



1º Encontro Interdisciplinar em Energia, Programa de Pós-graduação em Energia, Ufes



CFD-DEM em tecnologias de conversão energética: uma minirrevisão sobre parâmetros associados às interações resíduo-resíduo e resíduo-parede do reator

CFD-DEM in energy conversion technologies: a mini-review on parameters associated with residual-residual and residual-wall interactions in the reactor

Renata Falqueto Louvem^{1,*}, Paulo Sérgio Moscon², Daniel da Cunha Ribeiro³, Marcelo Silveira Bachelos³.

¹ Aluno do Programa de Pós-Graduação em Energia, Universidade Federal do Espírito Santo – Ufes, campus São Mateus, ES, Brasil

² Professor do Departamento de Ciências Naturais, Universidade Federal do Espírito Santo – Ufes, campus São Mateus, ES, Brasil

³ Professor do Programa de Pós-Graduação em Energia, Universidade Federal do Espírito Santo – Ufes, campus São Mateus, ES, Brasil

*Autor para correspondência, E-mail: renata_falqueto@hotmail.com

Resumo: A transição energética global tem impulsionado o desenvolvimento de tecnologias capazes de converter biomassa e resíduos em combustíveis. Nesse contexto, os reatores de leito de jorro destacam-se pela elevada eficiência de mistura gás-sólido, favorecendo os processos termoquímicos. No entanto, a previsão do comportamento fluidodinâmico desses reatores ainda representa um desafio, em razão da complexidade das intensas interações entre partículas e fluido. O acoplamento entre a Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) e o Método dos Elementos Discretos (DEM) surge como uma abordagem promissora para compreender esses fenômenos, desde que os parâmetros de entrada utilizados sejam obtidos de forma experimental e fisicamente consistente. Este trabalho apresenta uma minirrevisão das metodologias experimentais empregadas para determinar parâmetros fundamentais em simulações CFD-DEM, como coeficiente de restituição, coeficientes de atrito estático e de rolamento, e ângulo de repouso. São descritos os principais procedimentos reportados na literatura, incluindo métodos de queda livre, plano inclinado, rampa de rolamento e caixa retangular com abas móveis. A análise evidencia que a definição adequada desses parâmetros é essencial para a confiabilidade das simulações e para a reprodutibilidade dos resultados. Conclui-se que a integração entre ensaios experimentais padronizados e modelagem numérica representa o caminho mais eficiente para aprimorar a simulação de sistemas gás-sólido e acelerar o desenvolvimento de tecnologias inovadoras e sustentáveis de conversão energética.

Palavras-chave: CFD-DEM; parâmetros experimentais; coeficiente de restituição; coeficiente de atrito; ângulo de repouso.

Abstract: The global energy transition has driven the development of technologies capable of converting biomass and waste into fuels. In this context, spouted bed reactors stand out due to their high gas–solid mixing efficiency, enhancing thermochemical processes. However, predicting the fluid dynamic behavior of these reactors remains challenging due to the complex fluid–particle interactions. The coupling between Computational Fluid Dynamics (CFD) and the Discrete Element Method (DEM) emerges as a promising approach to understanding these phenomena, provided that the input parameters are experimentally determined and physically consistent. This work presents a mini-review of experimental procedures and methodologies used to determine fundamental parameters in CFD-DEM simulations, such as the coefficient

of restitution, static and rolling friction coefficients, and angle of repose. The main procedures reported in the literature are described, including the free-fall method, inclined plane, rolling ramp, and rectangular box with movable flaps. The analysis shows that the proper definition of these parameters is essential for the reliability and reproducibility of simulations. It is concluded that the integration of standardized experimental tests with numerical modeling represents the most efficient approach to improving gas–solid system simulations and accelerating the development of innovative and sustainable energy conversion technologies.

Keywords: CFD-DEM; experimental parameters; coefficient of restitution; friction coefficient; angle of repose.

