#### **MEIRE PEREIRA DE SOUZA BRAUN**

## MODELAGEM DO PARTICULADO EM SISTEMAS GÁS-SÓLIDO UTILIZANDO O MODELO DE DOIS FLUIDOS E O MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS

Tese apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo para obtenção do Título de Doutor em Engenharia Mecânica.

São Carlos 2013

#### **MEIRE PEREIRA DE SOUZA BRAUN**

## MODELAGEM DO PARTICULADO EM SISTEMAS GÁS-SÓLIDO UTILIZANDO O MODELO DE DOIS FLUIDOS E O MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS

Tese apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo para obtenção do Título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Orientador:

Helio Aparecido Navarro

ESTE EXEMPLAR TRATA-SE DA VER-SÃO CORRIGIDA. A VERSÃO ORIGINAL ENCONTRA-SE DISPONÍVEL JUNTO AO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂ-NICA DA EESC-SP.

São Carlos 2013

#### AUTORIZO A REPRODUÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

 Souza Braun, Meire Pereira de Modelagem do particulado em sistemas gás-sólido utilizando o modelo de dois fluidos e o método dos elementos discretos / Meire Pereira de Souza Braun; orientador Helio Aparecido Navarro; coorientador Paulo Sergio Varoto. São Carlos, 2013.
Tese (Doutorado) - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e Área de Concentração em Dinâmica de Máquinas e Sistemas -- Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, 2013.
Sistemas gás-sólido. 2. Modelo de dois fluidos.
Teoria cinética dos escoamentos granulares. 4. Método dos elementos discretos. 5. Força de contato. 6. Modelo da esfera suave. I. Título.

#### FOLHA DE JULGAMENTO

#### Candidata: Licenciada MEIRE PEREIRA DE SOUZA BRAUN.

Título da tese: "Modelagem do particulado em sistemas gás-sólido utilizando o modelo de dois fluídos e o método dos elementos discretos".

Data da defesa: 04/07/2013

#### Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Helio Aparecido Navarro (Orientador) (Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

Prof. Dr. Rodrigo Nicoletti (Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

Prof. Dr. Fernando Eduardo Milioli (Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

Prof. Dr. José Benaque Rubert (Universidade Federal de São Carlos/UFSCar)

Prof. Dr. Geraldo Luiz Palma APROVADA (Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"/UNESP - Bauru)

**Resultado:** 

Aprovada Aprovada Aprovada APROJAPA

Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Engenheira Mecânica: Prof. Associado Marcelo Areias Trindade

Presidente da Comissão de Pós-Graduação: Prof. Titular Denis Vinicius Coury

Dedico este trabalho ao meu esposo Francisco Braun.

## **AGRADECIMENTOS**

À Deus, pela dádiva da vida, por ter me concedido sabedoria para a realização deste trabalho, por me abençoar e me confortar nas horas difíceis.

Ao meu esposo Francisco, pelo apoio, amor e carinho.

Aos meus pais Luiza e Renato (in memoriam) pelo amor incondicional, pelos ensinamentos, e pelo apoio em todos os momentos da minha vida.

Aos meus irmãos Marisa, Amauri, Mauricéia e Renato Fillho que sempre me apoiaram em tudo, que são e sempre serão meus melhores amigos.

Ao Professor Dr. Hélio Aparecido Navarro, pela amizada e orientação no desenvolvimento do trabalho.

Aos Professores do Departamento de Engenharia Mecânica da USP, Campus de São Carlos, que contribuíram no desenvolvimento deste trabalho.

Aos amigos, que estiveram presentes e contribuíram direta ou indiretamente na realização do trabalho.

Aos funcionários e técnicos da EESC, pelo atendimento e colaboração.

Ao Laborátorio de dinâmica do Departamento de Engenharia Mecânica da EESC/USP, pelas facilidades oferecidas.

À CAPES pelo auxílio financeiro através da bolsa de doutorado e à FAPESP pelo auxílio financeiro do projeto de pesquisa.

### **RESUMO**

Souza Braun, M. P. (2013) Modelagem do particulado em sistemas gás-sólido utilizando o modelo de dois fluidos e o Método dos Elementos Discretos. São Carlos, 2013 - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

A presente pesquisa tem como objetivo realizar um estudo teórico e desenvolver simulações computacionais envolvendo a dinâmica de sistemas gás-sólido. O foco principal do trabalho é a modelagem do particulado através da análise das forças de contato entre partículas de materiais granulares utilizando modelos contínuos baseados na mecânica dos solos e na teoria cinética dos escoamentos granulares (sistemas grandes com muitas partículas, formulação Euleriana - Volumes Finitos) e modelos discretos baseados nas características físicas dos materiais (sistemas intermediários e número limitado de partículas, formulação Lagrangeana - Método dos Elementos Discretos). Investigam-se os modelos existentes na literatura com intuito de melhorar os modelos contínuos e discretos baseados na interação entre as partículas que caracterizam a dinâmica do particulado em sistemas gás-sólido. Propõe-se uma nova abordagem para a determinação do coeficiente de rigidez da mola baseada em uma equivalência entre os modelos lineares e não-lineares. Utiliza-se o código fonte MFIX para realizar simulações computacionais da dinâmica de sistemas gás-sólido, analisando o processo de fluidização, mistura e segregação de partículas, influência das correlações de arrasto, e análise das forças de contato entre as partículas através do novo método para a determinação do coeficiente de rigidez da mola. Os resultados obtidos são comparados com dados numéricos e experimentais da literatura.

**Palavras chaves:** sistemas gás-sólido, modelo de dois fluidos, teoria cinética dos escoamentos granulares, método dos elementos discretos, modelo da esfera suave, forças de contato.

## ABSTRACT

**Souza Braun, M. P. (2013)** Study of the dynamic in gas-solid systems using the twofluid model and the Discrete Element Method. São Carlos, 2013 - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

The purpose of the present study is to perform a theoretical study and develop numerical simulations involving dynamic in gas-solid systems. The focus of the work is the modeling of particulate matter using continuous models based on soil mechanics and the kinetic theory of granular flows (large systems with many particles, Eulerian formulation - Finite Volume) and discrete models based on physical characteristics of the particles (intermediate systems and limited number of particles, Lagrangian formulation - Discrete Element Method). It is proposed a new approach to determine the normal spring stiffness coefficient of the linear model through the numerical solution for the overlap between particles in non-linear models. The linear spring stiffness is determined using an equivalence between the linear and the non-linear models. It is used the MFIX computational code to perform numerical simulations of the dynamics of gas-solid systems. It is analyzed the processes of fluidization, mixing and particle segregation and the influence of drag correlations. The proposed approach for normal spring stiffness coefficient is applied in the numerical simulations of two problems: single freely falling particle and bubbling fluidized bed. The results were compared with numerical and experimental data from literature.

**Keywords:** dynamic of gas-solid systems, two-fluid model, kinetic theory of granular flows, discrete element method, soft-sphere model, contact forces.

# SUMÁRIO

#### Lista de Figuras

Lista de Tabelas

## Lista de Abreviaturas e Siglas

### Lista de Símbolos

1	Intr	odução	27
	1.1	Aplicações e modelagem hidrodinâmica dos escoamentos gás-sólido .	27
	1.2	Objetivos da pesquisa	29
		1.2.1 Objetivo geral	29
		1.2.2 Objetivos específicos	30
	1.3	Organização da tese	32
2	Revi	isão bibliográfica	35
	2.1	O modelo Eulerinao-Euleriano	36
	2.2	O modelo Euleriano-Lagrangeano	41
3	Met	odologia	49
	3.1	O Modelo Euleriano-Euleriano de duas fases separadas	49

	3.2	O Modelo Euleriano-Lagrangeano baseado no Método dos Elementos			
		Discret	tos		54
		3.2.1	Cálculo c	la força de interação fluido-partícula e da força coesiva	56
		3.2.2	Cálculo c	las forças de contato: modelo da esfera suave	59
			3.2.2.1	Modelo linear	62
			3.2.2.2	Modelo Hertiziano	70
			3.2.2.3	Equivalência para o cálculo do coeficiente de rigidez	
				de mola na direção normal	76
4	Rest	iltados			79
-	Rest	intud 05			17
	4.1	Estudo	de mistur	a em leito fluidizado borbulhante	79
		4.1.1	Levantan	nento da curva de fluidização da areia e do sal	81
		4.1.2	Mistura		85
	4.2	Estudo	da influêr	ncia da força de arrasto em sistemas monodispersos e	
		polidis	persos .		89
		4.2.1	Sistemas	monodisperso e polidispersos	91
		4.2.2	Segregaç	ão em uma mistura binária	96
	4.3	Estudo	de sistem	as coesivos	100
		4.3.1	Influênci	a das constantes de Hamaker	102
		4.3.2	Efeitos d	e vibração em sistemas altamente coesivos	107
	4.4	Estudo	do coefici	iente de rigidez da mola	111
		4.4.1	Colisões	partícula-partícula e partícula-parede	111
		4.4.2	Esfera in	dividual em queda livre	113

		4.4.3 Leito fluidizado borbulhante	116
5	Con	siderações finais	125
	5.1	Conclusões	125
	5.2	Trabalhos futuros	128
Referências			131
Ap	oêndio	ce A – Derivação das equações de equivalência	141
Ap	oêndio	ce B – Metodologia computacional	145
		Anexo I	148

# LISTA DE FIGURAS

1	Esquema de colisão entre duas partículas no modelo esfera suave	60
2	Sistema massa-mola-amortecedor nas direções normal e tangencial	61
3	Sobreposição adimensional (modelo linear mola-amortecedor)	67
4	Velocidade adimensional (modelo linear mola-amortecedor)	68
5	Aceleração adimensional (modelo linear mola-amortecedor)	68
6	Sobreposição adimensional (modelo HSD)	73
7	Velocidade adimensional (modelo HSD)	74
8	Aceleração adimensional (modelo HSD).	74
9	Geometria e condições iniciais e de contorno usadas na simulação con-	
	siderando o sistema de coordenadas cilíndricas	80
10	Curvas de fluidização da areia para partículas de diâmetros 310µm,	
	450 $\mu$ m e 590 $\mu$ m	82
11	Curva de fluidização da areia para uma mistura homogênea	83
12	Curva de fluidização da areia para partículas de $450\mu$ m e esfericidade	
	0,75	84
13	Curva de fluidização do sal para partículas de $450\mu$ m e esfericidade 0,60.	84
14	Geometria e condições iniciais e de contorno usadas nas simulações	
	numéricas para sistemas monodisperso e polidispersos	92

15	Imagens de simulação da bolha no instante t=0,4s em um leito mono-	
	disperso utilizando as correlações de arrasto de: (a) Syamlal, Rogers	
	e O'Brien (1993), (b) Ding e Gidaspow (1990), (c) Beetstra, Hoef e	
	Kuipers (2007), (d) Experimental de Hoomans (2001)	93
16	Imagens de simulação da bolha no instante t=0,5s em um leito mono-	
	disperso utilizando as correlações de arrasto de: (a) Syamlal, Rogers	
	e O'Brien (1993), (b) Ding e Gidaspow (1990), (c) Beetstra, Hoef e	
	Kuipers (2007), (d) Experimental de Hoomans (2001)	93
17	Imagens de simulação da bolha no instante t=0,4s em um leito poli-	
	dispersoso utilizando as correlações de arrasto de: (a) Syamlal, Rogers	
	e O'Brien (1993) (b) Ding e Gidaspow (1990), (c) Beetstra, Hoef e	
	Kuipers (2007), (d) Experimental de Hoomans (2001)	95
18	Imagens de simulação da bolha no instante t=0,5s em um leito poli-	
	disperso utilizando as correlações de arrasto de: (a) Syamlal, Rogers	
	e O'Brien (1993) (b) Ding e Gidaspow (1990), (c) Beetstra, Hoef e	
	Kuipers (2007), (d) Experimental de Hoomans (2001)	95
19	Geometria e condições de simulação para segregação	97
20	Segregação de espécies (condição inicial): (a) simulação, (b) experi-	
	mental de Hoomans (2001)	98
21	Segregação de espécies no instante t=20s utilizando as correlações de	
	arrasto de: (a) Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) (b) Ding e Gidas-	
	pow (1990), (c) Beetstra, Hoef e Kuipers (2007), (d) Experimental de	
	Hoomans (2001)	98

22	Segregação de espécies no instante t=40s utilizando as correlações de	
	arrasto de:: (a) Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) (b) Ding e Gidas-	
	pow (1990), (c) Beetstra, Hoef e Kuipers (2007), (d) Experimental de	
	Hoomans (2001)	99
23	Segregação de espécies: (a) t=0,0s, condição inicial para todos os mo-	
	delos, (b) t=40s utilizando o modelo de Syamlal, Rogers e O'Brien	
	(1993), (c) t=40s utilizando o modelo de Ding e Gidaspow (1990), (d)	
	t=40s utilizando o modelo de Beetstra, Hoef e Kuipers (2007)	100
24	Geometria do leito bidimensional.	101
25	Queda de pressão no leito para partículas coesivas com constante de	
	Hamamker de $A=10^{-12}$ kg.m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> considerando e sem considerar corre-	
	ção de Rumpf (1990) para asperidade	103
26	Queda de pressão no leito para partículas coesivas com constante de	
	Hamamker de $A=10^{-13}$ kg.m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> considerando e sem considerar corre-	
	ção de Rumpf (1990) para asperidade	103
27	Queda de pressão no leito para partículas coesivas com constante de	
	Hamamker de $A=10^{-14}$ kg.m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> considerando e sem considerar corre-	
	ção de Rumpf (1990) para asperidade	104
28	Imagens de simulação para partículas coesivas ( $A=10^{-12}$ kg.m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ) sem	
	considerar a correção de Rumpf (1990) para asperidade: (a) tempo	
	1,2s e $U_g$ =0,3cm/s; (b) tempo 3,2s e $U_g$ =0,8cm/s; (c) tempo 3,6s e	
	$U_g=0.9$ cm/s; (d) tempo 4.2s e $U_g=1.1$ cm/s; (e) tempo 4.4s e $U_g=1.2$ cm/s	.106
29	Imagens de simulação para partículas coesivas ( $A=10^{-12}$ kg.m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> )	
	considerando a correção de Rumpf (1990) para asperidade: (a) tempo	
	1,2s e $U_g$ =0,3cm/s; (b) tempo 3,2s e $U_g$ =0,8cm/s; (c) tempo 3,6s e	
	$U_g=0.9$ cm/s; (d) tempo 4.2s e $U_g=1.1$ cm/s; (e) tempo 4.4s e $U_g=1.2$ cm/s	.106

30	Queda de pressão no leito para partículas coesivas com constante de	
	Hamamker de $A=10^{-14}$ kg.m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> considerando e sem considerar corre-	
	ção de Rumpf (1990) para asperidade para de um leito convencional e	
	para leitos vibrados com frequência de vibração de 25Hz e amplitudes	
	de 0,03 e 0,1 repectivamente	108
31	Queda de pressão no leito para partículas coesivas com constante de	
	Hamamker de $A=10^{-14}$ kg.m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> considerando e sem considerar corre-	
	ção de Rumpf (1990) para asperidade para um leito convencional e	
	para leitos vibrados com amplitude de vibração de 0,1 e frequência de	
	10Hz, 25Hz e 50Hz respectivamente	109
32	Imagens de simulação para partículas coesivas ( $A=10^{-12}$ kg.m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> )	
	considerando a correção de Rumpf (1990) para asperidade: (a) leito	
	convencional ( $\Gamma$ =0 e f=0); (b) leito vibrado $\Gamma$ =0,03 e f=25Hz; (c)	
	leito vibrado $\Gamma$ =0,1 e f=10Hz; (d) leito vibrado $\Gamma$ =0,1 e f=25Hz; (e)	
	leito vibrado $\Gamma$ =0,1 e f=50Hz	110
33	Esquema de uma esfera individual em queda livre	114
34	Cinemática da esfera ( $k_n = 7,94 \times 10^4$ N/m e $e_n = 0,9$ , para o modelo	
	LSD): centro da posição da esfera y (linha sólida); velocidade da esfera	
	(linha pontilhada)	115
35	Cinemática da esfera ( $k_n = 7,77 \times 10^4$ N/m e $e_n = 0,7$ , para o modelo	
	LSD): centro da posição da esfera y (linha sólida); velocidade da es-	
	fera(linha pontilhada)	116
36	Geometria do leito tridimensional.	117
37	Coeficiente de rigidez da mola normal versus velocidade de impacto:	
	colisão partícula-partícula (linha sólida); colisão partícula-parede (li-	
	nha pontilhada)	119

38	Imagens de simulação nos instantes: (a) $t=0,1s$ ; (b) $t=0,25s$ ; (c) $t=0,5s$ ;	
	(d) $t=5,0s$ ; (e) $t=15,0s$ ; (f) $t=25,0s$	120
39	Porosidade: (a)16,5mm e (b)31,2mm	121
40	Velocidade axial média do sólido no tempo em três alturas distintas do	
	leito: (a) 15mm; (b) 25mm e (c)35mm	123

# LISTA DE TABELAS

1	Parâmetros adimensionais para o modelo linear mola-amortecedor	69
2	Parâmetros adimensionais para o modelo HSD	75
3	Simulações com velocidade de fluidização 1,4 $U_{mf}$ no instante t=61s .	86
4	Simulações com velocidade de fluidização 1,4 $U_{mf}$ no instante t=241s	86
5	Simulações com velocidade de fluidização 1,7 $U_{mf}$ no instante t=61s .	87
6	Simulações com velocidade de fluidização 1,7 $U_{mf}$ no instante t=241s	87
7	Simulações com velocidade de fluidização 2,0 $U_{mf}$ no instante t=61s .	88
8	Simulações com velocidade de fluidização 2,0 $U_{mf}$ no instante t=241s	89
9	Parâmetros usados nas simulações	102
10	Coeficiente de rigidez da mola normal para o modelo LSD: colisão	
	partícula-partícula	112
11	Coeficiente de rigidez da mola normal para o modelo LSD: colisão	
	com a parede	112
12	Coeficiente de rigidez da mola normal para o modelo LSD: esfera em	
	queda livre	114
13	Parâmetros de simulação do leito borbulhante	118

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

- DEM Método do Elementos Discretos
- HSD Modelo Hertiziano amortecido não-linear massa-mola-amortecedor (Nonlinear damped Hertzian spring-dashpot)
- LFB Leito Fluidizado Borbulhante
- LSD Modelo linear mola-amortecedor (Linear spring-dashpot)
- MFIX Multiphase Flow with Interphase eXchanges
- NETL National Energy Technology Laboratory
- TCEG Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares

# LISTA DE SÍMBOLOS

Α	Constante de Hamaker [kg.m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]
$d_{pm}$	Diâmetro da partícula [m]
$D_{sm}^{=}$	Tensor taxa de deformação [s <sup>-1</sup> ]
$C_{Ds}$	Função de arrasto para uma partícula em um meio infinito
$C_{f_{lm}}$	Coeficiente de fricção entre as fases sólidas
$e_{ml}$	Coeficiente de restituição para colisão entre partículas sólidas
$e_n$	Coeficiente de restituição na direção normal
g	Campo gravitacional [m/s <sup>2</sup> ]
$g_{0_{lm}}$	Função de distribuição radial
Ι	Momento de inérica de massa [kg.m <sup>2</sup> ]
= I	Tensor unitário
$\mathbf{I}_{gm}$	Força de interação entre a fase gasosa e a fase sólida [N/m <sup>3</sup> ]
$\mathbf{I}_{ml}$	Transferência da quantidade de movimento entre as fases sólidas [N/m <sup>3</sup> ]
$I_{2D}$	Segundo invariante do tensor taxa de deformação [Pa]
<i>k</i> <sub>n</sub>	Coeficiente de rigidez da mola na direção normal [N/m]
<i>k</i> <sub>t</sub>	Coeficiente de rigidez da mola na direção tangencial [N/m]
т	Massa de uma partícula [kg]
$P_{g}$	Pressão da fase gasosa [Pa]
$P_{sm}$	Pressão da fase sólida [Pa]

Re <sub>sm</sub>	Número	de	Reynolds
------------------	--------	----	----------

tr Traço da matriz

- **T** Torque sobre as partículas [N.m]
- $t_{c,n}$  Tempo de contato entre partículas [s]
- $\mathbf{v}_{g}$  Velocidade média local da fase gasosa [m/s]
- **v**<sub>sm</sub> Velocidade média local da fase sólida [m/s]
- V Velocidade individual de uma partícula sólida [m/s]
- *V<sub>rm</sub>* Correlação para a velocidade terminal da fase sólida [m/s]

$$\beta_{gm}$$
 Coeficiente de arrasto da interface

 $\delta$  Sobreposição entre partículas [m]

- $\delta_{max}$  Sobreposição máxima entre partículas [m]
- $\overline{\delta}_n$  Sobreposição média entre partículas [m]

 $\epsilon_g$  Fração de vazio

- $\epsilon_{sm}$  Fração volumétrica da fase sólida
- $\eta_n$  Coeficiente de amortecimento na direção normal
- $\eta_t$  Coeficiente de amortecimento na direção tangencial
- $\theta$  Temperatura granular [m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>]
- $\lambda_g$  Viscosidade volumétrica da fase gasosa [kg/m.s]
- $\lambda_{sm}$  Viscosidade volumétrica da fase sólida [kg/m.s]
- $\mu_g$  Viscosidade dinâmica do gás [kg/m.s]
- $\mu_{sm}$  Viscosidade dinâmica do sólido [kg/m.s]

- $\rho_g$  Densidade do gás [kg/m<sup>3</sup>]
- $\rho_{sm}$  Densidade do sólido [kg/m<sup>3</sup>]
- $\bar{\sigma}_{g}^{\bar{z}}$  Tensor das tensões para a fase gasosa [Pa]
- $\bar{\sigma_s}$  Tensor das tensões para a fase sólida [Pa]
- $\bar{\tau}_{g}$  Tensor das tensões viscosas do gás [Pa]
- $\bar{\tau}_s$  Tensor das tensões viscosas do sólido [Pa]
- *w* Velocidade angular de uma partícula [rad/s]

## 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 Aplicações e modelagem hidrodinâmica dos escoamentos gás-sólido

A fluidização em escoamentos gás-sólido constitui uma das mais importantes aplicações industriais que envolvem escoamentos multifásico. Entre as variadas aplicações dos escoamentos gás-sólido, duas são mais representativas e importantes economicamente: os craqueadores catalíticos para conversão de frações pesadas de petróleo em gasolina e os combustores de leito fluidizado para geração de energia térmica e elétrica.

Embora as reações químicas e os processos de transferência de calor influenciem diretamente as taxas de conversão dos reatores catalíticos e a eficiência térmica de instalações energéticas, estes são altamente influenciados pelos processos hidrodinâmicos, os quais determinam a distribuição espacial das fases e espécies envolvidas. Como a hidrodinâmica é dominante nos processos de transporte de massa e energia em certas escalas temporais e espaciais, é imprescindível o seu estudo e compreensão. Ainda na atualidade a compreensão dos processos hidrodinâmicos básicos que acontecem em escoamentos multifásicos nas instalações industriais é incompleta e insuficiente.

Leitos fluidizados de escoamentos gás-sólido aparecem em diversas aplicações industriais, sendo um dos tipos os reatores de leito fluidizado borbulhante (LFB). Esses leitos posssuem várias vantagens, tais como, mistura uniforme do particulado, gradientes de temperatura uniformes, capacidade de funcionamento contínuo, entre outras. Devido às vantagens dos reatores de leito fluidizado, muitas pesquisas são dedicadas à esta tecnologia. A maioria das pesquisas tem como objetivo quantificar e explicar o comportamento das interações entre as fases no leito. Temas específicos destas pesquisa incluem análise do tamanho e distribuição das partículas, estudo das interações entre as fases, velocidades de operação do leito, efeitos dos campos de pressão, modelagem computacional, entre outros. O objetivo é a produção de modelos mais precisos que permitirão projetar reatores melhores e mais eficientes, ampliando a sua utilização.

Os leitos borbulhantes são caracterizados por altas densidades de particulado, pelo desenvolvimento de bolhas de gás que promovem a recirculação e a mistura, e pelo processo de elutriação que promove o arrasto de particulados mais finos. A maior parte do leito é formada de partículas cujas velocidades terminais são diferentes da velocidade do gás. Uma característica dos leitos fluidizados gás-sólido é a presença de bolhas, as quais afetam o desempenho do reator. Assim, é importante entender as suas características e comportamento. Comumente pode-se definir bolhas como regiões com pouco ou sem sólido.

Para a modelagem de escoamentos gás-sólido é necessário conhecer o grupo de partículas sólidas que se pretender estudar. Existem grandes diferenças de comportamento para cada tipo de partícula ou conjunto de partículas no interior de um leito. Geldart (1973), classificou em quatro grupos distintos o comportamento de partículas sólidas de acordo com algumas de suas propriedades de fluidização (diâmetro e densidade). As partículas do grupo A são aeráveis e pouco coesivas. Os leitos apresentam tanto uma fluidização uniforme, sem bolhas, bem como, uma fluidização borbulhante (com o aumento da velocidade do gás). As partículas do grupo B apresentam fluidização borbulhante assim que a velocidade do gás atinge o ponto no qual as partículas iniciam a suspensão. A expansão do leito e a mistura de partículas são moderadas. As partículas do grupo C são relativamente muito pequenas e de difícil fluidização devido às forças coesivas. Nesse caso, é muito difícil de se obter fluidização, pois o fluido atravessa o leito por canais abertos ou faz com que as partículas se movam como um pistão. Essa dificuldade surge devido as forças entre as partículas serem maiores que àquela exercida pelo fluido. As partículas do grupo D são maiores e exigem altas velocidades para fluidizar, o que torna o regime mais turbulento e o resultado é uma mistura não satisfatória.

Como o tamanho e a frequência das bolhas nos leitos são responsáveis pela mistura, segregação de partículas e pelos processos de transferência de calor e massa no leito, uma previsão precisa da dinâmica da bolhas em leitos fluidizados é uma questão fundamental para o desenvolvimento dos modelos hidrodinâmicos. Com o desenvolvimento de algoritmos e de computadores mais velozes, a modelagem hidrodinâmica de escoamento multifásiscos vem recebendo esforços significativos para o desenvolvimento de modelos mais precisos. Um aspecto importante no desenvolvimento do modelo hidrodinâmico é a validação do modelo com dados experimentais confiáveis. Medições da dinâmica de bolhas realizadas com partículas com propriedades bem definidas (tamanho, forma, densidade, propriedades de colisão, entre outras), com a geometria do leito bem definida e em uma escala de tempo curto são difícies de encontrar na literatura.

## 1.2 Objetivos da pesquisa

#### 1.2.1 Objetivo geral

O objetivo geral da presente pesquisa é investigar parâmetros físicos do modelo de dois fluidos e do método dos elementos discretos através de um estudo teórico e de simulações numéricas que envolvam a dinâmica de sistemas gás-sólido.

#### 1.2.2 Objetivos específicos

O foco principal da presente pesquisa é a modelagem do particulado através de modelos contínuos e discretos com o objetivo de melhorar os modelos existentes na literatura. A contribuição do trabalho é atribuída à quatro diferentes estudos:

(a) processo de mistura de um sistema particulado binário, composto por areia e sal através do modelo Euleriano-Euleriano de duas fases separadas, com o objetivo de observar o comportamento do leito em relação às velocidades de fluidização e a homogeneidade da mistura.

(b) influência das correlações de arrasto em sistemas monodispersos (1 fase sólida) e polidispersos (mais de 1 fase sólida) em leito fluidizado borbulhante. Aplicações com partículas de tamanho uniforme dificilmente são encontradas em laboratórios e nas práticas industriais. Geralmente as partículas pertencem a uma faixa de diâmetro e densidade. Uma distribuição contínua de partículas pode influenciar o comportamento de bolhas de gás, velocidade de mínima fluidização, gradientes de pressão entre outros parâmetros. Para o estudo dos sistemas polidispersos uma função de distribuição do particulado no leito foi implementada com o objetivo de fornecer uma distribuição lognormal de partículas em uma determinada faixa de diâmetros. Uma rotina para a mistura inicial das diferentes fases sólidas também foi implementada. Foram realizadas simulações numéricas em um leito fluidizado borbulhante (monodisperso e polidisperso com 10 fases sólidas) e também em um sistema de segregação (duas fases sólidas).

(c) comportamento de partículas coesivas do grupo A de Geldart (1973), avaliando quais as dificuldades de fluidização e a existência de outros regimes como canais e aglomerados no leito. O estudo foi estendido considerando os efeitos de asperidade na superfície das partículas (RUMPF, 1990). O efeito de vibração na base do leito também foi analisado no caso de partículas altamente coesivas. Para esse estudo foi necessário a confecção de leitos pequenos para suportar um pequeno número de partículas e diminuir o tempo computacional. Também foi necessário a implementação de rotinas para computar os efeitos de vibração na base do leito.

