes e após o impacto fossem capturadas com exatidão.

Na primeira etapa de simulações, buscou-se verificar o resultado apresentado por Campos *et al.* (2021), em que um valor fixo de α foi usado para avaliar a força de lubrificação. Os resultados desse trabalho mostraram que há um valor do parâmetro α que produz resultados do coeficiente de restituição aparente próximos aos experimentais, porém a hipótese não foi testada para diferentes velocidades de impacto. Dessa forma, o primeiro conjunto de simulações utilizou valores variados para o parâmetro α para colisões em uma solução de glicerol 74%. Cada valor de α foi testado para sete velocidades de impacto diferentes, controladas pela altura de queda da partícula. Os resultados foram comparados com a correlação de Ruiz-Ângulo e Hunt (2010), obtida pelo ajuste dos dados experimentais do coeficiente de restituição de Joseph (2003) e que o relaciona (e_{fit}) com o número de Stokes de impacto, cobrindo, desde colisões inelásticas ($St \approx 10$), até o limite elástico. A correlação é apresentada na Equação 44.

$$e_{fit} = 1 - \frac{8,65}{St^{0,75}} \quad (44)$$

Os valores testados de α foram escolhidos para que uma ampla faixa de e fosse coberta pelas simulações. Os valores utilizados de α e as alturas de queda são apresentados na Tabela 3. Para cada α , foram feitas simulações com todas as alturas iniciais.

Tabela 3 - Valores de α e de altura inicial de queda usados nas simulações.

α (μm)						
0,18	0,11	0,10	0,07	0,06	0,05	0,04
Altura inicial (cm)						
8,0	5,0	2,0	1,0	0,5	0,1	0,05

Fonte: elaborado pelo autor.

Os coeficientes de restituição aparente, obtidos nas simulações pelas velocidade imediatamente após e antes da colisão, foram plotados em função do número de Stokes de impacto e comparados com a correlação da Equação 44. Devido à tendência observada, um ajuste logarítmico foi feito para os dados de cada conjunto de α , e a intersecção entre cada um desses ajustes e a Equação 44 foi calculada numericamente. Essa intersecção corresponde a um valor de α que seria suficiente para simular a força de lubrificação de forma que o coeficiente de restituição simulado corresponda ao predito pela Equação 44 para um dado valor de St de impacto. Esses pontos de intersecção foram então utilizados para ajustar uma função de correção para o limite inferior de h em função da velocidade no momento de impacto. Nas situações em que ocorrem contato ($h \leq 0$), a força de lubrificação passa a ser calculada como:

$$\mathbf{F}_{lub} = - \frac{3 \pi \mu_f \alpha^2 \mathbf{v}_{r,ij}}{\alpha(\mathbf{v}_{r,ij})} \quad (45)$$

em que \mathbf{F}_{lub} é incluída no somatório da Equação 12 para cada partícula j que interage com a partícula i .

É importante ressaltar que no LIGGGHTS[®] as posições das partículas são rastreadas pelas coordenadas de seus centroides, portanto a distância entre a superfície de duas partículas para o cálculo da força de lubrificação é definida como a distância de seus centróides menos a soma de seus raios. Isso, aliado ao fato de que deformações elásticas são simuladas como uma sobreposição virtual, faz com que seja possível que a distância entre a superfície de duas partículas seja negativa. Além disso, para evitar que o LIGGGHTS[®] gaste tempo calculando interações entre todos os pares possíveis de partículas, as forças entre partículas são calculadas apenas para pares que estejam na lista de “vizinhos”, ou seja, que atendam a seguinte condição:

$$d_{i,j} \leq c (r_i + r_j) + s \quad (46)$$

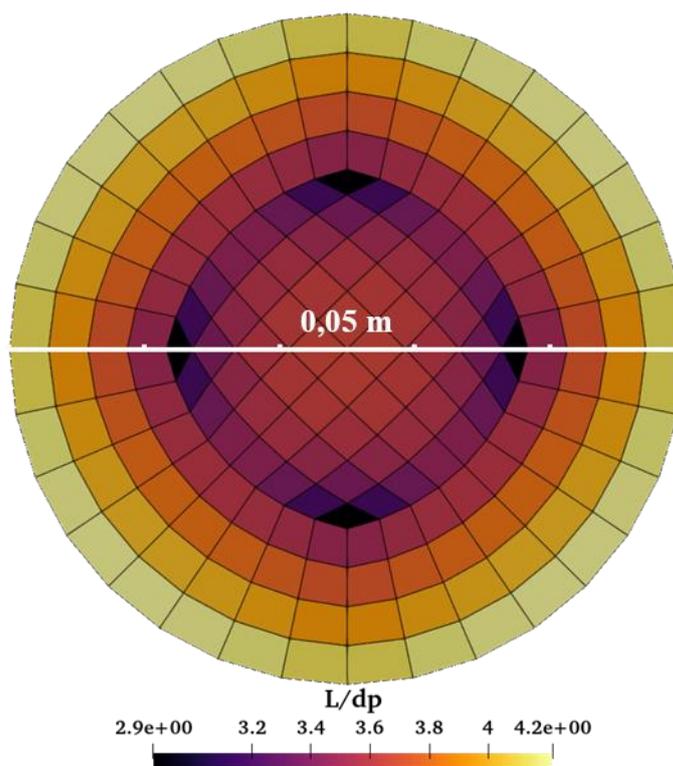
em que $d_{i,j}$ é a distância entre a superfície das duas partículas, c um parâmetro adimensional maior que 1, definido pelo usuário, e s um valor de distância, também definido pelo usuário. Uma configuração em que c é igual a 1 e s é igual a 0 significa que duas partículas só seriam consideradas “vizinhas” quando estivessem em contato, por exemplo. Em todas as simulações deste trabalho os valores de c e s foram de 100 e 0 respectivamente, para garantir que a força fosse capturada plenamente.

A Equação 45 foi implementada no lugar do modelo da Equação 42 e validada seguindo o mesmo procedimento de simulações de queda livre, porém sem a necessidade de um valor fixo de entrada para α , já que o novo modelo calcula dinamicamente seu valor durante a simulação. O procedimento de validação foi realizado para soluções de 74 e 50% de glicerol, para garantir que o modelo desenvolvido se adequa a diferentes faixas de St .

3.2.2 Leito Fluidizado

O domínio do leito fluidizado consistiu de um cilindro de acrílico de 5 cm de diâmetro e 31 cm de altura, para distanciar o leito de partículas da entrada de fluido e reduzir a possibilidade de problemas numéricos. A malha numérica foi gerada usando o programa blockMesh, com o auxílio da ferramenta *m4*, parte do pacote padrão do OpenFOAM[®], seguindo o padrão *o-grid*, conforme apresentado na Figura 7, em conjunto com a razão L/d_p , isto é, a razão entre o comprimento característico de cada célula, definido pela raiz cúbica de seu volume, e o diâmetro da partícula. A malha foi ajustada de forma a manter essa razão entre 3 e 4 para o maior número de células possível.

Figura 7 – Vista inferior da malha numérica do leito fluidizado



Fonte: elaborado pelo autor.

Como o tamanho dos elementos está atrelado ao diâmetro das partículas, não há a possibilidade de realizar um estudo de independência de malha. As informações da malha computacional são apresentadas em maiores detalhes na Tabela 4.

Tabela 4 – Discretização da malha e contagem de células.

	Dimensão (m)	Divisões
Raio	0,05	8
Altura	0,31	61
Total de células		11520

Fonte: elaborado pelo autor.

O número de divisões destacado na Tabela 4 corresponde ao número de células na direção especificada. Quanto à qualidade, a malha apresentou razão de aspecto máxima de

5,45; não-ortogonalidade máxima de 38,80 e média de 7,74; e *skewness* máximo de 0,59, parâmetros considerados como aceitáveis para malhas hexaédricas. As condições iniciais e de contorno da fase fluida são apresentadas na Tabela 5.

Tabela 5 – Condições iniciais e de contorno do fluido.

Condições iniciais		
Pressão manométrica		0
Velocidade (m/s)		0
Condições de contorno		
	Pressão	Velocidade (cm/s)
Parede	Gradiente nulo	Escorregamento
Entrada	Gradiente nulo	3,62; 4,41; 5,09; 5,77 e 6,72
Saída	Manométrica (0)	Gradiente nulo

Fonte: elaborado pelo autor.

A condição de gradiente nulo significa que os valores das faces atribuídas serão extrapolados a partir das células adjacentes na direção normal. A condição de escorregamento foi utilizada nas paredes pois a malha grosseira utilizada no acoplamento CFD-DEM não resolvido não permite que a camada limite laminar nas paredes seja capturada, e forçar essa condição levaria a uma distorção do perfil de velocidades e possivelmente um pico exacerbado na região central do domínio. Os valores de velocidade usados na entrada correspondem às cinco vazões testadas experimentalmente de $3,62 \times 10^{-2}$ m/s, $4,41 \times 10^{-2}$ m/s, $5,09 \times 10^{-2}$ m/s, $5,77 \times 10^{-2}$ m/s e $6,72 \times 10^{-2}$ m/s.

O domínio e a geometria do equipamento para o cálculo da fase sólida foram criados utilizando a ferramenta de geometria padrão do LIGGGHTS. As partículas foram criadas no domínio em posições aleatórias no interior do cilindro antes do início do acoplamento e a simulação prosseguiu por 0,7 s apenas no DEM, tempo suficiente para que as partículas sedimentem e formem o empacotamento inicial do leito. Foram inseridas um total de 172686 partículas, correspondendo a mesma massa de aproximadamente 324 g de partículas de alumina 1 mm de diâmetro e densidade de 3585 kg/m^3 utilizada nos experimentos. A Tabela 6

apresenta as propriedades da fase sólida e das paredes de acrílico inseridas no LIGGGHTS.