1 Introdução

A transição energética mundial demanda tecnologias capazes de promover a conversão eficiente de biomassa e resíduos em combustíveis renováveis. Nesse cenário, os reatores de leito de jorro têm despertado crescente interesse, pois oferecem elevada eficiência de mistura gás-sólido e favorecem processos termoquímicos, como pirólise e gaseificação, aplicados à produção de combustíveis líquidos e gasosos.

Apesar do potencial tecnológico, o desempenho desses reatores ainda é de difícil previsão devido à natureza multifásica complexa, caracterizada por intensa interação entre sólidos e gases, variações de regimes de fluxo e padrões instáveis de circulação. Esse desafio limita a otimização de parâmetros de projeto e de operação em escala industrial.

O acoplamento entre a Dinâmica de Fluidos Computacional (*Computational Fluid Dynamics* – CFD) e o Método dos Elementos Discretos (*Discrete Element Method* – DEM) é uma ferramenta amplamente empregada no estudo de processos industriais com escoamentos gás-sólido, como aqueles presentes em reatores de leito de jorro. Essa abordagem testa cenários operacionais com menor custo experimental e possibilita uma análise detalhada das interações fluido-partícula e partícula-partícula, permitindo a investigação de fenômenos complexos que dificilmente seriam possíveis apenas por meio de experimentos. O uso de modelos numéricos confiáveis não apenas acelera o desenvolvimento científico, mas também contribui para viabilizar rotas inovadoras e sustentáveis de produção de combustíveis em reatores de leito de jorro.

Pesquisas recentes têm avançado na investigação de metodologias experimentais para determinar parâmetros de entrada em simulações CFD-DEM. Entre os mais estudados destacam-se o coeficiente de restituição, coeficiente de atrito de rolamento, coeficiente de atrito estático e propriedades físicas das partículas. Trabalhos como os de Lima et al. (2021) e Batista et al. (2021) validaram técnicas experimentais capazes de fornecer parâmetros confiáveis e com significado físico, evitando ambiguidades associadas à calibração puramente numérica. Complementarmente, Xu et al. (2022) aplicaram e otimizaram esses parâmetros em simulações de fluidização de partículas irregulares, ampliando a precisão e a viabilidade computacional em cenários industriais.

Para o caso específico do coeficiente de restituição, Lima et al. (2021) demonstraram que esse parâmetro depende da espessura da superfície de impacto. Para o coeficiente de atrito estático, a metodologia baseada em partículas agrupadas mostrou maior precisão por minimizar a interferência do rolamento observado em partículas individuais. Embora o estudo de Lima et al. (2021) tenha consolidado metodologias experimentais e validado suas medições por meio de simulações DEM, seu escopo permaneceu limitado à análise do comportamento granular em sistemas de bancada, sem considerar a integração desses parâmetros em modelos acoplados CFD-DEM ou sua aplicação direta em reatores, processos industriais e tecnologias de conversão energética.

A complexidade dos leitos de jorro exige ferramentas capazes de representar com precisão as interações fluido-partícula. Nesse contexto, o acoplamento CFD-DEM tem se destacado por reproduzir com fidelidade o comportamento multifásico desses sistemas, desde que os parâmetros de entrada sejam definidos de forma experimental e fisicamente consistente. Desta forma, torna-se relevante analisar as abordagens existentes na literatura para a determinação experimental destes parâmetros. Este trabalho tem como objetivo apresentar uma minirrevisão sobre as metodologias experimentais mais utilizadas para determinar esses parâmetros, oferecendo subsídios para aumentar a confiabilidade das simulações CFD-DEM. Nesse sentido, contribui diretamente para o avanço científico e tecnológico de processos, especialmente aqueles voltados à conversão termoquímica de resíduos sólidos em combustíveis renováveis, ao mesmo tempo em que reduz custos e tempo de pesquisa.

2 Parâmetros avaliados

A acurácia das simulações CFD-DEM está diretamente associada à definição adequada dos parâmetros que descrevem as interações partícula-partícula e partícula-superfície. Entre esses, destacam-se o coeficiente de restituição, os coeficientes de atrito estático e de rolamento e ângulo de repouso.

