



IMPLEMENTAÇÃO DE MODELOS DE QUEBRA E COALESCÊNCIA APLICADOS AO ESCOAMENTO DE EMULSÕES

Gabriel Gonçalves da Silva Ferreira

Projeto Final de Curso

Orientadores

Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc

Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc

Outubro de 2012

IMPLEMENTAÇÃO DE MODELOS DE QUEBRA E COALESCÊNCIA APLICADOS AO ESCOAMENTO DE EMULSÕES

Gabriel Gonçalves da Silva Ferreira

Projeto Final de curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Aprovado por:

João Felipe Mitre de Araujo , D.Sc

Amaro Gomes Barreto Junior, D.Sc

Alessandra Bastos dos Santos, M.Sc

Orientado por:

Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc

Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc

Rio de Janeiro, RJ – Brasil
Outubro de 2012

de Ferreira, Gabriel Gonçalves da Silva.

Implementação de modelos de quebra e coalescência aplicados ao escoamento de emulsões/ Gabriel Gonçalves da Silva Ferreira. - Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2012 vi, 53 p.;il.

Projeto Final – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2012. Orientadores: Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva e Paulo Laranjeira da Cunha Lage

1. Escoamento multifásico. 2. Balanço populacional. 3. CFD. 4. Projeto Final (Graduação – UFRJ/EQ). 5. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva e Paulo Laranjeira da Cunha Lage.

AGRADECIMENTOS

Agradeço em primeiro lugar à minha família, pelo apoio incondicional nos momentos mais críticos.

Agradeço aos amigos que fiz durante o ensino médio e agregados pelo companheirismo. Vocês fizeram a diferença nesta etapa da minha vida que foi a faculdade, e também farão nas etapas que estão por vir. Em especial à Luciana, que tem me suportado nos bons e maus momentos, sempre com sorrisos e carinho. Obrigado.

Agradeço aos amigos que fiz durante a faculdade. Mesmo que cada um siga seu caminho, o quanto aprendemos uns com os outros nestes 5 anos não cabe no Perry, mas nunca será esquecido.

Agradeço aos meus colegas de LTFD. O laboratório não é só um ótimo lugar para tirar dúvidas sobre Linux, OpenFOAM, C++ e LaTeX, mas também para encontrar companheiros para comer um chocolate, tomar um café ou uma cerveja de vez em quando.

Por fim, agradeço aos meus professores orientadores, Luiz Fernando e Paulo Lage, pela orientação nesses quase 4 anos que eu tenho de LTFD, e pelo exemplo de profissionalismo e excelência.

Resumo do Projeto Final de Curso apresentado à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenheiro Químico.

IMPLEMENTAÇÃO DE MODELOS DE QUEBRA E COALESCÊNCIA APLICADOS AO ESCOAMENTO DE EMULSÕES

Gabriel Gonçalves da Silva Ferreira

Outubro, 2012

Orientadores: Luiz Fernando Rodrigues Silva, D.Sc

Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc

A simulação numérica do escoamento polidisperso de uma emulsão de água em óleo através de uma válvula de mistura foi realizada. A distribuição numérica de tamanho de gotas da emulsão foi avaliada através do acoplamento da abordagem Euleriana-Euleriana multi-fluido, estabelecida no campo da dinâmica dos fluidos computacional, com o acompanhamento da distribuição numérica de tamanho de gotas dada pela equação de balanço populacional. O pacote computacional utilizado foi o OpenFOAM, uma biblioteca para desenvolvimento de códigos CFD escrita na linguagem de programação C++ e de código aberto. Foram implementados modelos teórico-empíricos para os fenômenos de quebra e coalescência de gotas, e os resultados obtidos nas simulações CFD foram comparados com resultados experimentais. Os resultados das simulações apresentaram grandes desvios em relação aos experimentais, sendo apresentada uma análise crítica apontando possíveis melhorias na metodologia utilizada.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Modelagem de Escoamentos Multifásicos	2
1.2	Objetivo	3
1.3	Organização do Texto	3
2	Modelagem de Escoamentos Multifásicos Polidispersos	5
2.1	O Modelo Euleriano-Euleriano	6
2.1.1	O Modelo Multi-fluido	7
2.1.2	Equações Constitutivas	7
2.2	Balanco Populacional	14
2.2.1	A Equação de Balanco Populacional	14
2.2.2	Modelos de Coalescência	16
2.2.3	Modelos de Quebra	18
2.2.4	Modelagem da Difusividade das Partículas	19
3	Metodologia Numérica	21
3.1	Metodologia Numérica do OpenFOAM	21
3.1.1	O Método dos Volumes Finitos	21
3.1.2	Sistema Algébrico de Equações	25
3.2	Métodos Numéricos para a Solução da EBP	25
3.2.1	Método das Classes	26
3.2.2	MoM e DQMoM	27
3.3	Detalhamento do Solver multiPhasePbeFoam	28
3.3.1	Equação de Conservação Multifásica	29
3.3.2	Equação de Correção do Momentum	30
3.3.3	Equação da Pressão	30
3.3.4	Equação da Fração Volumétrica	31
3.3.5	Equações do Modelo $\kappa - \epsilon$	33
3.3.6	Algoritmo de Solução	33
4	Resultados	36
4.1	Verificação dos Códigos para Solução da EBP	38
4.2	Avaliação da Solução Numérica	39
4.3	Acoplamento PB-CFD	45
4.3.1	Parâmetros da Simulação	45
4.3.2	Avaliação do Modelo	47
5	Conclusão	50

Lista de Figuras

2.1	Coefficiente de arrasto para esferas rígidas em função do número de Reynolds (retirado de Schlichting [1])	10
2.2	Coefficiente de sustentação sobre uma esfera lisa e rígida em função do número de Reynolds (retirado de Legendre & Magnaudet [2])	11
3.1	Discretização dos domínios espacial e temporal (retirado de Rusche [3]) . .	22
3.2	Parâmetros da discretização por volumes finitos (retirado de Rusche [3]). .	22
4.1	Vista em corte longitudinal da seção de testes com as gavetas parcialmente fechadas (cotas em milímetros, retirado de Araujo [4]).	37
4.2	Volume de controle considerado para calcular o tempo de residência, que é dado por $Vc = 25(7 + Ab) mm^2$, onde Ab é a abertura da válvula, em milímetros (retirado de Araujo [4]).	37
4.3	Perfis do momento 0 para os casos 1 (a) e 2 (b).	40
4.4	Perfis do momento 2 para os casos 1 (a) e 2 (b).	40
4.5	Perfis do momento 3 para os casos 1 (a) e 2 (b).	41
4.6	Convergência do DQMoM no cálculo do momento 0 (a) e momento 1 (b) para o caso 1. Erros relativos ao caso com $N = 6$ pontos de quadratura . .	42
4.7	Convergência do DQMoM no cálculo do momento 2 (a) e momento 3 (b) para o caso 1. Erros relativos ao caso com $N = 6$ pontos de quadratura . .	42
4.8	Perfis do momento 0 (a) e momento 1 (b) para o caso 3.	42
4.9	Perfis dos momentos 2 (a) e momentos 3 (b) para o caso 3.	43
4.10	Perfis dos diâmetros d_{32} (a) e d_{43} (b) para o caso 3.	43
4.11	Perfis do momento 0 (a) e momento 1 (b) para o caso 4.	43
4.12	Perfis dos momentos 2 (a) e momentos 3 (b) para o caso 4.	44
4.13	Perfis dos diâmetros d_{32} (a) e d_{43} (b) para o caso 4.	44
4.14	Detalhe da malha na região do acidente.	46
4.15	Perfil de pressão.	48
4.16	Perfil da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, ϵ (m^2/s^3). . . .	48
4.17	Perfil do diâmetro médio de Sauter (d_{32}).	49
4.18	Perfil do diâmetro médio volumétrico (d_{43}).	49

Capítulo 1

Introdução

Escoamentos multifásicos estão presentes em diversas operações da indústria química moderna, tais como processos de flotação, reatores tipo leito fluidizado, operações de mistura, secagem, entre outras. No entanto, a importância da compreensão dos fenômenos físicos envolvidos neste tipo de escoamento vai além das aplicações industriais, tendo impacto direto no desenvolvimento de ferramentas de estudo para outras ciências. O escoamento do sangue em nossos vasos capilares, o movimento das ondas do mar, a formação de névoas e a chuva são exemplos de escoamentos multifásicos presentes no corpo humano e no meio ambiente.