(d) Desenvolvimento de um novo método para o cálculo da rigidez da mola durante o contato de forças normais modeladas por meio de um sistema massa-molaamortecedor no método dos elementos discretos (DEM). O método proposto baseia-se na comparação da sobreposição (overlap) do deslocamento na direção normal durante o contato (modelo de esfera suave) do modelo linear com modelos não-lineares. A comparação é feita considerando uma sobreposição média, e também a sobreposição máxima e o tempo de contato, entre as soluções analíticas do modelo linear e as numéricas do modelo não-linear. As forças de contato são determinadas pelo modelo de esfera suave. O modelo linear é descrito de forma dimensional e não-dimensional com as soluções analíticas e correspondentes tabelas e gráficos dos parâmetros cinemáticos na forma adimensional. Para o modelo não-linear, as forças conservativas são calculadas usando a Teoria de contato de Hertz (HERTZ, 1882). O modelo não-linear também é descrito com a apresentação de gráficos e tabelas. O novo método para a determinação da rigidez da mola é aplicado para o contato de esferas de vidro. Também são apresentados resultados para um problema dinâmico de uma esfera em queda livre e de um leito fluidizado borbulhante. Nesse último caso, os resultados obtidos são comparados com outros resultados numéricos e experimentais da literatura.

As simulações numéricas são realizadas através do código aberto MFIX (Multiphase Flow with Interphase eXchanges) de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) desenvolvido pelo NETL (National Energy Technology Laboratory) dos Estados Unidos da América. O código MFIX tem sido amplamente utilizado para simular a hidrodinâmica, transferência de calor e reações químicas em sistemas granulares e fluido-sólido. O código MFIX é escrito na linguagem de programação Fortran e está em constante desenvolvimento. A vantagem desse código é que fenômenos físicos recentemente publicados em periódicos científicos são incorporados e, também, é possível realizar alterações para suportar novos modelos. Existem diversas universidades e pesquisadores vinculados ao desenvolvimento do referido código. Os cálculos realizados pelo software MFIX nas formulações Euleriana-Euleriana e Euleriana-Lagrangeana fornecem dados transientes com distribuições tridimensionais de pressão, velocidade, temperatura, e frações de massa para espécies.

## 1.3 Organização da tese

O presente trabalho subdivide-se em cinco capítulos, sendo que no capítulo 1 é apresentada uma breve descrição dos escoamentos gás-sólido, com ênfase às suas principais características e aplicações.

O capítulo 2 apresenta uma revisão bibliográfica da literatura, estendendo os estudos já desenvolvidos sobre o tema. O objetivo dessa etapa é realizar uma atualização bibliográfica destacando as principais aplicações e experimentos realizados em sistemas granulares e em sistemas fluido-sólido. Abordagens numéricas e procedimentos computacionais de solução também são descritos.

O capítulo 3 apresenta a formulação matemática para o modelo Euleriano-Euleriano de duas fases separadas. Nesta etapa são descritas as equações de balanço considerando a abordagem Euleriana-Euleriana para ambas as fases. O tensor das tensões para a fase sólida é avaliado com base na Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares, em que a temperatura granular é calculada por uma equação algébrica. Apresenta-se também a formulação matemática para o Método dos Elementos Discretos. São descritas as equações de balanço para a fase gasosa bem como a as equações de Newton para a modelagem do particulado. O modelo da esfera suave utilizado para a modelagem das forças de contato entre as partículas e o novo método proposto para o cálculo da rigidez da mola no modelo linear são detalhados.
O capítulo 4 apresenta os resultados de simulação numérica obtidos a partir dos modelos matemáticos descritos no capítulo 3. Os resultados são discutidos e comparados com dados numéricos e experimentais da literatura.

O capítulo 5 apresenta as conclusões do estudo desenvolvido e propostas para trabalhos futuros.

# 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A modelagem de sistemas particulados tem sido um importante foco de pesquisas em todo o mundo, pois estes são bastante comuns na natureza, como quedas de gotas de chuva, nevascas, formação de dunas, e também em processos industriais, como secadores, reatores, na indústria farmacêutica e química, entre outros processos. Materiais granulares consistem de um conjunto de partículas discretas podendo estar distribuídas em um meio fluido. A diferença de escoamentos granulares e outros de mistura fluido sólida é que a interação entre as partículas tem um papel fundamental no padrão de escoamento.

Duas abordagens são possíveis para modelar sistemas particulados: contínua e discreta. O enfoque discreto é usualmente mais acurado, pois descreve o movimento de cada partícula usando as Leis de movimento de Newton, mas é restrito a um número relativamente pequeno de partículas por limitações computacionais. O enfoque contínuo usa a teoria cinética dos escoamentos granulares e é mais relevante para aplicações industriais que usam uma grande quantidade de sólido. Em problemas gássólido, quando a fase fluida e a fase sólida são consideradas contínuas, o método é chamado Euleriano-Euleriano ou modelo de dois fluidos. Quando a fase fluida é considerada contínua e a fase dispersa como discreta, a abordagem é chamada Euleriana-Lagrangiana.

## 2.1 O modelo Eulerinao-Euleriano

O modelo Euleriano-Euleriano é geralmente obtido utilizando o procedimento de médias de Euler, e constitui uma das principais formulações das equações de campo macroscópicas para um sistema bifásico. O modelo é formulado considerando cada fase em separado, em termos de um sistema de equações de conservação de massa, quantidade de movimento, e energia. A dificuldade de aplicação deste modelo, em escoamentos gás-sólido deve-se ao fato de que este tipo de escoamento caracteriza-se pela presença de duas fases diferentes, e de interfaces que separam essas fases entre si. Como ambas as fases interagem entre si, aparecem nas equações de campo termos devidos a essa interação, que especificam os transportes de massa, quantidade de movimento e energia através da interface. Essa ideia de descrever os leitos fluidizados como modelo hidrodinâmico de dois fluidos existe desde a década de 60. Diversos autores descreveram esse modelo na época, Davidson (1961), Jackson (1963), Murray (1965), Collins (1965), Stewart (1987) e Anderson e Jackson (1967). O conjunto de equações proposto por esses pesquisadores é muito difícil de se resolver, e soluções numéricas apareceram posteriormente nos trabalhos de Gidaspow e Ettehadieh (1983), Syamlal e O'Brien (1989), Bouillard, Gidaspow e Lyczkowski (1991), Gidaspow (1994), Sanyal e Cesmebasi (1994), Boemer, Qi e Renz (1997), Kuipers et al. (1993), entre outros.

Nos escoamentos gás-sólido em leitos fluidizados existem regiões que são caracterizadas pela cinética ou colisões do particulado, outras dominadas pelo atrito, e outras pela combinação dos dois fatores. A contribuição aditiva dos efeitos cinéticos e devido ao atrito no tensor das tensões do particulado foi estuda por Savage (1982) e por Johnson e Jackson (1987). Os efeitos cinéticos são baseados na teoria cinética dos escoamentos granulares que considera o efeito intersticial do gás (AGRAWAL et al., 2001). Esta teoria baseia-se na formulação de Euler/Boltzmann e correspondentemente permite a obtenção de um modelo reológico teórico para a fase sólida, através da modelagem das flutuações da velocidade das partículas (temperatura granular) com a ajuda de equações complementares (algébricas ou diferenciais). O tensor das tensões cinético utiliza a temperatura granular que pode ser calculada de duas formas: através de uma equação diferencial parcial adicional que representa o balanço da energia pseudo-térmica das flutuações das velocidades das partículas, isto é, uma equação adicional para a temperatura granular, ou através de uma expressão algébrica para a determinação da temperatura granular.

Os efeitos devido ao atrito são caracterizados por um modelo de escoamento quase-estático proposto por Schaeffer (1987) e modificado por Srivastava e Sundaresan (2003) para contabilizar flutuações no tensor taxa de deformação. Neste regime, o tensor das tensões pode ser descrito com base no estudo da mecânica dos solos (GO-ODMAN; COWIN, 1972; TüZüN et al., 1982; JENIKE, 1987; SCHAEFFER, 1987). Muitos trabalhos têm sido realizados considerando essa abordagem de modelo de dois fluidos por exemplo, Tsuo e Gidaspow (1990), Sun e Gidaspow (1999), Cabezas-Gómez et al. (2008), entre outros oferecendo resultados razoáveis da hidrodinâmica do escoamento. Recentemente, um modelo constitutivo com microestrutura para o escoamento de materiais granulares foi desenvolvido por Sun e Sundaresan (2011). Uma revisão de escoamentos em materiais granulares é realizado no trabalho de Campbell (2006).

Benyahia (2008) realizou um estudo com o objetivo de validação de duas teorias contínuas de modelagem do contato por fricção do escoamento. De acordo com Benyahia (2008), teorias cinéticas granulares são válidas para ambos os regimes: escoamento cinético (diluído) e escoamento denso colisional (intermediário), para o caso em que o contato entre as partículas colidindo seja instantâneo. Formulações elaboradas através de observações experimentais da mecânica dos solos têm sido tradicionalmente usadas em modelos contínuos para escoamentos granulares densos dominados por contato duradouro entre as partículas. A teoria do contato por atrito, somente é ativada no regime de escoamento quase-estático acima do máximo empacotamento, não fornece resultados acurados. Melhores previsões são obtidas usando uma teoria de contato por atrito que se estenda ao regime de escoamento intermediário abaixo do empacotamento onde ambos os contatos entre as partículas estão presentes, isto é, o colisional e o duradouro.

As forças interfaciais do modelo de dois fluidos incluem a força de arrasto, a força de sustentação, a força de massa virtual, entre outras (ENWALD; PEIRANO; ALMS-TEDT, 1996). Nas equações de escoamentos de duas fases, devido a grande diferença de densidades, as forças interfaciais são menos significantes, exceto a força de arrasto, cuja consequência é que em diversas simulações somente a força de arrasto é contabilizada. Geralmente a força de arrasto atuando em uma partícula em um escoamento fluido-sólido pode ser representada pelo produto do coeficiente de transferência da quantidade de movimento pela velocidade de deslizamento entre as duas fases.

Um dos primeiros trabalhos para o cálculo desse coeficiente foi proposto por Richardson e Zaki (1954). Wen e Yu (1966) estenderam o trabalho desses autores apresentando uma correlação para grandes valores das frações de vazio. Ding e Gidaspow (1990) apresentam o cálculo do coeficiente de arrasto em função da fração de vazio, e compondo duas teorias: a de Ergun (1952) que calcula para a região densa e a de Wen e Yu (1966) que calcula para a região dispersa. Ding e Gidaspow (1990) torna a correlação de arrasto descontínua na concentração de sólidos em que ocorre o chaveamento entre as duas teorias, embora seja contínua para número de Reynolds. Fisicamente, a força de arrasto é uma função contínua de ambos parâmetros: concentração de sólidos e número de Reynolds, portanto formulações contínuas para o coeficiente de arrasto são necessárias para evitar problemas de convergência em simulações de leitos fluidizados gás-sólido. Huilin et al. (2004) usaram uma função tangente inversa para remover o problema da descontinuidade. Dahl e Hrenya (2005) usaram uma interpolação linear. Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) propuseram um modelo para o cálculo do coeficiente de arrasto baseado na medida das velocidades terminais das partículas em leitos fluidizados. Beetstra, Hoef e Kuipers (2007) derivaram um correlação para coeficiente de arrasto na interface com base em simulações lattice-Boltzmann (LBM) e válidos para um grande intervalo de Reynolds. A correlação proposta por Beetstra, Hoef e Kuipers (2007) oferece um fator de correção para o modelo de arrasto indicado para uso em sistemas polidispersos. Beetstra, Hoef e Kuipers (2007) avaliaram segregação de espécies em um leito fluidizado borbulhante com duas fases sólidas distintas e encontraram bons resultados. Existem na literatura inúmeros trabalhos e correlações sobre o coeficiente de arrasto na interface. Um estudo detalhado sobre as diversas correlações para cálculo do coeficiente de arrasto é apresentado por Du et al. (2006) e também por Wang et al. (2009).

Gidaspow (1994) publicou um livro que descreve detalhadamente o modelo de dois fluidos, as equações constitutivas para o particulado, e também a teoria cinética dos escoamentos granulares. Um artigo clássico da teoria da obtenção das equações médias de escoamentos de duas fases e também das relações constitutivas é descrito por Enwald, Peirano e Almstedt (1996). Ishii e Hibiki (2011) apresentam uma descrição do modelo de dois fluidos e das equações de fechamento desse modelo aplicável a escoamentos não-reagentes. A modelagem e entendimento das equações constitutivas de fechamento são importantes porque regem os fenômenos que ocorrem na interface entre as fases. Mesmo em aplicações de escoamento granulares onde ocorrem regiões diluídas de sólidos é possível encontrar outras regiões que são densas e em que o atrito é relevante.

Na discretização das equações do modelo contínuo é necessário definir um esquema apropriado para análise dos termos convectivos. Um esquema numérico para a solução do modelo de dois fluidos é o método dos volumes finitos aplicado ao sistema de equações diferenciais parciais que envolvem as fases. A escolha do esquema numérico é muito importante pois pode levar a resultados não-físicos e totalmente diferentes de análises teóricas e experimentais. Existem diversas aproximações para os termos convectivos das equações de conservação, entre as quais se destacam os esquemas de primeira ordem tais como o FOUP (First Order Upwind) de Courant, Isaacson e Reeves (1952), HYBRID de Spalding (1972). Embora esses esquemas de primeira ordem tenham sido muito empregados por serem incondicionalmente estáveis, eles introduzem uma viscosidade numérica que suaviza a solução. Os esquemas de alta ordem, como por exemplo, o de segunda ordem SOU (Second Order Upwind) de Price, Varga e Warren (1966) e o de terceira ordem QUICK (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics) de Leonard (1979) melhoram a precisão dos cálculos. Entretanto, esses esquemas apresentam problemas quanto à limitação, ou seja, as soluções podem apresentar oscilações nãofísicas nas descontinuidades.

Diversas pesquisas pretendem obter esquemas de alta ordem e limitados. Geralmente os esquemas propostos se baseiam em dois conceitos: as restrições TVD (Total Variation Diminishing) e a abordagem em variáveis normalizadas. Este conceito normaliza as variáveis e também a sua variação no sentido do escoamento. Os esquemas que satisfazem as restrições TVD apresentam soluções livres de oscilações e convergentes. Usualmente, os esquemas TVD são utilizados em escoamentos compressíveis em que as variáveis convectivas sofrem mudanças bruscas no gradiente ou no caso de surgimento de descontinuidades. Um exemplo de esquema TVD é o esquema MUSCL (Monotonic Upstream Scheme for Conservation Laws) de Leer (1979) em que foi obtida precisão espacial de segunda ordem e o esquema Superbee de Sweby (1984). Para problemas estacionários, o esquema SHARP (Simple High-Accuracy Resolution Program) de Leonard (1988), e o esquema SMART (Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport) de Gaskell e Lau (1988) formulados no contexto de variáveis normalizadas, são limitados e possuem um bom desempenho.

Utilizando os conceitos TVD e NVD, Song et al. (2000) construíram um esquema com precisão de ordem três e limitado, designado como WACEB (Weighted-Average

Coeficient Ensuring Boundedness). Resultados numéricos para alguns problemas de convecção mostraram que este esquema possui a habilidade do esquema QUICK em reduzir a difusão numérica sem introduzir oscilações. Entretanto, segundo Alves, Oliveira e Pinho (2003), o esquema WACEB possui problemas de convergência para escoamentos viscoelásticos. Eles propuseram um esquema para esses tipos de escoamentos denominado CUBISTA (Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for Treatment of Advection) baseado em restrições TVD e associado ao número de Courant.

Guenther e Syamlal (2001) investigaram os efeitos de difusão numérica das equações do escoamento gás-sólido em um leito fluidizado borbulhante, utilizando as bolhas formadas em um leito fluidizado como uma métrica para comparar diversos esquemas de discretização dos termos convectivos. As bolhas preditas com o esquema de primeira ordem apresentaram uma forma não-física pontiaguda. Segundo os autores, métodos de alta ordem, como SMART e o Superbee, produziram bolhas mais realísticas, com uma forma arredondada. Souza-Braun et al. (2010) investigaram a influência de esquemas numéricos e das malhas no perfil das bolhas, e concluíram que o esquema Superbee ou possíveis esquemas baseados no Superbee são mais adequados para os estudos de escoamentos granulares ou gás-sólido. Recentemente, Correa et al. (2013) utilizaram o esquema EPUS (Eight-degree Polynomial Upwind Scheme) para investigar a formação de bolhas e independência de malha em leitos fluidizados borbulhantes. Portanto, a técnica numérica pode influenciar na solução do problema e, para cada tipo de aplicação, um determinado esquema pode-se adequar melhor.

### 2.2 O modelo Euleriano-Lagrangeano

Com o rápido e amplo desenvolvimento de técnicas de simulação e também da informática, a abordagem Euleriana-Lagrangiana para modelagem de sistemas particulados veem sendo amplamente difundida. Nessa abordagem, a fase gasosa é considerada contínua como no modelo de dois fluidos, porém para a fase sólida, o movimento individual de cada partícula é calculado através das Leis de Newton.

Alder e Wainwright (1957) foram os pioneiros na abordagem discreta de sistemas particulados através da introdução do método da Dinâmica Molecular como uma metodologia de estudo para comportamento macroscópico de partículas. As técnicas de Dinâmica Molecular podem ser adaptadas para modelos discretos de partículas incluindo as interações partícula-partícula, sendo essa abordagem chamada de Método dos Elementos Discretos (DEM - Discrete Element Method). Esse método tem sido aplicado em diversas áreas, por exemplo, mecanismos geotécnicos por Cundall e Strack (1979), tecnologia de transporte pneumático por Tsuji, Tanaka e Ishida (1992), segregação de materiais por Ketterhagen et al. (2007), escoamento em partículas coesivas por Weber (2004), misturas em leitos gás-sólidos por Rhodes et al. (2001). Popken e Cleary (1999) compararam a TCEG e esquemas de elementos discretos para a modelagem granular de escoamentos de Couette. Eles relataram que os dois métodos apresentam resultados semelhantes tanto qualitativamente quanto quantitativamente. Limtrakul et al. (2003) também realizaram simulação bidimensional em leito fluidizado, com o objetivo de estudar os efeitos do tamanho e da densidade das partículas e descobriram que a melhor mistura ocorre em leitos onde as partículas possuem tamanho próximo uma das outras e também onde a diferença de densidade é pequena. Li e Kuipers (2003) estudaram o efeito de várias correlações de arrasto em estruturas de escoamento formadas em leitos fluidizados e relataram que as correlações com não-dependência linear sobre a fração de vazio apresentam a formação de aglomerados no particulado mais fino. Eles também relataram os efeitos de colisões inelásticas entre as partículas. Tanaka, Mituji e Takahashi (1996) utilizaram DEM para estudar condições de mistura e de segregação. Uma abrangente revisão da literatura é feita no trabalho de Zhu et al. (2008), a qual resume os principais estudos baseados na simulação discreta de partículas.

O método dos elementos discretos para a fase sólida pode ser combinado com o da fase gasosa que é considerada contínua. A influência hidrodinâmica das partículas sobre o gás aparece principalmente na interface de arrasto. Outros efeitos tais como transferência de calor e massa também podem ser analisados quando se utiliza o método de elementos discretos. Na simulação numérica usando a técnica DEM, a análise global do sistema granular é obtida através da análise individual de cada partícula. Dois modelos podem ser usados na modelagem do particulado quando se utiliza o DEM: o modelo de esfera rígida e modelo de esfera suave.

O modelo de esfera rígida é usado em regimes diluídos, onde a fase sólida é bastante dispersa, as colisões entre partículas é análoga a dinâmica molecular em gases rarefeitos. Apesar das colisões entre as partículas serem pouco elástica, a energia é fornecida ao sistema através da aceleração da partícula, gravidade, e até mesmo pelas colisões com a fronteira. A maioria dos trabalhos publicados na literatura tem considerado apenas colisões binárias em escoamentos de regime granular rápido, onde as partículas movem-se em uma trajetória bem definida até que a colisão com outra partícula ocorra. Essas interações entre as partículas são modeladas como colisões instantâneas e o estado de pós-colisão é determinado a partir da dinâmica clássica (CAMPBELL, 1982). Usando o modelo de esfera rígida as equações de movimento de Newton consistem na força impulsiva em função do tempo atuando sob uma partícula. As equações e descrição detalhada do modelo de esfera rígida podem ser encontradas em Campbell (1982) e Crowe, Sommerfeld e Tsuji (1998). O modelo de esfera rígida foi utilizado no estudo de sistemas granulares pela primeira vez por Campbell (1982). A partir de então, inúmeros trabalhos que utilizam esse modelo veem sendo publicados na literatura. Hoomans et al. (1996) utilizaram o modelo de esfera rígida para estudar fluxos de gases em leitos fluidizados gás-sólido para estudar os efeitos da interação partícula-partícula sobre a formação de bolhas e segregação. O modelo da esfera rígida foi bastante explorado em conexão com a TCEG por Goldschmidt,

Kuipers e Swaaij (2001), em problemas de fluidização em altas pressões por Li e Kuipers (2002), no estudo de segregações em distribuições contínuas por Dahl e Hrenya (2005), em efeitos de turbulência do gás por Zhou et al. (2004), em leitos fluidizados circulantes por He et al. (2006), entre outros. Recentemente, Müller e Pöschel (2012) apontaram algumas limitações do modelo de esfera rígida para a dinâmica granular, dependendo do material e dos parâmetros do sistema.

Uma grande parte dos escoamentos granulares e dos sistemas gás-sólido apresentam um regime denso, onde predomina o atrito e cujas partículas estão em contato umas com as outras por um longo período de tempo. O modelo da esfera suave, proposto por Cundall e Strack (1979) é o mais recomendável para tais regimes. Nesse modelo, as partículas se sobrepõem a uma pequena distância e as forças de contato são calculadas com base no histórico de deformação usando um mapeamento entre essas forças e sistemas dinâmicos. Um estudo detalhado sobre impacto é descrito no livro de Goldsmith (1960), e o mecanismo elástico durante a colisão é modelado pela teoria de Hertz (1885). Timoshenko e Goodier (1970) fornecem uma apresentação clássica da teoria da elasticidade, cujo princípio é que a energia perdida durante o impacto pode ser associada com mecanismos de amortecimento durante o período de contato. Simo e Hughes (1997) apresentam conceitos teóricos de inelasticidade, uma formulação numérica e também uma descrição computacional de algoritmos clássicos de modelos de plasticidade, viscoplasticidade e viscoelasticidade. Diversos esquemas tem sido propostos na literatura para modelar as forças de contato, como o de Walton e Braun (1986) que usam duas constantes elásticas diferentes para modelarem a energia de dissipação nas direções normal e tangencial. Hunt e Grossley (1975) discutem o modelo de Kelvi-Voigt e introduzem um novo termo de amortecimento não-linear para o impacto entre corpos sólidos. Yigit, Ulsoy e Scott (1990) comparam modelos mola-amortecedor com modelos de impacto utilizando dados experimentais de vigas flexíveis.

Em escoamentos gás-sólido, o modelo de esfera suave possibilita a análise de algumas interações entre as partículas e entre partículas e parede, que não podem ser obtidas no modelo de esfera rígida. O modelo dinâmico linear massa-mola-amortecedor para o cálculo das forças de contatos é amplamente utilizado nas simulações DEM, como por exemplo, em Haff e Werner (1986), Hoef et al. (2006), Garg et al. (2010), Benyahia e Galvin (2010), Gopalakrishnan e Tafti (2013), entre outros. Um motivo para isso é que o modelo linear é simples, e possui solução analítica para os parâmetros de colisão. Além disso, o modelo linear é computacionalmente mais econômico comparado aos modelos não-lineares. No modelo linear, precisa-se especificar os valores dos coeficientes de rigidez da mola e de amortecimento. Shäfer, Dippel e Wolf (1996) descrevem que, em princípio, o modelo linear não tem parâmetros livres uma vez que os coeficientes de rigidez da mola e de amortecimento podem ser ajustados pelos coeficiente de restituição normal e pela duração do contato obtidos de valores experimentais em determinadas faixas de velocidade. As relações para os coeficientes de rigidez e de amortecimento podem ser derivadas como uma função do coeficiente de restituição e duração do contato (ver Hoef et al. (2006) e Shäfer, Dippel e Wolf (1996)). Stevens e Hrenya (2005) discutem um critério para escolher valores típicos dos parâmetros de entrada (coeficiente de rigidez e coeficiente de amortecimento) baseado em uma equivalência do tempo de colisão.

No modelo linear, se somente estiver disponível o valor para o coeficiente de restituição normal, pode-se calcular o coeficiente de amortecimento usando uma expressão analítica. O valor do coeficiente de rigidez para o modelo linear pode ser estimado de outros experimentos numéricos ou outra abordagem como uma equivalência de modelos lineares com não-lineares. Na literatura, existem diversos modelos não-lineares para a estimativa dos parâmetros de colisão durante o impacto normal, por exemplo, Tsuji, Tanaka e Ishida (1992), Hunt e Grossley (1975), Kuwabara e Kono (1987). A força conservativa nesses modelos são calculadas com base na teoria de Hertz (1885) e o coeficiente de rigidez não-linear é estimado nas propriedades dos materiais como módulo de Young e coeficiente de Poisson. A diferença básica entre esses modelos é o cálculo da força de amortecimento não-conservativa. Tsuji, Tanaka e Ishida (1992) consideram uma força de amortecimento proporcional a raiz quarta da sobreposição das partículas (overlap) na simulação de partículas não coesivas em um duto horizontal. Hunt e Grossley (1975) consideram um força contínua no início e final do contato. Kuwabara e Kono (1987) propuseram uma força de amortecimento proporcional a raiz quadrada da sobreposição das partículas para a colisão de partículas esféricas viscoelasticas. Existem vários trabalhos que apresentam uma equivalência entre o modelo linear e modelos não-lineares. Lan e Rosato (1995) usam uma energia máxima equivalente para a avaliação da rigidez linear, assumindo que a energia cinética incidente é armazenada como energia de deformação elástica Hertiziana e a rigidez da mola é obtida quando a energia não-linear é igualada à linear. Lan e Rosato (1997) usam uma sobreposição limite para determinar o coeficiente de rigidez. O valor da rigidez linear é associada com uma sobreposição máxima baseada em uma porcentagem do diâmetro da partícula. Dury e Ristow (1997) também determinam um valor da rigidez linear de mola baseado em uma sobreposição limite calculada com um porcentagem da soma dos raios de duas partículas. Buchholtz e Pöschel (1994) relacionam a rigidez linear com o Módulo de Young caracterizando uma restituição elástica das esferas. Antypov e Elliott (2011) mapeiam o modelo não-linear ao linear ajustando as constantes lineares com as não-lineares.

Além da força gravitacional, a força coesiva influência determinados tipos de partículas em meios específicos. Essa força aparece em alguns sistemas granulares e em leito fluidizado. A presença da coesão pode afetar esses escoamentos influenciando as velocidades de mínima fluidização, comportamento de segregação, surgimento de canais, podendo até levar a perda de fluidização do leito. Forças de coesão podem surgir de uma variedade de fatores, tais como, forças de van der Waals, forças "liquid bridging", forças eletrostáticas e forças magnéticas (VISSER, 1989) e (SEVILLE; WIL-LET; KNIGHT, 2000). Trabalhos que incluem coesão em simulações Langrageana veem sendo publicados na literatura. Mikami, Kamiya e Horio (1998) incorporaram um modelo coesivo "liquid bridging" para uma simulação de leito fluidizado. Os resultados ilustram o aumento da pressão na velocidade de mínima fluidização para partículas molhadas em relação ao sistema com partículas secas. Rhodes et al. (2001) utilizaram o mesmo leito fluidizado de Mikami, Kamiya e Horio (1998), e incorporaram um modelo de coesão em que as forças de coesão são calculadas apenas quando as partículas estão em contato físico. A magnitude da força de coesão é definida como uma constante igual a um múltiplo inteiro do peso das partículas. Mais recentemente, Wang e Rhodes (2004) desenvolveram novos parâmetros para quantificar a fluidez do leito fluidizado. Usando tais parâmetros, como a mobilidade da partícula e a velocidade média das partículas, os autores definiram critérios quantitativos para a transição de partículas do grupo A de Geldart para partículas do grupo C. Xu et al. (2002) implementaram um modelo para as forças de van der Waals em uma simulação de leito fluidizado, cujos resultados mostraram a formação de força estática dentro do leito. Posteriormente Ye, Hoef e Kuipers (2004) incorporaram as forças de van der Waals no modelo discreto da esfera suave utilizando a teoria Hamaker e observaram o típico comportamento dos sistemas coesivos, tais como, canais no leito e formação de aglomerados. Tatemoto, Mawatari e Noda (2005) estudaram os efeitos de coesão em uma simulação em leito vibro-fluidizados, examinando o efeito da frequência de vibração, bem como a queda de pressão no leito.