O coeficiente de restituição (CR) expressa a fração de energia cinética preservada em uma colisão, sendo definido como a razão entre a velocidade relativa de separação após o impacto e a velocidade relativa de aproximação antes do choque. Esse parâmetro indica o grau de elasticidade da colisão: valores iguais a 1 representam colisões perfeitamente elástica, ou seja, toda energia cinética foi conservada, enquanto valores iguais a 0 representam colisões perfeitamente inelástica, com máxima dissipação de energia (Cross 2021).

Na prática, parte da energia é dissipada em forma de calor, deformações plásticas ou vibrações, e o CR reflete essas perdas. Assim, alguns fatores podem influenciar este parâmetro como: propriedades dos materiais, velocidade e ângulo de impacto, forma, rugosidade e rotação das partículas e condições do meio (Corral et al., 2021). Estudos indicam ainda que, em partículas milimétricas, o aumento do diâmetros tende a reduzir o coeficiente de restituição.

O coeficiente de atrito estático corresponde à razão entre a força máxima de atrito que impede o início do deslizamento e a força normal entre as superfícies (Lima et al., 2021). Este parâmetro está relacionado ao movimento de translação das partículas e é crucial para que as simulações DEM possam representar de forma confiável o comportamento granular. Resultados experimentais sugerem que o aumento da rugosidade tende a elevar esse coeficiente (Brandão et al., 2024).

O coeficiente de atrito de rolamento quantifica a resistência ao movimento de rotação de uma partícula sobre uma superfície, resultando em perdas de energia no sistema. É definido como a razão entre a força de atrito de rolamento e a força normal da superfície de contato que impede a partícula de rolar. Seus valores são geralmente muito menores que os do coeficiente de atrito estático e dependem, principalmente, das deformações elásticas, rugosidade das superfícies de contato, histerese no ponto de contato e forma da partícula (Li et al., 2024; Xu et al., 2022). Superfícies mais rugosas, partículas de menor diâmetro ou com menor módulo de elasticidade tendem a apresentar valores mais elevados desse parâmetro (Li et al., 2024; Lima et al., 2021; Brandão et al., 2024).

Por fim, o ângulo de repouso é definido como o ângulo entre a superfície inclinada formada por um monte de partículas e a horizontal, sendo amplamente utilizado para caracterizar a fluidez e o empacotamento de materiais granulares. Essa medida reflete a resistência interna ao rolamento e ao deslizamento das partículas sob a ação da gravidade, e é influenciada por propriedades como tamanho, forma, atrito, coesão e método de deposição das partículas. Valores inferiores a 30° indicam materiais altamente fluidos, enquanto ângulos superiores a 55° sugerem elevado grau de coesão (Brandão et al., 2024).

3 Procedimentos experimentais para obtenção de parâmetros

Os trabalhos na literatura apresentam diferentes metodologias para a determinação experimental dos principais parâmetros empregados em simulações CFD-DEM. A seguir, são descritos os procedimentos mais usuais, organizados de acordo com cada parâmetro.

3.1 Coeficiente de restituição

3.1.1 Partícula-parede

O método de queda livre consiste na liberação de uma partícula de uma altura fixa, geralmente 5 cm acima de uma superfície plana feita do material representativo da parede em estudo, utilizando para isso uma haste vertical ou bomba de vácuo que reduz a rotação da partícula (Lima et al., 2021; Brandão et al., 2024). O impacto é registrado por uma câmera de alta velocidade (2000 frames/s) posicionada em frente ao aparato, com um espelho ao lado para controlar a verticalidade da trajetória. A Figura 1 ilustra um esquema do aparato experimental utilizado.