A natureza complexa dos escoamentos multifásicos, na comparação com os escoamentos com uma única fase, está na existência de interfaces deformáveis, descontinuidades nas propriedades dos fluidos e padrões de escoamento complicados nas proximidades da interface. A presença de turbulência aumenta ainda mais a complexidade do problema, já que existe ainda a interação entre os vórtices turbulentos de uma dada fase com as interfaces.

Os altos custos relativos a modelos em escala de laboratório e as dificuldades de extrapolação dos dados para este tipo de escoamento torna necessário o constante desenvolvimento de novos modelos teóricos capazes de prever o comportamento destes sistemas de uma maneira detalhada.

Por outro lado, com o aumento da disponibilidade dos recursos computacionais, tem-se tornado possível a solução direta das equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia para cada uma das fases, e assim calcular cada detalhe do escoamento multifásico. No entanto, tal nível de detalhamento só é viável em certos casos simplificados, de forma que ainda existe um esforço considerável sendo despendido no desenvolvimento de modelos de fechamento para fenômenos complexos como a turbulência e as trocas de massa, *momentum* e energia nas interfaces. A utilização destas modelagens simplificadas acaba sendo a abordagem mais comum para aplicações de engenharia, dando origem a várias modelagens que variam de acordo com o grau de sofisticação destes modelos de fechamento. Por exemplo, em escoamentos multifásicos onde existe uma fase dispersa cujas propriedades (tais como diâmetro, temperatura, etc.) são variáveis entre as partículas da fase dispersa, torna-se necessária uma abordagem matemática mais

detalhada da dinâmica da população de partículas [5].

1.1 Modelagem de Escoamentos Multifásicos

O conceito de fase não é universal. Para a termodinâmica, fase é uma região homogênea da matéria [6]. Um gás ou uma mistura de líquidos miscíveis são exemplos de sistemas com uma única fase. Fases são limitadas por interfaces, tais como um gás borbulhando em um líquido ou misturas entre água e óleo. Todavia, do ponto de vista da modelagem por fenômenos de transporte, o conceito de fase é menos rigoroso.

Por exemplo, ao modelarmos o escoamento de uma dada suspensão em uma tubulação, dependendo das propriedades físicas do fluido e da partícula, do tamanho médio das partículas da fase dispersa e do diâmetro da tubulação, podemos desprezar o efeito das partículas sobre o escoamento. Ou seja, se as partículas da fase dispersa são suficientemente pequenas para a velocidade das mesmas ser igual à velocidade da fase contínua, podemos modelar o escoamento como monofásico.

O escoamento multifásico pode ser classificado de acordo com a distribuição espaço-temporal das fases, que definem regimes de escoamento. Não existe consenso na definição de cada tipo de regime e nem mesmo no nome dado a cada um deles. Mesmo assim, ainda que a fronteira entre cada regime esteja indefinida, é possível observar e generalizar as configurações mais comuns em três tipos [7]:

- Disperso, onde uma fase encontra-se espalhada na outra na forma de partículas sólidas, gotas ou bolhas. Se as partículas possuírem propriedades diferentes entre si (tais como tamanho, composição, etc.) o sistema é dito polidisperso. Caso contrário, o sistema é dito uniformemente disperso.
- Estratificado ou separado, onde a interface entre as duas fases é bem definida.
- Intermitente ou complexo, inclui todos os escoamentos que não se encaixam nas definições anteriores.

Como o foco deste trabalho está na implementação de um modelo para um escoamento multifásico polidisperso, toda a revisão da modelagem estará focada neste caso particular.

O escoamento polidisperso é caracterizado pela existência de partículas na fase dispersa com propriedades diferentes entre si. Dentro da teoria de balanço populacional, estas propriedades são chamadas de variáveis internas. Estas variáveis são propriedades intrínsecas da partícula, podendo ser massa, tamanho, composição, energia interna, idade, etc.

No problema analisado por este trabalho, a variável interna é o volume da partícula. O objetivo a ser atingido é calcular a distribuição numérica das partículas como uma função do espaço e do tempo. Isso é obtido através da solução da equação de balanço

populacional, que é uma equação de conservação para a função de distribuição numérica das partículas, e da modelagem adequada dos processos de interação entre as fases e entre as partículas, tais como processos de quebra e coalescência [8].

1.2 Objetivo

Este trabalho trata da modelagem de um escoamento disperso líquido-líquido, a fim de se avaliar o comportamento de uma emulsão água-óleo que escoava através de uma válvula de mistura. O escoamento em questão é polidisperso, com diferentes tamanhos de gotas.

A metodologia numérica utilizada foi a recentemente desenvolvida e implementada na biblioteca livre de códigos CFD OpenFOAM por Silva e Lage [9] para a solução de escoamentos multifásicos polidispersos, que deu origem ao *solver multiPhasePbeFoam*.

O modelagem da quebra e coalescência das partículas utilizada é a apresentada na tese de doutorado de Araujo [4], que desenvolveu um novo modelo para partículas de diâmetro inferior à escala de comprimento de Kolmogorov em uma emulsão de água em óleo, validando o mesmo através da comparação com dados experimentais.

O objetivo deste trabalho é a implementação do modelo proposto por Araujo [4] no *solver multiPhasePbeFoam*, verificando a capacidade do mesmo em prever os fenômenos de quebra e coalescência em problemas usando CFD, efetuando-se a comparação dos resultados obtidos com dados experimentais.

1.3 Organização do Texto

Os conceitos relativos à revisão da modelagem matemática utilizada são mostrados no capítulo 2. Nele está detalhada a modelagem Euleriana multi-fluido [10] e o equacionamento e conceitos da teoria de balanço populacional necessários para a compreensão da modelagem utilizada por Silva & Lage [9]. Além disso, algumas considerações a respeito do desenvolvimento de modelos de quebra e coalescência de partículas fluidas e a apresentação do modelo proposto por Araujo [4] estão presentes ao final deste capítulo.

No capítulo 3 estão apresentados os métodos numéricos usados na solução do problema. O capítulo se inicia com uma revisão do método dos volumes finitos, que é a base do OpenFOAM e de muitos outros *softwares* CFD livres ou comerciais, com uma visão geral de como estes *softwares* resolvem os sistemas de equações diferenciais parciais. Em seguida os métodos para solução da equação de balanço populacional usados neste trabalho são apresentados. Enfim, a metodologia utilizada para acoplamento entre CFD e balanço populacional e o algoritmo do *solver multiPhasePbeFoam* são descritos. Note que para compreensão desta etapa é necessário um entendimento de tudo o que foi apresentado anteriormente.

No capítulo 4 estão presentes os resultados deste trabalho. No início deste capítulo é feito um parêntese onde é detalhada a modelagem matemática utilizada no desenvolvimento dos modelos de quebra e coalescência de Araujo [4] e as condições experimentais utilizadas pela equipe do Núcleo de Separadores Compactos da UNIFEI (Universidade Federal de Itajubá) [11, 12], que geraram os dados disponibilizados pela PETROBRAS e usados para a validação do modelo. Este parêntese é importante para a compreensão da análise dos resultados, já que a geometria modelada para as simulações CFD é a mesma dos experimentos, e o resultados obtidos neste trabalho são comparados com os de Araujo [4] e com os dados experimentais [11, 12]. Em seguida é realizada a verificação dos códigos utilizados e a validação da modelagem numérica utilizada. O capítulo termina com a avaliação do desempenho do modelo em simulações CFD.

Por fim, no capítulo 5 estão apresentadas as conclusões do trabalho e algumas sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Modelagem de Escoamentos Multifásicos Polidispersos

Dentre as abordagens presentes na literatura para a modelagem de escoamentos multifásicos duas delas se destacam: a abordagem Euleriana-Lagrangeana e a abordagem Euleriana-Euleriana [13]. Em ambas as abordagens estão presentes os conceitos de fase contínua e fase dispersa. O cálculo do campo de velocidade da fase contínua a partir da equação de conservação da quantidade de movimento é realizado em ambos os casos. Porém, a diferença entre as duas abordagens se encontra no tratamento dado às fases dispersas.