Tabela 6 – Propriedades físicas e de interação da fase sólida.

	Alumina	Acrílico	Alum / Alum	Alum / Acril	Acril / Acril
Módulo de Young (GPa)	1	2,8	-	-	-
Razão de Poisson	0,3	0,3	-	-	-
Coefficiente de restituição	-	-	0,95	0,95	0,95
Coefficiente de atrito estático	-	-	0,1	0,3	0,1

Fonte: elaborado pelo autor.

Como as interações partícula-partícula e partícula-parede ocorrem em uma escala de tempo pequena, é necessário que o passo de tempo do DEM seja inferior ao do CFD, com o acoplamento ocorrendo a cada passo de tempo da fase fluida. No caso das simulações do leito, o passo de tempo das partículas foi de 10^{-5} s com o acoplamento ocorrendo a cada 100 passos, ou seja, o passo de tempo do fluido foi de 10^{-3} s, garantindo que o número de Courant se mantivesse abaixo de 0,1, com cada simulação calculada por um tempo total de 10 s. A porosidade média dos últimos 3 segundos de cada simulação foi estimada, já que observou-se experimentalmente que 7 segundos são suficientes para que o leito atinja o regime pseudo-estacionário, e comparada com os dados experimentais. Além disso, a queda de pressão simulada foi comparada com a predita pelo balanço de forças no leito.

Um segundo conjunto de simulações sem a força de lubrificação foi realizado para analisar o efeito da posição inicial das partículas no leito na fluidização. Isso, em conjunto com um teste de hipótese, permite concluir se as diferenças observadas entre as simulações com e sem a força de lubrificação são, de fato, devido à sua inclusão ou se foram causadas pelo empacotamento inicial das partículas.

Por fim, o leito foi simulado utilizando uma solução de glicerol 50% (Tabela 2) como fluido, para velocidades de entrada de $3,62 \times 10^{-2}$, $2,89 \times 10^{-2}$ e $18,1 \times 10^{-2}$ m/s, para avaliar se o efeito da força de lubrificação é mais predominante na fluidização sólido-fluido com líquidos de alta viscosidade. Foram escolhidas velocidades inferiores as utilizadas com água para que

as partículas não fossem arrastadas pelo fluido, já que a viscosidade da solução de glicerol é consideravelmente maior. Os resultados foram comparados com a porosidade prevista pela correlação de Richardson e Zaki (Equação 4), utilizando a velocidade terminal estimada pela correlação de Goossens (2020), válida para $Re_t < 200000$, apresentada na Equação 47.

$$U_t = \frac{[(729 + 3 Ar)^{1/2} - 27] \mu_f}{d_p \rho_f} \quad (47)$$

Em que U_t é a velocidade terminal e Ar o número de Arquimedes, apresentado na Equação 48:

$$Ar = \frac{d_p^3 \rho_f (\rho_s - \rho_f) g}{\mu_f^2} \quad (48)$$

CAPÍTULO 4

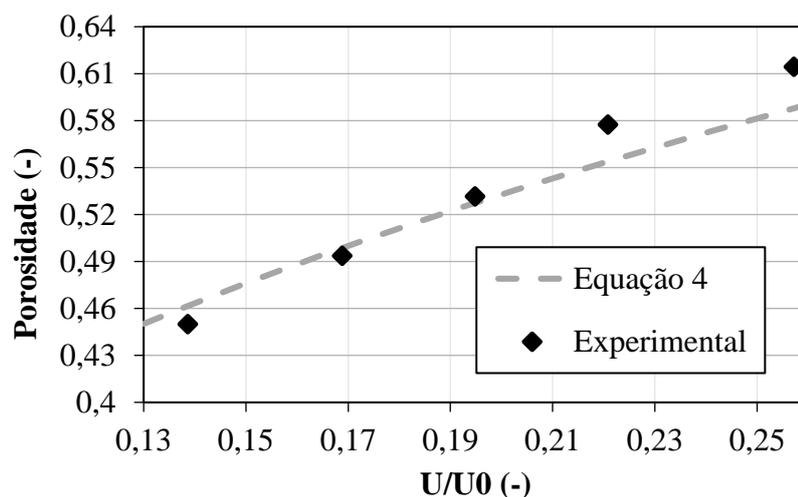
RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados obtidos são apresentados nessa seção, a começar pela validação do modelo de força de lubrificação, seguida pelos dados de fluidização coletados experimentalmente e a subsequente validação da simulação em CFD-DEM do leito fluidizado.

4.1 RESULTADOS EXPERIMENTAIS DE POROSIDADE NO LEITO FLUIDIZADO

A velocidade terminal média das partículas de alumina obtida experimentalmente foi de $0,2614 \pm 0,0082$ m/s. A Figura 8 traz um gráfico comparativo entre a porosidade experimental calculada pela Equação 43, a partir das medidas de altura do leito, e a porosidade prevista pela correlação de Richardson-Zaki (Equação 4), em função da velocidade de entrada adimensionalizada pela velocidade terminal das partículas de alumina. Os dados experimentais coletados apresentaram pouca diferença em relação ao predito pela correlação, sendo o maior desvio de 4,49% para a vazão de 7,92 L/min.

Figura 8 – Porosidade em função da velocidade adimensional



Fonte: Elaborado pelo autor.

A queda de pressão no leito experimental não foi medida, mas pode ser estimada reescrevendo-se a Equação 3 em termos da massa de partículas, conforme apresentado na

Equação 49:

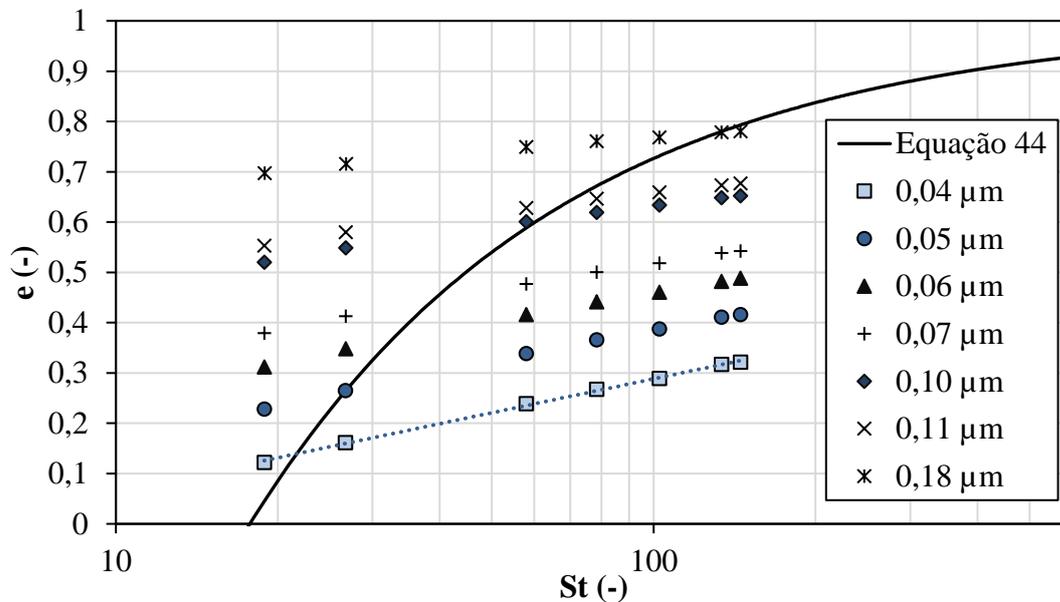
$$-\Delta p = \frac{M_p (\rho_p - \rho_f) g}{\rho_p \pi R^2} \quad (49)$$

em que M_p corresponde à massa de partículas no leito, resultando em uma queda de pressão estimada de 1170,31 Pa.

4.2 VALIDAÇÃO DO MODELO DA FORÇA DE LUBRIFICAÇÃO A PARTIR DA COLISÃO DE PARTÍCULAS

A Figura 9 traz os resultados do coeficiente de restituição simulado em função do número de Stokes da primeira etapa de simulações usando a implementação da força de lubrificação baseada na Equação 42, utilizando valores fixos de α para colisões imersas em uma solução de glicerol 74% em massa.

Figura 9 – Coeficiente de restituição simulado em função do número de Stokes de impacto para diferentes valores de α .



Fonte: Elaborado pelo autor.

É possível observar que essa primeira implementação produziu resultados distantes dos previstos pela correlação da Equação 44, indicando que essa abordagem não é suficiente para capturar os efeitos dissipativos do fluido em colisões, ao contrário do que foi apresentado no trabalho de Campos *et al.* (2021). Por outro lado, a implementação foi capaz de produzir coeficientes de restituição simulados que aumentam com o número de Stokes de impacto, comportamento observado experimentalmente em Joseph (2003). Além disso, é possível inferir que para cada conjunto de pontos de um mesmo α , existe um valor de Stokes que faz com que o coeficiente simulado coincida com a curva da correlação (Equação 44), que pode ser calculado a partir de um ajuste logarítmico de cada conjunto de pontos, como exemplificado pela linha tracejada na Figura 9. A Tabela 7 apresenta as equações ajustadas para cada conjunto de pontos:

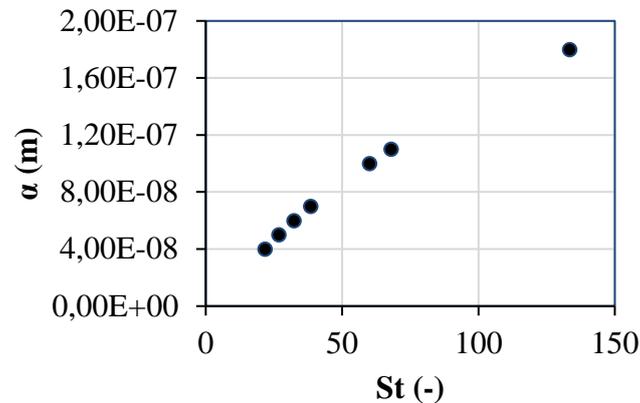
Tabela 7: Funções de e por St ajustadas.