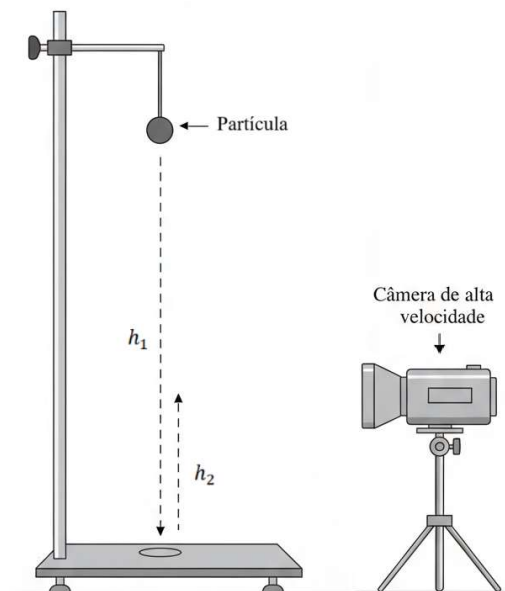


Figura 1. Representação esquemática do dispositivo de queda livre.

Após a colisão da partícula com a superfície, a altura máxima alcançada é medida a partir das imagens capturadas, que são analisadas por softwares como Redlake e ImageGrab para o cálculo do coeficiente de restituição (CR) (Batista et al., 2021). Adotando o movimento puramente vertical e desconsiderando a resistência do ar, o CR é determinado pela raiz quadrada da razão entre a altura após a colisão (h_2) e a altura inicial de queda (h_1), conforme a Eq. 1.

$$CR = \sqrt{\frac{h_2}{h_1}} \quad (1)$$

Para garantir a confiabilidade do resultado, o procedimento é repetido de 5 a 30 vezes para cada combinação de partícula e parede, e os resultados são apresentados como um valor médio com desvio padrão.

Simulações numéricas demonstraram que modelos DEM padrão podem não capturar esse efeito da espessura, ressaltando a importância de usar valores medidos experimentalmente que considerem as realidades físicas do sistema (Lima et al., 2021). Além disso, correlações existentes, como a equação de Zener, podem superestimar os valores do coeficiente de restituição por não considerarem todos os tipos de dissipação de energia, como a deformação plástica (Brandão et al., 2024).

3.1.2 Partícula-partícula

A metodologia segue o mesmo procedimento de queda livre adotado para a determinação do coeficiente da colisão entre partícula e parede, com uma pequena modificação. A superfície de impacto é coberta por uma camada de partículas que são coladas para garantir que permaneçam estacionárias e reproduzam o comportamento da interação. Uma câmera de vídeo de alta velocidade registra o impacto e o rebote. Para garantir a confiabilidade dos resultados, o procedimento também é repetido de 5 a 30 vezes. Apenas os testes em que a partícula apresenta movimento vertical sem rotação são considerados. Desta forma é possível determinar o valor médio do coeficiente de restituição.

3.2 Coeficiente de atrito estático

3.2.1 Partícula-parede

O principal procedimento descrito é o do plano inclinado, no qual a superfície plana é gradualmente elevada até que a partícula inicie o movimento de deslizamento, conforme mostra a Figura 2 (Lima et al., 2021; Batista et al., 2021).

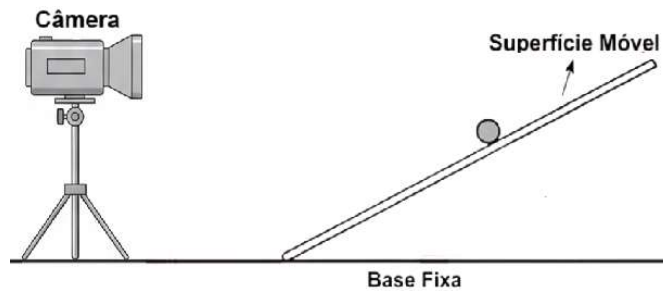


Figura 2. Representação esquemática do dispositivo utilizado para medição do coeficiente de atrito estático.