Na abordagem Euleriana-Lagrangeana, as partículas da fase dispersa são tratadas como entidades pontuais. O algoritmo é iniciado através do cálculo do campo de velocidades da fase contínua. Em seguida, a segunda lei de Newton é aplicada para cada partícula de forma a calcular a sua trajetória dentro do campo Euleriano, sendo a mesma calculada por:

$$m_i \frac{d\mathbf{u}_i}{dt} = \sum \mathbf{F}_i \quad (2.1)$$

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{u}_i \quad (2.2)$$

Se os efeitos de interação partícula-fluido forem levados em conta, uma terceira etapa é responsável pelo cálculo do efeito das partículas sobre o campo de escoamento, de forma iterativa. Efeitos partícula-partícula e partícula-parede também podem ser adicionados ao modelo. A principal desvantagem desta abordagem é o elevado crescimento no custo computacional quando se tem uma grande população de partículas, fazendo com que essa abordagem se torne mais aplicável a sistemas diluídos ou em casos específicos, como quando se deseja obter o tempo de residência da partícula.

Uma outra forma de abordagem lagrangeana é a simulação numérica direta, conhecida como DNS (*Direct Numerical Simulation*), porém esta abordagem é menos comum devido ao seu alto custo computacional, possuindo aplicações restritas à área de desenvolvimento, como na validação de outros modelos [7].

Outra classe de métodos é a do Volume de Fluido, ou VOF (*Volume-of-Fluid*), que é

uma abordagem onde as partículas fluidas são consideradas deformáveis e o acompanhamento da interface pode ser realizado. Nesta abordagem um único campo de escoamento é considerado e a fase dispersa e contínua são distinguidas pela variação das propriedades do fluido que ocorre na interface. Este método tem sido aplicado ao acompanhamento de interfaces de escoamentos de física simples [14, 15], mas o custo computacional ainda torna proibitiva a simulação de problemas práticos devido ao imenso custo computacional.

A abordagem Euleriana-Euleriana surge da promediação das equações de conservação de massa e *momentum*, de forma que ambas as fases são tratadas como contínuas. Esta metodologia é a mais utilizada para solução de escoamentos multifásicos, principalmente quando as fases se encontram misturadas [7]. Os detalhes deste tipo de modelagem são mostrados a seguir.

2.1 O Modelo Euleriano-Euleriano

A formulação Euleriana mais geral é o modelo multi-fluido. Esta formulação é obtida através da promediação das equações de conservação locais de cada fase. Durante essa promediação as descontinuidades entre as fases dão lugar a uma abordagem onde as fases são tratadas como meios interpenetrantes. Neste ponto é introduzida a fração volumétrica r , que é a probabilidade de uma determinada fase estar presente em um ponto do espaço num dado instante de tempo (média amostral) [16].

O processo de média simplifica a obtenção do campo de velocidades do escoamento multifásico, mas a perda de informação durante o processo é grande. As informações relativas aos gradientes locais entre as fases são perdidas [16], sendo modeladas por equações de fechamento que podem ser empíricas, analíticas ou obtidas através de simulações computacionais utilizando modelos mais gerais.

Outra abordagem Euleriana é o chamado modelo de mistura, ou ASMM (*Algebraic Slip Mixture Model*), que é uma simplificação do modelo multi-fluido [17]. Este modelo permite que as fases se movimentem entre si, mas uma única equação da continuidade e de quantidade de movimento é resolvida para toda a mistura. Desta forma, as partículas da fase dispersa são consideradas com velocidade igual à velocidade terminal nas condições correspondentes a sua localização, e uma relação deve ser dada para calcular a velocidade relativa entre as fases.

Nesta seção a modelagem multifásica multi-fluido é detalhada. A descrição é feita para um sistema com $n + 1$ fases, onde as variáveis relativas a uma dada fase são representadas pelo subscrito α . A fase contínua é representada por $\alpha = 0$, e as demais fases dispersas por $\alpha = 1, \dots, n$.

2.1.1 O Modelo Multi-fluido

A dedução das equações médias para o escoamento multifásico pode ser encontrada em várias fontes da literatura [10, 16, 18, 5].

As equações de conservação de massa e *momentum* médias para o escoamento multifásico são dadas por

$$\frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = R_\alpha \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\alpha) &= \nabla \cdot (r_\alpha \mathbf{T}_\alpha^{eff}) \\ &+ \overline{\mathbf{M}}_{I,\alpha} + R_\alpha \mathbf{u}_{\alpha,I} + \mathbf{S}_\alpha + r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{g} \end{aligned} \quad (2.4)$$

onde os termos ρ_α , \mathbf{u}_α e r_α representam, respectivamente, a massa específica média, a velocidade média e a fração de fase. O tensor \mathbf{T}_α^{eff} representa a combinação das tensões médias viscosas e turbulentas da fase α e é dado por $\mathbf{T}_\alpha^{eff} = \mathbf{T}_\alpha^{lam} + \mathbf{T}_\alpha^{turb}$. O termo fonte R_α é o referente à troca de massa entre a fase α e as demais fases, e sua formulação é dependente do tipo de processo em questão (solidificação, evaporação, condensação, etc.) e o termo $\mathbf{u}_{\alpha,I}$ representa a velocidade da transferência de massa pela interface [16]. \mathbf{S}_α é o termo fonte de quantidade de movimento por forças externas além da gravidade. O termo $\overline{\mathbf{M}}_{I,\alpha}$ é o termo de troca de *momentum* através da interface da fase α . A equação constitutiva para a tensão viscosa da fase contínua é dada pela lei da viscosidade de Newton [19] adaptada para a modelagem multi-fluidos.

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_\alpha^{lam} &= -p_\alpha \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_\alpha^{lam} \\ \boldsymbol{\tau}_\alpha^{lam} &= 2\mu_\alpha \mathbf{D}_\alpha + (k_\alpha - \frac{2}{3}\mu_\alpha)(\nabla \cdot \mathbf{u}_\alpha) \mathbf{I} \\ \mathbf{D}_\alpha &= \frac{1}{2}[\nabla \mathbf{u}_\alpha + (\nabla \mathbf{u}_\alpha)^t] \end{aligned} \quad (2.5)$$

onde \mathbf{D}_α é o tensor taxa de deformação da fase α , p_α é a pressão da fase α , μ_α é a viscosidade dinâmica da fase α e k_α é a viscosidade dilatacional da fase α . A modelagem do tensor relativo às tensões turbulentas é de extrema importância na modelagem de escoamentos multifásicos. Em escoamentos gás-líquido, por exemplo, os estudos de Pflieger *et al.* [20] e Sundaresan [21] mostraram que o modelo laminar não é apropriado mesmo para baixas velocidade relativa e fração de fase da fase dispersa. As simulações utilizando o modelo laminar não são capazes de representar o fenômeno físico, já que seus resultados não convergem em malha. A modelagem sub-malha da dissipação da energia cinética pela turbulência deve ser realizada. A modelagem deste termo e de outros termos de fechamento é apresentada logo a seguir.

2.1.2 Equações Constitutivas

A princípio, a modelagem Euleriana é aplicável a qualquer regime de escoamento, já que durante a sua formulação não há qualquer restrição quanto à topologia da interface. No entanto, para uma correta predição dos campos do escoamento, os termos de tensão

laminar e turbulenta e os termos de troca de *momentum* entre as fases precisam ser modelados de forma apropriada, através das leis de fechamento.

As leis de fechamento, ou equações constitutivas, devem obedecer aos seguintes princípios:

- Equipresença, que determina que cada equação de fechamento deve ser função das outras variáveis do problema.
- Solução bem-posta, que afirma que a solução do modelo existe, é única, e varia continuamente com as condições de contorno impostas.
- Indiferença ao referencial, que significa que as equações tensoriais dos modelos de fechamento não dependem do referencial do observador.
- Determinismo, que é a ideia de que o estado presente do sistema pode ser previsto pelo seu passado.
- Respeitar a segunda lei da termodinâmica.