α (m)	Ajuste	R^2	Interseção
$4,00 \times 10^{-8}$	$e = 0,0972 \ln(St) - 0,1596$	0,99	$St = 21,70$
$5,00 \times 10^{-8}$	$e = 0,0920 \ln(St) - 0,0384$	0,99	$St = 26,72$
$6,00 \times 10^{-8}$	$e = 0,0855 \ln(St) + 0,0649$	0,99	$St = 32,28$
$7,00 \times 10^{-8}$	$e = 0,0796 \ln(St) + 0,1494$	0,99	$St = 38,45$
$1,00 \times 10^{-7}$	$e = 0,0640 \ln(St) + 0,3366$	0,99	$St = 60,05$
$1,10 \times 10^{-7}$	$e = 0,0602 \ln(St) + 0,3804$	0,99	$St = 67,89$
$1,80 \times 10^{-7}$	$e = 0,0407 \ln(St) + 0,5806$	0,99	$St = 133,43$

Fonte: Elaborado pelo autor.

Os resultados da Tabela 7 foram então plotados na forma de α em função do número de Stokes de impacto (Equação 35), conforme apresentado na Figura 10.

Figura 10 – Gráfico de α em função do número de Stokes.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Pelo gráfico da Figura 10 nota-se que há uma relação aproximadamente linear entre o valor ideal de α e a velocidade de impacto correspondente. O ajuste linear dos pontos resultou na Equação 50, válida para o intervalo de St de 21 a 133:

$$\alpha(St) = 1 \times 10^{-9}St + 2 \times 10^{-8} \quad (50)$$

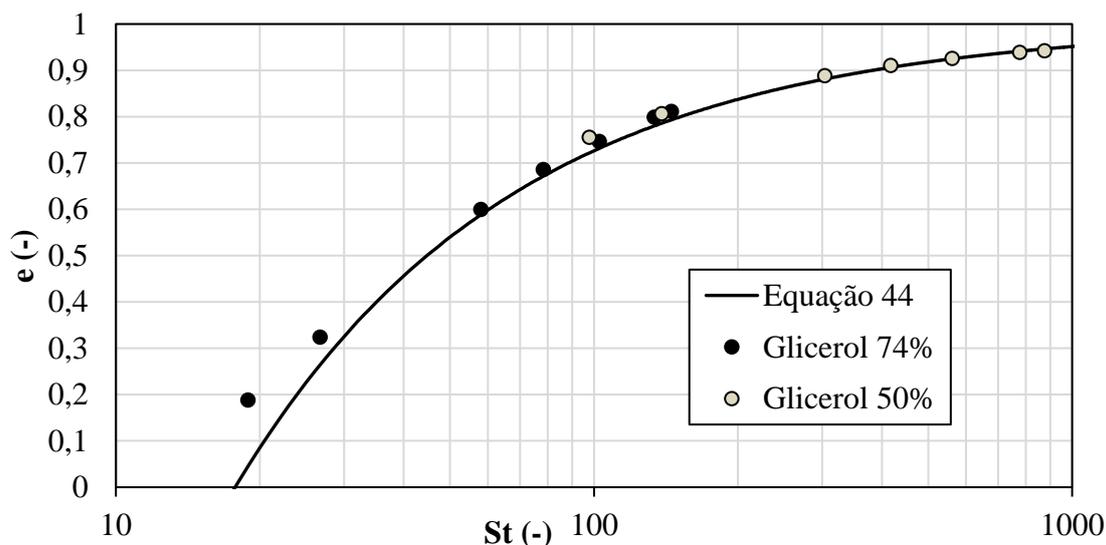
em que a unidade de α é metros. O coeficiente de determinação do ajuste foi igual a 0,99. O modelo de lubrificação foi reimplementado da seguinte maneira:

$$\mathbf{F}_{lub} = -\frac{3 \pi \mu_f \alpha^2 \mathbf{U}_p}{h} \begin{cases} h = h, & h > 0 \\ h = \alpha(St), & h \leq 0 \end{cases} \quad (51)$$

ou seja, na situação de contato ($d_{i,j} \leq 0$) a distância entre as partículas (h) será igual ao último valor de α calculado imediatamente antes da colisão pela Equação 50. Na prática, quando o código identifica que duas partículas são “vizinhas”, o valor de α passa a ser calculado em todos os passos de tempo e salvo como um parâmetro de interação persistente, até que ocorra a colisão. Essa implementação pode incorrer em um aumento no custo computacional, já que o código precisa alimentar uma matriz de interações entre cada par de partículas e buscar o valor de α referente ao par cuja interação está sendo calculada, além de aumentar a quantidade

de pares de vizinhos já que agora interações de não contato também são consideradas. Os resultados dos testes de validação realizados após a implementação do modelo da Equação 51 são apresentados na Figura 11. As simulações foram refeitas também para valores de St de impacto fora do intervalo usado para o desenvolvimento da Equação 50.

Figura 11 - Coeficiente de restituição simulado em função do número de Stokes de impacto.



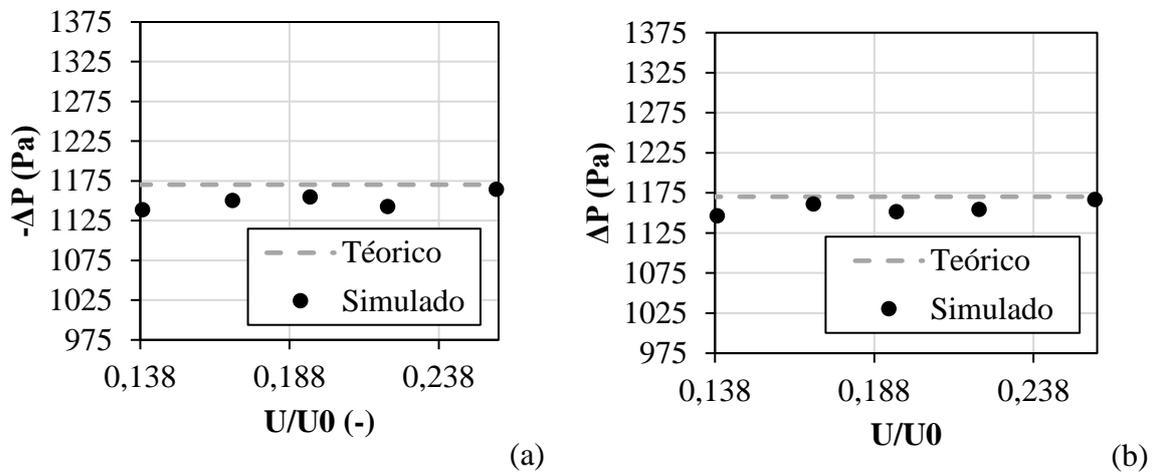
Fonte: Elaborado pelo autor.

A introdução da Equação 50 no modelo de lubrificação não-resolvido produziu resultados próximos aos previstos pela correlação da Equação 44, mesmo para casos em que o St de impacto ultrapassa o limite do intervalo utilizado no desenvolvimento da Equação 50. Logo, os resultados obtidos nas duas etapas de testes validaram a Equação 50 como uma forma de modelar os efeitos da força de lubrificação em simulações CFD-DEM.

4.3 APLICAÇÃO DO MODELO DE FORÇA DE LUBRIFICAÇÃO NA SIMULAÇÃO DE UM LEITO FLUIDIZADO

A Figura 12 apresenta a queda de pressão simulada em um leito fluidizado para os casos com e sem a força de lubrificação:

Figura 12 – Queda de pressão simulada sem (a) e com (b) a força de lubrificação, juntamente com o valor teórico obtido pela Equação 49.

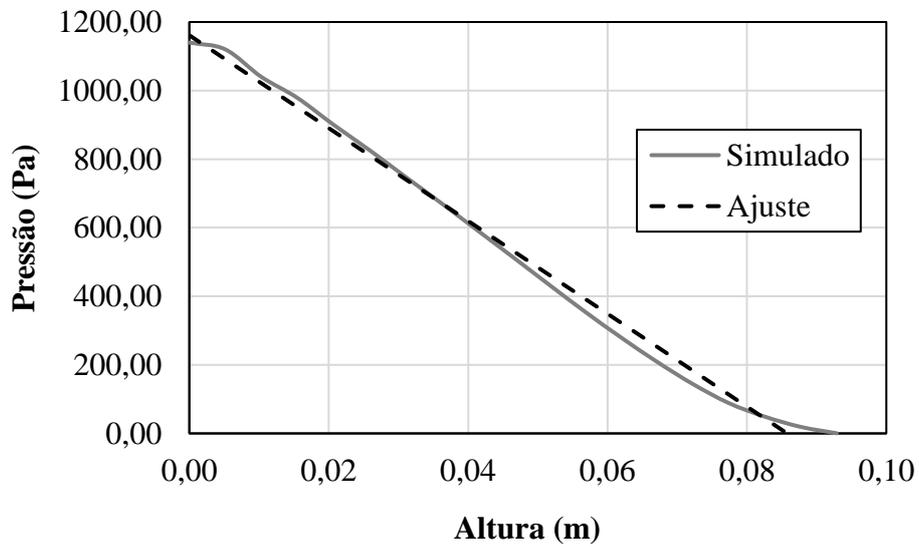


Fonte: Elaborado pelo autor

Ambos os casos resultaram em quedas de pressão simuladas abaixo, porém próximas da prevista pela Equação 49. Os erros médios foram de 1,72% e 1,21% para as simulações sem e com a força de lubrificação, respectivamente. Os resultados demonstram que a modelagem CFD-DEM é capaz de prever com boa exatidão a queda de pressão provocada pela fricção do fluido com a massa de partículas. Como a força de lubrificação não altera a massa dos sólidos, mas sim sua distribuição no leito ao agir como uma força dissipativa em colisões, é intuitivo que sua inclusão não deveria produzir impacto significativo na redução de pressão no leito, o que foi observado nas simulações.