O aparato experimental consiste em uma base horizontal fixa e uma superfície móvel confeccionada no material de interesse, com dimensões aproximadas de 40 cm por 20 cm. O ângulo crítico em que as partículas começam a deslizar é determinado com uma câmera de alta velocidade (maior do que 2000 fps) ou, mais simplesmente, um transferidor. Para garantir que o coeficiente de atrito estático não seja influenciado pelo atrito de rolamento, as partículas são agrupadas, geralmente em conjuntos de quatro unidades. O procedimento é repetido entre 5 e 30 vezes para cada tipo de interação e combinação de materiais, conferindo robustez aos resultados experimentais. O valor médio do coeficiente de atrito estático (μ_s) é calculado a partir da tangente do ângulo de deslizamento (θ), conforme a Eq. 2:

$$\mu_s = \tan \theta \quad (2)$$

3.2.2 Partícula-partícula

Para reproduzir o comportamento de interação partícula-partícula, empregou-se o mesmo procedimento descrito anteriormente, porém com a superfície do plano inclinado recoberta por partículas fixas.

Nesse arranjo experimental, as superfícies formadas por grãos colados apresentam maior irregularidade em comparação às superfícies lisas, o que pode resultar em valores mais elevados tanto para o coeficiente de atrito estático quanto para o coeficiente de atrito de rolamento.

A utilização de partículas agrupadas (coladas) evita o efeito de rolamento, o que leva a uma determinação mais precisa e reproduzível do coeficiente de atrito estático real. Simulações confirmaram que para partículas agrupadas, o coeficiente de atrito estático partícula-partícula é o único parâmetro significativo, enquanto para partículas soltas, o atrito de rolamento também influencia (Lima et al. 2021).

3.3 Coeficiente de atrito de rolamento

3.3.1 Partícula-parede

O ensaio mais utilizado emprega um dispositivo de lançamento composto por uma rampa, geralmente com alturas variando entre 5 e 45 mm e comprimentos entre 135 e 145 mm, que libera a partícula para rolar sobre uma superfície plana feita do material a ser analisado. A partícula é posicionada no topo da rampa e, ao ser solta, rola livremente até alcançar a superfície de teste, onde continua seu movimento até parar. Com o uso de uma régua, mede-se a distância horizontal percorrida pela partícula desde a saída do dispositivo de lançamento até o ponto de repouso. Um esquema do dispositivo pode ser observado na Figura 3.



Figura 3. Aparato utilizado para medição do coeficiente de atrito de rolamento.

O procedimento é repetido de 5 a 60 vezes para cada combinação de partícula e superfície, garantindo a confiabilidade dos resultados, sendo considerados apenas os testes em que a trajetória da partícula

permanece retilínea. O coeficiente de atrito de rolamento (μ_R) é então calculado utilizando a Eq. 3, na qual “ h ” representa a altura do dispositivo de lançamento e “ d ” a distância percorrida sobre a superfície-testada.

$$\mu_R = \frac{h}{d} \quad (3)$$

A principal função deste parâmetro nas simulações é levar em conta os efeitos da forma de partículas não esféricas de uma maneira computacionalmente eficiente, sem a necessidade de modelar a geometria complexa da partícula diretamente (Xu et al., 2022). Partículas de menor diâmetro (4 mm) ou com menor módulo de elasticidade tendem a apresentar maiores coeficientes de atrito de rolamento devido a uma maior rugosidade relativa ou maior deformabilidade, respectivamente (Brandão et al., 2024).

3.3.2 Partícula-partícula

Para reproduzir o comportamento de interação partícula-partícula, a superfície do plano inclinado ou a superfície plana de teste é coberta com partículas fixas do mesmo material. A medição e cálculo do coeficiente seguem o mesmo procedimento anterior.

Avaliações numéricas demonstrou que a metodologia é robusta e não é significativamente influenciada por outros parâmetros de entrada, como o coeficiente de atrito estático, fornecendo uma medida correta para ambas as interações partícula-partícula e partícula-parede (Lima et al., 2021).

3.4 Ângulo de repouso

O ângulo de repouso estático pode ser determinado, principalmente, através de duas metodologias que avaliam o comportamento de um leito de partículas a granel.