## **3 METODOLOGIA**

## **3.1 O Modelo Euleriano-Euleriano de duas fases separadas**

Nesta seção é apresentada a formulação Euleriana-Euleriana clássica que permite a obtenção do modelo denominado de duas fases separadas ou modelo de dois fluidos (ENWALD; PEIRANO; ALMSTEDT, 1996). Nesta formulação, a fase fluida e a fase sólida são consideradas como contínuas. Este modelo é geralmente obtido utilizando o procedimento de médias, e constitui uma das principais formulações das equações de campo macroscópicas para um sistema multifásico. O modelo é formulado considerando cada fase em separado, em termos de um sistema de equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia. Como ambas as fases interagem entre si, as equações de campo contêm termos devidos à essa interação relacionados com o transporte de massa, quantidade de movimento e energia através da interface.

A seguir são descritas as equações gerais médias, em condições isotérmicas e sem reações químicas, para um sistema gás-sólido, bem como, as leis de fechamento adotadas neste trabalho.

A equação da conservação da massa para a fase gasosa é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_g \rho_g) + \nabla . \left(\epsilon_g \rho_g \mathbf{v}_g\right) = 0 \tag{3.1}$$

Uma fase sólida total M, é formada pela soma das m-ésimas fases sólidas. Para

cada fase sólida m a equação da conservação da massa é:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_{sm}\rho_{sm}) + \nabla.\left(\epsilon_{sm}\rho_{sm}\mathbf{v}_{sm}\right) = 0$$
(3.2)

onde  $\epsilon_g$ ,  $\rho_g$  e  $\mathbf{v}_g$  na equação (3.1), são respectivamente a fração de vazio, a densidade e a velocidade para a fase gasosa. Na equação (3.2),  $\epsilon_{sm}$ ,  $\rho_{sm}$  e  $\mathbf{v}_{sm}$  são a fração volumé-trica, a densidade e a velocidade para a *m*-ésima fase sólida.

A equação da quantidade de movimento linear para o gás é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \epsilon_g \rho_g \mathbf{v}_g \right) + \nabla \left( \epsilon_g \rho_g \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g \right) = \nabla \cdot \bar{\sigma}_g^{-} + \epsilon_g \rho_g \mathbf{g} - \sum_{m=1}^M \mathbf{I}_{gm}$$
(3.3)

onde **g** é a aceleração da gravidade,  $\bar{\sigma}_g$  é o tensor das tensões da fase gasosa e  $\mathbf{I}_{gm}$  representa as forças de interação entre o gás e a *m*-ésima fase sólida. O tensor das tenões do gás  $\bar{\sigma}_g$ , é dado por:

$$\bar{\sigma}_g = -P_g \bar{I} + \bar{\tau}_g \tag{3.4}$$

onde  $P_g$  representa a pressão hidrostática, e  $\overline{I}$  o tensor unitário que também pode ser expresso, em notação indicial, através do delta de Kronecker. O tensor das tensões viscosas,  $\overline{\tau}_g$ , é modelado assumindo a relação tensão/deformação para um fluido Newtoniano considerando a hipótese de Stokes:

$$\bar{\bar{\tau}_g} = 2\epsilon_g \mu_g \,\bar{\bar{D}_g} + \epsilon_g \lambda_g tr(\bar{\bar{D}_g}) \,\bar{\bar{I}}$$
(3.5)

onde  $\bar{D}_g = \frac{1}{2} \left[ \nabla \mathbf{v}_g + (\nabla \mathbf{v}_g)^T \right]$  é denominado tensor taxa de deformação, e  $\mu_g$  e  $\lambda_g$  são as viscosidades dinâmica e volumétrica da fase gasosa, respectivamente.

Neste trabalho é considerado apenas empuxo e arrasto como força de interação entre as fases gasosa e sólida. Portanto, o termo  $I_{gm}$  é dado por:

$$\mathbf{I}_{gm} = -\epsilon_{sm} \nabla P_g - \beta_{gm} \left( \mathbf{v}_{sm} - \mathbf{v}_g \right)$$
(3.6)

em que na equação (3.6) o primeiro termo do lado direito representa o empuxo e o segundo termo representa a força de arrasto.

$$\beta_{gm} = \frac{3}{4} \frac{\epsilon_{sm} \epsilon_g \rho_g}{V_{rm}^2 d_{pm}} C_{Ds} \left(\frac{Re_m}{V_{rm}}\right) \left| \mathbf{v}_{sm} - \mathbf{v}_g \right|$$
(3.7)

onde  $C_{Ds}$  corresponde ao coeficiente de arrasto de uma partícula esférica dada pela relação de Valle (1948):

$$C_{Ds} = \left(0.63 + 4.8\sqrt{\frac{V_{rm}}{Re_m}}\right)^2$$
(3.8)

e  $V_{rm}$  é a velocidade terminal da fase sólida. Essa velocidade é modelada pela expressão de Garside e Al-Dibouni (1977):

$$V_{rm} = 0.5 \left( A - 0.06Re_m + \sqrt{(0.06Re_m)^2 + 0.12Re_m(2B - A) + A^2} \right)$$
(3.9)

onde  $A = \epsilon_g^{4.14}$  e  $B = \begin{cases} 0, 8\epsilon^{1.28} & \text{se } \epsilon_g \le 0.85 \\ \epsilon_g^{2.65} & \text{se } \epsilon_g > 0.85 \end{cases}$ 

O número de Reynolds para a fase sólida é definido por:

$$Re_m = \frac{\epsilon_g \rho_g \left| \mathbf{v}_g - \mathbf{v}_{sm} \right| d_{pm}}{\mu_g}$$
(3.10)

A equação da quantidade de movimento linear para a fase sólida é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \epsilon_{sm} \rho_{sm} \mathbf{v}_{sm} \right) + \nabla \left( \epsilon_{sm} \rho_{sm} \mathbf{v}_{sm} \mathbf{v}_{sm} \right) = \nabla \left[ \sigma_{sm}^{=} + \epsilon_{sm} \rho_{sm} \mathbf{g} + \mathbf{I}_{gm} - \sum_{l=1, l \neq m}^{M} \mathbf{I}_{ml} \right]$$
(3.11)

A transferência da quantidade de movimento entre as fases sólidas,  $I_{ml}$ , é representado por:

$$\mathbf{I}_{ml} = -\beta_{sml} \left( \mathbf{v}_{sl} - \mathbf{v}_{sm} \right) \tag{3.12}$$

O coeficiente de arrasto  $\beta_{sml}$ , é expresso por uma versão simplificada da teoria

cinética usada por Syamlal (1987):

$$\beta_{sml} = \frac{3\left(1 + e_{lm}\right)\left(\frac{\pi}{2} + C_{flm}\frac{\pi^2}{8}\right)\epsilon_{sl}\rho_{sl}\epsilon_{sm}\rho_{sm}\left(d_{pl} + d_{pm}\right)^2 g_{0_{lm}}\left|\mathbf{v}_{sl} - \mathbf{v}_{sm}\right|}{2\pi\left(\rho_{sl}d_{pl}^3 + \rho_{sm}d_{pm}^3\right)}$$
(3.13)

onde  $e_{lm}$  é o coeficiente de restituição e  $C_{flm}$  é o coeficiente de fricção entre a *m*ésima fase sólida e a *l*-ésima fase sólida. De acordo com Lebowitz (1964), a função de distribuição radial  $g_{0_{lm}}$  para uma mistura de esferas rígidas é:

$$g_{0_{lm}} = \frac{1}{\epsilon_g} + \frac{3d_{pl}d_{pm}}{\epsilon_g^2(d_{pl} + d_{pm})} \sum_{\lambda=1}^M \frac{\epsilon_{s\lambda}}{d_{p\lambda}}$$
(3.14)

O tensor das tensões da fase sólida  $\sigma_{sm}^{=}$  é formulado baseado nos estudos de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), onde a teoria cinética dos escoamentos granulares descrita por Jenkins e Savage (1983) usada para escoamentos dispersos (rápidos) e a teoria do estado crítico de Schaeffer (1987) usada para escoamentos densos (lentos) são combinadas por meio de uma chave no ponto de compactação crítico para a mínima fluidização, alternando a formulação do tensor das tensões da fase entre as duas diferentes relações constitutivas:

$$\vec{\sigma}_{s} = \begin{cases} -P_{sm}^{p} \vec{I} + \tau_{sm}^{=p} & \text{se } \epsilon_{g} \le \epsilon_{g}^{*} \\ -P_{sm}^{v} \vec{I} + \tau_{sm}^{=v} & \text{se } \epsilon_{g} > \epsilon_{g}^{*} \end{cases}$$
(3.15)

onde,  $P_{sm}$  é a pressão do sólido e  $\tau_{sm}^{=}$  é o tensor das tensões viscosas. Os sobrescrito p é usado no caso do regime plástico e o sobrescrito v para o regime viscoso. A variável  $\epsilon_{g}^{*}$  respresenta a fração de vazio na mínima fluidização.

Similarmente as funções usadas na teoria de escoamento plástico (JENIKE, 1987), define-se uma função que permite certa compressibilidade da fase sólida, respresentando assim, o termo da pressão do sólido para o regime de escoamento plástico:

$$P_{sm}^{p} = \epsilon_{sm} P^{*} \tag{3.16}$$

onde  $P^*$  é respresentado por uma lei empírica:  $P^* = A \left(\epsilon_g^* - \epsilon_g\right)^n$  com valores típicos

para  $A = 10^{25}$  e n = 10 (SYAMLAL; ROGERS; O'BRIEN, 1993).

O tensor das tensões viscosas para o regime plástico é calculado usando a formulação de Schaeffer (1987):

$$\tau_{sm}^{=\ p} = 2\mu_{sm}^{p} D_{sm}^{=}$$
(3.17)

com  $\mu_{sm}^p = \frac{P^* sin\phi}{2\sqrt{I_{2D}}}$ , onde  $\phi$  é o ângulo de fricção interna e  $I_{2D}$  representa o segundo invariante do tensor taxa de deformação  $D_{sm}^{=}$ :

$$I_{2D} = \frac{1}{6} \left[ (D_{s11} - D_{s22})^2 + (D_{s22} - D_{s33})^2 + (D_{s33} - D_{s11})^2 \right] + D_{s12}^2 + D_{s23}^2 + D_{s31}^2$$
(3.18)

Os termos do regime de escoamento viscoso na equação (3.15) são baseados em uma forma modificada da teoria cinética de partículas esféricas, inelásticas e suaves desenvolvida por Lun et al. (1984). A pressão da fase sólida no regime viscoso é expressa por:

$$P_{sm}^{\nu} = K_{1m} \epsilon_{sm}^2 \theta \tag{3.19}$$

com,  $K_{1m} = 2(1 + e_{lm})\rho_{sm}g_{0_{lm}}$ 

O tensor das tensões do sólido no escoamento viscoso é modelado considerando um fluido Newtoniano:

$$\tau_{sm}^{=\nu} = 2\mu_{sm}^{\nu} D_{sm}^{=} + \lambda_{sm}^{\nu} tr\left(D_{sm}^{=}\right)^{=} \overline{I}$$
(3.20)

O tensor taxa deformação  $D_{sm}^{=}$  é dado por:

$$\boldsymbol{D}_{sm}^{=} = \frac{1}{2} \left[ \nabla \mathbf{v}_{sm} + (\nabla \mathbf{v}_{sm})^{T} \right]$$
(3.21)

A viscosidade volumétrica  $\lambda_{sm}^{v}$  é expressa por:

$$\lambda_{sm}^{v} = K_{2m}\epsilon_{sm}\sqrt{\theta} \tag{3.22}$$

A constante  $K_{2m}$  é:

$$K_{2m} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} d_{pm} \rho_{sm} (1 + e_{lm}) \epsilon_{sm} g_{0_{lm}} - \frac{2}{3} K_{3m}$$
(3.23)

e a constante  $K_{3m}$  é:

$$K_{3m} = \frac{d_{pm}\rho_{sm}\sqrt{\pi}}{6(3-e_{lm})} \left[ 1 + \frac{2}{5}(1+e_{lm})(3e_{lm}-1)\epsilon_{sm}g_{0_{lm}} \right] + \frac{8d_{pm}\rho_{sm}\epsilon_{sm}}{10\sqrt{\pi}}g_{0_{lm}}(1+e_{lm}) \quad (3.24)$$

A viscosidade dinâmica  $\mu_{sm}^v$  é dada por:

$$\mu_{sm}^{v} = K_{3m}\epsilon_{sm}\sqrt{\theta} \tag{3.25}$$

A temperatura granular  $\theta$  é calculada, no presente trabalho, por uma expressão algébrica de acordo com a equação de energia de Lun et al. (1984). Essa equação algébrica para a temperatura granular é obtida assumindo que a energia granular é dissipada localmente, desprezando as contribuições de difusão e de convecção, permanecendo somente os termos de dissipação e geração (SYAMLAL; ROGERS; O'BRIEN, 1993):

$$\theta = \left[\frac{-(K_{1m}\epsilon_{sm} + \rho_{sm})tr(\vec{D}_{sm}) + \sqrt{[(K_{1m}\epsilon_{sm} + \rho_{sm})^2 tr^2(\vec{D}_{sm})]}}{2\epsilon_{sm}K_{4m}} + \frac{\sqrt{4K_{4m}\epsilon_{sm}[2K_{3m}tr(\vec{D}_{sm}^{-2}) + K_{2m}tr^2(\vec{D}_{sm})]]}}{2\epsilon_s K_{4m}}\right]$$
(3.26)

onde,  $K_{4m} = \frac{12(1-e_{lm}^2)\rho_{sm}g_{0_{lm}}}{d_{pm}\sqrt{\pi}}.$ 

## 3.2 O Modelo Euleriano-Lagrangeano baseado no Método dos Elementos Discretos

Um importante modelo discreto é o chamado Método dos Elementos Discretos (DEM - Discrete Element Method), originalmente desenvolvido por Cundall e Strack (1979). O método considera um número finito de partículas discretas que interagem entre si por meio de forças de contato. O movimento translacional e rotacional de cada partícula em um sistema é descrito pelas equações de movimento de Newton. Simulações DEM fornecem informações cinemáticas e dinâmicas, como as trajetórias e as forças transientes agindo sobre as partículas individualmente, o que é difícil de se obter através de ensaios experimentais. O método DEM tem sido acoplado a dinâmica dos fluidos computacional para descrever os escoamentos fluido-partículas (TSUJI; KAWAGUCHI; TANAKA, 1993) o que torna possível o estudo de vários sistemas de partículas em processos de engenharia.

Nesta seção, apresenta-se a formulação matemática para o modelo Euleriano-Lagrangeano, que consiste em utilizar técnicas da dinâmica dos fluidos computacional combinadas com o método DEM. Nesta abordagem, o fluido (gás) é considerado contínuo e é modelado através de um sistema de equações de conservação de massa e quantidade de movimento (ver seção 3.1). No sistema particulado, cada partícula é modelada individualmente através das Leis de Newton. A influência hidrodinâmica das partículas sobre o fluido aparecem principalmente na interface através da força de arrasto.

No modelo DEM apresentado, uma fase sólida *m* é representada por  $N_m$  partículas esféricas, sendo que cada partícula possui diâmetro  $D_m$  e densidade  $\rho_m$ . Para um total de *M* fases sólidas, o número total de partículas é  $N = \sum_{m=1}^{M} N_m$ . No presente trabalho, as fases sólidas são diferenciadas de acordo com o diâmetro e a densidade.

O movimento individual de cada partícula *i*, com massa  $m^{(i)}$  é calculado a partir da segunda Lei de Newton:

$$m^{(i)}\frac{d^{2}\mathbf{X}^{(i)}}{dt^{2}} = \mathbf{F}_{total}^{(i)}(t) = m^{(i)}\mathbf{g} + \mathbf{F}_{contato}^{(i)}(t) + \mathbf{F}_{fluido}^{(i\in k,m)}(t) + \mathbf{F}_{coesiva}^{(i)}(t)$$
(3.27)

onde  $\mathbf{X}^{(i)}$  é a posição da partícula e  $\mathbf{g}$  é a aceleração da gravidade.  $\mathbf{F}_{contato}^{(i)}$  é a força de contato devido às colisões,  $\mathbf{F}_{fluido}^{(i \in k, m)}$  é a força de interação fluido-partícula (pressão + força de arrasto) sobre a partícula *i* pertencente a fase sólida *m* na célula computacional

 $k \in \mathbf{F}_{coesiva}^{(i)}$  representa a força coesiva entre partícula-partícula e partícula-parede.  $\mathbf{F}_{total}^{(i)}$ é a soma de todas as forças que atuam sobre a partícula *i*.

O Torque das forças externas em uma dada partícula é calculado por:

$$\mathbf{T}^{(i)} = I^{(i)} \frac{d\boldsymbol{w}^{(i)}}{dt}$$
(3.28)

onde *I* é o momento de inércia de massa, que para partículas esféricas de raio  $r^{(i)}$  é dado por  $I^{(i)} = \frac{2}{5}m^{(i)}r^{(i)^2}$ .

### 3.2.1 Cálculo da força de interação fluido-partícula e da força coesiva

No MFIX-DEM existem dois métodos numéricos para o cálculo da força de interação fluido-partícula. No primeiro método, as velocidades médias do gás e do sólido são calculadas no centro de cada células da malha computacional. A velocidade média do sólido é dada pelo volume de sólido da fase *m* pertecente a célula computacional *k*. Nesse caso, como o método DEM fornece a velocidade individual de cada partícula no final de cada passo no tempo, se  $\mathbf{V}_m^{(i \in k)}$  é a velocidade da partícula *i* pertecente a fase sólida *m* na célula computacional *k*, então a velocidade média do volume do sólido da fase *m* na célula computacional *k* é:

$$\mathbf{v}_{sm} = \frac{\sum \boldsymbol{V}_m^{(i\in k)} \, \mathbf{V}_m^{(i\in k)}}{\boldsymbol{V}_m^{(k)}} \tag{3.29}$$

onde  $\Psi_m^{(i \in k)}$  é o volume da partícula *i* pertecente a fase sólida *m* na célula computacional *k*, e  $\Psi_m^{(k)}$  é o volume total do sólido da fase *m* na célula computacional *k*.

Portanto, a força de interação fluido-partícula sobre uma partícula i pertencente a uma fase sólida m na célula computacional k no instante t, é dada por:

$$\mathbf{F}_{fluido}^{(i\in k,m)} = -\nabla P_g\left(\mathbf{x}_k\right) \Psi_m^{(k)} + \frac{\beta_m^{(k)} \Psi_m^{(k)}}{\epsilon_{sm}} \left(\mathbf{v}_g\left(\mathbf{x}_k\right) - \mathbf{v}_{sm}(\mathbf{x}_k)\right)$$
(3.30)

onde,  $\mathbf{x}_k$  é o centro da célula computacional k,  $\boldsymbol{V}_m^{(k)}$  é o volume das partículas da fase m

e  $\beta_m^{(k)}$  é o coeficiente de arrasto na célula computacional *k*.

A partir dessa aproximação, em que a força de interação fluido-partícula é constante para todas as partículas que residem em uma mesma célula computacional, o termo de transferência de momento na interface  $\mathbf{I}_{gm}^{(k)}$  na célula computacional k é dado por:

$$\mathbf{I}_{gm}^{(k)} = -\epsilon_{sm} \nabla P_g \left( \mathbf{x}_k \right) \beta_m^{(k)} \left( \mathbf{v}_g \left( \mathbf{x}_k \right) - \mathbf{v}_{sm}(\mathbf{x}_k) \right)$$
(3.31)

Existem diversas correlações derivadas de estudos experimentais e numéricos usadas para a modelagem do coeficiente de arrasto na interface. Uma parametrização geral para  $\beta_m^{(k)}$  que agrupa os diferentes modelos pode ser escrita como:

$$\beta_m^{(\forall i \in k)} = \beta_m^{(k)} = \beta\left(\rho_m, D_m, \left|\mathbf{v}_g\left(\mathbf{x}_k\right) - \mathbf{v}_{sm}(\mathbf{x}_k)\right|, \rho_g, \mu_g\right)$$
(3.32)

No segundo método, as velocidades médias das fases são calculadas de acordo com a posição de cada partícula na malha computacional. Considere uma partícula i, pertencente a uma fase sólida m na célula computacional k no instante t. A força de interação fluido-partícula sobre esta partícula é representada por:

$$\mathbf{F}_{fluido}^{(i\in k,m)} = -\nabla P_g\left(\mathbf{X}^{(i)}\right) \mathcal{V}_m^{(i\in k)} + \frac{\beta_m^{(i\in k)} \mathcal{V}_m^{(i\in k)}}{\epsilon_{sm}} \left(\mathbf{v}_g\left(\mathbf{X}^{(i)}\right) - \mathbf{V}^{(i)}\right)$$
(3.33)

onde  $P_g(\mathbf{X}^{(i)}) \in \mathbf{v}_g(\mathbf{X}^{(i)})$  são a pressão do gás e o campo de velocidade na posição das partículas.  $V_m^{(i \in k)} = \pi D_m^3/6$  é o volume da partícula e  $\beta_m^{(i \in k)}$  é o coeficiente de arrasto na interface da partícula *i* pertencente a célula computacional *k*.

O termo de transferência de quantidade de movimento na interface,  $\mathbf{I}_{gm}^{(k)}$ , na célula computacional k é calculado utilizando a velocidade média do gás interpolada na posição da partícula na malha Euleriana (GARG et al., 2010). Este termo é calculado em cada célula computacional k, com centro  $\mathbf{x}_k$  e com volume  $\mathcal{V}^{(k)}$ , através da soma da força de interação fluido-particula (equação(3.33)) atuando nas  $N_m$  partículas da fase sólida *m*, que pertencem a célula computacional *k*:

$$\mathbf{I}_{gm}^{(k)} = -\epsilon_{sm} \nabla P_g \left( \mathbf{x}_k \right) + \frac{1}{\mathcal{V}^{(k)}} \sum_{i=1}^{N_m} \beta_m^{(i \in k)} \left( \mathbf{v}_g \left( \mathbf{X}^{(i)} \right) - \mathbf{V}^{(i)} \right) \phi^{(i)}$$
(3.34)

onde  $\phi^{(i)}$  é o fator de interpolação que determina a contribuição da força de arrasto de cada partícula na célula computacional (GARG et al., 2010; GOPALAKRISHNAN; TAFTI, 2013).

Nesse segundo método, uma parametrização geral para  $\beta_m^{(i \in k)}$  que agrupa os diferentes modelos para o cálculo do coeficiente de arrasto na interface é dada por:

$$\beta_m^{(i\in k)} = \beta\left(\rho_m, D_m, \left|\mathbf{V}^{(i)} - \mathbf{v}_g\left(\mathbf{X}^{(i)}\right)\right|, \rho_g, \mu_g\right)$$
(3.35)

No capítulo 4 do presente trabalho, é apresentado um estudo sobre a influência do modelo de arrasto em leitos fluidizados gás-sólido.

As forças coesivas  $\mathbf{F}_{coesiva}^{(i)}$  entre as partículas são modeladas pela força de van der Waals (ISRAELACHVILI, 1991):

$$F_{vdW} = \frac{Ar^{(i)}}{12H^2}$$
(3.36)

onde  $F_{vdW}$  é a força de van der Waals,  $r^{(i)}$  é o raio da partícula, A é a constante de Hamaker específica do material, e H é a distância entre as superfícies das partículas, dada por:

$$H = \sqrt{\left(X^{(i)} - X^{(j)}\right)^2 + \left(Y^{(i)} - Y^{(j)}\right)^2} - 2r^{(i)}$$
(3.37)

A força coesiva entre partícula e parede é (ISRAELACHVILI, 1991):

$$F_{vdW,parede} = \frac{A_{parede}r^{(i)}}{6H^2}$$
(3.38)

Para as expressões (3.36) e (3.38), a força coesiva se aproxima do infinito, conforme a distância entre as partículas se aproxima de zero. Essa singularidade constituída no contato da partícula é evitada através da introdução de uma distância "cut-off",  $H_{cut}$ . Para distâncias de separação entre as partículas inferiores a esta distância "cutoff", a força coesiva entre as partículas é dada por uma força de adesão superficial  $F_{ad}$ , conforme o modelo de Seville (1997):

$$F_{ad} = 2\pi r^{(i)} \gamma \tag{3.39}$$

onde  $\gamma$  é uma constante que considera a área superficial da partícula. A superfície de contato é calculada com base na constante de Hamaker especificada e na distância "cut-off" para assegurar que a força é contínua na distância "cut-off".

#### 3.2.2 Cálculo das forças de contato: modelo da esfera suave

No presente trabalho, a força de contato  $\mathbf{F}_{contato}^{(i)}$  é modelada de acordo com o modelo de esfera suave proposto por (CUNDALL; STRACK, 1979). Este modelo é baseado em um sistema linear massa, mola e amortecedor que utiliza um passo fixo no tempo permitindo que as partículas permaneçam em contato por alguns instantes. A força de contato é calculada em função da deformação do particulado. A seguir, é descrito o modelo da esfera suave implementado no código MFIX-DEM.

A força de contato  $\mathbf{F}_{contato}^{(i)}$  sobre uma partícula *i*, no instante *t*, é calculada como a soma das forças de contato de todas as partículas *j* que estão em contato com a partícula *i*, ou seja:

$$\mathbf{F}_{contato}^{(i)}(t) = \sum_{j=1}^{N} \left( \mathbf{F}_{n,ij}(t) + \mathbf{F}_{t,ij}(t) \right)$$
(3.40)

onde  $\mathbf{F}_{n,ij}$  e  $\mathbf{F}_{t,ij}$  representam as componentes normal e tangencial da força de contato entre as partículas *i* e *j*.

As forças de contato são calculadas a partir da sobreposição  $\delta$  entre as partículas, bem como de suas respectivas velocidades relativas. Portanto, considerando o esquema mostrado na figura 1, onde duas partículas *i* e *j* de diâmetros  $D^{(i)}$  e  $D^{(j)}$  e posição  $\mathbf{X}^{(i)}$ e  $\mathbf{X}^{(j)}$  estão em contato. A partícula *i* está se movendo com velocidade linear e angular igual a  $\mathbf{V}^{(i)}$  e  $\mathbf{w}^{(i)}$  respectivamente, assim como, a partícula *j* está se movendo com velocidade linear e angular igual a  $\mathbf{V}^{(j)}$  e  $\mathbf{w}^{(j)}$  respectivamente. A sobreposição das partículas  $\delta_n$  na direção normal é dada por:

$$\delta_n = 0, 5 \left( D^{(i)} + D^{(j)} \right) - \left| \mathbf{X}^{(i)} - \mathbf{X}^{(j)} \right|$$
(3.41)

A velocidade relativa no ponto de contato entre as partículas  $i \in j \in$ :

$$\mathbf{V}_{ij} = \mathbf{V}^{(i)} - \mathbf{V}^{(j)} + \left( L^{(i)} \boldsymbol{w}^{(i)} - L^{(j)} \boldsymbol{w}^{(j)} \right) \times \mathbf{n}_{ij}$$
(3.42)

onde  $L^{(i)}$  e  $L^{(j)}$  são a distância do centro das partículas *i* e *j* até o ponto de contato:

$$L^{(i)} = \frac{\left|\mathbf{X}^{(j)} - \mathbf{X}^{(i)}\right|^{2} + r^{(i)^{2}} - r^{(j)^{2}}}{2\left|\mathbf{X}^{(j)} - \mathbf{X}^{(i)}\right|}$$
(3.43)

e

$$L^{(j)} = \left| \mathbf{X}^{(j)} - \mathbf{X}^{(i)} \right| - L^{(i)}$$
(3.44)

 $r^{(i)}$  e  $r^{(j)}$  são os raios das partículas *i* e *j* respectivamente.



Figura 1: Esquema de colisão entre duas partículas no modelo esfera suave.

O Torque total sobre a partícula *i* é definido por:

$$\mathbf{T}^{(i)}(t) = \sum_{j=1}^{N} \left( L^{(i)} \mathbf{n}_{ij} \times \mathbf{F}_{t,ij}(t) \right)$$
(3.45)

As componentes normais  $\mathbf{V}_{n,ij}$  e tangenciais  $\mathbf{V}_{t,ij}$  da velocidade relativa são respectivamente:

$$\mathbf{V}_{n,ij} = (\mathbf{V}_{ij}.\mathbf{n}_{ij})\mathbf{n}_{ij} \tag{3.46}$$

$$\mathbf{V}_{t,ij} = \mathbf{V}_{ij} - \mathbf{V}_{n,ij} \tag{3.47}$$

Na modelagem esfera suave, a sobreposição  $\delta$  entre duas partículas é representada por um sistema massa, mola e amortecedor que pode ser linear ou não-linear. A mola representa o recuo das partículas em colisão e o amortecedor a dissipação de energia cinética devido às colisões inelásticas (figura 2).