Por outro lado, a força de lubrificação pode afetar a expansão e distribuição das partículas. Por agir como uma força coesiva após a colisão entre as partículas, é possível que sua inclusão leve à formação de aglomerados, reduzindo, desta forma, a porosidade local nas células. A porosidade simulada foi estimada pela manipulação da Equação 3. O termo $\Delta p/L$ é uma constante já que o perfil de pressão ao longo da altura é linear, e pode ser estimado pelo coeficiente angular do gráfico de pressão por altura. A Figura 13 traz um exemplo do perfil de pressão manométrica médio para os últimos 3 segundos simulados para a vazão de 4,27 L/min.

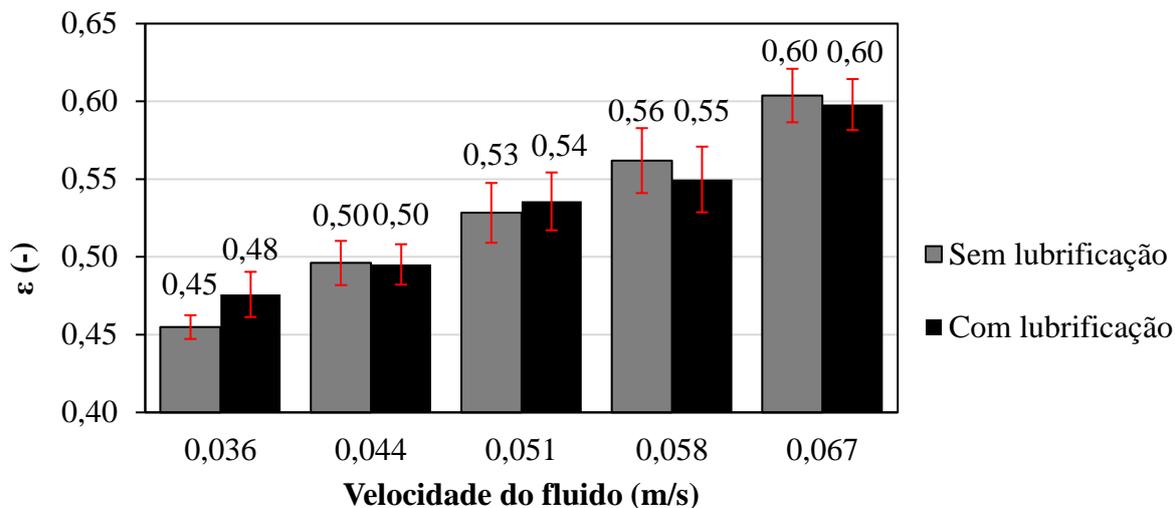
Figura 13 – Perfil de pressão simulado ao longo da direção axial do leito para uma vazão de 4,27 L/min.



Fonte: Elaborado pelo autor.

O ajuste resultou em um valor de $\Delta p/L$ de -13539,83 Pa/m, com coeficiente de determinação de 0,99. Os valores de porosidade média dos últimos 3 segundos simulados, calculados por esse método para os casos com e sem a força de lubrificação, são apresentados na Figura 14.

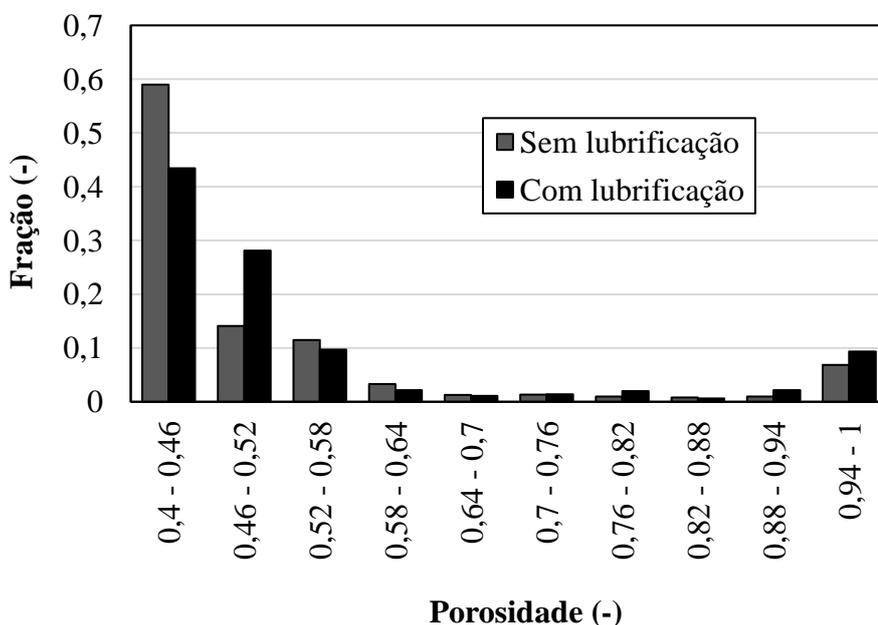
Figura 14 – Porosidade simulada para fluidização em água.



Fonte: Elaborado pelo autor.

As barras de erro representam um desvio padrão para mais e para menos. Em uma primeira análise, não há como afirmar que houve diferença significativa na porosidade simulada para as velocidades de 0,044 a 0,067, especialmente levando em consideração os desvios padrão obtidos. Já para a vazão mais baixa de 4,27 L/min (0,036 m/s), a diferença foi relativamente mais pronunciada e com sobreposição parcial dos desvios padrão, indicando que possivelmente a inclusão da força de lubrificação de fato afetou a porosidade do leito de partículas. Isso fica mais evidente na Figura 15, que traz um histograma normalizado da porosidade média das células da malha nos últimos 3s de simulação, para a vazão de 4,27 (0,036 m/s).

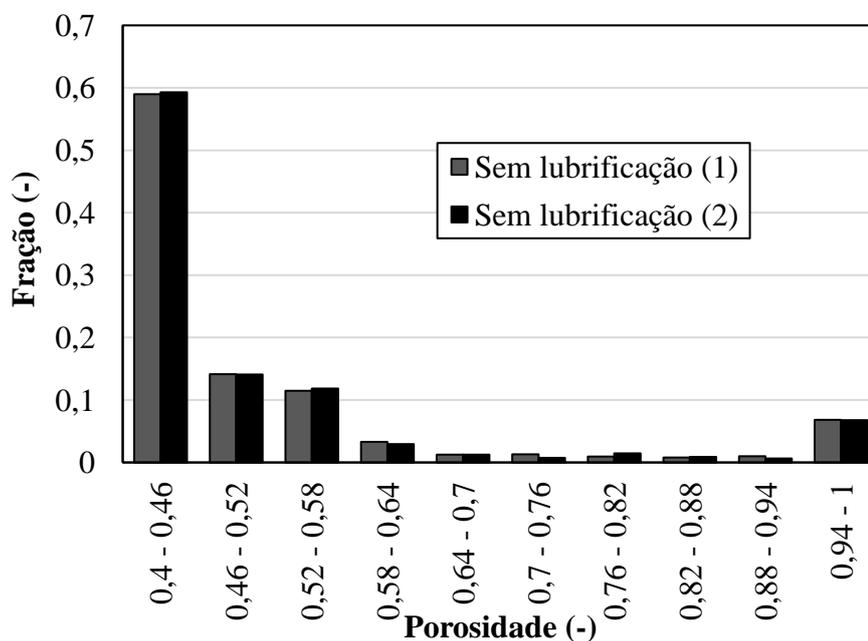
Figura 15 – Histograma comparativo normalizado da porosidade média das células para a vazão de 4,27 L/min, para os casos com e sem a força de lubrificação.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Pelos resultados da Figura 15, a distribuição de porosidade das células da malha apresentou diferença significativa com a inclusão da força de lubrificação, evidenciando que sua inclusão provocou efeito observável na dinâmica do leito. Especificamente, houve uma redução de 15% na contagem de células com porosidade entre 0,40 e 0,46, que foi compensada com um aumento de também aproximadamente 15% no grupo seguinte, de porosidade de 0,46 a 0,52. Essa diferença, no entanto, pode ser apenas resultado do método de solução numérica, dada que a posição inicial das partículas foi diferente entre as duas simulações, uma vez que as partículas são criadas em posições aleatórias em cada simulação. Para garantir que esse não foi o caso, a Figura 16 traz a mesma comparação, porém, dessa vez, entre duas simulações sem a força de lubrificação, mas com empacotamentos iniciais diferentes.