Conforme já exposto anteriormente, a troca de *momentum* entre partícula e fluido pode ser decomposta de acordo com a origem fenomenológica das forças atuantes na interface. O sistema multifásico pode ser modelado a partir de uma fase primária ($\alpha = 0$) que consiste na fase contínua, e outras n fases secundárias dispersas, cada uma representando uma classe de tamanho de partículas. O termo de fluxo de *momentum* através da interface para uma fase α genérica oriundo do processo de promediação das equações é dado por [16]

$$\bar{\mathbf{M}}_{I,\alpha} = p_\alpha \nabla r_\alpha + \hat{\mathbf{M}}_{I,\alpha} - \nabla r_\alpha \cdot \boldsymbol{\tau}_{I\alpha} \quad (2.6)$$

onde $\boldsymbol{\tau}_{I\alpha}$ é o tensor tensão interfacial e $\hat{\mathbf{M}}_{I,\alpha}$ é a força de arrasto generalizada, que para a fase contínua ($\alpha = 0$) é dada por

$$\hat{\mathbf{M}}_{I,0} = \sum_{\alpha=1}^n [\mathbf{M}_{I,0\alpha}^a + \mathbf{M}_{I,0\alpha}^s + \mathbf{M}_{I,0\alpha}^{mv}] \quad (2.7)$$

onde $\mathbf{M}_{I,ij}^a$, $\mathbf{M}_{I,ij}^s$ e $\mathbf{M}_{I,ij}^{mv}$ simbolizam, respectivamente, as força de arrasto, sustentação e massa virtual da fase j sobre a fase i . Ao considerarmos que as fases secundárias não interagem entre si, hipótese razoável para sistemas diluídos, o termo de interação entre as fases se torna

$$\hat{\mathbf{M}}_{I,\alpha} = \mathbf{M}_{I,\alpha 0}^a + \mathbf{M}_{I,\alpha 0}^s + \mathbf{M}_{I,\alpha 0}^{mv} \quad \alpha = 1, \dots, n \quad (2.8)$$

Da terceira lei de Newton, sabe-se que os termos de troca de quantidade de movimento se inter-relacionam de maneira oposta, ou seja, $\mathbf{M}_{I,\alpha 0} = -\mathbf{M}_{I,0\alpha}$.

Embora largamente aplicada, a relação linear apresentada nas Eqs. 2.7 e 2.8 nem sempre é válida. Esta divisão de forças é baseada em casos particulares da solução do escoamento em torno de uma dada partícula que possuem solução analítica. Na realidade, existe uma relação não-linear entre as forças. No entanto, estas interações não são bem conhecidas, e estes desvios na maioria dos casos são menos significativos que os erros na

modelagem dos termos principais. De uma forma geral, a força de arrasto é dominante na maioria dos escoamentos bifásicos. A inclusão das demais forças deve ser considerada quando a razão entre as mesmas com a força de arrasto for significativa.

Desprezando as forças de tensão interfacial e considerando que a pressão de todas as fases dispersas é igual à da fase contínua, ou seja, $p_\alpha = p_0 = p$, o termo de fluxo de *momentum* pela interface entre as fases fica

$$\overline{\mathbf{M}}_{I,\alpha} = p\nabla r_\alpha + \hat{\mathbf{M}}_{I,\alpha} \quad (2.9)$$

Modelagem da Força de Arrasto

A força de arrasto é uma força exercida pela fase contínua sobre a fase dispersa, na direção da velocidade relativa entre as fases, sempre que a mesma não for nula. Ela é usualmente modelada por [1]

$$\mathbf{M}_{I,\alpha}^a = -\frac{1}{2}\rho_0 r_\alpha A_\alpha C_{D,\alpha} |\mathbf{u}_{r,\alpha}| \mathbf{u}_{r,\alpha} \quad (2.10)$$

onde $C_{D,\alpha}$ é o coeficiente de arrasto para a fase α , $\mathbf{u}_{r,\alpha} = \mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_\alpha$ é a velocidade relativa e A_α é a área projetada normal à velocidade relativa da partícula da fase α dividida pelo volume da mesma. Para uma partícula esférica de diâmetro d_p este valor é igual a $A_\alpha = 3/2d_p$.

A maioria dos resultados dos estudos referentes à força de arrasto são apresentados na forma adimensional, com o coeficiente de arrasto C_D em função do número de Reynolds da partícula, conforme mostrado na figura 2.1, onde número de Reynolds da partícula, definido na Eq. 2.11, é função da velocidade relativa $\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_p$, da massa específica da fase contínua ρ_0 , da viscosidade da fase contínua μ_0 e de d_α , que é o diâmetro equivalente da partícula (isto é, o diâmetro da esfera de volume igual ao da partícula).

$$Re = \frac{\rho_0 |\mathbf{u}_r| d_\alpha}{\mu_0} \quad (2.11)$$

A equação utilizada para cálculo do coeficiente de arrasto é a correlação de Schiller-Naumann [22], que é dada por

$$C_{D,\alpha} = \frac{24}{Re_\alpha} (1 + 0,15Re_\alpha^{0,687})$$

Modelagem da Força de Sustentação

Enquanto a força de arrasto é uma força que atua na direção do escoamento, a força de sustentação é a força que atua na direção normal à velocidade relativa entre o fluido e a partícula. As origens da força de sustentação são diversas, tais como a presença de um gradiente de velocidade na fase contínua, deformação e rotação da partícula (efeito

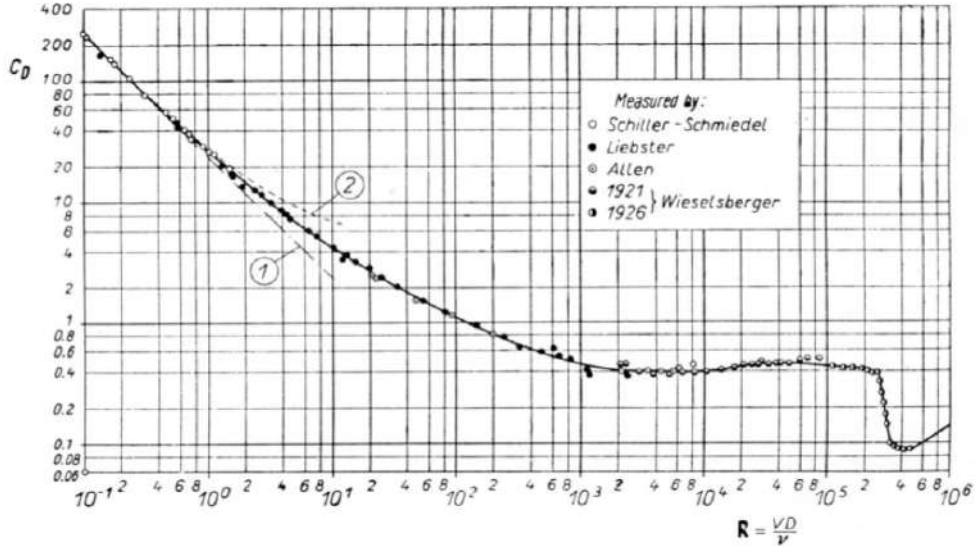


Figura 2.1: Coeficiente de arrasto para esferas rígidas em função do número de Reynolds (retirado de Schlichting [1])

Magnus) e até mesmo pelo efeito de surfactantes presentes na fase contínua. O trabalho de Auton [23] mostra que a força de sustentação é proporcional ao produto vetorial da vorticidade da fase contínua com a velocidade relativa entre as fases, propondo a Eq. 2.12.

$$\mathbf{M}_{I,\alpha}^s = -C_{L,\alpha}\rho_0\mathbf{u}_{r,\alpha} \times (\nabla \times \mathbf{u}_0) \quad (2.12)$$

O coeficiente de sustentação C_L é, assim como o coeficiente de arrasto, pode ser expresso como função do número de Reynolds. No entanto, a forte dependência do coeficiente de sustentação com outras variáveis do escoamento para baixos números de Reynolds e a persistente dúvida quanto aos fenômenos físicos envolvidos, o valor do coeficiente de sustentação é frequentemente extrapolado, sendo considerado constante e igual a 0,5.