Figura 2: Sistema massa-mola-amortecedor nas direções normal e tangencial

A partir da equação (3.40), as componentes normal e tangencial da força de contato, são decompostas em força conservativa (mola,  $\mathbf{F}^{S}$ ) e força dissipativa (amortecedor,  $\mathbf{F}^{D}$ ), respectivamente, conforme segue:

$$\mathbf{F}_{n,ij}(t) = \mathbf{F}_{n,ij}^{S} + \mathbf{F}_{n,ij}^{D}$$
(3.48)

$$\mathbf{F}_{t,ij}(t) = \mathbf{F}_{t,ij}^S + \mathbf{F}_{t,ij}^D$$
(3.49)

Com base na equação (3.48), apresenta-se, a seguir uma proposta para o desenvolvimento de um novo método para o cálculo da rigidez da mola durante o contato de forças normais no modelo massa, mola e amortecedor usado pelo método dos elementos discretos (DEM). O método proposto baseia-se na comparação da sobreposição  $\delta$ na direção normal durante o contato das partículas entre o modelo linear com modelos não-lineares. A comparação é feita considerando a sobreposição máxima, a sobreposição média e o tempo de contato, entre as soluções analíticas do modelo linear e as numéricas do modelo não-linear.

A solução analítica do modelo linear e a solução numérica do modelo não-linear são descritas nas seções 3.2.2.1 e 3.2.2.2 respectivamente. Por fim, a seção 3.2.2.3 traz uma equivalência para o cálculo do coeficiente de rigidez de mola na direção normal do modelo linear, derivada através dos parâmetros de contato iguais àqueles encontrados no modelo não-linear através de computação numérica.

#### 3.2.2.1 Modelo linear

O modelo linear que considera um sistema massa, mola e amortecedor (LSD linear spring-dashpot) é um modelo simples, no qual a lei de Hook ( $\mathbf{F}(\delta_n) = k\delta_n$ ) é usada para descrever a força elástica.

A força de mola normal  $\mathbf{F}_{n,ij}^{S}$  e a força de mola tangencial  $\mathbf{F}_{t,ij}^{S}$ , equações (3.48) e (3.49), em um instante qualquer durante o contato das partículas, é calculada com base

na sobreposição  $\delta$ :

$$\mathbf{F}_{n,ij}^{S} = -k_n \delta_n \mathbf{n}_{ij} \tag{3.50}$$

$$\mathbf{F}_{t,ij}^{S} = -k_t \delta_t \mathbf{t}_{ij} \tag{3.51}$$

onde  $k_n$  e  $k_t$  representam a rigidez da mola nas direções normal e tangencial, respectivamente.  $\delta_t$  é o deslocamento tangencial que no instante  $(t + \Delta t)$ , é calculado por:

$$\delta_t(t + \Delta t) = \delta_t(t) + |\mathbf{V}_{t,ij}| \Delta t \tag{3.52}$$

Para o caso em que  $|\mathbf{F}_{t,ij}| > \mu_e |\mathbf{F}_{n,ij}|$ , ocorre o deslizamento e portanto a força de contato tangencial é dada de acordo com a lei de atrito de Coulomb:

$$\mathbf{F}_{t,ij} = -\mu_c \left| \mathbf{F}_{n,ij} \right| \mathbf{t}_{ij} \tag{3.53}$$

onde  $\mu_c$  é o coeficiente de atrito dinâmico e  $\mathbf{t}_{ij}$  é o vetor tangente unitário:

$$\mathbf{t}_{ij} = \frac{\mathbf{V}_{t,ij}}{\left|\mathbf{V}_{t,ij}\right|} \tag{3.54}$$

As forças dissipativas normal  $\mathbf{F}_{n,ij}^{D}$  e tangencial  $\mathbf{F}_{t,ij}^{D}$ , equações (3.48) e (3.49) respectivamente, são calculadas baseadas nas componentes normal e tangencial da velocidade relativa:

$$\mathbf{F}_{n,ij}^{D} = -\eta_n \mathbf{V}_{n,ij} \tag{3.55}$$

$$\mathbf{F}_{t,ij}^D = -\eta_t \mathbf{V}_{t,ij} \tag{3.56}$$

onde  $\eta_n$  e  $\eta_t$  são os coeficientes de amortecimento nas direções normal e tangencial, respectivamente.

Os coeficientes de rigidez de mola  $k_n$  e amortecimento  $\eta_n$ , para colisões entre duas partículas *i* e *j*, são calculados a partir da solução da equação diferencial do oscilador harmônico amortecido. Para isso, considere a equação que descreve a colisão entre duas partículas, em função da sobreposição  $\delta_n$  na direção normal:

$$m_{eff}\ddot{\delta}_n = -k_n\delta_n - \eta_n\dot{\delta}_n \tag{3.57}$$

ou

$$\ddot{\delta}_n + 2\Psi \dot{\delta}_n + \Omega_0^2 \delta_n = 0 \tag{3.58}$$

onde  $m_{eff} = m_m m_l / (m_m + m_l)$  é a massa efetiva,  $\Omega_0 = \sqrt{k_n / m_{eff}}$  é a frequência natural do oscilador harmônico não-amortecido e  $\Psi = \eta_n / (2m_{eff})$  é o coeficiente de amortecimento responsável pela dissipação de energia cinética devido às colisões.

A solução da equação diferencial do oscilador harmônico amortecido (equações (3.57) e (3.58)), no caso de sistemas sub-amortecidos ( $\Omega_0 > \Psi$ ), com as condições iniciais  $\delta_n(0) = 0$  e  $\dot{\delta}_n(0) = v_0$  é dada por:

$$\delta_n(t) = (v_0/\Omega) \exp(-\Psi t) \sin(\Omega t)$$
(3.59)

$$\dot{\delta}_n(t) = (v_0/\Omega) \exp(-\Psi t)(-\Psi \sin(\Omega t) + \Omega \cos(\Omega t))$$
(3.60)

onde  $v_0$  é a velocidade relativa inicial e  $\Omega = \sqrt{\Omega_0^2 - \Psi^2}$  é a frequência natural amortecida do oscilador.

O tempo de contato entre as partículas pode ser determinado a partir da condiç $\delta_n(t_{c,n}) = 0$  na equação (3.59) o que resulta em:

$$t_{c,n} = \pi/\Omega \tag{3.61}$$

ou

$$t_{c,n} = \pi \left( \frac{k_n}{m_{eff}} - \frac{\eta_n^2}{4m_{eff}^2} \right)^{-1/2}$$
(3.62)

A velocidade relativa logo após o término do contato entre as partículas é igual

 $\dot{\delta}_n(t_{c,n}) = -v_0 \exp(-\Psi t_{c,n})$ . O coeficiente de restituição na direção normal é dado por:

$$e_n = -\frac{\dot{\delta}_n(t_{c,n})}{\dot{\delta}_n(0)} = \exp(-\pi \Psi/\Omega)$$
(3.63)

ou

$$e_n = \exp\left(-\frac{\eta_n t_{c,n}}{2m_{eff}}\right) \tag{3.64}$$

O modelo linear massa-mola-amortecedor prevê que o coeficiente de restituição normal  $e_n$  e o tempo de contato  $t_{c,n}$  são independentes da velocidade de impacto  $v_0$  (ver equações (3.63) e (3.62)).

Aplicando a função inversa na equação (3.63) é possível calcular o valor do parâmetro  $\Psi$ :

$$\Psi = \frac{-\ln e_n}{\sqrt{\ln^2 e_n + \pi^2}} \Omega_0 \tag{3.65}$$

A partir das equações (3.62) e (3.64), é obtida uma expressão para  $k_n$  e para  $\eta_n$ :

$$k_n = \frac{m_{eff} \left( ln^2 e_n + \pi^2 \right)}{(t_{c,n})^2}$$
(3.66)

$$\eta_n = \frac{2\sqrt{m_{eff}k_n}|\ln e_n|}{\sqrt{\ln^2 e_n + \pi^2}}$$
(3.67)

Se os valores de  $e_n$  e  $t_{c,n}$  forem conhecidos através de dados experimentais, os coeficientes  $k_n$  e  $\eta_n$  podem ser determinados através das equações (3.66) e (3.67). Normalmente, em problemas envolvendo simulações numéricas, somente o valor de  $e_n$  é conhecido, e portanto os valores de  $k_n$  são estimados. Seguindo os trabalhos de Shäfer, Dippel e Wolf (1996), Silbert, Landry e Grest (2003) considera-se, no presente trabalho, para a direção tangencial  $k_t = 2/7k_n$  e  $\eta_t=0.5\eta_n$ .

A sobreposição máxima  $\delta_{max}$  pode ser derivada a partir da condição  $\delta_n(t_{max}) = 0$ , e das equações (3.59) e (3.60):

$$\delta_{max} = (v_0 / \Omega_0) \exp\left(-\frac{\arctan(\beta)}{\beta}\right)$$
(3.68)

onde  $\beta = -\Omega/\Psi = \pi/\ln e_n$  para  $e_n < 1$ . O tempo de contato pode ser reescrito como:

$$t_{c,n} = \frac{\pi}{\Omega_0} \sqrt{\left(1 + \frac{1}{\beta^2}\right)}$$
(3.69)

A sobreposição média  $\overline{\delta}_n$  é calculada pela expressão:

$$\overline{\delta}_n = \frac{1}{t_{c,n}} \int_0^{t_{c,n}} \delta_n(t) = \frac{v_0}{\pi \Omega_0} \frac{-\beta}{\sqrt{1+\beta^2}} \left( \exp\left(\frac{\pi}{\beta}\right) + 1 \right)$$
(3.70)

Para uma colisão perfeitamente elástica ( $e_n = 1$ ), tem-se  $\Psi = \eta_n = 0$  e respectivamente as seguintes expressões para a sobreposição máxima, tempo de contato e sobreposição média:  $\delta_{max} = v_0/\Omega_0$ ,  $t_{c,n} = \pi/\Omega_0$  e  $\overline{\delta}_n = 2v_0/(\pi\Omega_0)$ .

Usando os seguintes parâmetros de adimensionalização na equação (3.58):

$$\delta_n^* = \frac{\delta_n}{v_0} \Omega_0, \quad \delta_n^{*\prime} = \frac{\delta_n}{v_0}, \quad t^* = t \Omega_0$$

a equação de deslocamento para a sobreposição adimensional, na direção normal ( $\delta_n^*$ ) pode ser escrita por:

$$\delta_n^{*''} + 2\nu^* \delta_n^{*'} + \delta_n^* = 0 \tag{3.71}$$

onde linha ( $\iota$ ) denota a derivada em relação a  $t^*$ . O parâmetro  $v^*$  é o coeficiente de amortecimento adimensional dado por ( $e_n > 0$ ):

$$\nu^* = \frac{\Psi}{\Omega_0} = \frac{-\ln e_n}{\sqrt{\ln^2 e_n + \pi^2}}$$
(3.72)

A solução da equação com sobreposição adimensional (equação (3.71)), no caso de sistema sub-amortecido ( $v^* < 1$ ), com condições iniciais  $\delta_n^*(0) = 0$  e  $\delta_n^{*\prime}(0) = 1$  é dada por:

$$\delta_n^*(t^*) = (1/\Omega^*) \exp(-\nu^* t^*) \sin(\Omega^* t^*)$$
(3.73)

onde  $\Omega^* = \sqrt{1 - \nu^{*2}}$  é a frequência natural amortecida adimensional do oscilador.

As expressões adimensionais para a sobreposição máxima, tempo de contato e

sobreposição média são respectivamente:

$$\delta_{max}^* = \exp\left(-\frac{\arctan(\beta^*)}{\beta^*}\right) \tag{3.74}$$

$$t_{c,n}^* = \pi \sqrt{\left(1 + \frac{1}{\beta^{*2}}\right)}$$
(3.75)

$$\overline{\delta}_n^* = \frac{1}{\pi} \frac{-\beta^*}{\sqrt{1+\beta^{*2}}} \left( \exp\left(\frac{\pi}{\beta^*}\right) + 1 \right)$$
(3.76)

onde  $\beta^* = -\Omega^* / \nu^* = \pi / \ln e_n = \beta$ , for  $e_n < 1$ .

Para colisões perfeitamente elásticas ( $e_n = 1 \text{ e } v^* = 0$ ), a sobreposição máxima adimensional, o tempo de contato adimensional e a sobreposição média adimensional são respectivamente expressos por:  $\delta_{max}^* = 1$ ,  $t_{c,n}^* = \pi$ , e  $\overline{\delta}_n^* = 2/\pi$ .

As figuras 3, 4 e 5 apresentam os gráficos para a sobreposição adimensional,  $\delta^*$ , versus tempo adimensional, velocidade adimensional,  $v^*$ , versus tempo adimensional, e aceleração adimensional,  $a^*$ , versus sobreposição adimensional, respectivamente, para diversos valores do coeficiente de restituição normal ( $e_n = 0.9$ ; 0,7; 0,5; 0,3; 0,1). Essas curvas foram obtidas até o tempo de contato.



Figura 3: Sobreposição adimensional (modelo linear mola-amortecedor).

A tabela 1 mostra, para diferentes valores do coeficiente de restituição normal ( $e_n$  = 1; 0,9; 0,7; 0,5; 0,3; 0,1), os seguintes parâmetros adimensionais: coeficiente de



Figura 4: Velocidade adimensional (modelo linear mola-amortecedor).



Figura 5: Aceleração adimensional (modelo linear mola-amortecedor).
amortecimento  $\nu^*$ , tempo na sobreposição máxima  $t^*_{max}$ , sobreposição máxima  $\delta^*_{max}$ , sobreposição média  $\overline{\delta}^*_n$ , tempo de contato  $t^*_{c,n}$ , aceleração inicial  $a^*(0)$ , e aceleração no tempo final de contato  $a^*(t^*_{c,n})$ , respectivamente.

$e_n$	$\nu^*$	$t_{max}^*$	$\delta^*_{max}$	$\overline{\delta}_n^*$	$t^*_{c,n}$	$a^{*}(0)$	$a^*(t^*_{c,n})$
1	0	1,5708	1	0,6366	3,1416	0	0
0,9	0,0335	1,5381	0,9498	0,6044	3,1434	-0,0670	0,0603
0,7	0,1128	1,4671	0,8475	0,5377	3,1618	-0,2256	0,1579
0,5	0,2155	1,3862	0,7418	0,4663	3,2172	-0,4309	0,2155
0,3	0,3579	1,2903	0,6302	0,3864	3,3644	-0,7157	0,2147
0,1	0,5912	1,1635	0,5027	0,2824	3,8951	-1,1823	0,1182

Tabela 1: Parâmetros adimensionais para o modelo linear mola-amortecedor.

Note na figura 3 que o tempo de contato aumenta conforme  $e_n$  diminui (ver tabela 1). Em simulações numéricas, um longo tempo de contato pode ser desejável, permitindo um grande passo de integração temporal.

No modelo linear aqui apresentado, o tempo de contato é independente da velocidade de impacto, o que é oposto à colisões reais (GOLDSMITH, 1960). A sobreposição máxima aumenta conforme  $e_n$  aumenta (ver tabela 1). Os altos valores para a sobreposição tornam o modelo de esfera suave, baseado na hipótese de partículas geometricamente rígidas, e portanto, limitado a pequenas deformações ou sobreposições, menos preciso podendo causar erros de modelagem física devido à exclusão de efeitos de volume.

Na figura 4, o coeficiente de restituição normal é calculado com base nos valores negativos da velocidade no instante do contato, ou seja,  $e_n = -\delta_n^{*\prime}(t_{c,n}^*)$ . A figura 4, de acordo com a equação (3.63), reproduz o coeficiente de restituição normal independente da velocidade de impacto. Para colisões reais,  $e_n$  diminui conforme a velocidade  $v_0$  aumenta.

Observa-se na figura 5 que a força de contato é descontínua no início e no fim do contato entre as partículas  $(a^*(0) \neq a^*(t_{c,n}^*) \neq 0)$  devido à força de amortecimento viscosa. Em colisões reais, a força de contato é contínua. Nota-se que a força de contato é coesiva ( $a^* > 0$ ) no final do impacto. Para colisões reais, a força de contato é sempre repulsiva ( $a^* < 0$ ).

#### 3.2.2.2 Modelo Hertiziano

As forças de contato nas colisões entre partícula-partícula e entre partícula-parede também podem ser descritas através do modelo não-linear Hertiziano (HERTZ, 1882; HERTZ, 1885; GOLDSMITH, 1960). De acordo com a teoria de contato Hertiziana, o coeficiente de rigidez da mola nas direções normal e tangencial para as colisões entre as partículas i e j pertencentes a fases sólidas m e l, respectivamente, é calculado a partir do módulo de Young e do coeficiente de Poisson:

1

$$k_n = k_{n,Hz} \delta_{n,ij}^{\frac{1}{2}}$$
(3.77)

$$k_t = k_{t,Hz} \delta_{n,ij}^{\frac{1}{2}}$$
(3.78)

onde

$$k_{n,Hz} = \frac{4}{3} E_{eff} \sqrt{r_{eff}}$$
(3.79)

$$k_{t,Hz} = \frac{16}{3} G_{eff} \sqrt{r_{eff}}$$
(3.80)

e onde  $r_{eff}$  é o raio efetivo das partículas pertecentes as fases sólidas *m* e *l*, expresso por  $1/r_{eff} = 1/r_m + 1/r_l$ .

 $E_{eff}$  e  $G_{eff}$  são, respectivamente, o módulo de Young efetivo e o módulo de cisalhamento efetivo, dados por:

$$1/E_{eff} = (1 - \sigma_m^2)/E_m + (1 - \sigma_l^2)/E_l$$
(3.81)

$$1/G_{eff} = (2 - \sigma_m)/G_m + (2 - \sigma_l)/G_l$$
(3.82)

onde  $E_m$  e  $E_l$  são os módulos de Young e  $\sigma_m$  and  $\sigma_l$  são os coeficientes de Poisson para *m*-ésima e *l*-ésima fase sólida, respectivamente.  $G_m$  e  $G_l$  são o módulo de cisalhamento para a *m*-ésima e *l*-ésima fase sólida, calculados por:

$$G_m = E_m / 2(1 + \sigma_m)$$
 (3.83)

$$G_l = E_l / 2(1 + \sigma_l) \tag{3.84}$$

Os coeficientes de amortecimento podem ser relacionados com o coeficiente de rigidez da mola e também com o coeficiente de restituição através das equações: (3.67),(3.79),(3.80).

No modelo não-linear Hertiziano amortecido do tipo massa-mola-amortecedor (HSD - Non-linear damped Hertzian spring-dashpot), a colisão entre duas esferas elásticas é descrita através da integração da lei de Hooke sobre a deformação da área, o que resulta na relação não-linear conhecida como Lei de Hertz ( $F(\delta_n) = k_{n,Hz} \delta_n^{3/2}$ ) (para detalhes ver: Hertz (1882), Hertz (1885)), onde  $k_{n,Hz}$  é dado pela equação (3.79). A "potência 3/2" não se aplica quando o contato é entre superfícies perfeitamente planas (HUNT; GROSSLEY, 1975). Portanto, uma forma mais geral para a força não-linear no modelo de rigidez pode ser escrita por:  $F(\delta_n) = k\delta_n^n$  (ver Goldsmith (1960), Hunt e Grossley (1975)).

Como o coeficiente de restituição normal não aumenta com a velocidade de impacto a expressão para dissipação de energia cinética devido às colisões necessariamente precisa ser não-linear. Hunt e Grossley (1975) derivaram uma termo para o amortecimento não-linear expresso por:  $\lambda \delta_n(t)^p \dot{\delta_n}(t)^q$ .

Considerando q = 1 e p = 1/4, uma expressão para a força dissipativa é proposta por Tsuji, Tanaka e Ishida (1992):

$$F(\delta_n) = \eta_{n,H_z} \delta_n^{-1/4} \dot{\delta_n} \tag{3.85}$$

onde  $\eta_{n,H_z}$  é o coeficiente de amortecimento para o modelo HSD e segundo o trabalho de Tsuji, Tanaka e Ishida (1992) é expresso por:

$$\eta_{n,Hz} = \alpha(e_n) \sqrt{(m_{eff}k_{n,Hz})}$$
(3.86)

onde o parâmetro  $\alpha(e_n)$  é escrito em função do coeficiente de restituição normal  $e_n$ . Tsuji, Tanaka e Ishida (1992) apresentam um diagrama mostrando a relação entre  $e_n$  e  $\alpha$ , a qual determina o valor de  $\alpha$  quando o coeficiente de restituição é conhecido.

A partir da equação (3.85), a equação de deslocamento para a sobreposição normal é expressa pela equação do oscilador Hertiziano amortecido não-linear:

$$m_{eff}\ddot{\delta}_n = -k_{n,Hz}\delta_n^{3/2} - \eta_{n,Hz}\delta_n^{-1/4}\dot{\delta}_n$$
(3.87)

Utilizando os seguintes parâmetros adimensionais na equação (3.87):

$$\delta_n^* = \delta_n \left( \frac{k_{n,Hz}}{v_0^2 m_{eff}} \right)^{2/5}, \quad \dot{\delta}_n^* = \frac{\dot{\delta}_n}{v_0}, \quad t^* = t \left( \frac{k_{n,Hz} v_0^{1/2}}{m_{eff}} \right)^{2/5}$$

onde  $v_0$  é a velocidade de impacto, a equação de deslocamento para a sobreposição adimensional na direção normal,  $\delta_n^*$ , pode ser escrita como:

$$\delta_n^{*\prime\prime} + 2\nu_{Hz}^* \delta_n^{*1/4} \delta_n^{*\prime} + \delta_n^{*3/2} = 0$$
(3.88)

onde ( $\prime$ ) denota as derivadas em relação a  $t^*$ . O parâmetro  $v_{Hz}^*$  é o coeficiente de amortecimento adimensional expresso por:

$$v_{Hz}^* = \frac{\eta_{n,Hz}}{2\sqrt{(m_{eff}k_{n,Hz})}} = \frac{\alpha}{2}$$
(3.89)

A equação (3.88) pode ser resolvida numericamente, com as condições iniciais  $\delta_n^*(0) = 0 \ e \ \delta_n^{*\prime}(0) = 1$  para determinar o conjunto adimensional das sobreposições  $\delta_{n,i}^*$  nos instantes  $t_i^*$ . Utilizando algoritmos computacionais, a sobreposição máxima adimensional, o tempo de contato adimensional e a sobreposição média adimensional é determinada por:

$$\delta_{max}^* = max_i \{\delta_{n,i}^*(t_i^*)\}$$
(3.90)

$$\delta_{n,i}^*(t_i^*) = 0, \quad t_{c,n}^* = t_i^* \tag{3.91}$$

$$\overline{\delta}_{n}^{*} = \frac{1}{t_{c,n}^{*}} \sum_{0}^{t_{c,n}^{*}} \{\delta_{n,i}^{*}\}$$
(3.92)

Semelhantemente às figuras 3, 4 e 5, as figuras 6, 7 e 8 apresentam os gráficos do modelo HSD para a sobreposição adimensional versus tempo adimensional, velocidade adimensional versus tempo adimensional, e aceleração adimensional versus sobreposição adimensional, respectivamente, considerando vários valores para o coeficiente de amortecimento Hertiziano adimensional ( $v_{Hz}^* = 0$ ; 0,1; 0,25; 0,4; 0,6). As curvas são plotadas até o tempo final do contato  $t_{c,n}^*$ .



Figura 6: Sobreposição adimensional (modelo HSD).

A tabela 2 mostra para diversos valores do coeficiente de amortecimento Hertiziano adimensional,  $v_{Hz}^*$ , os seguintes parâmetros adimensionais: coeficiente de restituição normal  $e_n$ , tempo na sobreposição máxima  $t_{max}^*$ , sobreposição máxima  $\delta_{max}^*$ , sobreposição média  $\overline{\delta}_n^*$ , tempo de contato  $t_{c,n}^*$ , aceleração inicial  $a^*(0)$  e aceleração no tempo final do contato  $a^*(t_{c,n}^*)$ . Esses parâmetros foram resolvidos numericamente pelas expressões (3.90), (3.91), e (3.92). O coeficiente de restituição normal e a aceleração



Figura 7: Velocidade adimensional (modelo HSD).



Figura 8: Aceleração adimensional (modelo HSD).

também foram calculados numericamente por  $e_n = -\delta_n^{*\prime}(t_{c,n}^*)$  e  $a^* = v^{*\prime}$ .

$v_{Hz}^*$	$e_n$	$t_{max}^*$	$\delta^*_{max}$	$\overline{\delta}_n^*$	$t_{c,n}^*$	<i>a</i> *(0)	$a^*(t^*_{c,n})$
0	1,0000	1,6090	1,0936	0,6833	3,2181	0	0
0,02	0,9453	1,5976	1,0693	0,6682	3,2366	-0,0018	0,0034
0,04	0,8936	1,5864	1,0465	0,6537	3,2562	-0,0036	0,0050
0,06	0,8446	1,5754	1,0243	0,6396	3,2768	-0,0054	0,0061
0,08	0,7982	1,5647	1,0032	0,6260	3,2985	-0,0072	0,0032
0,1	0,7542	1,5542	0,9830	0,6128	3,3213	-0,0089	0,0089
0,15	0,6536	1,5288	0,9358	0,5815	3,3836	-0,0134	0,0107
0,2	0,5648	1,5046	0,8931	0,5524	3,4540	-0,0179	0,0100
0,25	0,4864	1,4815	0,8542	0,5251	3,5338	-0,0224	0,0116
0,3	0,4168	1,4595	0,8185	0,4993	3,6243	-0,0268	0,0122
0,35	0,3550	1,4383	0,7858	0,4748	3,7273	-0,0313	0,0097
0,4	0,3001	1,4181	0,7557	0,4514	3,8449	-0,0358	0,0096
0,45	0,2513	1,3987	0,7279	0,4288	3,9801	-0,0402	0,0086
0,5	0,2079	1,3801	0,7022	0,4069	4,1368	-0,0447	0,0076
0,55	0,1695	1,3621	0,6782	0,3853	4,3200	-0,0492	0,0049
0,6	0,1356	1,3449	0,6559	0,3639	4,5368	-0,0536	0,0057
0,7	0,0803	1,3122	0,6156	0,3205	5,1163	-0,0626	0,0036
0,8	0,0400	1,2818	0,5801	0,2737	6,0353	-0,0715	0,0017
0,9	0,0141	1,2533	0,5487	0,2186	7,7508	-0,0805	0,0004

Tabela 2: Parâmetros adimensionais para o modelo HSD.

O mesmo comportamento do modelo linear massa-mola-amortecedor é observado nas figuras 6, 7 e 8 do modelo HSD. Na figura 6, o tempo de contato aumenta conforme  $v_{Hz}$  aumenta. Nota-se também que, o tempo de contato é independente da velocidade de impacto e a sobreposição máxima aumenta conforme  $v_{Hz}$  diminui. O coeficiente de restituição pode ser determinado através da figura 7, no final do contato entre as partículas. No modelo HSD apresentado neste trabalho, os valores de  $e_n$  são independentes da velocidade de impacto. Observa-se na figura 8 que a força de contato é descontínua no início e no fim do contato entre as partículas. Comparando a figura 8 com o a figura 5 do modelo LSD, a descontinuidade na força de contato no modelo HSD é muito pequena, como pode ser visto nas tabelas 1 e 2.

Uma expressão para os valores de  $\alpha$  plotados no trabalho de Tsuji, Tanaka e Ishida (1992) é apresentada por Antypov e Elliott (2011) e reescrita para o coeficiente de

amortecimento  $v_{Hz}^*$  como ( $e_n > 0$ ):

$$v_{Hz}^* = -\frac{\sqrt{5}}{2} \frac{\ln e_n}{\sqrt{\ln^2 e_n + \pi^2}}$$
(3.93)

Com o coeficiente de restituição normal, obtido numericamente e mostrado na tabela 2, pode-se reproduzir, aproximadamente, os valores do  $v_{Hz}^*$  da mesma tabela utilizando a equação (3.93).

Assim como o modelo LSD (equação (3.57)), o modelo HSD (equação (3.87)) resulta no coefciente de restituição independente da velocidade de impacto. Em colisões reais, estudos experimentais realizados por Goldsmith (1960) e também por Kuwabara e Kono (1987) mostram uma discreta diminuição monotóna de  $e_n$  com a velocidade de impacto.

# 3.2.2.3 Equivalência para o cálculo do coeficiente de rigidez de mola na direção normal

Nesta seção são descritos os métodos para se determinar o coeficiente de rigidez de mola na direção normal, do modelo LSD, definindo os parâmetros de contato iguais àqueles encontrados no modelo Hertiziano HSD utilizando computação numérica. Os detalhes dessa equivalência estão descritos no apêndice A.