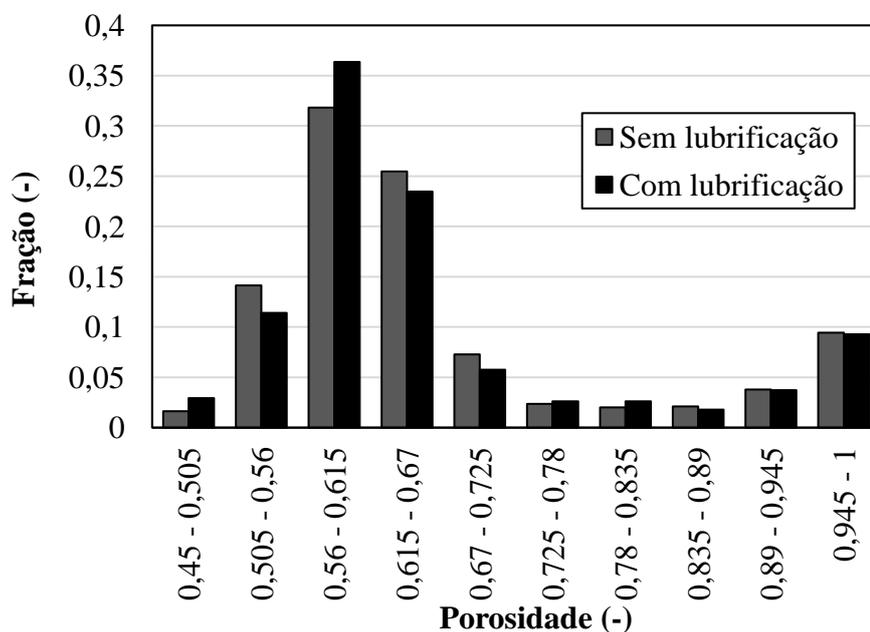
Figura 16 – Histograma comparativo normalizado da porosidade média nas células para a vazão de 4,27 L/min, sem a força de lubrificação e com diferentes empacotamentos iniciais.



Fonte: Elaborado pelo autor.

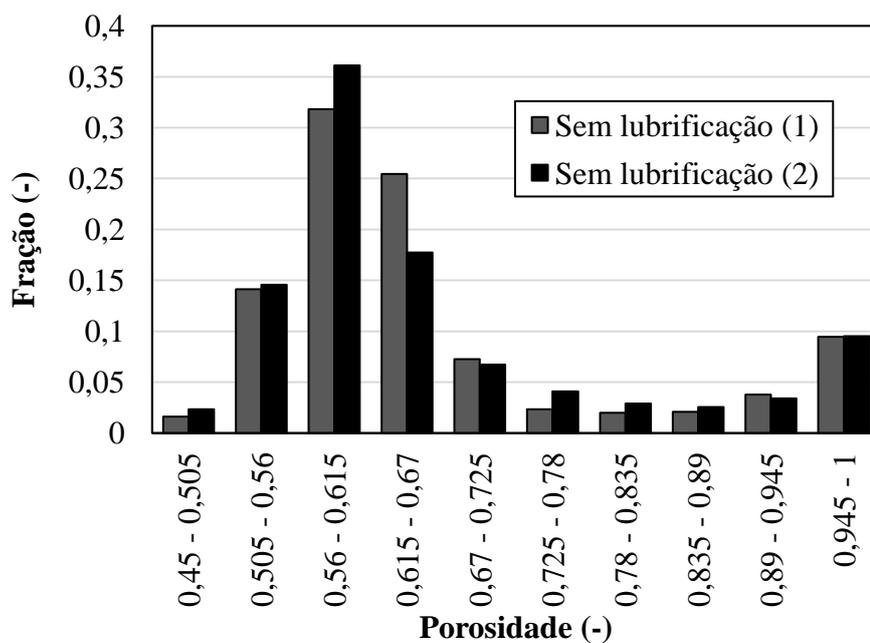
A Figura 16 mostra que não houve diferenças significativas entre os dois casos, o que indica que mudanças no arranjo inicial do leito de partículas não são suficientes para produzir as diferenças observadas entre as duas simulações da Figura 15. Conclui-se, então, que é possível que a força de lubrificação tenha sido responsável pelo aumento da porosidade média do leito, bem como por modificar a distribuição de porosidade nas células da malha numérica. A mesma comparação foi feita para a vazão de 7,92 L/min (0,067 m/s), apresentada nas Figuras 17 e 18.

Figura 17 – Histograma comparativo normalizado da porosidade média nas células para a vazão de 7,92 L/min, para os casos com e sem a força de lubrificação.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 18 – Histograma comparativo normalizado da porosidade média das células para a vazão de 7,92 L/min, sem a força de lubrificação.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Ao contrário dos resultados com a vazão de 4,27 L/min, a Figura 18 indica que as diferenças na distribuição de porosidade para os casos com e sem a força de lubrificação, observadas na Figura 17, são muito provavelmente resultado de diferenças na solução numérica da fluidização provocados pela configuração inicial do leito de partículas, e não pela ação da força de lubrificação. Esse resultado é coerente com o esperado, já que, conforme evidenciado pela Equação 44, a ação dissipativa da força de lubrificação aumenta conforme o número de Stokes de impacto diminui, ou seja, quanto menor a velocidade do fluido no leito, maior será a influência da força de lubrificação. A significância estatística das diferenças entre as porosidades apresentadas na Figura 14 foi verificada através de um teste t bicaudal para populações homocedásticas, cujos resultados são apresentados na Tabela 8.

Tabela 8 – Resultados do teste t para fluidização em água.

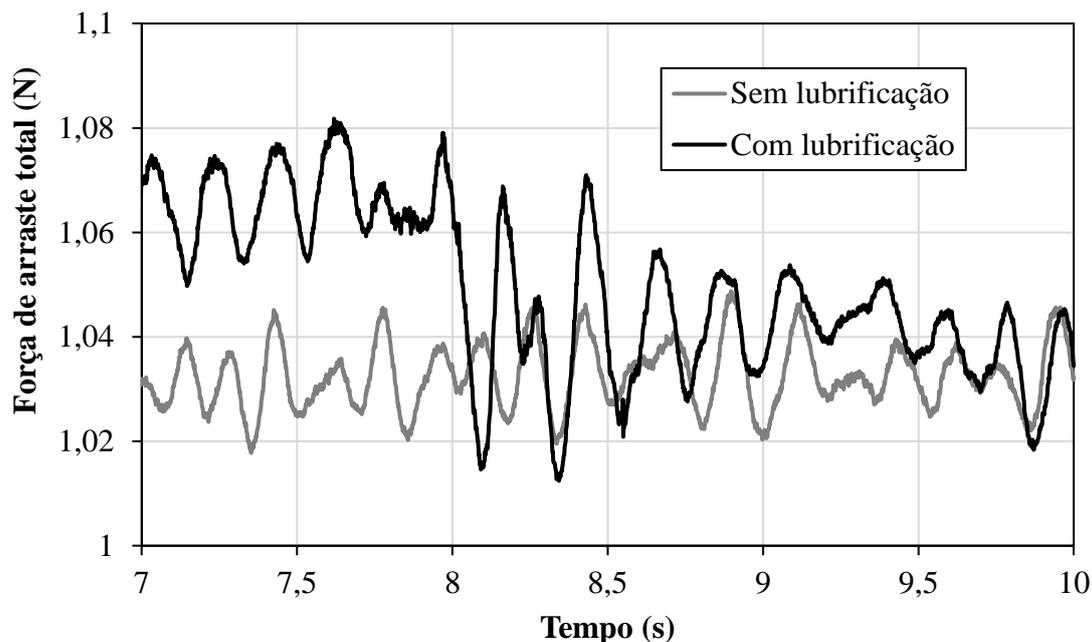
Velocidade (m/s)					
	0,036	0,044	0,051	0,058	0,067
$t(29)$	-6,892	0,258	-1,486	2,199	1,315
$p(0,025)$	$4,453 \times 10^{-9}$	0,798	0,143	0,032	0,194

Fonte: Elaborado pelo autor.

Para um intervalo de confiança de 95% bicaudal, o valor $p(0,025)$ representa a probabilidade dos dois conjuntos de dados (com e sem a força de lubrificação) serem diferentes apenas por coincidência. Para que a hipótese nula de que as simulações são iguais seja rejeitada, o valor de $p(0,025)$ deve ser inferior a 0,025. Os resultados mostram que a hipótese nula não foi rejeitada para as velocidades de 0,044 a 0,067 m/s, isto é, não existem evidências suficientes de que as porosidades médias com e sem a força de lubrificação nesses casos são diferentes. Já para a velocidade de 0,036, o valor de t foi alto o suficiente para que a hipótese nula fosse rejeitada, o que significa que, para um intervalo de confiança de 95%, pode-se afirmar que a inclusão da força alterou a porosidade do leito de forma estatisticamente significativa. Além disso, o sinal negativo do valor $t(29)$ indica que a porosidade com a força de lubrificação (0,476) foi maior que a porosidade sem a força de lubrificação (0,455). É possível que a ação dissipativa e coesiva da lubrificação tenha resultado na formação de aglomerados de partículas, reduzindo a porosidade das células nessas regiões. Pela Equação 10, o termo de correção para escoamentos concentrados da força de arraste é inversamente proporcional à porosidade da célula, e, portanto, a formação desses aglomerados pode ter sido

responsável por aumentar a força de arraste e a expansão do leito de partículas. A Figura 19 traz a força de arraste total que age sobre o leito de partículas ao longo dos últimos três segundos de simulação, para os casos com e sem a força de lubrificação.