Modelagem da Massa Virtual

A força de massa virtual é a força necessária para acelerar a quantidade de fluido da fase contínua que é deslocada durante o movimento da partícula. Dessa forma, a massa total sujeita a aceleração para a equação de conservação de momentum da partícula é igual a $(\rho_\alpha + C_{MV,\alpha}\rho_0)v_\alpha$, onde $C_{MV,\alpha}$ é o coeficiente de massa virtual, v_α é o volume da partícula da fase dispersa α . A força de massa virtual $\mathbf{M}_{I,\alpha}^{mv}$ é dada por

$$\mathbf{M}_{I,\alpha}^{mv} = C_{MV,\alpha}\rho_0r_\alpha \left(\frac{D_0\mathbf{u}_0}{Dt} - \frac{D_\alpha\mathbf{u}_\alpha}{Dt} \right) \quad (2.13)$$

O operador $\frac{D(\cdot)}{Dt}$ é a chamada derivada material, ou derivada substantiva, sendo definido por

$$\frac{D(\cdot)}{Dt} = \frac{\partial(\cdot)}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla(\cdot) \quad (2.14)$$

Tanto para o escoamento invíscido quanto para o escoamento a baixos números de Reynolds (regime de Stokes), os resultados levam ao valor de 0,5 para partículas esféricas. Este valor pode ser aproximado para muitos casos de partículas sólidas, bolhas e gotas.

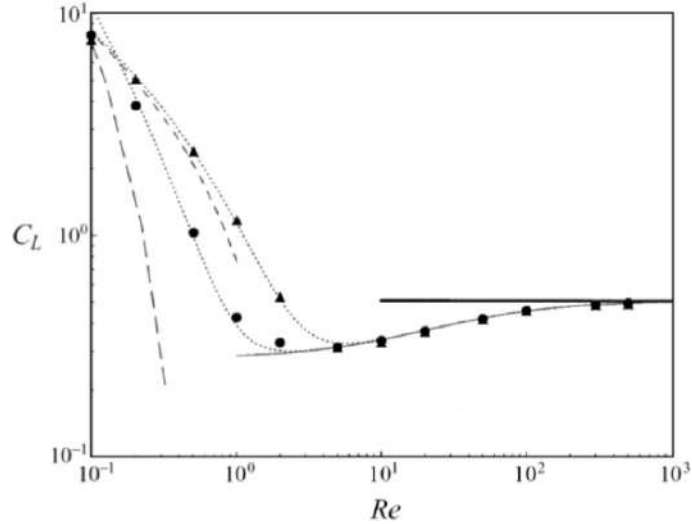


Figura 2.2: Coeficiente de sustentação sobre uma esfera lisa e rígida em função do número de Reynolds (retirado de Legendre & Magnaudet [2])

O trabalho de Drew & Lahey [24] mostra que tanto as forças de massa virtual quanto a força de sustentação ferem o princípio de indiferença ao referencial. No entanto, a soma destas forças é independente do referencial quando os coeficientes de sustentação e massa virtual são iguais, o que ocorre para escoamentos com baixa vorticidade. Para este caso particular, a Eq. 2.13 pode ser reescrita como

$$\mathbf{M}_{I,\alpha}^{mv} = \rho_0 r_\alpha C_{MV,\alpha} \left[\frac{D_0 \mathbf{u}_0}{Dt} - \frac{D_\alpha \mathbf{u}_\alpha}{Dt} - \mathbf{u}_{r,\alpha} \times (\nabla \times \mathbf{u}_0) \right] \quad (2.15)$$

Para mais informações a respeito dos princípios físicos e de modelos empíricos para estes coeficientes adimensionais, o livro de Clift *et al.* [25] apresenta uma ampla compilação de dados experimentais para a forma e velocidade terminal da partícula, o trabalho de Loth [26] mostra uma revisão bibliográfica dos modelos existentes para partículas sólidas e fluidas, e o trabalho de Rusche [3] analisa os efeitos da força de arrasto e sustentação, comparando vários modelos existentes para simular o escoamento gás-líquido com altas frações volumétricas de gás.

Modelagem da Tensão Turbulenta

Os modelos de turbulência partem da decomposição do vetor velocidade presente na equação da continuidade e do movimento em uma componente média \mathbf{u}_0 e uma componente de flutuação \mathbf{u}' , seguida da promediação de Reynolds destas equações para uma escala de tempo Δt . A partir deste procedimento surge o termo de tensão de Reynolds ($\mathbf{T}_\alpha^{eff} = -\rho_\alpha \overline{\mathbf{u}'_\alpha \mathbf{u}'_\alpha}$) na equação do movimento. Dependendo das características do escoamento, diferentes abordagens surgem para modelagem deste termo. Os modelos de turbulência são geralmente divididos em quatro categorias:

- modelos algébricos de viscosidade turbulenta,
- modelos diferenciais lineares de viscosidade turbulenta,

- modelos de tensão de Reynolds e
- modelos não-lineares de viscosidade turbulenta em conjunto com modelos algébricos de tensão de Reynolds

Os modelos baseados no conceito de viscosidade turbulenta tem origem na teoria da viscosidade de Boussinesq [27]. Neste caso considera-se que, assim como as tensões viscosas num escoamento laminar, as tensões turbulentas são proporcionais ao gradiente da velocidade média do escoamento. O coeficiente de proporcionalidade é a chamada viscosidade turbulenta μ_α^{turb} . Partindo deste princípio, o tensor tensão turbulenta é formulado por:

$$\begin{aligned}\mathbf{T}_\alpha^{turb} &= -\frac{2}{3}\rho_\alpha\kappa\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_\alpha^{turb} \\ \boldsymbol{\tau}_\alpha^{turb} &= 2\mu_\alpha^{turb}\mathbf{D}_\alpha\end{aligned}\quad (2.16)$$

onde κ é a energia cinética turbulenta e $\boldsymbol{\tau}_\alpha^{turb}$ é o tensor tensão residual de turbulência.

Apesar de tratar somente a turbulência isotrópica e não resolver a mesma perto da parede, o modelo $\kappa - \epsilon$ clássico [28] é a abordagem mais aceita e utilizada na modelagem de escoamentos multifásicos [29, 30]. Este modelo introduz duas equações de transporte, uma para cálculo da energia cinética turbulenta (κ) e outra para sua taxa de dissipação (ϵ). A equação exata para κ surge diretamente da equação de Navier-Stokes, através da multiplicação da mesma pela flutuação da velocidade e realização da promediação de Reynolds para uma dada escala de tempo. A equação para a taxa de dissipação ϵ surge de um modelo que correlaciona κ e ϵ pela viscosidade turbulenta, fazendo uso da teoria de Boussinesq [27].

A formulação utilizada do modelo $\kappa - \epsilon$ é dada pelas Eqs. 2.17 e 2.18.

$$\frac{\partial(r_0\rho_0\kappa_0)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_0\rho_0\mathbf{u}_0\kappa_0) - \nabla \cdot \left[r_0 \left(\frac{\mu_0^{eff}}{\sigma_k} \right) \nabla \kappa_0 \right] = r_0(P_0 - \rho_0\epsilon_0) + S_\kappa \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial(r_0\rho_0\epsilon_0)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_0\rho_0\mathbf{u}_0\epsilon_0) - \nabla \cdot \left[r_0 \left(\frac{\mu_0^{eff}}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon_0 \right] = r_0 \frac{\epsilon_0}{\kappa_0} (C_1 P_0 - C_2 \rho_0 \epsilon_0) + S_\epsilon \quad (2.18)$$

onde a viscosidade efetiva μ_0^{eff} é dada pela Eq. 2.19

$$\mu_0^{eff} = \mu_0 + \mu^{turb} = \mu_0 + C_\mu \rho_0 \frac{\kappa_0^2}{\epsilon_0} \quad (2.19)$$

onde as constantes C_1 , C_2 , σ_k e σ_ϵ são as mesmas utilizadas no modelo monofásico, e os termos fonte adicionais bifásicos S_κ e S_ϵ são considerados nulos.

Modelagem da Turbulência Próximo à Parede

Uma forma de modelar os perfis das variáveis do modelo de turbulência na região da camada limite é através da aplicação de condições de contorno a uma certa distância

da parede. Estas condições de contorno são obtidas através de modelos teórico-empíricos, fundamentados em análise dimensional, dados experimentais e algumas soluções analíticas obtidas de modelagens simplificadas para a camada limite turbulenta [31].