Considere três métodos para o computo de  $k_n$ : sobreposição máxima, tempo de contato e sobreposição média, expressas pelas equações (3.94), (3.95) e (3.96), respectivamente. Considerando  $e_n < 1$ , tem-se:

$$k_n = \frac{1}{\delta_{maxHSD}^{*2}} \left( v_0^{1/2} m_{eff}^{1/4} k_{n,Hz} \right)^{4/5} \left[ \exp\left( -\frac{\arctan(\beta)}{\beta} \right) \right]^2$$
(3.94)

$$k_n = \frac{1}{t_{c,nHSD}^{*2}} \left( v_0^{1/2} m_{eff}^{1/4} k_{n,Hz} \right)^{4/5} \pi^2 \left( 1 + \frac{1}{\beta^2} \right)$$
(3.95)

$$k_n = \frac{1}{\overline{\delta}_{nHSD}^{*2}} \left( v_0^{1/2} m_{eff}^{1/4} k_{n,Hz} \right)^{4/5} \frac{\beta^2}{\pi^2 (1+\beta^2)} \left[ 1 + \exp\left(\frac{\pi}{\beta}\right) \right]^2$$
(3.96)

onde  $\delta^*_{maxHSD}$ ,  $t^*_{c,nHSD}$ , e  $\overline{\delta}^*_{nHSD}$  são os parâmetros adimensionais computados para o modelo Hertiziano através de algoritmos numéricos a partir das equações (3.90), (3.91), e (3.92), respectivamente.

Para colisões perfeitamente elásticas,  $e_n = 1$ , a sobreposição máxima, o tempo de contato e a sobreposição média são expressas pelas equações (3.97), (3.98), e (3.99), respectivamente:

$$k_n = \frac{1}{\delta_{maxHSD}^{*2}} \left( v_0^{1/2} m_{eff}^{1/4} k_{n,Hz} \right)^{4/5}$$
(3.97)

$$k_n = \frac{\pi^2}{t_{c,nHSD}^{*2}} \left( v_0^{1/2} m_{eff}^{1/4} k_{n,Hz} \right)^{4/5}$$
(3.98)

$$k_n = \frac{4}{\pi^2 \overline{\delta}_{nHSD}^{*2}} \left( v_0^{1/2} m_{eff}^{1/4} k_{n,Hz} \right)^{4/5}$$
(3.99)

## 4 **RESULTADOS**

# 4.1 Estudo de mistura em leito fluidizado borbulhante

Esta seção é baseada no ensaio experimental de Palma (1998), onde o processo de mistura de um sistema particulado binário, composto por areia e sal é estudado. O objetivo é utilizar o modelo Euleriano-Euleriano de duas fases separadas, discutido no capítulo 3, para a modelagem do escoamento. Um grande número de fenômenos em leitos fluidizados é estudado de forma experimental, o que requer, em alguns casos, ensaios elaborados com alto custo financeiro e muitas vezes um espaço físico significativo. Estes fatores dificultam e até inviabilizam certos ensaios experimentais. A utilização de um modelo matemático que descreva bem o comportamento desse tipo de escoamento, e que possa ser utilizado em escalas industriais possibilitaria uma estreita ligação entre a teoria e a experiência. É essencial reconhecer que a simulação numérica não substitui a teoria e o experimento, mas contribui para o avanço de ambas.

O estudo da mistura está dividido em dois passos. No primeiro passo, seção 4.1.1, é realizado o levantamento das curvas de fluidização da areia e do sal para se determinar a velocidade de mínima fluidização,  $U_{mf}$ , de cada um dos particulados. A partir desses dados é realizado o segundo passo, seção 4.1.2, com simulações numéricas para a mistura. Os resultados de simulação são comparados com os dados experimentais de Palma (1998).

Para as simulações numéricas foi empregado um domínio computacional bidimen-

sional, com raio de 0,098m e altura de 0,360m. A malha computacional foi de 98 x 72 células, totalizando 7.056 nós, com  $\delta_x$ =0,001m e  $\delta_y$ =0,005m. O sistema particulado é composto por areia com um diâmetro de 450µm e densidade de 2.590kg/m<sup>3</sup>, e sal também com diâmetro de 450µm, mas com densidade de 2.533kg/m<sup>3</sup>. A proporção entre as partículas é de 75% de areia e 25% de sal. A figura 9 mostra a geometria, condições iniciais e de contorno do leito utilizado nas simulações numéricas. Nas



Figura 9: Geometria e condições iniciais e de contorno usadas na simulação considerando o sistema de coordenadas cilíndricas.

simulações realizadas considerou-se a formulação algébrica para o cálculo da temperatura granular baseada na teoria cinética dos escoamentos granulares. O modelo de arrasto utilizado foi o de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), descrito pela equação (3.7). E o esquema de discretização usado para os termos de convecção nas equações de conservação (equações (3.1), (3.2), (3.3) e (3.11)) foi o Superbee.

80

### 4.1.1 Levantamento da curva de fluidização da areia e do sal

Nesta seção apresenta-se os resultados de simulação numérica para o levantamento da curva de fluidização da areia e do sal. No caso da areia foi considerado um leito composto somente por areia com uma região inicial de 0,130m de altura e fração de vazio na mínima fluidização de 0,42, conforme a figura 9. O meio de fluidização foi o ar entrando através da base do leito. As paredes laterais do leito foram consideradas rígidas e impermeáveis para ambas as fases. A parte inferior foi considerada permeável para o gás e impermeável para a fase sólida. Todos os parâmetros de simulação foram baseados no trabalho de Palma (1998).

O procedimento de fluidização foi iniciado com regime de leito fixo, então a velocidade superficial do gás na base do leito, foi aumentada em pequenos incrementos, sendo que, cada velocidade foi mantida por 0,2 segundos, tempo suficiente para que que o leito atingisse o regime permanente. Com o aumento na velocidade do gás, a queda de pressão ao longo do leito aumenta devido à fricção do gás com o particulado, entre outros fatores. A queda de pressão do leito foi medida para cada velocidade de gás na primeira célula computacional logo acima da base do leito. A velocidade mínima de fluidização,  $U_{mf}$ , corresponde a um estado onde o arrasto individual sobre as partículas é igual a força da gravidade, em outras palavras, a queda de pressão ao longo do leito é igual ao seu peso divido pela área.

Para o estudo da curva de fluidização da areia, inicialmente, foram realizadas simulações numéricas com partículas de três diâmetros distintos:  $310\mu$ m,  $450\mu$ m e  $590\mu$ m, uma vez que, as partículas de areia utilizadas no experimento de Palma (1998) possuíam diâmetros entre  $310\mu$ m e  $590\mu$ m. A densidade das partículas de areia utilizadas foi de 2.590kg/m<sup>3</sup>.

A figura 10 mostra os resultados simulados da queda de pressão do leito por unidade de área versus a velocidade do gás para os três diâmetros de partículas (310 $\mu$ m,  $450\mu$ m e  $590\mu$ m). Os resultados de simulação são comparados com os dados experimentais de Palma (1998).



Figura 10: Curvas de fluidização da areia para partículas de diâmetros  $310\mu m$ ,  $450\mu m$  e  $590\mu m$ .

Os resultados da figura 10 mostram que a curva experimental está entre as curvas simuladas. Os resultados estão sobrestimados quando comparados com os valores experimentais provavelmente porque os resultados numéricos não levaram em consideração a esfericidade das partículas. A velocidade de mínima fluidização foi de 0,179m/s, 0,310m/s e 0,418m/s para simulações com partículas de diâmetro  $310\mu$ m,  $450\mu$ m e 590 $\mu$ m respectivamente. No caso experimental, a velocidade média de mínima fluidização foi de 0,20m/s. A influência do diâmetro da partículas sobre a velocidade de mínima fluidização é claramente observada na figura 10.

Em seguida, foi realizada uma simulação para uma mistura homogênea com os três diâmetros de partículas ( $310\mu$ m,  $450\mu$ m e  $590\mu$ m). A figura 11 mostra os resultados de simulação numérica para a mistura homogênea e os valores experimentais de Palma (1998). Neste caso, a velocidade de minima fluidização de 0,264m/s para partículas

perfeitamente esféricas também ficou sobrestimada.



Figura 11: Curva de fluidização da areia para uma mistura homogênea.

Por fim, foram realizadas simulações numéricas para partículas de diâmetro  $450\mu$ m e esfericidade 0,75. A figura 12 mostra os resultados de simulação numéricas. Neste caso, os resultados estão de acordo com os dados experimentais de Palma (1998). Nesse trabalho, o parâmetro esfericidade foi contabilizado através do diâmetro da partícula. A influência da esfericidade é evidente quando comparamos os dados da figura 12 com os dados da figura 10 para partículas de diâmetro de 450 $\mu$ m.

Para o levantamento da curva de fluidização do sal, utilizou-se um leito composto somente por sal de 0,05m de altura e com fração de vazio na mínima fluidização de 0,42, conforme a figura 9. No caso do sal, somente foram realizadas simulações numéricas com partículas de diâmentro médio  $d_{pm}$  de 450 $\mu$ m, esfericidade de 0,6 e densidade de 2.533kg/m<sup>3</sup>. O procedimento de fluidização é idêntico ao utilizado no caso da areia.

A figura 13 mostra os resultados simulados da queda de pressão do leito por unidade de área versus a velocidade do gás para o sal. Os resultados de simulação são comparados com os dados experimentais de Palma (1998) e mostram que a velocidade



Figura 12: Curva de fluidização da areia para partículas de  $450\mu$ m e esfericidade 0,75. de mínima fluidização ficou muito próxima do experimental embora o valor para a pressão tenha ficado sobrestimado. A velocidade de mínima fluidização simulada foi de 0,154m/s e de 0,150m/s para o experimental.



Figura 13: Curva de fluidização do sal para partículas de  $450\mu m$  e esfericidade 0,60.

### 4.1.2 Mistura

Nesta seção apresenta-se os resultados de simulação numérica para a mistura composta por areia e sal. O leito simulado possui raio 0,098m e altura de 0,180m com a proporção entre as partículas de 75% de areia e 25% de sal, conforme especificados na figura 9. O procedimento de fluidização é iniciado, após o leito ser preenchido com as partículas, por meio de ar entrando pela base do leito. Após 60s de simulação, a injeção de ar é suspensa por 1s. No instante t=61s são feitas as leituras das porcentagens de areia e sal da mistura obtida, em posições próximas à parede e também no centro do leito. Em seguida o leito é novamente fluidizado até o instante t=240s. A injeção de ar através da base do leito é novamente suspensa por 1s e em seguida são feitas as leituras na mesmas posições anteriores. As velocidades de fluidização do leito foram baseadas nas velocidades médias de mínima fluidização da areia e do sal discutidas na seção anterior. Foram realizadas simulações numéricas com três velocidades de fluidização:  $1,4U_{mf}$ ,  $1,7U_{mf}$  e  $2,0U_{mf}$ , onde  $U_{mf}$  é a velocidade de mínima fluidização. Os resultados também foram comparados com os dados experimentais de Palma (1998).

As tabelas 3 e 4 mostram os resultados de simulação para uma velocidade de fluidização 40% acima da velocidade de mínima fluidização nos instantes t=61s e t=241s, respectivamente. Os dados da mistura foram processados em três posições verticais do leito: uma posição inferior em 0,04m, uma posição intermediária em 0,105m e uma posição superior em 0,170m, medidas a partir da base do leito. No plano horizontal, as leituras foram realizadas em duas posições próximas à parede e também no centro do leito. Nas tabelas, os dados referentes à parede estão representados pelos valores médios, e a coluna "Dif. Sal (%)" representa a diferença entre as percentagens dos valores simulados e experimentais para a proporção ideal do sal de 25%.

Com uma velocidade de operação 40% acima da velocidade de mínima fluidização observa-se a formação de bolhas no leito, o que contribui para homogeneidade da mistura. No primeiro minuto de simulação, tabela 3, os índices de mistura nas

	Areia (%)		Sal (%)		Dif. Sal (%)	
	Sim.	Exp.	Sim.	Exp.	Sim.	Exp.
Posição inferio	r					
Centro	75,64	72,28	24,36	27,72	2,63	-9,82
Média Parede	74,27	72,53	25,73	27,46	-2,83	-8,95
Posição interm	ediária					<u> </u>
Centro	73,34	72,03	26,66	27,97	-6,23	-10,62
Média Parede	69,54	72,58	30,46	27,42	-17,92	-8,83
Posição superior						
Centro	73,29	71,92	26,71	28,08	-6,40	-10,97
Média Parede	71,25	72,49	28,75	25,50	-13,04	-9,09

Tabela 3: Simulações com velocidade de fluidização  $1,4U_{mf}$  no instante t=61s

Tabela 4: Simulações com velocidade de fluidização 1,4 $U_{mf}$  no instante t=241s

	Areia (%)		Sal (%)		Dif. Sal (%)	
	Sim.	Exp.	Sim.	Exp.	Sim.	Exp.
Posição inferio	r					
Centro	77,27	73,88	22,72	26,12	10,03	-4,29
Média Parede	74,24	73,28	25,76	26,72	-2,95	-6,43
Posição interm	ediária					
Centro	72,23	73,41	27,77	26,59	-9,97	-5,98
Média Parede	73,96	73,27	26,04	26,73	-3,99	-6,47
Posição superior						
Centro	72,86	73,57	27,14	26,43	-8,79	-5,41
Média Parede	69,54	73,28	30,46	26,72	-17,92	-6,44

posições centrais apresentam boa correlação com os dados experimentais de Palma (1998). As posições laterais apresentam maior segregação, o que pode ser explicado pela pequena diferença de densidade entre as partículas. Com o aumento do tempo de fluidização para quatro minutos, tabela 4, a mistura alterou pouco sua homogeneidade, mantendo uma certa variação em determinadas posições. Apesar de não alcançar o índice de mistura ideal operando com uma velocidade de fluidização de  $1,4U_{mf}$ , a mistura mostrou-se bastante regular.

As tabelas 5 e 6 mostram os resultados de simulação para uma velocidade de fluidização 70% acima da velocidade de mínima fluidização nos instantes t=61s e t=241s, respectivamente. Os dados da mistura foram processados nas mesmas posições da simulação anterior. Com o aumento da velocidade de fluidização, as bolhas de ar que se formam na base do leito possuem diâmetros maiores e se propagam com velocidade maior, o que promove maior circulação das partículas.

	Areia (%)		Sal (%)		Dif. Sal (%)	
	Sim.	Exp.	Sim.	Exp.	Sim.	Exp.
Posição inferio	r					
Centro	70,77	73,04	29,23	26,96	-14,47	-7,27
Média Parede	72,68	73,31	27,32	26,69	-8,49	-6,33
Posição interm	ediária					
Centro	71,88	73,32	28,12	26,68	-11,09	-6,29
Média Parede	70,01	73,36	29,99	26,54	-16,64	-6,15
Posição superior						
Centro	71,91	73,97	28,09	26,03	-11,00	-3,96
Média Parede	70,26	73,09	29,74	26,91	-15,94	-7,10

Tabela 5: Simulações com velocidade de fluidização  $1,7U_{mf}$  no instante t=61s

Tabela 6: Simulações com velocidade de fluidização  $1,7U_{mf}$  no instante t=241s

	Areia (%)		Sal (%)		Dif. Sal (%)	
	Sim.	Exp.	Sim.	Exp.	Sim.	Exp.
Posição inferio	r					
Centro	75,20	74,29	24,80	25,71	0,81	-2,76
Média Parede	71,25	74,41	28,75	25,59	-13,04	-2,31
Posição interm	ediária					
Centro	74,12	74,63	25,88	25,37	-3,40	-1,45
Média Parede	72,19	74,62	27,81	25,38	-10,10	-1,50
Posição superior						
Centro	71,89	74,28	28,11	25,72	-11,06	-2,80
Média Parede	68,07	74,18	31,93	25,82	-21,70	-3,18

No primeiro minuto de simulação o leito atingiu uma boa homogeneidade, porém algumas posições tiveram irregularidades mais acentuadas. Com quatro minutos de simulação, as posições centrais apresentaram uma melhora na mistura, mas nas regiões da parede as irregularidades persistiram. Isso pode ser explicado pelas condições de contorno utilizadas nas simulações numéricas. Nesse trabalho, utilizou-se a condição de contorno de livre-deslizamento na parede. Para essa condição, os gradientes de velocidade do fluido são pequenos próximos a parede, comparado às outras regiões do leito, influenciando assim a circulação de partículas nessas regiões, o que consequentemente pode causar segregação. Um outro ponto importante a destacar, é o modelo utilizado para o cálculo da força de arrasto. que para esse estudo foi o modelo de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) (equação (3.7)). Porém, com o aumento da velocidade do fluido, aumenta o número de Reynolds e o modelo de arrasto pode ser tornar sensível. Utilizar uma equação diferencial para o cálculo da temperatura granular no tensor das tensões cinético e um modelo de turbulência para as velocidades de fluidização mais altas também poderia melhorar os resultados de simulação.

Finalmente, as tabelas 7 e 8 mostram os resultados de simulação para uma velocidade de fluidização 100% acima da velocidade de mínima fluidização nos instantes t=61s e t=241s, respectivamente. Neste caso, o tamanho e a frequência das bolhas são muito maiores do que nos casos anteriores. Este foi o caso, em que as simulações numéricas tiveram o pior desempenho comparado com os dados experimentais de Palma (1998).

	Areia (%)		Sal (%)		Dif. Sal (%)	
	Sim.	Exp.	Sim.	Exp.	Sim.	Exp.
Posição inferio	r					
Centro	73,63	76,30	26,37	23,70	-5,19	5,49
Média Parede	72,16	75,31	27,84	24,69	-10,20	1,26
Posição interm						
Centro	72,11	75,94	27,89	24,06	-10,36	3,91
Média Parede	67,90	75,52	32,10	24,48	-22,12	2,12
Posição superior						
Centro	70,56	75,55	29,44	24,45	-15,08	2,25
Média Parede	67,55	75,24	32,45	24,76	-22,96	0,97

Tabela 7: Simulações com velocidade de fluidização 2,0 $U_{mf}$  no instante t=61s

Isso pode ser explicado pelas mesmas razões mencionadas no caso anterior: condições de contorno, modelo para o cálculo da força de arrasto, modelo de turbulência. Vale destacar, que no caso das simulações numéricas, o dados foram processados em apenas uma célula computacional para cada posição determinada o que pode influenciar os resultados.

Apesar de certas variações em determinadas posições do leito, o modelo matemático capturou bem a hidrodinâmica do problema proposto. A mudança de alguns

	Areia (%)		Sal (%)		Dif. Sal (%)	
	Sim.	Exp.	Sim.	Exp.	Sim.	Exp.
Posição inferio	r					
Centro	69,92	75,42	30,08	24,58	-16,89	1,71
Média Parede	66,36	75,46	33,64	24,54	-25,68	1,87
Posição interm						
Centro	75,24	75,98	24,76	24,02	0,97	4,08
Média Parede	72,44	75,52	27,56	24,48	-9,29	2,12
Posição superior						
Centro	77,05	75,31	22,95	24,69	-8,93	1,26
Média Parede	71,80	75,34	28,20	24,66	-11,35	1,38

Tabela 8: Simulações com velocidade de fluidização  $2,0U_{mf}$  no instante t=241s

parâmetros (condições iniciais e de contorno), testes de outros modelos (modelos de arrasto, turbulência) podem melhorar muito o desempenho das simulações numéricas.

# 4.2 Estudo da influência da força de arrasto em sistemas monodispersos e polidispersos

Nesta seção, estuda-se a influência das correlações de arrasto na formação de bolhas de gás, mistura e segregação de espécies, em sistemas monodispersos e polidispersos em leito fluidizado borbulhante. O Método dos Elementos Discretos foi utilizado para as simulações numéricas, onde foram analisadas três diferentes correlações para o cálculo da força de arrasto: o modelo de arrasto de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), o modelo de arrasto de Ding e Gidaspow (1990) e o modelo de arrasto de Beetstra, Hoef e Kuipers (2007), descritos a seguir.

De acordo com Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), a correlação para o coeficiente de arrasto na interface é baseada na medida da velocidade das partículas em leitos fluidizados conforme as equações (3.7)-(3.10), descritas a seguir:

$$\beta_{gm} = \frac{3}{4} \frac{\epsilon_{sm} \epsilon_g \rho_g}{V_{rm}^2 d_{pm}} C_{Ds} \left( \frac{R e_m}{V_{rm}} \right) \left| \mathbf{v}_{sm} - \mathbf{v}_g \right|$$

onde  $C_{Ds}$  corresponde ao coeficiente de arrasto de uma partícula esférica dada pela

relação de Valle (1948):

$$C_{Ds} = \left(0, 63 + 4, 8\sqrt{\frac{V_{rm}}{Re_m}}\right)^2$$

e  $V_{rm}$  é a velocidade terminal da fase sólida. Essa velocidade é modelada pela expressão de Garside e Al-Dibouni (1977):

$$V_{rm} = 0,5 \left( A - 0,06Re_m + \sqrt{(0,06Re_m)^2 + 0,12Re_m(2B - A) + A^2} \right)$$
$$= \epsilon_g^{4,14} e B = \begin{cases} c \epsilon^{1,28} & \text{se } \epsilon_g \le 0,85\\ \epsilon_g^d & \text{se } \epsilon_g > 0,85 \end{cases}.$$

Para esse estudo, os coeficientes c e d do parâmetro B, foram ajustados de acordo com os dados experimentais de Hoomans (2001) para satisfazer a velocidade de mínima fluidização: c = 0,65 e d = 3,93.

Ding e Gidaspow (1990) derivaram uma expressão para o coeficiente de arrasto na interface baseada na equação de Ergun (1952) e na correlação de Wen e Yu (1966):

$$\beta_{gm} = 150 \frac{\epsilon_{sm}^2 \mu_g}{d_{pm}^2 \epsilon_g} + 1,75 \frac{\rho_g \epsilon_{sm} \left| \mathbf{v}_g - \mathbf{v}_{sm} \right|}{d_{pm}} \quad \text{se} \quad \epsilon_g < 0,8 \tag{4.1}$$

$$\beta_{gm} = \frac{3}{4} C_D \frac{\epsilon_g \epsilon_{sm} \rho_g \left| \mathbf{v}_g - \mathbf{v}_{sm} \right|}{d_{pm}} \epsilon_g^{-2,65} \text{ se } \epsilon_g > 0,8$$
(4.2)  
onde  $C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_m} \left( 1 + 0, 15 \left( Re_m \right)^{0,687} \right) & \text{se } Re_m < 1000 \\ 0,44 & \text{se } Re_m \ge 1000 \end{cases}$ .

Beetstra, Hoef e Kuipers (2007) derivaram uma correlação para coeficiente de arrasto na interface com base em simulações lattice-Boltzmann (LBM) e válidos para um grande intervalo de Reynolds. Esta relação foi derivada a partir de simulações em que a porosidade variou de 0,4 a 0,9, e o número de Reynolds de Re = 0,1 a 1000:

$$\beta_{gm} = 10 \frac{\epsilon_{gm}}{\epsilon_g^2} + \epsilon_g^2 \left( 1 + 1, 5\sqrt{1 - \epsilon_g} \right) + \frac{0,413Re_m}{24\epsilon_g^2} \left( \frac{\epsilon_g^{-1} + 3\epsilon_g\epsilon_{sm} + 8,4Re_m^{-0,343}}{1 + 10^{3\phi}Re_m^{-0,5-2\phi}} \right)$$
(4.3)

onde  $\phi = 1 - \epsilon_g$ .

onde A

Esta seção está dividida em duas subseções: na primeira, estuda-se a influência das correlações de arrasto em um sistema monodisperso, caracterizado por partículas de diâmetro médio igual a  $850\mu$ m. O mesmo estudo é extendido a um sistema polidisperso, caracterizado por um distribuição lognormal com partículas de diâmetros entre  $800\mu$ m e  $900\mu$ m. Na segunda subseção a segregação de espécies em uma mistura binária com partículas de diferentes diâmetros e de mesma densidade é estudada. As simulações foram realizadas utilizando o esquema de discretização Superbee para os termos de convecção nas equações de fase gasosa e a malha computacional foi escolhida para atingir independência nos resultados (SOUZA-BRAUN et al., 2010). As simulações foram baseadas no trabalho experimental de Hoomans (2001).

### 4.2.1 Sistemas monodisperso e polidispersos

Nesta seção, o comportamento da formação de bolhas de gás em um sistema monodisperso e em um sistema polidisperso são analisados. As simulações foram realizadas em um domínio computacional bidimensional com 0,195m de largura e 0,30m de altura. A região do leito consiste em 0,195m de largura e 0,15m de altura, com uma fração de vazio na mínima fluidização de 0,42. O meio de fluidização é o ar que entra através da base do leito com um velocidade superficial de 0,5m/s com o intuito de manter o leito em um estado de mínima fluidização. Um jato com largura de 0,015m é colocado no centro da base do leito. Inicialmente, a velocidade superficial do ar através do jato é igual à velocidade de mínima fluidização. No instante t = 0,3s, a velocidade do jato é aumentada para 5,0m/s, com o objetivo de estudar a formação de bolhas no leito. As simulações não assumem simetria do leito. A figura 14 mostra a geometria e as condições iniciais e de contorno utilizadas nas simulações numéricas.

No caso do sistema monodisperso, foram utilizadas 39.432 partículas de diâmetro  $850\mu$ m e densidade de 2.930kg/m<sup>3</sup> para realizar a formação de bolhas de gás. Para o cálculo da força de contato entre as partículas foi utilizado o modelo linear massa-



Condições iniciais Leito: Fração de vazio  $\epsilon_g = 0,44$ Velocidade axial do ar:  $\frac{U_{mf}}{\epsilon_g} = 1,14$ m/s Condições de contorno Jato central: Velocidade axial do ar:  $V_{jet} = 5,0$ m/s À esquerda e a direita do jato central: Velocidade axial do ar:  $V_g = 0,5$ m/s Distribuição das partículas Sistema monodisperso:  $d_p = 850\mu$ m Sistema polidisperso: 10 fases sólidas ( $d_{pm} = 800-900\mu$ m)

Figura 14: Geometria e condições iniciais e de contorno usadas nas simulações numéricas para sistemas monodisperso e polidispersos.

mola-amortecedor, discutido no capítulo 3, com  $k_n = 1 \times 10^6$ N/m e  $e_n = 0.8$ .

A figura 15, apresenta os resultados de simulação numérica em uma malha computacional com  $39 \times 60$  células computacionais considerando os modelos de arrasto de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), Ding e Gidaspow (1990) e Beetstra, Hoef e Kuipers (2007). A bolha é capturada no instante t = 0,4s quando a primeira bolha começa a se formar na base do leito. A figura 16 ilustra a dinâmica da bolha no instante t=0,5s com a propagação da bolha no centro do leito. Os resultados são comparados com os dados experimentais apresentados por Hoomans (2001).

Analisando os resultados das figuras 15 e 16, observa-se que, quando utilizou-se o modelo de arrasto de Ding e Gidaspow (1990) e Beetstra, Hoef e Kuipers (2007) uma grande bolha arredondada se forma na base, desprende-se e sobe através do leito. Para o modelo de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) o comportamento (formato da bolha) capturado é fisicamente coerente com o experimental de Hoomans (2001). As



Figura 15: Imagens de simulação da bolha no instante t=0,4s em um leito monodisperso utilizando as correlações de arrasto de: (a) Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), (b) Ding e Gidaspow (1990), (c) Beetstra, Hoef e Kuipers (2007), (d) Experimental de Hoomans (2001).



Figura 16: Imagens de simulação da bolha no instante t=0,5s em um leito monodisperso utilizando as correlações de arrasto de: (a) Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), (b) Ding e Gidaspow (1990), (c) Beetstra, Hoef e Kuipers (2007), (d) Experimental de Hoomans (2001).

diferentes formas das bolhas apresentadas nestas figuras são atribuídas às correlações utilizadas para calcular a força de arrasto entre o gás e as partículas. Comparando com a equação de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), as correlações propostas por Ding e Gidaspow (1990) e por Beetstra, Hoef e Kuipers (2007) estimaram um valor bem mais alto para o coeficiente de arrasto na interface durante a injeção da bolha. Assim, as correlações de Ding e Gidaspow (1990) e Beetstra, Hoef e Kuipers (2007) sobrestimaram a força de arrasto em comparação a equação proposta por Syamlal, Rogers e O'Brien (1993). Bokkers, Annaland e Kuipers (2004) também observaram diferenças significativas para a forma e tamanho da bolha quando usaram diferentes correlações de arrasto ((ERGUN, 1952), (WEN; YU, 1966), (KOCH; HILL, 2001)).