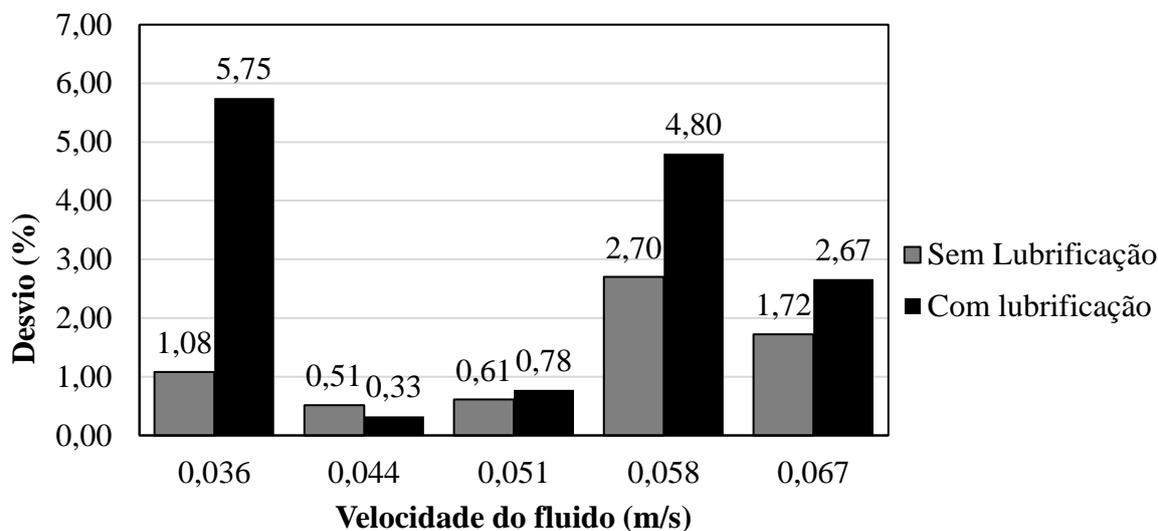
Figura 19 – Força de arraste total ao longo do tempo para as simulações com e sem a força de lubrificação para a velocidade de 0,036 m/s.



Fonte: Elaborado pelo autor.

A partir da Figura 19 é possível concluir que a inclusão da força de lubrificação resultou em um aumento na força de arraste, reforçando a hipótese da formação de aglomerados de partículas. As forças de arraste totais médias para os últimos três segundos de simulação foram de 1,033 e 1,049 N, para os casos sem e com a força de lubrificação, respectivamente. Esse comportamento é possivelmente um resultado da discretização grosseira utilizada em simulações não-resolvidas, em que a formação de aglomerados afeta a distribuição de porosidade local, resultando no aumento da força de arraste nessas células, e, conseqüentemente, em um aumento na expansão do leito. A Figura 20 apresenta o desvio das porosidades simuladas em relação aos resultados experimentais.

Figura 20 – Desvio da porosidade simulada em relação as medidas experimentais para os casos com e sem a força de lubrificação.

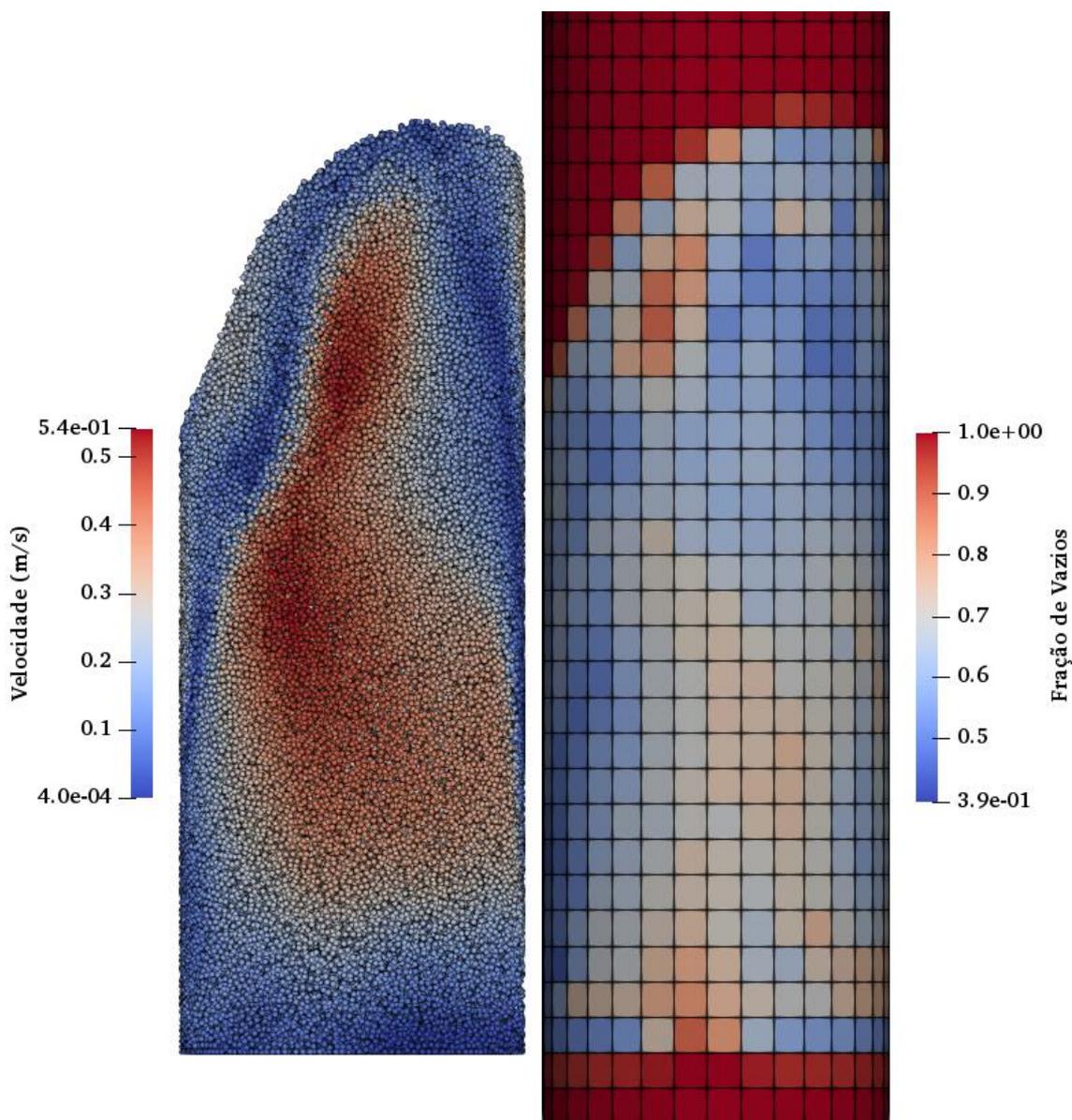


Fonte: Elaborado pelo autor.

O desvio máximo observado para a porosidade foi de 5,75% com o modelo da força de lubrificação, e 2,70% sem o modelo, reforçando o potencial da abordagem CFD-DEM como ferramenta para auxiliar no projeto de leitos fluidizados sólido-líquido. Conforme mencionado anteriormente, a inclusão da força de lubrificação não produziu efeito significativo na fluidização para as velocidades de 0,044 m/s a 0,067 m/s. Já para a velocidade de 0,036 m/s, o aumento da expansão do leito provocado pela força de lubrificação resultou em um maior desvio em relação aos dados experimentais. Isso indica que a inclusão da força de lubrificação provavelmente não é necessária para simular esse sistema com boa exatidão.

Embora os resultados numéricos tenham apresentado boa concordância com os experimentos, todas as simulações do leito apresentaram a formação de caminhos preferenciais, resultando em regiões de alta velocidade nas paredes, fenômeno que não foi observado experimentalmente. A Figura 21 traz uma visualização do leito simulado em conjunto com a fração de vazios da malha para a velocidade de 0,067 m/s, após 8 segundos de simulação.

Figura 21 – Visualização instantânea das velocidades das partículas, bem como da porosidade das células da malha para a velocidade de 0,067 m/s.



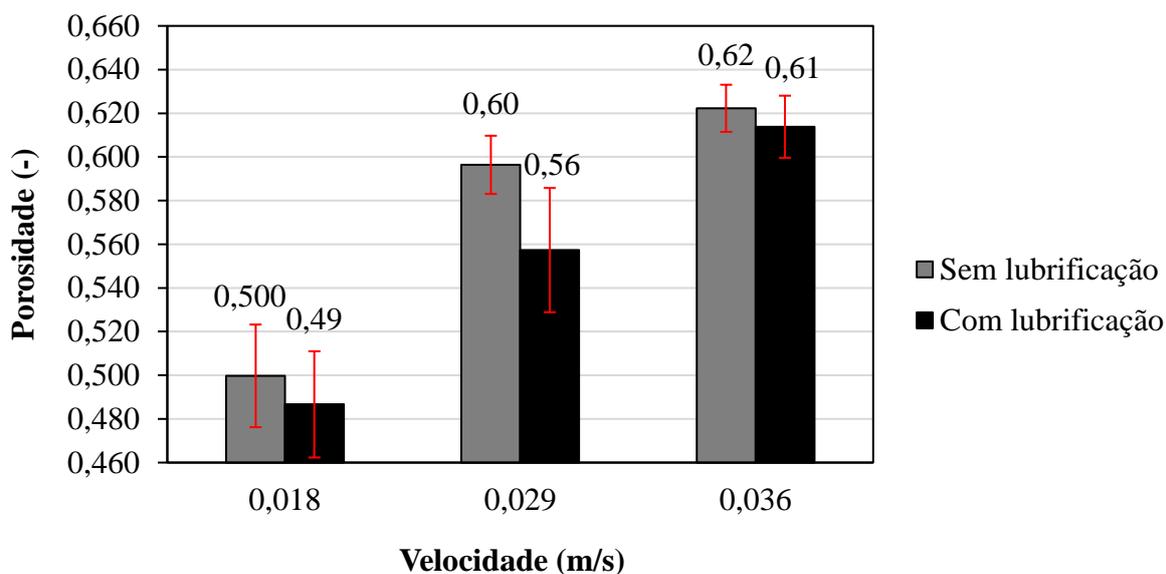
Fonte: Elaborado pelo autor.