3.4.1 Método da caixa retangular com abas móveis

O experimento utiliza uma caixa retangular composta por duas seções, separadas por uma prateleira horizontal e por abas laterais móveis interligadas por uma haste, sendo que a parede frontal da caixa é de vidro para visualização. Inicialmente, as partículas são arranjadas na seção superior do dispositivo e, com a remoção simultânea das abas laterais móveis, as partículas caem, formando três pilhas: uma permanece na seção superior e duas se acumulam na seção inferior, conforme ilustrado na Figura 4. Quando as partículas entram em repouso, mede-se o ângulo de repouso estático tanto nos dois lados da pilha superior quanto nas duas pilhas localizadas no fundo da caixa. Nota-se que o ângulo de repouso superior está relacionado à distribuição das forças de atrito no leito de partículas granulares, enquanto o ângulo de repouso inferior associa-se sobretudo à elasticidade e ao módulo de cisalhamento.

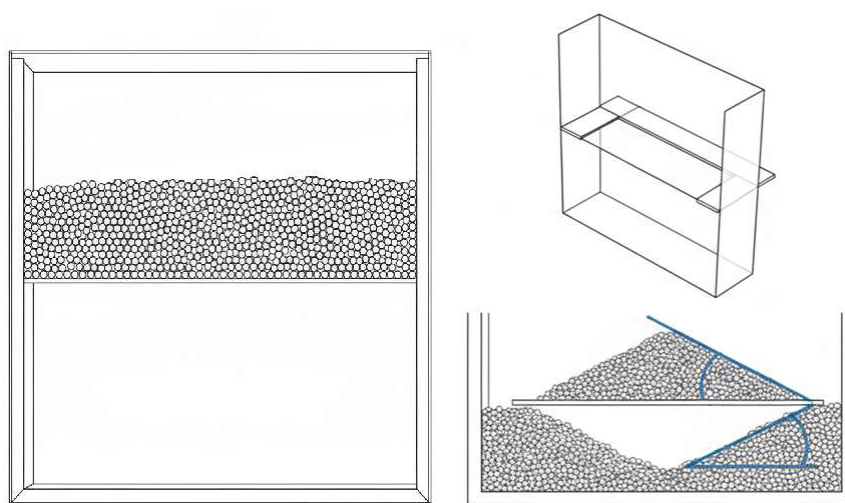


Figura 4. Desenho esquemático da caixa com abas móveis e das pilhas formadas pelas partículas.

3.4.2 Método do funil de altura fixa (baseado na norma ASTM C1444-00)

No experimento, utiliza-se um funil com uma abertura de descarga entre 0,64 cm e 0,97 cm, capaz de comportar entre 113,5 g e 227,2 g de pó de molde. O funil com bico de descarga padronizado libera uma

amostra do pó ou de grãos sobre uma superfície plana, formando um cone. O diâmetro da base do cone é medido em quatro pontos distintos com o auxílio de um paquímetro, sendo registrada a média dessas medidas (D). O procedimento é realizado três vezes para garantir a reprodutibilidade dos resultados. Após essas etapas, o ângulo de repouso (AoR) é determinado utilizando-se a Eq. 4.

$$\text{AoR} = \tan^{-1} \left[\frac{2H}{(D-d)} \right] \quad (4)$$

Em que, H é a altura do monte cônico (altura do cone), D é o diâmetro médio da base do cone e d é o diâmetro interno do orifício de descarga do funil.

É importante ressaltar que o ângulo de repouso é uma propriedade de massa (a granel) do material granular. As metodologias descritas medem o comportamento de uma pilha de partículas, que é o resultado macroscópico de múltiplas interações entre partículas (p-p) e entre partículas e as paredes do aparato (p-w). O AoR é uma propriedade de massa que reflete o comportamento macroscópico do material granular, sendo útil para classificar a fluidez e coesividade (Brandão et al., 2024). O método da caixa retangular permite a medição de "ângulos superiores" (relacionados à distribuição de forças friccionais) e "ângulos inferiores" (relacionados à elasticidade e módulo de cisalhamento), fornecendo insights mais detalhados sobre o leito de partículas.

4 Considerações finais

A crescente demanda por tecnologias capazes de viabilizar a conversão eficiente de resíduos em combustíveis renováveis tem destacado os reatores de leito de jorro como uma alternativa promissora. Nesse contexto, o uso do acoplamento CFD-DEM tem se mostrado uma ferramenta numérica consolidada para simular o comportamento de materiais particulados, permitindo análises detalhadas em microescala. No entanto, a confiabilidade das simulações DEM depende da qualidade do modelo de contato escolhido e da definição precisa e fisicamente significativa de seus parâmetros de entrada.