Para o estudo dos sistemas polidispersos, foi implementada no código MFIX-DEM uma função de distribuição  $f_m$ , com o objetivo de fornecer uma distribuição lognormal de partículas em uma determinada faixa de diâmetros:

$$f_m = \frac{1}{d_{pm}\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{\left(ln\left(d_{pm}\right) - d_{p,M}\right)^2}{2\sigma^2}\right]$$
(4.4)

onde  $\sigma$  é o desvio padrão e  $d_{p,M}$  é o diâmetro médio das partículas.

No código também foi implementada uma rotina para a mistura inicial das diferentes fases sólidas. Detalhes da metodologia computacional e implementação de rotinas no código MFIX estão descritos no apêndice B. A função de distribuição, equação (4.4) forneceu uma distribuição lognormal com partículas de diâmetros entre  $800\mu$ m e  $900\mu$ m. Diversas simulações numéricas foram realizadas para investigar a formação de bolhas de gás em um sistema polidisperso. O sistema caracteriza-se por 10 diferentes fases sólidas com mesma densidade, porém diferentes diâmetros. Neste caso, a geometria, e as condições iniciais e de contorno são as mesmas utilizadas no caso do sistema monodisperso, conforme a figura 14. O leito é fluidizado uniformemente pelo ar com uma velocidade superficial de 0,5m/s através da base do leito. Um jato central de largura de 0,015m é colocado na base do leito, com ar a uma velocidade superficial de 5,0m/s depois de 0,3s. As simulações também não assumem simetria do leito.

As figuras 17 e 18 mostram os resultados para um sistema polidisperso com 10 fases sólidas, considerando as mesmas correlações para a força de arrasto analisadas no sistema monodisperso. O número total de partículas utilizadas nas simulações numéricas foi de 41.727.

Observa-se que o modelo de arrasto de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) não



Figura 17: Imagens de simulação da bolha no instante t=0,4s em um leito polidispersoso utilizando as correlações de arrasto de: (a) Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) (b) Ding e Gidaspow (1990), (c) Beetstra, Hoef e Kuipers (2007), (d) Experimental de Hoomans (2001).



Figura 18: Imagens de simulação da bolha no instante t=0,5s em um leito polidisperso utilizando as correlações de arrasto de: (a) Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) (b) Ding e Gidaspow (1990), (c) Beetstra, Hoef e Kuipers (2007), (d) Experimental de Hoomans (2001).

conseguiu capturar a formação de bolhas de gás. Uma comparação qualitativa mostra que o padrão da bolha na simulação é muito menor do que a bolha relatada no experimental de Hoomans (2001). Neste caso, o diâmetro da bolha no instante t=0,5s era apenas 0,01m. Para as correlações de Ding e Gidaspow (1990) e Beetstra, Hoef e Kuipers (2007), as bolhas apresentam um padrão coerente comparado com os resultados experimentais de Hoomans (2001). Os diâmetros das bolhas no instante t= 0,5s foram de 0,03m e 0,035m para os modelos de arrasto de Ding e Gidaspow (1990) e Beetstra,

Hoef e Kuipers (2007), respectivamente. A queda de partículas a partir do topo da bolha presente na simulação que utilizou a equação de Beetstra, Hoef e Kuipers (2007) é mais pronunciada em comparação com os resultados de simulação que utilizou a correlação de Ding e Gidaspow (1990). A interface entre a bolha e o leito é muito mais clara na correlação de Ding e Gidaspow (1990).

Hoef, Beetstra e Kuipers (2005) mostraram que a força de arrasto sobre uma partícula em uma mistura é diferente da força de arrasto sobre a mesma partícula em um sistema monodisperso. Sendo assim, um fator de correção para os modelos de arrasto utilizados em sistemas monodispersos deveria ser considerado no caso de sistemas polidispersos. Beetstra, Hoef e Kuipers (2007) propuseram uma correção no modelo de arrasto para avaliar segregação de espécies em um leito fluidizado borbulhante com duas fases sólidas distintas e encontraram bons resultados. No caso do sistema deste trabalho, sistema polidisperso com 10 fases sólidas distintas, a implementação de um fator de correção para o modelo de arrasto de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) pode melhorar os resultados.

### 4.2.2 Segregação em uma mistura binária

Nesta seção estuda-se a segregação de espécies para uma mistura binária com partículas de diâmetros distintos e mesma densidade. Para isso, considera-se um leito bidimensional com 0,15m de largura e 0,40m de altura. Utiliza-se partículas esféricas sólidas de dois diâmetros diferentes: partículas grandes com um diâmetro de  $2.500\mu$ m e partículas pequenas com um diâmetro de  $1.500\mu$ m, ambas com densidade de 2.525kg/m<sup>3</sup>. Utiliza-se o modelo DEM e o modelo linear mola-massa-amortecedor para o cálculo da força de contato entre as partículas. O coeficiente de rigidez da mola normal considerado é de 1.000 N/m, e o coeficiente de restituição normal é de 0,97. A malha computacional utilizada foi de  $15 \times 40$  células e o esquema numérico para a discretização dos termos convectivos das equações da fase gasosa foi o Superbee. O leito é fluidizado através de jatos de ar na base do leito com a velocidade superficial do ar igual 2,1m/s referente à velocidade de mínima fluidização. O número total de partículas utilizadas nas simulações numéricas foi de 7.804, sendo 6.429 partículas grandes e 1.375 partículas pequenas. O tempo total de simulação foi de 40 segundos e as simulações não assumiram simetria do leito. A figura 19 apresenta a geometria do leito e as condições de simulação para a segregação.



Figura 19: Geometria e condições de simulação para segregação.

As simulações numéricas são baseadas nos experimentos realizados por Hoomans (2001). A simulação foi realizada utilizando os diferentes modelos de arrasto: Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), Ding e Gidaspow (1990) e Beetstra, Hoef e Kuipers (2007).

A figura 20 mostra a condição inicial para uma distribuição aleatória das partículas misturadas. As partículas pequenas estão coloridas de azul e as partículas grandes estão coloridas de vermelho.

As figuras 21 e 22 ilustram os padrões típicos de segregação que ocorrem no leito nos instantes intermediário t=20s e no instante final de simulação t=40s.



Figura 20: Segregação de espécies (condição inicial): (a) simulação, (b) experimental de Hoomans (2001).



Figura 21: Segregação de espécies no instante t=20s utilizando as correlações de arrasto de: (a) Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) (b) Ding e Gidaspow (1990), (c) Beetstra, Hoef e Kuipers (2007), (d) Experimental de Hoomans (2001).

Todas as correlações de arrasto analisadas conseguiram capturar a formação de bolhas e segregação das partículas. O tamanho e a frequência das bolhas tem uma forte influência sobre a dinâmica das partículas. As partículas com diâmetros maiores foram transportadas para o topo do leito através das bolhas de gás e, em seguida, levadas



Figura 22: Segregação de espécies no instante t=40s utilizando as correlações de arrasto de:: (a) Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) (b) Ding e Gidaspow (1990), (c) Beetstra, Hoef e Kuipers (2007), (d) Experimental de Hoomans (2001).

para baixo nas regiões mais densas do leito. Isto enfatiza a importância das bolhas na mistura de sólidos em leito fluidizado. Comparando os resultados de simulação com os dados exprimentais de Hoomans (2001) nota-se que as partículas maiores tendem a acumular-se no centro do leito enquanto que no experimento existe uma divisão horizontal entre os dois tipos de partículas.

A figura 23(a) mostra a fração volumétrica dos sólidos na condição inicial e as figuras 23(b) - 23(d) mostram a fração volumétrica dos sólidos no instante t=40s ao longo da altura do leito, com o objetivo de analisar a taxa de segregação para cada um dos modelos de arrasto estudado. Note que para o modelo de Ding e Gidaspow (1990) a fração volumétrica do sólido para as partículas pequenas e grandes são iguais em torno de 0,075m da altura no leito. Para os modelos de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) e Beetstra, Hoef e Kuipers (2007) a fração volumétrica do sólido para as partículas pequenas e grandes são iguais em torno de 0,085m e 0,095m da altura no leito, respectivamente. Neste caso, o modelo de arrasto proposto por Ding e Gidaspow (1990) foi um pouco mais eficiente ao estimar a segregação de espécies.



Figura 23: Segregação de espécies: (a) t=0,0s, condição inicial para todos os modelos, (b) t=40s utilizando o modelo de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), (c) t=40s utilizando o modelo de Ding e Gidaspow (1990), (d) t=40s utilizando o modelo de Beetstra, Hoef e Kuipers (2007).

# 4.3 Estudo de sistemas coesivos

Nesta seção, estuda-se o comportamento de partículas coesivas do grupo A de Geldart (1973) em um escoamento bifásico gas-sólido em leito fluidizado borbulhante. Devido à prevalência de forças coesivas em sistemas com partículas dos grupos A e C de Geldart (1973), a dinâmica e os mecanismos envolvidos na fluidização desses sistema são complexos e necessitam de investigações detalhadas. Apesar dos esforços para se incluir efeitos de coesão em modelos Lagrangeanos muitos trabalhos utilizam sistemas com partículas de diâmetros grandes para o computo das forças de coesão, bem como valores médio e baixo para o nível de coesão.

No presente trabalho, a força coesiva entre as partículas é modelada pela força de

van der Waals. O efeito da força de van der Waals é analisado através de três diferentes valores da constante de Hamaker. No caso das partículas altamente coesivas, quando valores realísticos para constante de Hamaker são utilizados, o leito não fluidizou. Então, o estudo foi estendido considerando os efeitos de asperidade (irregularidades) na superfície das partículas (RUMPF, 1990). O efeito de vibração na base do leito também foi analisado para o caso das partículas altamente coesivas.

As simulações numéricas foram realizadas em um domínio computacional bidimensional com 0,55cm de largura e 1,25cm de altura. Uma região que representa o leito possui 0,55cm de largura e 0,625cm de altura, e fração de vazio na mímina fluidização igual a 0,37. A figura 24 mostra a geometria e a tabela 9 mostra os parâmetros usados nas simulações numéricas.



Figura 24: Geometria do leito bidimensional.

Foi utilizado um sistema com 3.282 partículas caracterizadas pelo diâmetro médio  $d_{pm}$  igual a 100µm e densidade de 900kg/m<sup>3</sup>. Para a fase gasosa, considerou-se viscosidade  $\mu_g = 1.8 \times 10^{-5}$  Pa.s e densidade  $\rho_g = 1.2$ kg/m<sup>3</sup>. Os dados utilizados foram baseados no trabalho de Ye, Hoef e Kuipers (2004). Na parede, foi aplicada a condição de contorno de livre deslizamento e no topo do leito a pressão foi definida para ser a atmosférica.

Tabela 9: Parametros usac	labela 9: Parametros usados nas simulações.					
Número de partículas	3.282					
Diâmetro da partícula	$d_p = 100 \mu \mathrm{m}$					
Densidade da partícula	$\rho_s = 900 \text{kg/m}^3$					
Coeficiente de rigidez da mola normal	$k_n = 7$ N/m					
Coeficiente de rigidez da mola tangencial	$k_t = 2N/m$					
Coeficiente de restituição	e=0,9					
Coeficiente de fricção	$C_f = 0,3$					
Constantes de Hamaker	$A=10^{-12}, A=10^{-13}, A=10^{-14}$ kg.m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>					
"Outer cut-off" partícula-partícula	20µm					
"Inner cut-off" partícula-partícula	$4 \times 10^{-4} \mu m$					

Tabela 9: Parâmetros usados nas simulações.

### 4.3.1 Influência das constantes de Hamaker

Nesta seção são apresentados resultados numéricos para a análise do efeito da força de van der Waals entre as partículas durante o processo de fluidização. Para isso, a curva de fluidização foi levantada para partículas coesivas com as constantes de Hamaker de:  $A=10^{-12}$ kg.m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>,  $A=10^{-13}$ kg.m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup> e  $A=10^{-14}$ kg.m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>.

O processo de fluidização foi iniciado com o leito fixo. A velocidade superficial do gás, entrando através da base do leito, foi aumentada com pequenos incrementos, nos quais, cada velocidade foi mantida por 0,2 segundos. Com o aumento da velocidade superficial do gás ocorre a queda de pressão ao longo do leito devido à fricção do gás com as partículas. A velocidade de mínima fluidização é definida quando a queda de pressão ao longo do leito é igual ao seu peso dividido pela área da base, e neste caso, o regime de fluidização é alcançado.

A figura 25 mostra a queda de pressão do leito versus a velocidade superficial do gás para partículas altamente coesivas ( $A=10^{-12}$ kg.m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>). A queda de pressão foi medida na primeira célula computacional logo acima da base do leito. Neste caso, as simulações apresentaram um leito muito aderente e que não fluidizou quando valores realísticos da constante de Hamaker foram empregados.Para partículas com níveis de coesão médio ( $A=10^{-13}$ kg.m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>), figura 26, observa-se alguns picos na pressão, porém com o aumento da velocidade do gás a queda de pressão ao longo do leito estabiliza-se,

e portanto o regime de fluidização é atingido.



Figura 25: Queda de pressão no leito para partículas coesivas com constante de Hamamker de  $A=10^{-12}$ kg.m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup> considerando e sem considerar correção de Rumpf (1990) para asperidade.



Figura 26: Queda de pressão no leito para partículas coesivas com constante de Hamamker de  $A=10^{-13}$ kg.m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup> considerando e sem considerar correção de Rumpf (1990) para asperidade.

Para partículas com níveis de coesão baixo ( $A=10^{-14}$ kg.m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>), figura 27, o regime de fluidização é alcançado sem problemas, porém as simulações não são consistentes com observações experimentais, uma vez que a forças coesivas são importantes em leitos fluidizados composto por partículas do tipo A e portanto não devem ser desprezadas.



Figura 27: Queda de pressão no leito para partículas coesivas com constante de Hamamker de  $A=10^{-14}$ kg.m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup> considerando e sem considerar correção de Rumpf (1990) para asperidade.

Uma vez que os resultados de simulação numérica para partículas com níveis de coesão alto e médio não foram satisfatórios, o estudo será extendido usando no cálculo da força coesiva de van der Waals a correção de Rumpf (1990) a qual considera os efeitos de asperidade (irregularidades) na superfície da partícula. Para isso, a equação (3.36) foi modificada:

$$F_{vdW} = \frac{A}{12H^2} \left[ \frac{Rr^{(i)}}{R + r^{(i)}} + \frac{r^{(i)}}{(1 + R/H)^2} \right]$$
(4.5)

onde  $F_{vdW}$  é a força de van der Waals, R é a asperidade na superfície da partícula,  $r^{(i)}$  é o raio da partícula, A é a constante de Hamaker e H é a distância entre as superfícies
das partículas, dada pela equação (3.37). Similarmente, a equação (3.38) também é modificada para o computo dos efeitos de asperidade entre as partículas e a parede. Para as simulações numéricas, considerou-se  $1\mu$ m como efeito de asperidade.

As figuras 25, 26 e 27 também mostram os resultados da queda de pressão do leito versus velocidade superficial do gás com a correção de Rumpf (1990) para a asperidade na superfície das partículas. Nota-se que os sistemas com nívies de coesão alto e médio (valores mais realísticos da constante Hamaker) atingem o regime de fluidização quando se considerou a correção de Rumpf (1990). Nestes casos, os efeitos de asperidade na superfície da partícula tendem a diminuir a intensidade das forças coesivas.

As figuras 28 e 29 mostram imagens da simulações para partículas com nível de coesão alto ( $A=10^{-12}$ kg.m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>) em diferentes tempos e com diferentes velocidade de gás, sem e com correções de Rumpf (1990) para asperidade, respectivamente. A figura 28 confirma que o leito permanece fixo mesmo com o aumento da velocidade superficial do gás. Na figura 29 nota-se o surgimento de alguns canais conforme a velocidade superficial do gás aumenta (ver figuras 29(b) e 29(c)), o que é um comportamento típico de partículas pertencentes ao grupo A de Geldart (1973). Para altos valores da velocidade do gás, nota-se a formação de bolhas na base do leito, que se desprendem e propagam até a superfície do leito (ver figuras 29(d) e 29(e)).

Com base nos dados de simulação e nas figuras 25, 26 e 27 a velocidade de mínima fluidização para os sitemas com níveis de coesão alto, médio e baixo foi obtida aproximadamente em torno de  $U_{mf}$ =0,75cm/s,  $U_{mf}$ =0,7cm/s e  $U_{mf}$ =0,65cm/s, respectivamente.Os valores computados para a velocidade de mínima fluidização estão sobrestimados comparado com valores calculados a partir de aproximações teóricas propostas por Syamlal, Rogers e O'Brien (1993), Ergun (1952) e Wen e Yu (1966). Para estas correlações, a velocidade de mínima fluidização teórica para partículas caracterizadas pelo diâmetro médio de  $d_{pm}$ =100µm, densidade de  $\rho_s$ =900kg/m<sup>3</sup> e  $\epsilon_{mf}$ =0,37 são



Figura 28: Imagens de simulação para partículas coesivas ( $A=10^{-12}$ kg.m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>) sem considerar a correção de Rumpf (1990) para asperidade: (a) tempo 1,2s e  $U_g=0,3$ cm/s; (b) tempo 3,2s e  $U_g=0,8$ cm/s; (c) tempo 3,6s e  $U_g=0,9$ cm/s; (d) tempo 4,2s e  $U_g=1,1$ cm/s; (e) tempo 4,4s e  $U_g=1,2$ cm/s.



Figura 29: Imagens de simulação para partículas coesivas ( $A=10^{-12}$ kg.m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>) considerando a correção de Rumpf (1990) para asperidade: (a) tempo 1,2s e  $U_g=0,3$ cm/s; (b) tempo 3,2s e  $U_g=0,8$ cm/s; (c) tempo 3,6s e  $U_g=0,9$ cm/s; (d) tempo 4,2s e  $U_g=1,1$ cm/s; (e) tempo 4,4s e  $U_g=1,2$ cm/s.

 $U_{mf}$ =0,25cm/s para correlação de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993),  $U_{mf}$ =0,260cm/s para equação de Ergun (1952) e  $U_{mf}$ =0,294cm/s para Wen e Yu (1966).

Uma razão para isso é a sensibilidade das variáveis nas correlações teóricas. Por exemplo, a fração de vazio na mínima fluidização é altamente sensível. Uma pequena variação na fração de vazio, faz com que a velocidade de fluidização teórica varie em um grande intervalo. Além disso, partículas coesivas do grupo A de Geldart (1973) são muito difíceis fluidizadar devido à aglomeração de partículas e regiões empacotadas do leito.

Como um método para melhorar o processo de fluidização em sistemas altamente coesivos ( $A=10^{-12}$ kg.m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>), estuda-se o efeito de vibração na base do leito conside-rando os efeitos de asperidade na superfície das partículas (RUMPF, 1990).

#### 4.3.2 Efeitos de vibração em sistemas altamente coesivos

Para este estudo, uma rotina foi implementada no código fonte MFIX-DEM, com o objetivo de acoplar uma força vertical senoidal à base do leito. A razão entre amplitude de vibração e aceleração da gravidade é dada por:

$$\Gamma = \frac{a\omega^2}{g} \implies a = \frac{\Gamma g}{\omega^2}$$
 (4.6)

onde  $\omega = 2\pi f$  é a frequência angular de vibração. A base do leito se move senoidalmente na direção vertical:

$$y(t) = asin(\omega t); \quad \dot{y}(t) = a\omega cos(\omega t); \quad \ddot{y}(t) = -a\omega^2 sin(\omega t)$$
 (4.7)

onde y(t) é a posição do deslocamento,  $\dot{y}(t)$  é a velocidade vertical e  $\ddot{y}(t)$  é a aceleração.

Para investigar os efeitos de vibração no processo de fluidização de sistemas altamente coesivos, a figura 30 mostra os resultados de simulação númerica para queda de pressão do leitos versus velocidade superficial do gás para um leito convencional e para um leito vibrando, com frequência de f=25Hz e amplitudes de  $\Gamma=0,03$  e  $\Gamma=0,1$  respectivamente. Os resultados mostram que a velocidade de mínima fluidização é de aproximadamente  $U_{mf}$ =0,5cm/s no caso dos leitos vibrados, em comparação com  $U_{mf}$ =0,75cm/s para o leito convencional (sem vibração). Quando a vibração é aco-



Figura 30: Queda de pressão no leito para partículas coesivas com constante de Hamamker de  $A=10^{-14}$ kg.m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup> considerando e sem considerar correção de Rumpf (1990) para asperidade para de um leito convencional e para leitos vibrados com frequência de vibração de 25Hz e amplitudes de 0,03 e 0,1 repectivamente.

plada ao leito, as partículas começam a colidir umas com as outras e também com a base do leito. A energia de vibração a partir destas colisões se propaga pelo leito melhorando a circulação das partículas e o processo de fluidização.

Na figura 30 nota-se que com o alto valor para amplitude de vibração de  $\Gamma$ =0,1, a queda de pressão do leito diminui. Alguns trabalhos na literatura, discutem que pequenas amplitudes de vibração podem não fornecer força suficiente para vencer as forças de coesão, de modo que uma amplitude de vibração relativamente grande é necessária para fluidizar sistemas coesivos (TATEMOTO; MAWATARI; NODA, 2005), (LIMTRAKUL; ROTJANAVIJIT; VATANATHAM, 2007).

Para o estudo da influência dos parâmetros de vibração, o leito foi vibrado com

três diferentes frequências: f=10Hz, f=25Hz e f=50Hz para uma mesma amplitude de vibração  $\Gamma=0,1$ . A figura 31 mostra a queda de pressão do leito versus velocidade superficial do gás para as três diferentes frequências. As curvas de fluidização são similares conforme a frequência de vibração aumenta.



Figura 31: Queda de pressão no leito para partículas coesivas com constante de Hamamker de  $A=10^{-14}$ kg.m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup> considerando e sem considerar correção de Rumpf (1990) para asperidade para um leito convencional e para leitos vibrados com amplitude de vibração de 0,1 e frequência de 10Hz, 25Hz e 50Hz respectivamente.

Para baixas velocidades de gás, as partículas estão aglomeradas, a queda de pressão atinge um pico e então diminui à medida que as velocidades superficiais do gás aumentam, resultando em alguns picos de queda de pressão. Estes picos podem ser explicados pela formação de canais no leito, o que pode resultar em alguma diminuição na queda de pressão.

A figura 32 mostra imagens das simulações numéricas para as diferentes amplitudes e frequências. Esses resultados são comparados com o leito convencional ( $\Gamma$ =0 e f=0). Nessa figura, observam-se os canais característicos presentes em sistemas coesivos. Conforme a velocidade superficial do gás aumenta observa-se a formação de bolhas e a recirculação de partículas.



Figura 32: Imagens de simulação para partículas coesivas ( $A=10^{-12}$ kg.m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>) considerando a correção de Rumpf (1990) para asperidade: (a) leito convencional ( $\Gamma=0$  e f=0); (b) leito vibrado  $\Gamma=0,03$  e f=25Hz; (c) leito vibrado  $\Gamma=0,1$  e f=10Hz; (d) leito vibrado  $\Gamma=0,1$  e f=25Hz; (e) leito vibrado  $\Gamma=0,1$  e f=50Hz.

### 4.4 Estudo do coeficiente de rigidez da mola

Esta seção, apresenta o estudo do coeficiente de rigidez de mola utilizado no cálculo das forças de contato no sistema linear massa-mola-amortecedor. São realizadas simulações numéricas para três problemas distintos: (a) colisões entre partículapartícula e partícula-parede; (b) partícula individual em queda livre; e (c) leito fluidizado borbulhante. O valor do coeficiente de rigidez da mola linear é determinado através da analogia com o modelo não-linear utilizando os seguintes parâmetros: o coeficiente de restituição normal, o diâmetro da partícula, a densidade da partícula, o módulo de Young, o coeficiente de Poisson e a velocidade de impacto.

#### 4.4.1 Colisões partícula-partícula e partícula-parede

Esta seção é baseada nos ensaios experimentais de Foerster et al. (1994), onde foram medidas as propriedades de colisões entre duas esferas pequenas e entre uma esfera pequena e uma superfície. O objetivo é calcular o coeficiente de rigidez da mola normal para colisões binárias entre duas esferas e entre uma esfera e uma superfície para o modelo LSD. Para as simulações foram utilizados dados de duas esferas de vidro ("soda lime glass") com diâmetros 3,18mm colidindo com velocidade  $v_0$ = 1m/s. As propriedades das esferas são: densidade  $\rho$ =2.500kg/m<sup>3</sup>, módulo de Young *E*=71GPa, coeficiente de Poisson  $\sigma$ = 0,22, e coeficiente de restituição normal  $e_n$ = 0,97. Utilizando esses valores, determina-se: massa efetiva  $m_{eff}$ =2,105×10<sup>-5</sup>kg, raio efetivo  $r_{eff}$ = 7,950×10<sup>-4</sup>m, módulo de Young efetivo  $E_{eff}$ = 37,306GPa, coeficiente de rigidez da mola normal Hertiziano  $k_{n,Hz}$  = 1,4025×10<sup>9</sup>N/m<sup>1.5</sup>.

A tabela 10 apresenta os valores para o coeficiente de rigidez da mola na direção normal (modelo LSD) para colisões binárias entre duas esferas.

Observa-se na tabela 10 que o valor do coeficiente de amortecimento  $v_{H_z}^*$  é menor devido ao valor do coeficiente de restituição estar perto da unidade ( $e_n = 0.97$ ). Quando

$v_{Hz}^*$	$\delta^*_{maxHSD}$ $k_n[MN/m]$	$t_{c,nHSD}^*$ $k_n[MN/m]$	$\overline{\delta}_{nHSD}^{*}$ $k_n[MN/m]$
(Eq.(3.93))	(Eq.(3.94))	(Eq.(3.95))	(Eq.(3.96))
0,0108	1,0802	3,2280	0,6751
	2,0045	2,2836	2,0804

Tabela 10: Coeficiente de rigidez da mola normal para o modelo LSD: colisão partícula-partícula

são comparados os métodos para se computar  $k_n$ , equações (3.94), (3.95), e (3.96), o valor estimado pela aproximação da sobreposição média (equação (3.96)) mostra-se adequado. Além disso, as outras duas aproximações estudadas nesse trabalho (sobreposição máxima e tempo de contato) também são apropriadas para uso. Assim, para o caso de colisões binárias de duas esferas de vidro, o valor obtido para o coeficiente de rigidez de mola na direção normal para o modelo LSD é aproximadamente  $k_n$ = 2,08MN/m.

Em seguida, considerou-se a colisão entre uma esfera de vidro e uma superfície plana de alumínio. A velocidade de impacto é  $v_0$ = 1,35m/s. A placa de alumínio possui as seguintes propriedades: densidade  $\rho_w$  =2.700kg/m<sup>3</sup>, módulo de Young  $E_w$  = 69GPa, coeficiente de Poisson  $\sigma_w$  = 0,33. O coeficiente de restituição normal utilizado para a colisão entre a esfera e a placa foi de  $e_n$  = 0,831. Utilizando esses valores, calculouse: massa efetiva  $m_{eff}$  = 4,209×10<sup>-5</sup>kg, raio efetivo  $r_{eff}$  = 1,590×10<sup>-3</sup>m, módulo de Young efetivo  $E_{eff}$  = 37,998GPa, coeficiente de rigidez da mola normal Hertiziano  $k_{n,Hz}$  = 2,0202×10<sup>9</sup>N/m<sup>1.5</sup>. Os valores para o coeficiente de rigidez da mola na direção normal (modelo LSD) para colisão entre a esfera e a placa plana são apresentados na tabela 11.

Tabela 11: Coeficiente de rigidez da mola normal para o modelo LSD: colisão com a parede

$v_{Hz}^*$	$\delta^*_{maxHSD}$	$t^*_{c,nHSD}$	$\overline{\delta}_{nHSD}^{*}$
	$k_n$ [MN/m]	$k_n$ [MN/m]	$k_n$ [MN/m]
(Eq.(3.93))	(Eq.(3.94))	(Eq.(3.95))	(Eq.(3.96))
0,0658	1,0181	3,2830	0,6356
	3,3751	3,8421	3,5279

Observando a tabela 11, uma estimativa inicial para o cálculo do coeficiente de rigidez da mola é o uso do modelo HSD (equação (3.88)) em conjunto com a abordagem de sobreposição média (equação (3.96)). Assim, para este caso de colisão com a parede, o valor do coeficiente de rigidez da mola normal é de aproximadamente  $k_n$ =3,53MN/m. O algoritmo proposto pela equação (3.92) para o cálculo adimensional da sobreposição média também pode ser usado para outros modelos de esfera suave.

Existem diversos modelos para predizer as propriedades de colisão durante o impacto na direção normal (Hunt e Grossley (1975), Kuwabara e Kono (1987), Tsuji, Tanaka e Ishida (1992)). Por exemplo, para uma colisão entre esferas viscoeláticas, o modelo com força de amortecimento proporcional a raiz quadrada da sobreposição (p = 1/2) semelhante ao modelo HSD pode ser usado (ver Kuwabara e Kono (1987), Brilliantov et al. (1996)). Stevens e Hrenya (2005) compararam vários modelos de esfera suave com experimentos usando partículas de aço submetidas a um impacto normal. Os dados experimentais obtidos por Stevens e Hrenya (2005) mostraram que o tempo de colisão medido está dentro de 10% do que é previsto pela teoria Hertiziana.