A Figura 21 ilustra a formação de um caminho preferencial na região de parede, efeito observado em todas as simulações, com ou sem a força de lubrificação. Esse efeito é produto da modelagem CFD-DEM não-resolvida, e é causado principalmente pela fração de vazios. A parede do leito impede que as partículas se aglomerem nas faces dessa região, impossibilitando a ocorrência de arranjos compactos nessas regiões. Isso resulta em maiores porosidades nas regiões de parede, e, conseqüentemente, maiores velocidades do fluido, já que a resistência ao

escoamento é menor e a condição de não escorregamento nas paredes não foi empregada. Não há uma solução óbvia e de simples implementação que possa suavizar esse comportamento.

A Figura 22 apresenta os resultados da porosidade média dos últimos três segundos de simulação para os leitos fluidizados com a solução de glicerol 50% em massa.

Figura 22 – Porosidade simulada para fluidização em uma solução de glicerol 50% em massa.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Em ambos os casos, a inclusão da força de lubrificação resultou em uma redução na porosidade média simulada: de 0,596 para 0,557, para a velocidade de 0,029 m/s; e de 0,622 para 0,614, para a velocidade de 0,036 m/s. Novamente, para confirmar que houve uma diferença estatisticamente significativa entre cada caso, foi realizado um teste *t* para populações independentes, cujos resultados são apresentados na Tabela 9.

Tabela 9 – Resultados do teste t para fluidização com solução de glicerol 50%.

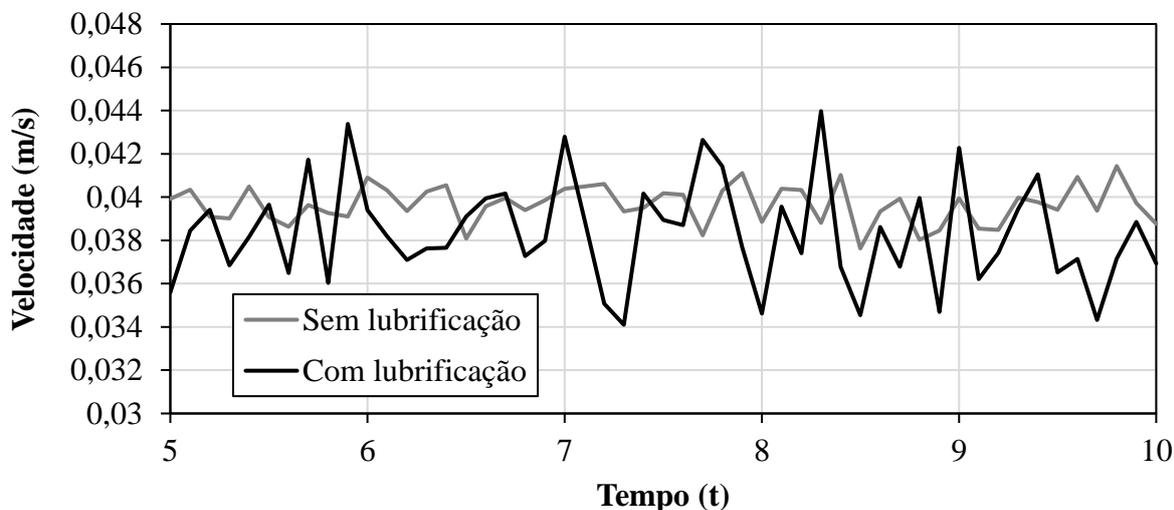
	Velocidade (m/s)		
	0,018	0,029	0,036
t(29)	2,08	6,693	2,550
p(0,025)	0,041	$9,590 \times 10^{-9}$	0,013

Fonte: Elaborado pelo autor.

Os resultados mostram que, para um nível de significância de 5%, as porosidades médias com e sem a inclusão da força de lubrificação foram estatisticamente diferentes para as três velocidades testadas, e menores nos casos com a força de lubrificação. Para a velocidade de 0,029 m/s, houve uma redução de 6,55%, superior a observada para a velocidade de 0,036 m/s de 1,36%. Isso é coerente com o observado nos resultados da Figura 11 por exemplo, em que a dissipação de energia nas colisões por conta da força de lubrificação aumenta com a redução da velocidade de impacto.

Com o aumento da viscosidade do fluido, o efeito observado na porosidade com a inclusão da força de lubrificação foi o oposto do observado na fluidização em água, em que a expansão do leito foi maior. Nesse caso, é possível que, embora ainda ocorra a formação de aglomerados de partículas, a dissipação de energia em colisões é significativa o suficiente a ponto de desacelerar o leito de partículas, reduzindo a porosidade. Um efeito secundário observado nas simulações foi um aumento na oscilação da velocidade média do fluido no leito com a inclusão da força de lubrificação, como pode ser observado na Figura 23.

Figura 23 – Velocidade média do fluido no leito de partículas para os últimos 5 segundos simulados com a solução de glicerol 50%.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Uma possível explicação para esse fenômeno está na dissipação de energia provocada pela força de lubrificação. Os picos e vales no gráfico correspondem aos movimentos de ascensão e descida das partículas, respectivamente, e, devido à perda energética por conta da força de lubrificação, a velocidade relativa entre as fases ao final do movimento de descida é maior, e, conseqüentemente, a força de arraste também. O fluido, portanto, transfere mais energia para a fase sólida resultando em uma redução em sua velocidade, enquanto as partículas ficam sob ação de maior força de arraste durante os próximos passos de integração, até que ocorra o acoplamento novamente e um novo arraste seja calculado. Esse conjunto de fatores faz com que as partículas atinjam velocidades maiores, reduzindo a força de arraste e aumentando os picos de velocidade, até que o processo se inicia de novo ao final da descida. É possível que um aumento na frequência de acoplamento, através da redução do passo de tempo da fase fluida suavize ou elimine esse comportamento. A Tabela 10 traz um comparativo entre as porosidades simuladas e as previstas pela correlação da Equação 4.

Tabela 10: Comparativo entre as porosidades simuladas e a porosidade prevista pela Equação 4 para a fluidização com solução de glicerol 50%.

Velocidade (m/s)	Porosidade (-)			Erro relativo (-)	
	Sem lubrificação	Com lubrificação	Equação 4	Sem lubrificação	Com lubrificação
0,018	0,500	0,487	0,407	22,93%	19,71%
0,029	0,596	0,557	0,495	19,71%	12,65%
0,036	0,622	0,614	0,541	20,04%	17,96%

Os valores de porosidade são uma média temporal do últimos 3 segundos de simulação. Ao contrário das simulações da fluidização em água, o uso de um fluido de maior viscosidade resultou em desvios consideráveis de porosidade. É possível que o uso de duas correlações diferentes, uma para a velocidade terminal da partícula, e outra para a porosidade, tenham contribuído para os desvios observados. Os resultados, porém, podem ser indicativos de que a modelagem do leito em CFD-DEM não-resolvido não tenha sido capaz de reproduzir outros efeitos dissipativos que se tornam prevalentes com o aumento da viscosidade do fluido, principalmente os causados por forças chamadas de não estacionárias, como a força de Basset, causada pelo retardamento no desenvolvimento da camada limite ao longo da trajetória da partícula. No trabalho de Vojir e Michaelides (1994), os autores estudaram o efeito dessa força na velocidade de partículas em diferentes condições de escoamento, chegando à conclusão de que seu efeito dissipativo não pode ser descartado em situações em que as partículas estão sob constante mudança de direção. Apesar disso, a inclusão da força de lubrificação reduziu o erro relativo nas duas velocidades testadas, indicando que, no caso de escoamentos com fluidos de alta viscosidade, sua inclusão pode levar a resultados mais exatos.

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES

No presente trabalho, a aplicação da modelagem CFD-DEM na simulação e predição de um leito fluidizado sólido-líquido foi avaliada e comparada a dados experimentais, e um modelo de força de lubrificação não-resolvido foi desenvolvido e implementado nas simulações.

O modelo comumente utilizado para a força de lubrificação em acoplamentos CFD-DEM não-resolvidos foi analisado numericamente e comparado com dados experimentais da literatura. Os resultados demonstraram que o uso de um valor fixo para o limite inferior de distância não é suficiente para capturar os efeitos dissipativos do fluido intersticial, resultando em valores de restituição incoerentes com os previstos. O novo modelo desenvolvido a partir dos resultados anteriores utiliza o número de Stokes no momento de impacto para calcular, dinamicamente, o parâmetro de distância mínima, e foi validado com sucesso.

Foi verificado que a modelagem CFD-DEM não-resolvida é capaz de prever com boa exatidão a dinâmica de um leito fluidizado sólido-líquido. Nos primeiros testes em que a força de lubrificação não foi incluída, foram obtidos desvios máximos de 2,69% para a queda de pressão e 2,70% para a porosidade em relação aos dados experimentais, comprovando a aplicabilidade desse tipo de acoplamento no projeto de leitos fluidizados.