Com base na revisão realizada, conclui-se que:

- a) A análise das metodologias experimentais para a obtenção de parâmetros fortalece a base teórica das simulações multifásicas, aumentando sua precisão e confiabilidade, podendo promover o avanço das modelagens computacionais de sistemas gás-sólido e contribuindo para a compreensão da hidrodinâmica em reatores de leito de jorro.
- b) Apesar dos avanços, ainda há carência de padronização e validação das metodologias experimentais, o que dificulta a comparação de resultados entre diferentes estudos.
- c) De acordo com Lima et al. (2021) os modelos de contato implementados em softwares DEM, podem não considerar todas as realidades físicas do sistema real, como desconsiderar a influência da espessura da superfície de impacto sobre o coeficiente de restituição.
- d) Segundo Xu et al. (2022) a simulação de sistemas com um grande número de partículas, especialmente não esféricas, pode ser extremamente custosa em termos computacionais. Técnicas de agrupamento numérico são usadas para reduzir esse custo, mas introduzem suposições que podem comprometer a precisão.

Com base nesta minirrevisão, espera-se que a combinação de experimentação e modelagem numérica fortaleça o uso de simulações CFD-DEM para prever o índice de mistura e impulsione o desenvolvimento tecnológico na produção de combustíveis a partir de resíduos poliolefinicos em reatores de leito de jorro.

Agradecimentos

Este estudo foi financiado em parte pelo Código Financeiro 001 da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES). Os autores também expressam sua gratidão pelo apoio financeiro do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPQ), da Fundação de Amparo à Pesquisa e Inovação do Espírito Santo (FAPES) e da Financiadora de Estudos e Projetos (FINEP).

Referências

- Batista, JNM, Santos, DA and Béttega, R (2021) ‘Determination of the physical and interaction properties of sorghum grains: Application to computational fluid dynamics–discrete element method simulations of the fluid dynamics of a conical spouted bed’, *Particuology*, v. 54, pp. 91–101. <http://doi:10.1016/J.PARTIC.2020.04.005>.
- Brandão, RJ, Calheiros, CJP, Machado, MVC, Lima, RM, Duarte, CR and Barrozo, MAS (2024) ‘A systematic evaluation of DEM input parameters measurement and calibration’, *Powder Technology*, v. 448, p. 120157. <http://doi:10.1016/J.POWTEC.2024.120157>.
- Corral, E, Moreno, RG, García, MJG and Castejón, C (2021) ‘Nonlinear phenomena of contact in multibody systems dynamics: a review’, *Nonlinear Dynamics*, v. 104, pp. 1269–1295, <http://doi:10.1007/S11071-021-06344-Z>.
- Cross, R (2021) ‘Coefficients of restitution for a collision’, *Physics Education*, v. 56, n. 6, p. 065017, <http://doi:10.1088/1361-6552/ac1f6e>.
- Li, J, Zhang, Y, Shang, Q and Wang, T (2024) ‘Experimental study on the static rolling friction coefficient of a flat-roller-flat configuration considering surface roughness’, *Structures*, v. 65, p. 106711, <http://doi:10.1016/J.ISTRUC.2024.106711>.
- Lima, RM, Brandao, RJ, Santos, RL, Duarte, CR and Barrozo, MAS (2021) ‘Analysis of methodologies for determination of DEM input parameters’, *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 38, n. 2, pp. 287–296, <http://doi:10.1007/S43153-021-00107-4/TABLES/9>.
- Xu, X, Li, C and Gao, X (2022) ‘Coarse-Grained DEM-CFD Simulation of Fluidization Behavior of Irregular Shape Sand Particles’, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 61, n. 25, pp. 9099–9109, http://doi:10.1021/ACS.IECR.2C00891/ASSET/IMAGES/LARGE/IE2C00891_0013.JPEG.