A aplicação destes submodelos é justificada pela incapacidade dos modelos de turbulência de prever as propriedades do escoamento na região próxima da parede e pelas evidências experimentais de uma "lei universal" que descreve bem o perfil de velocidades nessa região. Um modelo bastante utilizado é a lei logarítmica da parede. Para desenvolvimento desta lei, observa-se que na região bem próxima da parede, a tensão cisalhante na parede τ_w e a viscosidade são parâmetros importantes. Define-se então a velocidade de fricção u_τ como

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (2.20)$$

e a escala de comprimento viscosa, δ_ν , por

$$\delta_\nu = \frac{\nu}{u_\tau} \quad (2.21)$$

Utilizando-se estes parâmetros pode-se definir uma distância da parede adimensional, baseada nesta escala de comprimento viscosa e na distância Δy da parede

$$y^+ = \frac{\Delta y}{\delta_\nu} = \frac{u_\tau \Delta y}{\nu} \quad (2.22)$$

Diferentes regiões da camada limite são definidas baseadas no valor de y^+ . Quando $y^+ > 50$ a tensão viscosa é desprezível se comparada à tensão de Reynolds. Para $y^+ < 5$ temos a chamada subcamada viscosa, onde o tensor de Reynolds é desprezível frente à tensão viscosa. A lei logarítmica da parede é uma equação para o perfil de velocidade válida para a região com $y^+ > 30$

$$u^+ = \frac{1}{K} \ln y^+ + B \quad (2.23)$$

onde $u^+ = u/u_\tau$ é a velocidade adimensional. Os parâmetros K e B são reportados com diferentes valores na literatura, entretanto os valores variam em torno de $K = 0,41$ e $B = 5,2$, com desvios máximos em torno de 5%.

Utilizando-se argumentos de que na região com $y^+ \simeq 50$ existe equilíbrio entre produção e dissipação de turbulência, chega-se à seguinte condição de contorno para ϵ

$$\epsilon = \frac{C_\mu^{3/4} \kappa^{3/2}}{K \Delta y} \quad (2.24)$$

que é válida para a região com $y^+ > 30$.

A condição de contorno empregada para κ neste modelo é a de gradiente normal nulo.

2.2 Balanço Populacional

A modelagem de sistemas dispersos por balanço populacional possui várias aplicações na engenharia química, principalmente no projeto e análise de equipamentos de reação e separação, como biorreatores, reatores em leito fluidizado, reatores de fase dispersa, evaporadores, etc. Nestes sistemas, as partículas da fase dispersa podem sofrer diferentes tipos de interações com as outras partículas e com a fase contínua. Fenômenos como quebra, coalescência, nucleação e crescimento podem estar presentes, de forma a alterar as propriedades destas partículas, tais como tamanho, idade ou energia interna. Para uma análise correta destes equipamentos, a evolução da distribuição das partículas no tempo e no espaço deve ser avaliada através da equação de balanço populacional [8].

2.2.1 A Equação de Balanço Populacional

Em geral, a variável que se deseja calcular pela equação de balanço populacional é a função de distribuição de densidade numérica de partículas, definida aqui como $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$. Sendo assim, as partículas da fase dispersa são distribuídas em função das suas características, tais como tamanho, idade, energia, que são agrupadas em um vetor de variáveis internas (\mathbf{v}), e pela posição no espaço, que é a variável externa (\mathbf{x}) [32].

A equação de balanço populacional em sua forma mais geral é deduzida a partir da equação de Boltzmann, e representa a conservação da função de distribuição de densidade numérica de partículas $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ levando em conta a interação entre as partículas [32], sendo dada por

$$\frac{\partial f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} = -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot [\dot{\mathbf{X}}f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)] + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot [\mathbf{D}_x \cdot (\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{D}_x^T f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t))] + H(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad (2.25)$$

Na equação 2.25, $\dot{\mathbf{X}}$ representa a taxa de variação da variável externa e \mathbf{D}_x é o coeficiente de difusão anisotrópico das partículas no espaço das variáveis externas \mathbf{x} . O termo fonte $H(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ é o responsável pelos efeitos nucleação, taxa de variação das propriedades internas da partícula e as taxas de nascimento e morte por quebra e coalescência. Considerando somente os efeitos de quebra e coalescência, este termo é dado por

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = B_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) - D_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + B_b(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) - D_b(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad (2.26)$$

onde os termos $B_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ e $D_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ representam os termos relativos ao nascimento e morte de partículas por coalescência, e os termos $B_b(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ e $D_b(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ representam o nascimento e a morte de partículas por quebra, respectivamente.

A partir da função $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ podemos calcular vários parâmetros de interesse prático do sistema disperso, tais como o número total de partículas no domínio.

$$N_T(t) \doteq \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \int_{\Omega_{\mathbf{v}}} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) dV_{\mathbf{x}} dV_{\mathbf{v}} \quad (2.27)$$

E a fração volumétrica da fase dispersa.

$$r(\mathbf{x}, t) \doteq \int_{\Omega_{\mathbf{v}}} v(\mathbf{v}) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) dV_{\mathbf{v}} \quad (2.28)$$

onde $v(\mathbf{v})$ é o volume da partícula com variáveis internas \mathbf{v} e $\Omega_{\mathbf{x}}$ e $\Omega_{\mathbf{v}}$ são, respectivamente, os domínios das variáveis internas e externas. Este texto trata de uma distribuição monovariada, ou seja, que possui uma única variável interna, e a variável em questão é o próprio volume v da partícula. A derivação dos termos de nascimento e morte por quebra e coalescência para este caso são bem mais simples que para o caso geral, onde o vetor \mathbf{v} possui n dimensões. O desenvolvimento destes termos para o caso geral pode ser encontrado no livro de Ramkrishna [32]. Para o caso de uma distribuição monovariada e difusão isotrópica a Eq. 2.25 se resume a:

$$\frac{\partial f(\mathbf{x}, v, t)}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{u}f(\mathbf{x}, v, t)] - \nabla \cdot [\Gamma_D \nabla f(\mathbf{x}, v, t)] = H(\mathbf{x}, v, t) \quad (2.29)$$

onde \mathbf{u} representa o campo médio de velocidades da fase dispersa e Γ_D é o coeficiente de difusão das partículas, a qual ocorre devido às flutuações turbulentas de velocidade ou ao efeito Browniano, dependendo das condições hidrodinâmicas e da faixa de tamanho das partículas [33].

Os fenômenos de quebra e coalescência ocorrem por interação das partículas entre si e pela interação entre as partículas e a fase contínua. No entanto, antes de estudarmos estes processos do ponto de vista fenomenológico é necessária uma análise matemática destes termos.

Para o caso de uma distribuição monovariada e admitindo que a quebra e coalescência são fenômenos locais, ou seja, as funções de quebra e coalescência dependem de t e \mathbf{x} somente através das variáveis da fase contínua, os termos da Eq. 2.26 são dados por [32]

$$B_a(\mathbf{x}, v, t) = \frac{1}{2} \int_0^v f(\mathbf{x}, v - v', t) f(\mathbf{x}, v', t) a(v - v', v', \mathbf{y}) dv' \quad (2.30)$$

$$D_a(\mathbf{x}, v, t) = \int_0^\infty f(\mathbf{x}, v, t) f(\mathbf{x}, v', t) a(v, v', \mathbf{y}) dv' \quad (2.31)$$

$$B_b(\mathbf{x}, v, t) = \int_{v'}^\infty \zeta(v', \mathbf{y}) P(v|v', \mathbf{y}) b(v', \mathbf{y}) f(\mathbf{x}, v', t) dv' \quad (2.32)$$

$$D_b(\mathbf{x}, v, t) = b(v, \mathbf{y}) f(\mathbf{x}, v, t) \quad (2.33)$$

onde o vetor \mathbf{y} representa os parâmetros do escoamento da fase contínua que afetam os fenômenos de coalescência e quebra. Para os termos de coalescência, o fator $a(v, v', \mathbf{y})$ representa a taxa de coalescência local de partículas com volume v e v' . Nos termos de quebra, o fator $b(v', \mathbf{y})$ representa a frequência de quebra de uma partícula de volume v' , o termo $\zeta(v', \mathbf{y})$ é o número de partículas filhas gerada na quebra da partícula de volume v' e $P(v|v', \mathbf{y})$ representa a probabilidade condicional de uma partícula-filha de volume v ser gerada pela quebra de uma partícula-mãe de volume v' .