A inclusão da força de lubrificação produziu resultados similares de queda de pressão, sendo o desvio máximo obtido de 2,03%. Para as velocidades de entrada do fluido de 0,044 até 0,067 m/s, não houve diferença significativa entre as porosidades simuladas com e sem a força de lubrificação, sendo o único par de simulações estatisticamente diferente o que utilizou a menor velocidade de entrada, igual a 0,036 m/s. Nesse caso, a inclusão da força de lubrificação resultou em um aumento da expansão e da porosidade do leito de partículas, possivelmente por conta da formação de aglomerados. A força de arraste total no leito também foi maior na simulação com a força de lubrificação, reforçando a hipótese da formação de aglomerados de partículas. Dada a proximidade dos resultados numéricos e experimentais, o modelo CFD-DEM do leito foi validado com sucesso e pode ser utilizado em trabalhos futuros para o projeto e desenvolvimento de equipamentos similares.

Embora a força de lubrificação tenha alterado a expansão do leito para a velocidade mais baixa, sua inclusão resultou em um maior desvio em relação à porosidade medida experimentalmente, saltando de 1,08% para 5,75%. Isso indica que a viscosidade da água não é alta o suficiente para que a força de lubrificação seja necessária para prever a dinâmica do leito.

Todas as simulações do leito fluidizado apresentaram a formação de caminhos preferenciais. Trata-se de uma consequência da discretização do domínio para a fase fluida utilizada na modelagem não-resolvida, e não há uma solução aparente para esse comportamento. Apesar desse fenômeno não ter sido observado experimentalmente, os resultados importantes para o projeto de um leito fluidizado, como a porosidade e expansão do leito, não foram afetados nas simulações.

Nas simulações de fluidização com uma solução de glicerol 50%, o efeito da força de lubrificação foi oposto ao observado em água. A ação dissipativa da força foi grande o suficiente para que houvesse redução significativa da expansão do leito, aproximando os resultados de porosidade dos previstos pela correlação empírica. No entanto, os desvios obtidos foram altos o suficiente para colocar em dúvida a aplicabilidade do CFD-DEM não-resolvido na predição da dinâmica de leitos fluidizados líquidos com fluidos viscosos. Dados experimentais de fluidização em soluções de glicerol devem ser coletados, para garantir que os desvios observados nessa etapa não tenham sido causados pelo uso de correlações empíricas. Além disso, cabem novos estudos a respeito de forças viscosas que costumam serem ignoradas, como a de Basset, por exemplo.

REFERÊNCIAS

- ANDERSON, T. B.; JACKSON, R. **Fluid mechanical description of fluidized beds: equations of motion.** Ind. Eng. Chem. Fundamen., Vol. 6, 1967. 527 – 539.
- AKRAM, C.; TAN, C. K.; GARWOOD, R.; THAI, S. M. **Vinasse – a potential biofuel - Cofiring with coal in a fluidized combustor.** Fuel, Vol. 158, 2015. 1006 – 1015.
- BEETSTRA, R.; VAN DER HOEF, M., A.; KUIPERS J. A. M. **Drag force of intermediate Reynolds number flow past mono and bidisperse arrays of spheres.** AIChE Journal, Vol. 53, 2007. 488 – 501.
- 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, 2016. 201-221.
- CAMPOS, J. P. F.; MELO, K. R. B.; LOPES, G. C. **Implementation, validation and application of a lubrication force model in CFD-DEM simulations.** Brazilian Journal of Chemical Engineering, Vol. 39, 2022. 429 – 440.
- CHEN, X.; WANG, J. **A comparison of two-fluid model, dense discrete particle model and CFD-DEM method for modeling impinging gas-solid flows.** Powder Technol., Vol. 254, 2014. 94 – 102.
- CHEN, T.; KU, X.; LIN, J.; STRÖM, H. **CFD-DEM simulation of biomass pyrolysis in fluidized-bed reactor with a multistep kinetic scheme.** Energies, Vol. 13, 2020.
- CROWE, C. T.; SCHWARZKOPF, J. D.; SOMMERFELD, M.; TSUJI, Y. **Multiphase flows with droplets and particles.** Boca Raton: CRC Press, 2012.
- CUNDALL, P. A.; STRACK, O. D. L. **A discrete numerical model for granular assemblies.** Géotechnique, Vol. 29, No. 1, 1979. 47 – 65.
- DALLAVALLE, J. M. **Micromeritics: the technology of fine particles.** New York: Pitman Pub. Corp., 1943.
- DAVIS, R. H.; SERAYSSOL, J.; HINCH, E. J. **The elastohydrodynamic collision of two**

spheres. J. Fluid Mech., Vol. 163, 1986. 479 – 497.

DIFELICE, R. **The voidage function for fluid-particle interaction systems.** International Journal of Multiphase Flow, Vol. 20, 1994. 153 – 159.

EPSTEIN, N. Liquid – solids fluidization. In: YANG, W. C. **Fluidization and fluid-particle systems.** New York: Marcel Dekker Inc., 2003, 26, 706-765.

GABARDO, S.; RECH, R.; AYUB, M. A. Z. **Performance of different immobilized-cell systems to efficiently produce ethanol from whey: fluidized batch, packed-bed and fluidized continuous bioreactors.** J. Chem. Technol. Biotechnol, Vol. 87, No. 8, 2012. 1194 – 1201.

GIBSON, I. *et al.* **The continuous combustion of glycerol in a fluidized bed.** Combust. Flame, Vol. 200, 2019. 60 – 68.

GONDRET, P.; LANCE, M.; PETIT, L. **Bouncing motion of spherical particles in fluids.** Physics of Fluids, Vol. 14, 2002. 643 – 652.

GONIVA, C. *et al.* **Influence of rolling friction on single spout fluidized bed simulation.** Particuology, Vol. 10, 2012. 582 – 591.

GOOSSENS, W. R. A. **A new explicit equation for the terminal velocity of a settling sphere.** Powder Technology, Vol. 362, 2020. 54 – 56.

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

LAMBERT, B.; WEYANS, L.; BERGMANN, M. **Local lubrication model for spherical particles within compressible Navier-Stokes flows.** Physical Review, Vol. 97, 2018.

LIU, G. *et al.* **CFD-DEM simulation of liquid-solid fluidized bed with dynamic restitution coefficient.** Powder Technol., Vol 304, 2016. 186 – 197.

MINDLIN, R. D.; DERESIEWICZ, H. **Elastic spheres in contact under varying oblique forces.** Journal of Applied Mechanics, Vol. 20, 1953. 327 – 344.

KIM, J. *et al.* **Anaerobic fluidized bed membrane bioreactor for wastewater treatment.** Environ. Sci. Technol., Vol. 45, 2011. 576 – 581.

KU, X.; LI, T.; Løvås, T. **CFD-DEM simulation of biomass gasification with steam in a fluidized bed reactor.** Chem. Eng. Sci., Vol. 122, 2015. 270 – 283.

OSTERMEIER, P. *et al.* **Comprehensive investigation and comparison of TFM, DenseDPM and CFD-DEM for dense fluidized beds.** Chem. Eng. Sci., Vol. 196, 2019. 291 – 309.

PENG, Z.; DOROODCHI, E.; LUO, C.; MOGHTADERI, B. **Influence of void fraction calculation on fidelity of CFD-DEM simulation of gas solid bubbling fluidized beds.** AIChE Journal, Vol. 60, 2014. 2000 – 2018.

REN, H. *et al.* **Carrier modification and its application in continuous photo-hydrogen production using anaerobic fluidized bed photo-reactor.** Bioenergy, Vol. 6, 2014. 599-605.

RICHARDSON, J. K.; ZAKI, W. N. **The sedimentation of a suspension of uniform spheres under conditions of viscous flow.** Chemical Engineering Science, Vol. 3, 1954. 65 – 73.

ROWE, P. N. **A convenient empirical equation for estimation of the Richardson-Zaki exponent.** Chem. Eng. Sci., Vol. 42, 1987. 2795 – 2796.

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

SONG, C.; LIU, D.; MA, J.; CHEN, X. **CFD-DEM simulation of flow pattern and particle velocity in a fluidized bed with wet particles.** Powder Technology, Vol. 314, 2017. 346 – 354.

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, 2016. 207-219.

TSUJI, Y.; TANAKA, T.; ISHIDA, T. **Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe.** Powder Technology, Vol. 71, 1992. 239 – 250.

VOJIR, D. J.; MICHAELIDES, E. E. **Effect of the history term on the motion of rigid spheres in a viscous fluid.** *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 20, 1994. 547 – 556.

WANG, S. et al. **Numerical simulation of flow behavior of particles in an inverse liquid-solid fluidized bed with a jet using CFD-DEM.** *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, Vol. 82, 2018a. 214 – 225.

WANG, S. et al. **Numerical simulation of flow behavior of particles in a porous media based on CFD-DEM.** *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Vol. 171, 2018b. 140 – 152.

WANG, J.; KU, X.; LIN, J.; YANG, S. **Impact of the reactor structure on biomass pyrolysis in fluidized-bed reactors: a coarse grained CFD-DEM study.** *Energy & Fuels*, Vol. 35, 2021. 10035 – 10050.

ZBIB, H.; EBRAHIMI, M.; EIN-MOZAFFARI, F.; LOHI, A. **Comprehensive analysis of fluid-particle and particle-particle interactions in a liquid-solid fluidized bed via CFD-DEM coupling and tomography.** *Powder Technology*, Vol. 340, 2018. 116-130.

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

ZHOU, Z. Y.; KUANG, S. B.; CHU, K. W.; YU, A. B. **Discrete particle simulation of particle-fluid flow: model formulations and their applicability.** *J. Fluid Mech.*, Vol. 661, 2010. 482-510.

ZHOU, L. et al. **CFD-DEM bidirectional coupling simulation and experimental investigation of particle ejections and energy conversion in a spouted bed.** *Energy*, Vol. 2011, 2020.