#### 4.4.2 Esfera individual em queda livre

Nesta seção, é analizado o problema de uma esfera em queda livre de uma altura especificada. A esfera cai sob a ação da força da gravidade e salta após a colisão com uma parede fixa. Esse problema é clássico e tem sido aplicado por diversos autores, Chen, Drumm e Guiochon (2007), Flores et al. (2011), Garg et al. (2012), Jankowski (2005), Ye, Li e Zhu (2009), no estudo de parâmetros de colisão. A figura 33 ilustra o modelo de uma esfera que cai sobre uma superfície plana.

Seguindo o trabalho de Garg et al. (2012) e Chen, Drumm e Guiochon (2007), utiliza-se uma esfera com diâmetro de 0,2m em queda livre que colide com uma parede fixa. As propriedades da esfera foram obtidas do trabalho de Chen, Drumm e Guiochon (2007): densidade  $\rho$ = 2.600kg/m<sup>3</sup>, módulo de Young *E*=1,6916MPa, mó-



Figura 33: Esquema de uma esfera individual em queda livre.

dulo de Young na parede  $E_w$ = 5,0748MPa, coeficiente de Poisson para esfera e para a parede  $\sigma = \sigma_w = 0$ , e dois diferentes valores para o coeficiente de restituição normal ( $e_n$ = 0,9 e  $e_n$  = 0,7) para a colisão com a parede. Os seguintes valores também foram utilizados no presente estudo: altura inicial  $h_0$  = 0,5m e aceleração da gravidade g =9,81m/s<sup>2</sup>.

A velocidade de impacto é de  $v_0 = -\sqrt{2g(h_0 - r_p)} = -2,801$ m/s, onde  $r_p$  é o raio da esfera. Utilizando esse valor, calculou-se: massa efetiva  $m_{eff}$ =10,891kg, raio efetivo  $r_{eff}$ = 0,1m, módulo de Young efetivo  $E_{eff}$  = 1,268700Pa, coeficiente de rigidez de mola na direção normal para o modelo HSD  $k_{n,Hz}$  = 5,3493×10<sup>5</sup>N/m<sup>1.5</sup>. Os valores para o coeficiente de rigidez da mola na direção normal para o modelo LSD são mostrados na tabela 12.

$e_n$	$\delta^*_{maxHSD}$	$t^*_{c,nHSD}$	$\overline{\delta}^*_{nHSD}$
$\nu^*_{Hz}$	$k_n$ [N/m]	$k_n$ [N/m]	$k_n$ [N/m]
(Eq.(3.93)	(Eq.(3.94)	(Eq.(3.95))	(Eq.(3.96))
0,9	1,0492	3,2537	0,6555
0,0375	$7,6294 \times 10^4$	8,6899×10 <sup>4</sup>	$7,9355 \times 10^{4}$
0,7	0,9578	3,3529	0,5961
0,1261	$7,2895 \times 10^4$	$8,2795 \times 10^{4}$	$7,7705 \times 10^4$

 Tabela 12: Coeficiente de rigidez da mola normal para o modelo LSD: esfera em queda livre

De acordo com a tabela 12, para altos valores do coeficiente de restituição normal

 $(e_n = 0,9)$ , o modelo HSD apresenta pequenos valores para os coeficientes de amortecimento  $v_{Hz}^*$ . Comparando os três métodos para o cálculo de  $k_n$  (equações: (3.94), (3.95) e (3.96)), foi utilizado o método da sobreposição média e o modelo HSD para uma estimativa do coeficiente de rigidez da mola normal para o modelo LSD, isto é,  $k_n = 7,94 \times 10^4$ N/m.

O código MFIX-DEM foi utilizado para as simulações numéricas. Um teste para uma esfera em queda livre é também apresentado no trabalho de Garg et al. (2012). A figura 34 mostra a posição do centro da esfera y e a velocidade da esfera v, versus o tempo (de t =0s até t =1,6s). O contato é modelado pelo modelo LSD e a esfera rebate depois do impacto com a parede. Observa-se a energia perdida devido a dissipação da força de contato. A duração do contato ocorre para valores da posição do centro da esfera y <0,1m onde a forças repulsivas atuam. Durante o tempo total de simulação, t =1,6s, a esfera colide três vezes com a parede.



Figura 34: Cinemática da esfera ( $k_n = 7,94 \times 10^4$  N/m e  $e_n = 0,9$ , para o modelo LSD): centro da posição da esfera y (linha sólida); velocidade da esfera (linha pontilhada).

O código MFIX-DEM também foi utilizado para simulações com o coeficiente de

restituição normal igual a  $e_n = 0,7$ . O coeficiente de rigidez da mola na direção normal usado foi  $k_n = 7,77 \times 10^4$ N/m (modelo HSD equação (3.88) e sobreposição média equação (3.96), ver tabela 12). A figura 35 mostra os resultados da cinemática da esfera (posição do centro y e velocidade v versus tempo) para o coeficiente de restituição normal  $e_n = 0,7$ . Da mesma forma que o caso anterior, quando a esfera colide com a parede, o contato ocorre e a esfera rebate. Como o coeficiente de restituição normal é menor do que a unidade, a esfera salta menos após cada contato. A duração de contato em cada salto da esfera é menor e diminui até zero, quando a esfera permanece no solo. Na figura 35, observam-se sete colisões da esfera com a parede.



Figura 35: Cinemática da esfera ( $k_n = 7,77 \times 10^4$ N/m e  $e_n = 0,7$ , para o modelo LSD): centro da posição da esfera y (linha sólida); velocidade da esfera(linha pontilhada).

#### 4.4.3 Leito fluidizado borbulhante

Nesta seção, estuda-se um leito fluidizado (material Perspex), similar aos experimentos de Müller et al. (2008) e Müller et al. (2009) com dimensões: 44mm × 10mm × 120mm (largura, espessura e altura). A figura 36 mostra a geometria do leito utilizada nas simulações numéricas.



Figura 36: Geometria do leito tridimensional.

Semelhantemente as simulações numéricas de Müller et al. (2009), são utilizadas 9.240 partículas com diâmetro médio de 1,2mm equivalentes a sementes de papola utilizada nos experimentos Müller et al. (2009). O leito foi fluidizado durante 25s por ar, com uma velocidade superficial de 0,9m/s. Os parâmetros utilizados nas simulações estão sumarizados na tabela 13. O modelo de arrasto de Ding e Gidaspow (1990), foi empregado para o cálculo da força de interação entre o fluido e as partículas na interface. Como o coeficiente de restituição normal é de  $e_n$ =0,98, utilizou-se a sobreposição média e o modelo HSD para estimar o coeficiente de rigidez da mola normal para o modelo LSD. Utilizando os dados da tabela 13, calculou-se os seguintes parâmetros de colisão partícula-partícula: massa efetiva  $m_{eff}$ =4,524×10<sup>-7</sup>kg, raio efetivo  $r_{eff}$ =3,0×10<sup>-4</sup>m, módulo de Young efetivo  $E_{eff}$ =6,733×10<sup>4</sup>Pa, coeficiente de rigidez da mola normal Hertiziano  $k_{n,Hz}$ =1,5550×10<sup>3</sup>N/m<sup>1.5</sup>, coeficiente de amortecimento adimensional  $v^*$ =7,1896×10<sup>-3</sup>, sobreposição média adimensional  $\overline{\delta}_{nHSD}^*$ = 0,6778; e os seguin-

Leito:		
Dimensões(C×L×A)	44mm×10mm×120mm	
Módulo de Elasticidade	3GPa	
Coeficiente de Poisson	0,35 ~ 36mm	
Altura do leito estático		
Células nas direções x, y, e z	$15 \times 40 \times 3$	
Partículas:		
Número	9.240	
Densidade	$1.000 \text{kg/m}^3$	
Diâmetro	1,2mm	
Módulo de Elasticidade	1,2×10 <sup>5</sup> Pa	
Coeficiente de Poisson	0,33	
Coeficiente de restituição partícula-partícula	0,98	
Coeficiente de restituição partícula-parede	0,98	
Coeficiente de fricção partícula-partícula	0,10	
Coeficiente de fricção partícula-parede	0,10	
Fluido:		
Temperatura do ar	298,15K	
Densidade	$1,2kg/m^{3}$	
Viscosidade	1,8×10 <sup>-5</sup> Pa.s	

Tabela 13: Parâmetros de simulação do leito borbulhante

tes parâmetros de colisão para partícula-parede: massa efetiva  $m_{effw}=9,048\times10^{-7}$ kg, raio efetivo  $r_{effw}=6,0\times10^{-4}$ m, módulo de Young efetivo  $E_{effw}=1,347\times10^{5}$ Pa, coeficiente de rigidez da mola normal Hertiziano  $k_{n,H_{zw}}=4,3980\times10^{3}$ N/m<sup>1.5</sup>, coeficiente de amortecimento adimensional  $v_{w}^{*}=7,1896\times10^{-3}$ , sobreposição média adimensional  $\overline{\delta}_{nHSD_{w}}^{*}=0,6778$ .

Nota-se que o valor do coefciente de rigidez da mola normal (modelo LSD) expresso pela equação (3.96) é dependente da velocidade de colisão  $v_0$ . A figura 37 mostra os valores de  $k_n$  versus  $v_0$  para colisões partícula-partícula (linha sólida) e para partícula-parede (linha pontilhada).

Para determinar o valor do coeficiente de rigidez da mola utilizou-se o gráfico da figura 37, com a velocidade de impacto variando de 0,0m/s a 0,3m/s. Para colisões partícula-partícula foi obtido  $k_n$ =10,28N/m em  $v_0$ =0,3m/s e um valor médio de



Figura 37: Coeficiente de rigidez da mola normal versus velocidade de impacto: colisão partícula-partícula (linha sólida); colisão partícula-parede (linha pontilhada)

 $\overline{k_n}$ =7,33N/m, e para colisões partícula-parede, obteve-se  $k_n$ =27,14N/m em  $v_0$ =0,3m/s e um valor médio de  $\overline{k_n}$ =19,34N/m. Os valores médios dos coeficientes de rigidez da mola foram calculados através da média aritmética com base nos valores de  $k_n$  do gráfico da figura 37.

O código MFIX-DEM foi utilizado nas simulações através do modelo linear LSD. Resultados numéricos transientes foram armazenados a uma frequência de 100Hz para o pós-processamento dos dados. Do tempo total de simulação 25s, somente os últimos 20s em regime foram utilizados para calcular os valores da porosidade e velocidade do sólido.

A figura 38 apresenta imagens de simulação tridimensional do leito nos seguintes instantes: t=0,1s, t=0,25s, t=0,5s, t=5s, t=15s e t=25s. A figura 38(a) apresenta a condição inicial de simulação. A figura 38(b) ilustra o instante quando a primeira bolha de ar que se formou no leito atinge a superfície e a figura 38(c) ilustra o instante quando a segunda bolha de ar atinge a superfície. A figura 38(d) ilustra a dinâmica do leito no instante inicial do regime considerado para o cálculo dos valores da porosidade e velocidade do sólido e a figura 38(e) ilustra o instante intermediário do regime. A figura 38(f) mostra a dinâmica do leito no instante final da simulação. Nas figuras notase o movimento predominante de uma bolha relativamente grande, o que é esperado, considerando o tamanho relativamente pequeno do leito.



Figura 38: Imagens de simulação nos instantes: (a) t=0,1s; (b) t=0,25s; (c)t=0,5s; (d) t=5,0s; (e) t=15,0s; (f) t=25,0s.

A figura 39 mostra os valores da porosidade média no tempo em duas alturas diferentes do leito: 16,4mm (figura 39(a)) e 31,2mm (figura 39(b)). Nestas figuras,

apresenta-se uma comparação da simulação corrente com os dados experimentais e as simulações DEM de Müller et al. (2009) e com as simulações DEM de Gopalakrishnan e Tafti (2013). Os perfis médios da porosidade das simulações DEM deste trabalho



Figura 39: Porosidade: (a)16,5mm e (b)31,2mm.

estão qualitativamente em concordância com os resultados experimentais de Müller et al. (2009) e com os resultados numéricos de Gopalakrishnan e Tafti (2013). O valor da porosidade perto das paredes ficou sobrestimada na altura de 31,2mm, tanto nas simulações DEM deste trabalho quanto nas simulações de Gopalakrishnan e Tafti (2013) e de Müller et al. (2009). Li et al. (2012) também simularam este problema para investigar a influência da esfericidade e do atrito de resistência e obtiveram desvios semelhantes.

A figura 40 apresenta o perfil da velocidade axial média no tempo para o sólido em três alturas distintas do leito: 15mm (figura 40(a)), 25mm (figura 40(b)), e 35mm (figura 40(c)), respectivamente. Os perfis de velocidade para o sólido obtido pelas simulações numéricas é parabólico. Tanto as simulações DEM deste trabalho, quanto as simulações dos trabalhos de Müller et al. (2008), e de Gopalakrishnan e Tafti (2013) mostraram um desvio relativo dos dados experimentais próximo das paredes. Na altura de 35mm as simulações também apresentam desvios na linha central.

Li et al. (2012) investigaram a influência de diversos parâmetros de simulação, como constante da mola, atrito com a parede, esfericidade das partículas, e atrito de resistência em perfis de velocidade de sólidos na direção vertical. Esses autores também obtiveram desvios semelhantes nos resultados DEM. Os efeitos da variação desses parâmetros nas simulações de Li et al. (2012) não foram significativos. Estudos adicionais podem ser feitos no modelo de análise de força de contato. Por exemplo, no caso do modelo LSD, a constante da mola depende da velocidade e para todos os contatos entre as partículas foi considerado um único valor. Existem também vários modelos não-lineares que consideraram as propriedades do material e características do seu processo de colisão. Além disso, a não-esfericidade das sementes de papoula só foi considerada na correlação de arrasto na interface (por multiplicação do diâmetro da partícula pela esfericidade) e não no contato das partículas (DUZIUGYS; PETERS, 2001).

Assim, considerando um modelo linear de força de contato, o valor do coeficiente de rigidez da mola normal (modelo LSD) usado na presente simulação reproduz os resultados numéricos obtidos por outros autores com desvios semelhantes em relação aos dos dados experimentais de Müller et al. (2008).



Figura 40: Velocidade axial média do sólido no tempo em três alturas distintas do leito: (a) 15mm; (b) 25mm e (c)35mm.

# **5** CONSIDERAÇÕES FINAIS

## 5.1 Conclusões

Neste trabalho investigou-se aspectos relevantes relacionados a simulação numérica de escoamentos gás-sólido em leito fluidizado borbulhante, através do modelo Euleriano-Euleriano de duas fases separadas, e também do modelo Euleriano-Lagrangeano baseado no Método de Elementos Discretos. As simulações numéricas foram realizadas através do código aberto MFIX. Considerando-se as discussões e análises desenvolvidas ao longo do presente trabalho, formulam-se as seguintes conclusões:

Para o estudo da mistura em leito fluidizado borbulhante, através do modelo Euleriano-Euleriano de duas fases separadas, as velocidades de mínima fluidização tanto da areia, quanto do sal, ficaram de acordo com os dados experimentais de Palma (1998) e também com correlações teóricas da literatura.

Em relação à mistura, esta foi mais homogênea na região central do leito em relação às posições próximas à parede. Para baixa velocidade de operação do leito  $(1,4U_{mf})$ , a mistura mostrou um índice de homogeneidade bastante regular e ficou de acordo com os dados experimentais de Palma (1998). Para as velocidades de operação do leito média e alta  $(1,7U_{mf} e 2,0U_{mf}, respectivamente)$  o leito atingiu uma certa homogeneidade na região central, porém algumas posições tiveram irregularidades mais acentuadas. A velocidade de operação de  $2,0U_{mf}$  foi o caso, em que as simulações numéricas tiveram o pior desempenho comparado com os dados experimentais de Palma

(1998). Essas irregularidades podem ser atribuídas as condições e modelos escolhido para o fechamento do modelo matemático Euleriano-Euleriano de duas fases separadas.

Apesar de certas variações em determinadas posições do leito, o modelo matemático capturou bem a hidrodinâmica do problema proposto. A mudança de alguns parâmetros (condições iniciais e de contorno), testes de outros modelos de arrasto e a consideração de um modelo de turbulência podem melhorar os resultados das simulações numéricas.

O Método dos Elementos Discretos foi utilizado para estudar a influência das correlações de arrasto em sistemas monodisperso e polidisperso. O tamanho e formato da bolha dependem fortemente do modelo de arrasto utilizado. Para um sistema monodisperso, as correlações propostas por Ding e Gidaspow (1990) e por Beetstra, Hoef e Kuipers (2007) sobrestimaram o tamanho da bolha em grande escala. Neste caso, a velocidade do ar que entra pela parte inferior do leito à velocidade mínima de fluidização teve um grande efeito no formato da bolha. No sistema monodisperso, a equação de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) apresentou uma boa previsão para a forma e tamanho da bolha.

Para o sistema polidisperso, as equações de Ding e Gidaspow (1990) e Beetstra, Hoef e Kuipers (2007) apresentaram um resultado muito melhor para o tamanho da bolha. Neste caso, a correlação de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) não consegui capturar a formação de bolhas. Um fator de correção, baseado no trabalho de Beetstra, Hoef e Kuipers (2007), para modelo de arrasto de Syamlal, Rogers e O'Brien (1993) podem melhorar os resultados.

Para a mistura binária, todas as correlações utilizadas para estimar a força de arrasto conseguiram prever a segregação do particulado. Uma vez que as simulações são iniciadas com as partículas bem misturadas, os índices de segregação concordaram muito bem com os índices de segregação observados experimentalmente no trabalho de Hoomans (2001).

No estudo de sistemas coesivos, conclui-se que a força coesiva afeta fortemente o comportamento hidrodinâmico de reatores de leito fluidizado. Para partículas altamente coesivas as simulações não conseguiram determinar a velocidade de mínima fluidização, e consequentemente não foi possível fluidizar o leito. O estudo foi então estendido considerando os efeitos de asperidade na superfície das partículas (RUMPF, 1990).

Foi estudado o efeito da vibração do leito com o objetivo de melhorar o processo de fluidização das partículas altamente coesivas. Quando a vibração foi adicionada ao leito, as partículas colidem umas com as outras e também com a base do leito. A energia de vibração destas colisões se propaga através do leito, melhora a circulação das partículas e, consequentemente, o processo de fluidização.

No estudo do coeficiente rigidez da mola, foi proposta uma nova abordagem para a determinação da rigidez da mola baseada em uma equivalência entre os modelos lineares e não-lineares. O coeficiente de rigidez da mola não-linear foi associado com o linear através de três métodos: sobreposição máxima, a sobreposição média e o tempo de contato. Os parâmetros adimensionais não lineares utilizados nestas equivalências foram calculados numericamente pelos algoritmos propostos. Os parâmetros lineares são resolvidos analiticamente e então associados com os não-lineares. Este procedimento foi aplicado para o cálculo do coeficiente de rigidez da mola normal, utilizando os dados experimentais para as propriedades dos materiais, com base no trabalho de Foerster et al. (1994), para a colisão entre duas esferas pequenas e a colisão entre uma esfera e uma placa plana. Para este problema, concluiu-se que uma estimativa inicial para o cálculo do coeficiente de rigidez da mola não-linear combinado com a abordagem de sobreposição média. Também aplicou-se a metodologia proposta ao estudo de outros dois problemas: (a) partícula individual em queda livre e (b) leito fluidizado borbulhante. Para este último problema, estimou-se um valor médio para o cálculo do coeficiente de rigidez da mola, porque este valor na abordagem proposta é função da velocidade de impacto das partículas.

Para os problemas estudados de simples contato partícula-partícula e partículaparede, e o escoamento gás-sólido em leito fluidizado borbulhante (com valores relativamente elevados para o coeficiente de restituição normal), sugere-se, como estimativa inicial para a determinação do valor do coeficiente de rigidez da mola normal, o método baseado na sobreposição adimensional média, embora as outras abordagens discutidas neste trabalho possam ser aplicadas.

### 5.2 Trabalhos futuros

Algumas recomendações para o desenvolvimento de futuras pesquisas na área são descritas a seguir:

Consideração de modelos de turbulência em ambas as fases, para o estudo da mistura em leito fluidizado borbulhante, através do modelo Euleriano-Euleriano de duas fases separadas. No caso da TCEG calcular a temperatura granular através de uma equação diferencial parcial.

Estudar modelos de arrasto para sistemas polidispersos, com o intuito de implementar um fator de correção nos modelos de arrasto existentes. Estudar sistemas polidispersos que abrajam todo um determinado grupo de partículas de Geldart (1973), bem como a transição entre os grupos. Implementar no código MFIX o índice Lacey para medir a taxa de segregação e mistura de sistemas polidispersos.

Estudar partículas do grupo C de Geldart (1973), e a transição entre os grupos A e C avaliando quais as dificuldades da fluidização e a existência de regimes como canais e aglomerados no leito. Estudar diferentes faixas de amplitudes e frequências de vibração do leito com o objetivo de melhorar o processo de fluidização.

Na modelagem do contato entre as partículas, estimar o coeficiente de rigidez da

mola na direção normal através de outros modelos não-lineares. Estudar modelos com o objetivo de estimar o coeficiente de rigidez de mola e o coeficiente de amortecimento na direção tangencial. Simular diversos modelos não-lineares para força de contato entre as partículas. Estudar o modelo de esfera rígida para modelar a força de contato entre as partículas no modelo DEM. Estudar problemas que envolvam reações químicas e transferência de calor através do modelo DEM. 

# REFERÊNCIAS

AGRAWAL, K. et al. The role of meso-scale structures in rapid gas-solid flows. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 445, p. 151–185, 2001.

ALDER, B. J.; WAINWRIGHT, T. E. Phase transition for a hard-sphere system. *J. Chem. Phys.*, v. 27, p. 1208, 1957.

ALVES, M.; OLIVEIRA, P.; PINHO, F. A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection. *International Journal for Numerical Methods in Fluid*, v. 41, p. 47–75, 2003.

ANDERSON, T.; JACKSON, R. A fluid mechanical description of fluidized beds. *Ind. Eng. Chem. Fund.*, v. 6, n. 4, p. 527–534, 1967.

ANTYPOV, D.; ELLIOTT, J. A. On an analytical solution for the damped hertzian spring. *Europhysics Letter*, v. 94, n. 5, p. 50004, 2011.

BEETSTRA, R.; HOEF, M. A. van der; KUIPERS, J. A. M. Numerical study of segregation using a new drag force correlation for polydisperse systems derived from lattice-boltzmann simulations. *Chemical Engineering Science*, v. 62, p. 246–255, 2007.

BENYAHIA, S. Validation study of two continuum granular frictional flow theories. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 47, p. 8926–8932, 2008.

BENYAHIA, S.; GALVIN, J. E. Estimation of numerical errors related to some basic assumptions in discrete particle methods. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 49, n. 21, p. 10588–10605, 2010.

BOEMER, A.; QI, H.; RENZ, U. Eulerian simulation of bubble formation at a jet in a two-dimensional fluidized bed. *International Journal Multiphase Flow*, v. 23, n. 5, p. 927–944, 1997.

BOKKERS, G. A.; ANNALAND, M. van S.; KUIPERS, J. A. M. Mixing and segregation in a bidisperse gasâsolid fluidised bed:a numerical and experimental study. *Powder Technology*, v. 140, p. 176–186, 2004.

BOUILLARD, J.; GIDASPOW, D.; LYCZKOWSKI, R. Hydrodynamics of fluidization: fast-bubble simulation in a two-dimensional fluidized bed. *Powder Technology*, v. 66, p. 107–118, 1991.

BRILLIANTOV, K. V. et al. Model for collisions in granular gases. *Physical Review E*, v. 53, n. 5, p. 5382–5392, 1996.

BUCHHOLTZ, V.; PöSCHEL, T. Numerical investigations of the evolution of sandpiles. *Physica A*, v. 202, p. 390–401, 1994.

CABEZAS-GóMEZ, L. et al. Cluster identification and characterization in the riser of a circulating fluidized bed from numerical simulation results. *Applied Mathematical Modelling*, v. 32, p. 327–340, 2008.

CAMPBELL, C. Granular material flows – An overview. *Powder Technology*, v. 162, n. 3, p. 208 – 229, 2006.

CAMPBELL, C. S. *Shear flows in granular material*. Tese (PhD Thesis) — California Institute of technology, California, 1982.

CHEN, F.; DRUMM, E. C.; GUIOCHON, G. Prediction/verification of particle motion in one dimension with the discrete-element method. *International Journal of Geomechanics*, v. 7, p. 344–352, 2007.

COLLINS, R. An extension of davidson's theory of bubbles in fluidised beds. *Chemical Engineering Science*, v. 20, p. 745–755, 1965.

CORREA, L. et al. A c2 -continuous high-resolution upwind convection scheme. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, p. DOI: 10.1002/fld.3785, 2013.

COURANT, R.; ISAACSON, E.; REEVES, M. On the solution of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences. *Comm. Pure Appl. Math.*, v. 5, p. 243–255, 1952.

CROWE, C.; SOMMERFELD, M.; TSUJI, Y. *Multiphase flows with droplets and particles*. New York: CRC Press, 1998.

CUNDALL, P. A.; STRACK, O. D. L. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, v. 29, n. 1, p. 47–65, 1979.

DAHL, S. R.; HRENYA, C. M. Size segregation in gas-solid fluidized beds with continuous size distributions. *Chem. Eng. Sci.*, v. 60, p. 6658–6673, 2005.

DAVIDSON, J. Symposium on fluidization-discussion. *Trans. Inst. Chem. Eng.*, v. 39, p. 230–232, 1961.

DING, J.; GIDASPOW, D. A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow. *AIChE Journal*, v. 36, p. 523–538, 1990.

DU, W. et al. Computational fluid dynamics (cfd) modeling of spouted bed: Assessment of drag coefficient correlations. *Chemical Engineering Science*, v. 61, p. 1401–1420, 2006.

DURY, C. M.; RISTOW, G. H. Radial segregation in a two-dimensional rotating drum. *J. Phys. I France*, v. 7, n. 5, p. 737–745, 1997.

DUZIUGYS, A.; PETERS, B. An approach to simulate the motion of spherical and non-spherical fuel particles in combustion chambers. *Granular Matter*, v. 3, n. 4, p. 231–266, 2001.

ENWALD, H.; PEIRANO, E.; ALMSTEDT, A. Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. *Int. J. Multiph. Flow*, v. 22, p. 21–66, 1996.

ERGUN, S. Fluid flow through packed columns. *Chem. Eng. Prog.*, v. 48, p. 89–94, 1952.

FLORES, P. et al. On the continuous contact force models for soft materials in multibody dynamics. *Multibody System Dynamics*, v. 25, p. 357–375, 2011.

FOERSTER, S. F. et al. Measurements of the collision properties of small spheres. *Physics of Fluids*, v. 6, n. 3, p. 1108–1115, 1994.

GARG, R. et al. *Documentation of open-source MFIX-DEM software for gas-solids flows*. [S.l.], 2010. Disponível em: <a href="https://mfix.netl.doe.gov/documentation-/dem\_doc\_2010.pdf">https://mfix.netl.doe.gov/documentation-/dem\_doc\_2010.pdf</a>>.

GARG, R. et al. Open-source MFIX–DEM software for gas-solids flows: Part I–Verification studies. *Powder Technology*, v. 220, p. 122–137, 2012.

GARSIDE, J.; AL-DIBOUNI, M. R. Velocity-voidage relationship for fluidization and sedimentation. *IEEC Proc. Des. Dev*, v. 16, p. 206–214, 1977.

GASKELL, P.; LAU, A. Curvature-compensated convective transport: Smart, a new boudedness preserving transport algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 8, p. 61–641, 1988.

GELDART, D. Types of gas fluidization. Powder Technology, v. 7, p. 285–292, 1973.

GIDASPOW, D. Multiphase Flow and Fluidization. London: Academic Press, 1994.

GIDASPOW, D.; ETTEHADIEH, B. Fluidization in two dimensional beds with a jet 2. hydrodynamics modeling. *Ind. Eng. Chem. Fund.*, v. 22, p. 193–201, 1983.

GOLDSCHMIDT, M. J. V.; KUIPERS, J. A. M.; SWAAIJ, W. P. M. V. Hydrodynamic modeling of dense gas-fluidised beds using the kinetic theory of granular flow: effect of coefficient of restitution on bed dynamics. *Chemical Engineering Science*, v. 56, n. 2, p. 571–578, 2001.