Quando a partícula é considerada incompressível, a função $P(v|v', \mathbf{y})$ a ser proposta deve possuir uma série de propriedades a serem respeitadas, tais como:

1. Nenhuma partícula-filha pode possuir volume maior que a partícula-mãe:

$$P(v|v', \mathbf{y}) = 0, \quad \forall v > v' \quad (2.34)$$

2. A probabilidade total de surgirem partículas filhas de volume menor ou igual a da partícula mãe é unitária:

$$\int_0^{v'} P(v|v', \mathbf{y}) dv = 1 \quad (2.35)$$

3. A massa se conserva na quebra, de onde se conclui que o somatório dos volumes de todas as partículas-filhas é igual à massa da partícula-mãe:

$$\varsigma(v', \mathbf{y}) \int_0^{v'} v P(v|v', \mathbf{y}) dv = v' \quad (2.36)$$

O desenvolvimento de modelos de quebra e coalescência nada mais é do que a proposição de formas funcionais para os termos $a(v - v', v', \mathbf{y})$, $b(v', \mathbf{y})$, $\varsigma(v', \mathbf{y})$ e $P(v|v', \mathbf{y})$ através de hipóteses físicas e/ou empíricas, e será abordado nas próximas subseções.

2.2.2 Modelos de Coalescência

Para que ocorra a coalescência entre duas partículas deve ocorrer, *a priori*, a colisão entre as mesmas. Uma vez ocorrida a colisão, estas partículas podem se unir, gerando uma nova partícula, ou simplesmente se afastarem. Esta premissa é o primeiro passo na modelagem da frequência de coalescência. Omitindo o vetor das variáveis da fase contínua \mathbf{y} , podemos escrever a frequência de coalescência na forma

$$a(v, v') = \theta(v, v') \lambda(v, v') \quad (2.37)$$

onde $\theta(v, v')$ é a chamada frequência de colisão, que determina com que frequência duas partículas de volume v e v' irão colidir. Uma vez que ocorra a colisão, características como a intensidade, ângulo de contato e as propriedades físicas das partículas decidirão se a coalescência ocorrerá ou não. Esses fatores são levados em conta através da função $\lambda(v, v')$, que é a chamada eficiência de coalescência.

Deste ponto em diante não existe consenso no desenvolvimento dos modelos de coalescência. Em um trabalho recente, Araujo [34] concluiu que os modelos de coalescência ainda não foram avaliados experimentalmente de maneira cuidadosa até então. No entanto, a revisão de Chesters [35], assim como a feita por Liao & Lucas [36] são excelentes referências, abrangendo vários mecanismos de interação devido à hidrodinâmica e à turbulência da fase contínua.

De uma forma geral, a modelagem da frequência de colisão se baseia em quatro mecanismos fundamentais:

- colisão devido à turbulência da fase contínua
- colisão devido à ação produzida por forças de campo (gravidade, campo elétrico)
- colisão devido à interação com a hidrodinâmica do escoamento (exceto turbulência)
- colisão devido às interações partícula-partícula

Modelagem da Frequência de Coalescência

O modelo de coalescência utilizado foi o sugerido por Araujo [4]. Neste texto, Araujo [4] faz uma revisão dos principais modelos de coalescência e quebra já desenvolvidos e desenvolve um modelo para a quebra e coalescência de gotas de água emulsionadas em óleo.

O modelo parte da forma generalizada da frequência de coalescência mostrada anteriormente

$$a(v, v') = \theta(v, v')\lambda(v, v') \quad (2.38)$$

Com a frequência de colisão modelada a partir de

$$\theta(v, v') = C_C S(v, v') u_r(v, v') \quad (2.39)$$

onde u_r é a velocidade característica das partículas, sendo a definição desta dependente do modelo e $S(v, v')$ é uma área característica. No modelo desenvolvido por Araujo [4], esta área característica é definida por

$$S(v, v') = \frac{\pi(d(v) + d(v'))^2}{4} \quad (2.40)$$

onde $d(v)$ é o diâmetro da partícula. A velocidade relativa u_r é definida por

$$u_r(v, v') = \frac{u_d(v) + u_d(v')}{2} \quad (2.41)$$

onde $u_d(v)$ e $u_d(v')$ são as velocidades que as partículas possuem associadas à movimentação induzida pela turbulência em gotas de tamanho na faixa sub-Kolmogorov, e é definida como

$$u_d(v) = \sqrt{\frac{\epsilon}{\nu}} d(v) \quad (2.42)$$

onde ϵ e ν são a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta e a viscosidade cinemática da fase contínua, respectivamente.

Neste modelo, o valor da eficiência de coalescência é considerado constante e seu valor fica embutido no parâmetro C_C . Como o modelo trata de partículas de forma esférica, a relação entre diâmetro e volume é direta, e o modelo final é dado por

$$a(v, v') = C_C \frac{\pi}{8} \sqrt{\frac{\epsilon}{\nu}} (d(v) + d(v'))^3 \quad (2.43)$$

$$d(v) = \left(\frac{6v}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.44)$$

que se resume ao modelo desenvolvido por Saffman & Turner [37], mas com uma constante multiplicativa diferente. O valor do parâmetro empírico ajustado por Araujo [4] é $C_C = 1,9 \times 10^{-2}$.

2.2.3 Modelos de Quebra

Os primeiros estudos sobre a quebra de partículas fluidas devido ao escoamento externo à partícula tiveram início com os experimentos de Taylor [38]. Posteriormente, o estudo de Hinze [39] propôs formas de relacionar a ocorrência da quebra com as tensões viscosas e dinâmicas sobre a partícula. Seu estudo tentou relacionar a deformação da partícula como uma razão entre a magnitude da tensão cisalhante τ proveniente do campo de escoamento e tensão σ/d , onde σ é a tensão superficial e d é o diâmetro da partícula. Em escoamentos onde as forças viscosas dominam, τ pode ser relacionado por $\tau = \mu D'$, onde D' é a taxa de deformação. Podemos definir então um número adimensional, o número capilar, por:

$$Ca = \frac{\mu D' d}{\sigma} \quad (2.45)$$

Em escoamentos dominados pelas forças inerciais, $\tau = \rho U^2$ representa as forças dinâmicas no escoamento, onde U representa uma velocidade característica do escoamento externo à partícula. Pode-se definir então o número de Weber por:

$$We = \frac{\rho U^2 d}{\sigma} \quad (2.46)$$

Espera-se que ocorra quebra da partícula quando o número adimensional exceder um dado limite, que é função de características do escoamento, das razões entre densidades e viscosidades das fases contínuas e dispersas e de um número adimensional conhecido como número de Ohnesorge,

$$Oh = \frac{\mu_d}{\sqrt{\rho_d \sigma d}} \quad (2.47)$$

que é uma razão entre as forças viscosas e de tensão superficial na partícula fluida.

A teoria da quebra de partículas devido à interação com a turbulência da fase contínua foi desenvolvida independentemente por Kolmogorov [40] e Hinze [39]. De acordo com as hipóteses consideradas nestas, somente as flutuações de velocidade de escala semelhante ao diâmetro da partícula são capazes de causar grandes deformações. Sendo assim, o número de Weber considerado é dado por $We = \overline{\rho u^2(d)} d / \sigma$, onde $\overline{u^2(d)}$ é o valor médio do quadrado das flutuações da magnitude da velocidade entre dois pontos afastados a uma distância d [4].

Modelagem da Frequência de Quebra e da Distribuição de Partículas Filhas

A modelagem recomendada por Araujo [4] baseou-se no modelo de Cristini [41], propondo a seguinte equação para a frequência de quebra:

$$b(d) = 63,927 C_b \frac{1}{We_{crit}^{11/5}} \sqrt{\epsilon/\nu} Ca^{2,2} \left(\frac{d}{2\eta} \right)^{4/5} \quad (2.48)$$

quando $Ca > Ca_{crit}$.