GOLDSMITH, W. Impact. London: Edward Arnold Publishers Ltd., 1960.

GOODMAN, M. A.; COWIN, S. C. A continuum theory for granular materials. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, v. 44, n. 4, p. 249 – 266, 1972.

GOPALAKRISHNAN, P.; TAFTI, D. Development of parallel DEM for the open source code MFIX. *Powder Technology*, v. 235, p. 33 – 41, 2013.

GUENTHER, C.; SYAMLAL, M. The effect of numerical diffusion on simulation of isolated bubbles in a gasâsolid fluidized bed. *Powder Technology*, v. 116, p. 142–154, 2001.

HAFF, P. K.; WERNER, B. T. Computer simulation of the mechanical sorting of grains. *Powder Technology*, v. 48, n. 3, p. 239 – 245, 1986.

HE, Y. et al. Gas-solid two-phase turbulent flow in a circulating fluidized bed riser:an experimental and numerical study. *Proceedings of the Fifth World Congress on Particle Technology*, April 23–27 2006.

HERTZ, H. Über die Berührung fester elastischer Körper. *Journal für die Reine und* Angewandte Mathematik, v. 92, p. 156 – 171, 1882.

HERTZ, H. Gesammette Werke. Leipzig, Germany: [s.n.], 1885.

HOEF, M. A. van der; BEETSTRA, R.; KUIPERS, J. A. M. Lattice boltzmann simulations of low reynolds number flow past mono- and bidisperse arrays of spheres: results for the permeability and drag force. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 528, p. 233, 2005.

HOEF, M. A. van der et al. Multiscale modeling of gas-fluidized beds. *Advances in Chemical Engineering*, v. 31, p. 65 – 149, 2006.

HOOMANS, B. P. B. *Granular Dynamics of gas-solid two-phase flows*. Tese (PhD Thesis) — University of Twente, 2001.

HOOMANS, B. P. B. et al. Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidised bed: a hard-sphere approach. *Chemical Engineering Science*, v. 51, n. 1, p. 99–118, 1996.

HUILIN, L. et al. Computer simulations of gasâsolid flow in spouted beds using kinetic-frictional stress model of granular flow. *Chemical Engineering Science*, v. 59, p. 865 – 878, 2004.

HUNT, K. H.; GROSSLEY, F. R. E. Coefficient of restitution interpreted as damping in vibroimpact. *ASME Journal of Applied Mechanics*, v. 7, p. 440 – 445, 1975.

ISHII, M.; HIBIKI, T. *Thermo-fluid Dynamic Theory of Two-phase Flow*. Second. New York: Springer, 2011.

ISRAELACHVILI, J. Intermolecular and Surface Forces. London: Academic Press London, 1991.

JACKSON, R. The mechanics of fluidized beds: Part 1. the stability of the state of uniform fluidization. *Trans. Inst. Chem. Eng.*, v. 41, p. 13–21, 1963.

JANKOWSKI, R. Non–linear viscoelastic modelling of earthquake-induced structural pounding. *Earthquake Engineering and Structural Dynamics*, v. 34, n. 6, p. 595–611, 2005.

JENIKE, A. W. A theory of flow of particulate solids in converging and diverging channels based on a conical yield function. *Powder Technology*, v. 50, p. 229–236, 1987.

JENKINS, J. T.; SAVAGE, S. B. A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles. *J. Fluid Mech.*, v. 130, p. 187–202, 1983.

134

JOHNSON, P. C.; JACKSON, R. Frictional-collisional constitutive relations for granular materials, with applications to plane shearing. *J. Fluid Mech.*, v. 176, p. 67–93, 1987.

KETTERHAGEN, W. R. et al. Granular segregation in discharging cylindrical hoppers: A discrete element and experimental study. *Chemical Engineering Science*, v. 62, n. 22, p. 6423 – 6439, 2007.

KOCH, D. L.; HILL, R. J. Inertial effects in suspension and porous-media flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 33, p. 619–647, 2001.

KUIPERS, J. et al. Computer simulation of the hydrodynamics of a two-dimensional gas-fluidized bed. *Computers Chem. Eng.*, v. 17, n. 8, p. 839–858, 1993.

KUWABARA, G.; KONO, K. Restitution coefficient in a collision between two spheres. *Japanese Journal of Applied Physics*, v. 26, p. 1230 – 1233, 1987.

LAN, Y.; ROSATO, A. Macroscopic behavior of vibrating beds of smooth inelastic spheres. *Physics of Fluids*, v. 7, p. 1818 – 1831, 1995.

LAN, Y.; ROSATO, A. Convection related phenomena in granular dynamics simulations of vibrated beds. *Physics of Fluids*, v. 12, p. 3616–3624, 1997.

LEBOWITZ, J. L. Exact solution of generalized percus-yevick equation for a mixture of hard spheres. *Phys. Rev.*, p. 895–899, 1964.

LEER, B. van. Towards the ultimate conservative difference scheme. v. a second-order sequel to godunov's method. *J. Comput. Phys.*, v. 32, p. 101–136, 1979.

LEONARD, B. A stable and accurate convective modeling procedure based on quadratic upstream interpolations. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, v. 19, p. 59–98, 1979.

LEONARD, B. Simple high-accuracy resolutions program for convective modeling of discontinuities. *Internat. J. Numer. Methods Fluids*, v. 8, p. 1291–1318, 1988.

LI, J.; KUIPERS, J. A. M. Effect of pressure on gas-solid flow behavior in dense gas-fluidized beds: a discrete particle simulation study. *Powder Technology*, v. 127, n. 2, p. 173–184, 2002.

LI, J.; KUIPERS, J. A. M. Gas-particle interactions in dense gas-fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, v. 58, p. 711–718, 2003.

LI, T. et al. Open-source mfix-dem software for gas-solids flows: Part II - Validation studies. *Powder Technology*, v. 220, p. 138–150, 2012.

LIMTRAKUL, S. et al. Discrete particle simulation of solids motion in a gas-solid fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, v. 58, p. 915–921, 2003.

LIMTRAKUL, S.; ROTJANAVIJIT, W.; VATANATHAM, T. Lagrangian modeling and simulation of effect of vibration on cohesive particle movement in a fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, v. 62, p. 232–245, 2007.

LUN, C. K. K. et al. Kinetic theories for granular flow: Inelastic particles in couette flow and slightly inelastic particles in a general flow field. *J. Fluid Mech.*, v. 140, p. 223–256, 1984.

MIKAMI, T.; KAMIYA, H.; HORIO, M. Numerical simulation of cohesive powder behavior in a fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, v. 53, n. 10, p. 1927–1940, 1998.

MüLLER, C. R. et al. Granular temperature: Comparison of magnetic resonance measurements with Discrete Element Model simulations. *Powder Technology*, v. 184, n. 2, p. 241 – 253, 2008.

MüLLER, C. R. et al. Validation of a discrete element model using magnetic resonance measurements. *Particuology*, v. 7, n. 4, p. 297 – 306, 2009.

MüLLER, P.; PöSCHEL, T. Oblique impact of frictionless spheres: on the limitations of hard sphere models for granular dynamics. *Granular Matter*, v. 14, p. 115–120, 2012.

MURRAY, J. On the mathematics of fluidization: Part 1. fundamental equations and wave propagation. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 21, p. 465–493, 1965.

PALMA, G. L. *Um estudo de mistura em leito fluidizado para sistemas particulados solidos*. Tese (PhD Thesis) — Universidade de São Paulo, São Carlos, SP, 1998.

POPKEN, L.; CLEARY, P. Comparison of kinetic theory and discrete element schemes for modeling granular couette flows. *Journal Computational Physics*, v. 155, p. 1–25, 1999.

PRICE, H.; VARGA, R.; WARREN, J. Applications of oscillation matrices to diffusion-correction equations. *J. Math. Phys.*, v. 45, p. 301–311, 1966.

RHODES, M. J. et al. Onset of cohesive behavior in gas fluidized beds: a numerical study using dem. *Chemical Engineering Science*, v. 56, p. 4433–4438, 2001.

RICHARDSON, J. R.; ZAKI, W. N. Sedimentation and fluidization: part i. *Transactions of Institute of Chemical Engineering*, v. 32, p. 35–53, 1954.

RUMPF, H. Particle Technology. London: Chapman and Hall, 1990.

SANYAL, J.; CESMEBASI, E. On the effect of various momentum transfer coefficient models on bublle dynamics in a rectangular gas fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, v. 49, p. 3955–3966, 1994.

SAVAGE, S. B. Granular flows down rough inclined. In: JENKINS, J. T.; SATAKE, M. (Ed.). *Proceedings of U. S. Japan Seminar on new models and constitutive relations in the mechanics of granular materials*. Amsterdam: Elsevier Science Publishers, 1982. p. 261–282.

SCHAEFFER, D. G. Instability in the evolution equations describing incompressible granular flow. *Journal Differential Equations*, v. 66, p. 19–50, 1987.

SEVILLE, J. *Processing of Particulate Solids*. London: Blackie Academic and Professional, 1997.

SEVILLE, J. P. K.; WILLET, C. D.; KNIGHT, P. C. Interparticle forces in fluidisation: a review. *Powder Technology*, v. 113, p. 261–268, 2000.

SHäFER, J.; DIPPEL, S.; WOLF, D. E. Force schemes in simulations of granular materials. *Journal de Physique I*, v. 6, n. 1, p. 5–20, 1996.

SILBERT, L. E.; LANDRY, J. W.; GREST, G. S. Granular flow down a rough inclined plane: transition between thin and thick piles. *Physics of Fluids*, v. 15, p. 1–10, 2003.

SIMO, J. C.; HUGHES, T. J. R. *Computational Inelasticity*. New York: Springer–Verlag, 1997.

SONG, B. et al. On a higher-order discretization scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluid*, v. 32, p. 881–897, 2000.

SOUZA-BRAUN, M. et al. The effect of numerical diffusion and the influence of computational grid over gas-solid two-phase flow in a bubbling fluidized bed. *Mathematical and Computer Modelling*, v. 52, p. 1390–1402, 2010.

SPALDING, D. A novel finite-difference formulation for differential expressions involving both first and second derivatives. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, v. 4, p. 551–559, 1972.

SRIVASTAVA, A.; SUNDARESAN, S. Analysis of a frictional-kinetic model for gas-particle flow. *Powder Technology*, v. 129, p. 72–85, 2003.

STEVENS, A. B.; HRENYA, C. M. Comparison of soft–sphere models to measurements of collision properties during normal impacts. *Powder Technology*, v. 154, n. 2â3, p. 99 – 109, 2005.

STEWART, P. Isolated bubbles in fluidised beds-theory and experiment. *Tran. Inst. Chem. Eng.*, v. 46, p. 60–68, 1987.

SUN, B.; GIDASPOW, D. Computation of circulating fluidized bed riser flow for the fluidization VIII benchmark test. *Industrial Engineering Chemical Research*, v. 38, p. 787–792, 1999.

SUN, J.; SUNDARESAN, S. A constitutive model with microstructure evolution for flow of rate-independent granular materials. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 682, p. 590–616, 2011.

SWEBY, P. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservative laws. *SIAM J. Numer. Anal*, v. 21, p. 995–1011, 1984.

SYAMLAL, J. The Particle-Particle Drag Term in a Multiparticle Model of Fluidization. Springfield, VA, 1987.

SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T. Computer simulations of bubbles in a fluidized bed. *AIChE Symp. Ser. Fluidization. Fluid Particle Syst.: Fundam. Appl.*, v. 85, p. 22–31, 1989.

SYAMLAL, M.; ROGERS, W.; O'BRIEN, T. *MFIX documentation: theory guide*. [S.l.], 1993.

TANAKA, T.; MITUJI, H.; TAKAHASHI, T. Extractive fluidized classification. *Advanced Powder technology*, v. 7, p. 575–591, 1996.

TATEMOTO, Y.; MAWATARI, Y.; NODA k. Numerical simulation of cohesive particle motion in vibrated fluidized bed. *Chemical Engineering Science*, v. 60, p. 5010–5021, 2005.

TIMOSHENKO, S. P.; GOODIER, J. N. *Theory of Elasticity*. New York: McGraw–Hill, 1970.

TSUJI, Y.; KAWAGUCHI, T.; TANAKA, T. Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed. *Powder Technology*, v. 77, n. 1, p. 79–87, 1993.

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

TSUO, Y. P.; GIDASPOW, D. Computation of flow patterns in circulating fluidized beds. *AIChE Journal*, v. 36, n. 6, p. 885–896, 1990.

TüZüN, U. et al. The flow of granular materials – II Velocity distributions in slow flow. *Chemical Engineering Science*, v. 37, n. 12, p. 1691â–1709, 1982.

VALLE, J. D. Micromeritics. London: Pitman, 1948.

VISSER, J. An invited review: van der waals and other cohesive forces affecting powder fluidization. *Powder Technology*, v. 58, p. 1–10, 1989.

WALTON, O. R.; BRAUN, R. L. Viscosity and temperature calculations for assemblies of inelastic frictional disks. *Journal of Rheology*, v. 30, n. 5, p. 949–980, 1986.

WANG, S.; RHODES, M. Mechanistic study of defluidization by numerical simulation. *Chemical Engineering Science*, v. 59, p. 215–222, 2004.

WANG, S. et al. Numerical simulations of flow behavior of gas and particles in spouted beds using frictional-kinetic stresses model. *Powder Technology*, v. 196, p. 184–193, 2009.

WEBER, M. W. Simulation of cohesive particle flows in granular and gas-solid systems. Tese (PhD Thesis) — University of Colorado, Boulder, Colorado, USA, 2004.

WEN, Y. C.; YU, Y. H. Mechanics of fluidization. *Chem. Eng. Prog. Symp. Ser.*, v. 62, p. 100–111, 1966.

XU, B. et al. Force structures in gas fluidized beds of fine powders. In: *World congress* on particle technology. Sydney, Australia: [s.n.], 2002.

YE, K.; LI, L.; ZHU, H. A note on the Hertz contact model with nonlinear damping for pounding simulation. *Earthquake Engineering and Structural Dynamics*, v. 38, n. 9, p. 1135–1142, 2009.

YE, M.; HOEF, M. A. van der; KUIPERS, J. A. M. A numerical study of fluidization behavior of geldart a particles using a discrete particle model. *Powder Technology*, v. 139, p. 129–139, 2004.

YIGIT, A. S.; ULSOY, A. G.; SCOTT, R. A. Spring–dashpot models for the dynamics of a radially rotating beam with impact. *Journal of Sound and Vibration*, v. 142, n. 3, p. 515 – 525, 1990.

ZHOU, H. et al. Numerical simulation of the turbulent ]gas-particle flow in a fluidized bed by an les-dpm model. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 82, p. 918–926, 2004.

ZHU, H. P. et al. Discrete particle simulation of particulate systems: A review of major applications and findings. *Chemical Engineering Science*, v. 63, p. 5728–5770, 2008.
## APÊNDICE A - DERIVAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE EQUIVALÊNCIA

Nesta seção, são derivadas as equações (3.94), (3.95) e (3.96), comparando o modelo LSD com o modelo não-linear de amortecimento hertziano (HSD). Consideramos uma equivalência da sobreposição linear (LSD) com a sobreposição não-linear (HSD). Para a sobreposição máxima esta equivalência é dada por:

$$\delta_{maxLSD} = \delta_{maxHSD}$$

Substituindo a sobreposição máxima linear ( $\delta_{maxLSD}$ ) pela equação (3.68):

$$(v_0/\Omega_0) \exp\left(-\frac{\arctan(\beta)}{\beta}\right) = \delta_{maxHSD}$$

Substituindo a sobreposição máxima não-linear ( $\delta_{maxHSD}$ ) pelo adimensional  $\delta^*_{maxHSD} = \delta_{maxHSD} \left(\frac{k_{n,Hz}}{v_0^2 m_{eff}}\right)^{2/5}$ 

$$(v_0/\Omega_0) \exp\left(-\frac{\arctan(\beta)}{\beta}\right) = \delta^*_{maxHSD} \left(\frac{k_{n,Hz}}{v_0^2 m_{eff}}\right)^{-2/5}$$

Isolando  $\Omega_0$ 

$$\Omega_0 = \frac{v_0}{\delta_{maxHSD}^*} \exp\left(-\frac{\arctan(\beta)}{\beta}\right) \left(\frac{k_{n,Hz}}{v_0^2 m_{eff}}\right)^{2/5}$$

Substituindo  $\Omega_0$  por  $\Omega_0 = \sqrt{k_n/m_{eff}}$ 

$$\sqrt{k_n/m_{eff}} = \frac{v_0}{\delta_{maxHSD}^*} \exp\left(-\frac{\arctan(\beta)}{\beta}\right) \left(\frac{k_{n,Hz}}{v_0^2 m_{eff}}\right)^{2/5}$$

Isolando  $k_n$ , obtemos a equação (3.94)

$$k_{n} = \frac{1}{\delta_{maxHSD}^{*2}} \left( v_{0}^{1/2} m_{eff}^{1/4} k_{n,Hz} \right)^{4/5} \left[ \exp\left(-\frac{\arctan(\beta)}{\beta}\right) \right]^{2}$$

Para derivar a equação (3.95, consideramos a seguinte equivalência entre o tempo de contato linear (LSD) e o tempo de contato não-linear (HSD)

$$t_{c,nLSD} = t_{c,nHSD}$$

Substituindo o tempo de contato linear  $(t_{c,nLSD})$  pela equação (3.69)

$$\frac{\pi}{\Omega_0} \sqrt{\left(1 + \frac{1}{\beta^2}\right)} = t_{c,nHSD}$$

Substituindo o tempo de contato não-linear  $(t_{c,nHSD})$  pelo adimensional =  $t_{c,nHSD}^* = t_{c,nHSD} \left(\frac{k_{n,Hz}v_0^{1/2}}{m_{eff}}\right)^{2/5}$ 

$$\frac{\pi}{\Omega_0} \sqrt{\left(1 + \frac{1}{\beta^2}\right)} = t_{c,nHSD}^* \left(\frac{k_{n,Hz} v_0^{1/2}}{m_{eff}}\right)^{-2/5}$$

Isolando  $\Omega_0$ 

$$\Omega_0 = \frac{\pi}{t_{c,nHSD}^*} \sqrt{\left(1 + \frac{1}{\beta^2}\right)} \left(\frac{k_{n,Hz} v_0^{1/2}}{m_{eff}}\right)^{2/5}$$

Substituindo  $\Omega_0$  por  $\Omega_0 = \sqrt{k_n/m_{eff}}$  e isolando  $k_n$ 

$$k_n = \frac{1}{t_{c,nHSD}^{*2}} \left( v_0^{1/2} m_{eff}^{1/4} k_{n,Hz} \right)^{4/5} \pi^2 \left( 1 + \frac{1}{\beta^2} \right)$$

Da mesma forma, para derivar equação (3.96) baseada na sobreposição média, considere a seguinte equivalência entre sobreposição média linear (LSD) e a sobreposição média não-linear (HSD)

$$\overline{\delta}_{nLSD} = \overline{\delta}_{nHSD}$$

Substituindo a sobreposição média linear pela equação (3.70)

$$\frac{v_0}{\pi\Omega_0} \frac{-\beta}{\sqrt{1+\beta^2}} \left( \exp\left(\frac{\pi}{\beta}\right) + 1 \right) = \overline{\delta}_{nHSD}$$

Substituindo a sobreposição não-linear pelo valor adimensional  $\overline{\delta}_{nHSD}^* =$ 

142

 $\overline{\delta}_{nHSD} \left(\frac{k_{n,HZ}}{v_0^2 m_{eff}}\right)^{2/5}$ , isolando  $\Omega_0$ , substituindo  $\Omega_0 = \sqrt{k_n/m_{eff}}$  e isolando  $k_n$ 

$$k_n = \frac{1}{\overline{\delta}_{nHSD}^{*2}} \left( v_0^{1/2} m_{eff}^{1/4} k_{n,Hz} \right)^{4/5} \frac{\beta^2}{\pi^2 (1+\beta^2)} \left[ 1 + \exp\left(\frac{\pi}{\beta}\right) \right]^2$$

## APÊNDICE B - METODOLOGIA COMPUTACIONAL

Para realizar as simulações numéricas deste trabalho utilizou-se o código computacional aberto MFIX (Multiphase Flow with Interphase eXchanges)(SYAMLAL; ROGERS; O'BRIEN, 1993), escrito na linguagem de programação Fortran e que está em constante desenvolvimento no NETL (National Energy Technology Laboratory). Esse código descreve a hidrodinâmica, transferência de calor e reações químicas em sistemas gás-sólidos. Os cálculos realizados no MFIX fornecem dados transientes com distribuições tridimensionais de pressão, velocidade, temperatura e frações de massa para as espécies. O uso do código permite testar diversos aspectos, desde numéricos, como o efeito dos esquemas de discretização das equações e também parâmetros físicos, como o uso de relações constitutivas. O código permite a forma de processamento sequencial e paralelo. Para o desenvolvimento do trabalho utilizou-se como plataforma para o código MFIX o sistema operacional LINUX, que é gratuito e regido pelas normas de software livre, e também o compilador Fortran-Intel para a linguagem de programação Fortran, distribuído gratuitamente pela INTEL para fins acadêmicos.

Uma simulação numérica utilizando o código MFIX é controlada com a ajuda de um arquivo de entrada chamado mfix.dat e vários arquivos em fortran definidos pelo usuário. O MFIX produz dois arquivos texto que o usuário pode acessar diretamente e oito arquivos binários que o usuário acessa através dos dois códigos de pós-processamento (post\_MFIX e animate\_MFIX). O arquivo mfix.dat definido pelo usuário e necessário para se realizar uma simulação deve conter informações sobre o controle da corrida, tais como: as equações que serão resolvidas, tempo de simulação, rotinas que serão utilizadas entre outras. O arquivo mfix.dat determina também os parâmetros físicos e numéricos que devem utilizados, a geometria e o tipo de discretização, condições iniciais e de contorno e o controle sobre os dados de saída, como por exemplo, o intervalo em os dados são salvos.

Os dois arquivos texto de saída que o usuário poderá acessar diretamente são: .LOG e .OUT. O arquivo .LOG irá conter mensagens de erro, informações sobre convergência e número de iterações, etc. O arquivo .OUT trará as informações especificadas no arquivo mfix.dat, além de informações sobre a simulação em toda malha computacional. Cada célula computacional é representada por uma sequência de três caracteres que permite identificar o tipo de célula e informações sobre condições iniciais e de contorno em toda malha computacional. Dessa forma é possível verificar se a entrada de dados foi processada corretamente. O programa de pós-processamento post\_MFIX é utilizado para recuperar os dados dos arquivos arquivos binários de extensões .RES ou .SPX. É possível examinar dados da simulação, tais como fração de vazio, pressão, velocidade, temperatura, entre outros e escrevê-los em arquivos de texto. Ainda é possível escrever arquivos .RES a partir de arquivos no formato .SPX, interpolar arquivos .RES e calcular diversas quantidades. As representações de animações dos resultados das simulações no MFIX podem ser obtidas utilizando-se o programa animate\_MFIX.

Informações adicionais às que são fornecidas pelo mfix.dat (novas expressões para reações químicas e cinéticas, novas relações constitutivas e etc.) podem ser oferecidas modificando adequadamente as subrotinas correspondentes do código MFIX. Para o presente trabalho, foram modificadas algumas rotinas do código MFIX de acordo com o problema estudado.

Para o estudo de sistemas polidispersos, presente neste trabalho, foram modificadas as seguintes subrotinas do código MFIX: CHECK\_DATA\_04.f,

CHECK\_DES\_DATA.f e GENERATE\_PARTICLE\_CONFIG.f. A rotina CHECK\_DATA\_04.f, responsável pela checagem dos dados de entrada da fase sólida, foi alterada para definir a faixa de diâmetros de partículas e o número de fases sólidas que seriam usadas para o estudo de sistemas polidispersos. A rotina CHECK\_DES\_DATA.f, responsável pela checagem de todos os dados de entrada feitos pelo usuário, foi alterada com a implementação de uma função de distribuição lognormal. Essa função foi aplicada para cada faixa de diâmetro, fornecendo o número total de partículas para cada fase. A rotina GENERATE\_PARTICLE\_CONFIG.f, repsonsável por gerar a configuração de partículas no leito com base nos dados de entrada, foi alterada para fornecer uma distribuição aleatória das partículas, uma vez que no código MFIX as partículas são posicionadas sequencialmente no leito de acordo com o diâmetro.

No estudo de sistemas coesivos, presente neste trabalho, foi modificada a subrotina CALC\_FORCE\_DES.f, responsável pelo cálculo das forças de contato e torque entre partícula-partícula e colisões partícula-parede. A rotina foi alterada para acoplar uma força vertical senoidal à base do leito, para o estudo dos efeitos de vibração em sistemas altamente coesivos.

Para o estudo do coeficiente de rigidez da mola, foi utilizado o programa Matlab<sup>®</sup> para o cálculo do coeficiente de rigidez da mola normal equivalente ao modelo nãolinear. Esse valor, foi então dado de entrada no código MFIX. A rotina Matlab<sup>®</sup> que calcula o coeficiente de rigidez de mola através da sobreposição média para o caso da esfera em queda livre encontra-se em anexo (Anexo I).

As simulações numéricas deste trabalho foram realizadas em uma "Workstation SGI Octane III", configurada com "Dual Intel Xeon Six-Core X5675" de 3,06GHz e 12MB de cache e 24GB de memória RAM, com o sistema operacional "Red Hat linux". É importante destacar o alto custo computacional para alguns problemas simulados. No caso do estudo de mistura em leito fluidizado borbulhante, por exemplo, o

tempo de processamento (CPU) foi de aproximadamente 40 dias para 241s de simulação para cada velocidade de fluidização. O alto custo computacional em problemas gás-sólidos pode limitar o número de simulações, dificultando testes de diferentes modelos físicos e numéricos.

## Anexo I

```
function LSD_NormalSpringStiffness;
```

% Autores: Meire Pereira de Souza Braun Helio Aparecido Navarro % % Data: 02/09/2013 % Objetivo: Calcular o coeficiente de rigidez da mola normal, baseado % na sobreposicao media, para uma esfera em queda livre. close all; clear all; clear('sqr'); format long e  $sqr = @(x) x^*x;$ % Material Properties - SI ro s1 = 2600% density of solid, E1 = 1.6916e6% Young Modulus, particle, E2 = 5.0748e6% Young Modulus, wall, d1 = 0.2% particle diameter,  $r_{1=d_{1/2}}$ % particle radius nu1 = 0.0% poisson coefficient, particle, nu2 = 0.0% poisson coefficient, wall,

en = 0.9 % en, particle - wall, v0 = 2.801 % impact velocity,

```
% Parameters of collision
Eeff = (E1*E2)/(E2*(1.-nu1*nu1)+E1*(1.-nu2*nu2)) % Young Modulus,
m1 = ro_s1*(4./3.)*pi*(d1/2.)^3
                                                   % particle mass,
m_eff = m1
                                                   % effective mass,
r eff = r1
                                                   % effective radius,
k_n_{t = 4./3.*Eeff*sqrt(r_eff)}
                                                   % k_n, hertizian,
if (en>0)
    alfa = -sqrt(5)*log(en)/sqrt(pi*pi+sqr(log(en)));
    nu = alfa/2.0
else % en = 0
    nu = 1.0
end
% ODE solution non-linear, Hertzian
tspan=[0.0:1.0e-5:8.0];
ic=[0.0 1.0];
options = odeset('RelTol',1e-8,'AbsTol',[1e-12 1e-12]);
[t,y]=ode45(@SystemHertzian,tspan,ic,options,nu);
% end of the solution
% mean overlap
deltamedio_hz_star=0.0;
i=1;
if (real(y(i,1)) \ge 0) fim = 0; else fim = 1; end
```

while(~fim)

```
deltamedio_hz_star=deltamedio_hz_star+real(y(i,1));
i = i + 1;
if (i>length(y)) fim = 1; end;
if (~fim)
    if (real(y(i,1))<0) fim = 1; end
end
end
```

ic=i-1;

```
deltamedio_hz_star=deltamedio_hz_star/(ic)
```

```
% Normal spring stiffness coefficient (eq. 3.96)
```

```
TermoDimensional = power(v0,0.5)*power(m_eff,0.25)*k_n_hz,0.8);
```

```
if (en==1.0)
```

```
A = 4.0/(pi*pi);
```

```
else % en < 1.0
```

```
beta= pi/log(en);
```

```
A = sqr((1+exp(-pi/beta))*exp(pi/beta)/pi)*(1.0+(1.0/sqr(beta)));
```

end

```
kn_avg =A*(TermoDimensional/sqr(deltamedio_hz_star))
```

```
function dydt = SystemHertzian(t,y,nu);
dydt = zeros(2,1);
dydt(1)=y(2);
dydt(2)=-2*nu*power(y(1),0.25)*y(2)-power(y(1),1.5);
```

150