O número capilar crítico, Ca_{crit} , é definido como

$$Ca_{crit} = 1,65 \times 10^{-4} St_k Re_{max}^{-3/20} \quad (2.49)$$

onde St_k é o número de Stokes da partícula, definido pela razão entre o tempo de residência e escala de tempo de Kolmogorov:

$$St_k = \frac{t_{res}}{\tau_\eta} \quad (2.50)$$

onde $\tau_\eta = \sqrt{\nu/\epsilon}$, ϵ é a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta e ν é a viscosidade cinemática do fluido. O tempo de residência t_{res} deve ser definido de forma a representar o tempo de residência do fluido na região do domínio onde a quebra de fato ocorre. O número de Reynolds utilizado, Re_{max} é definido por:

$$Re_{max} = \frac{Q}{L_a \nu} \quad (2.51)$$

onde L_a é um comprimento característico da geometria do escoamento. O número capilar, Ca , é definido como

$$Ca = \frac{\mu \sqrt{\epsilon/\nu d}}{2\sigma} \quad (2.52)$$

Uma das formas de extensão deste modelo para simulações CFD seria através da consideração do tempo de residência t_{res} como uma variável de campo, dependente para cada volume da malha. Outra forma de extensão seria através da utilização de um valor constante, representativo para todo o volume de controle, semelhante ao que foi utilizado por Araujo [4], e pela simplicidade de implementação foi a alternativa escolhida.

O número de Weber crítico We_{crit} foi definido como sendo igual ao de bolhas de ar em água ($We_{crit} = 6$). Embora isso fisicamente não faça sentido, o erro acaba sendo corrigido na estimação da constante C_b . Embora fosse mais conveniente criar uma única constante, foi escolhido manter a Eq. 2.48 na mesma forma que foi reportada no texto de Araujo [4]. O valor obtido por Araujo [4] na estimação de parâmetros foi $C_{b1} = 1,07 \times 10^{-2}$.

A modelagem para a distribuição de tamanho de partículas filhas considerada parte do princípio que todas as partículas filhas possuem o mesmo volume. Assim, a probabilidade condicional de uma partícula de volume v gerar uma partícula filha de volume v' , $P(v|v')$, é expressa por

$$P(v|v') = \delta \left(v - \frac{v'}{\zeta} \right) \quad (2.53)$$

onde δ é a função delta de Dirac e ζ é o número médio de partículas filhas geradas a cada quebra. O valor estimado por Araujo [4] para este parâmetro é 31,2.

2.2.4 Modelagem da Difusividade das Partículas

A modelagem do coeficiente de difusão das partículas é baseada na teoria das partículas de Tchen [42], desenvolvida posteriormente por Hinze [43] e aplicada por Baldyga & Orciuch [33] em problemas de precipitação de partículas. O coeficiente de difusividade pode ser dividido em duas parcelas

$$\Gamma_D = \Gamma_t + \Gamma_B \quad (2.54)$$

Define-se então o número de Schimidt Sc^t do processo de difusão turbulenta por

$$Sc^t = \frac{\nu_t}{\Gamma_t} \quad (2.55)$$

onde a viscosidade cinemática turbulenta, ν_t , é calculada por

$$\nu_t = \frac{C_\mu \kappa^2}{\epsilon} \quad (2.56)$$

onde C_μ é um parâmetro de modelagem da turbulência, onde geralmente é assumido o valor de 0,09. Assumindo que a difusividade das partículas é $Sc^t = 1$ obtêm-se

$$\Gamma_D = 0,09 \frac{\kappa^2}{\epsilon} \quad (2.57)$$

Capítulo 3

Metodologia Numérica

3.1 Metodologia Numérica do OpenFOAM

O OpenFOAM é um pacote CFD livre e de código aberto, distribuído pela OpenFOAM *Foundation*. O seu campo de aplicação abrange várias áreas da ciência e da engenharia, sendo utilizado tanto por organizações comerciais quanto pelo meio acadêmico. O pacote constitui de solvers e utilitários para os mais variados problemas, como escoamentos complexos envolvendo reações químicas, turbulência, transferência de calor, dinâmica dos sólidos e eletromagnetismo. Inclui ferramentas para construção de malhas, além de pré e pós-processamento. Por ser um pacote de código aberto, o OpenFOAM oferece total liberdade para customização e extensão das suas funções. A estrutura de programação modular permite que cada biblioteca (métodos numéricos, malha, modelos físicos, etc.) seja compilada separadamente.

O projeto OpenFOAM nasceu com a preocupação dos alunos do Imperial College, Londres, Henry Weller e Hrvoje Jasak em desenvolver um código CFD estruturado de forma que fosse geral o suficiente e que pudesse ser facilmente utilizado. Essa facilidade poderia ser obtida se a forma como as funções fossem utilizadas pelo usuário fosse a mais próxima possível da notação matemática convencional. Isso foi possível através de técnicas de orientação a objeto (possuindo recursos de abstração, herança e polimorfismo), que tornaram a linguagem de programação C++ a mais indicada para o desenvolvimento deste pacote [44].

3.1.1 O Método dos Volumes Finitos

O OpenFOAM possui uma série de bibliotecas implementadas para a solução de sistemas de equações diferenciais parciais e o entendimento das metodologias numéricas utilizadas é fundamental para a extensão dos códigos.

O método de discretização espacial e temporal utilizado pelo OpenFOAM é o método

dos volumes finitos. Este método não deve ser confundido com o método das diferenças finitas. Embora muitas vezes as equações discretizadas obtidas por ambos os métodos sejam iguais, a base da formulação destes dois métodos é completamente diferente. Enquanto o método das diferenças finitas tem natureza puramente matemática, sendo sua formulação obtida a partir da aproximação por derivadas usando séries de Taylor, o método dos volumes finitos possui interpretação física [45].

No método dos volumes finitos, a etapa de discretização espacial é a responsável pela construção da chamada malha computacional. Nesta etapa, o espaço é subdividido em volumes de controle contíguos. A discretização temporal é aplicada a problemas transientes, partindo de uma condição inicial, e é utilizada para subdividir o domínio espacial em intervalos finitos de tempo [46, 47, 48], conforme mostrado na Fig. 3.1.

Cada um destes volume de controle é delimitado por um conjunto de faces, e cada face é delimitada por um conjunto de arestas. As faces são responsáveis pela conexão entre dois volumes de controle adjacentes ou entre um volume de controle e o contorno do domínio.

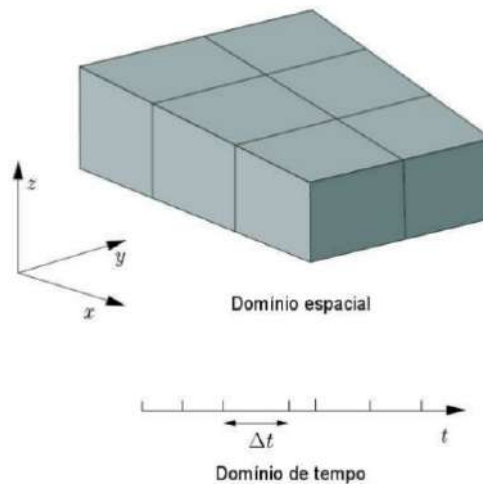


Figura 3.1: Discretização dos domínios espacial e temporal (retirado de Rusche [3])

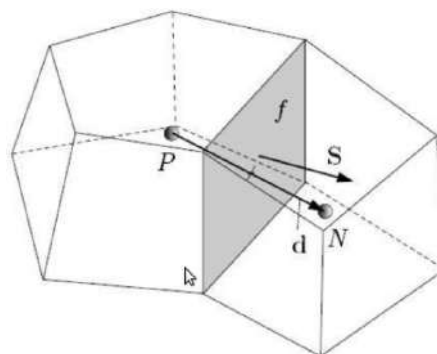


Figura 3.2: Parâmetros da discretização por volumes finitos (retirado de Rusche [3]).

A Fig. 3.2 mostra dois volumes de controle interconectados em conjunto com as variáveis de interesse para aplicação do método. O vetor S é normal à face f , e possui magnitude igual à área da mesma. Este vetor aponta do volume analisado P para o vizinho N . O

vetor normal à face é definido como $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{S}}{|\mathbf{S}|}$, enquanto a distância \mathbf{d} entre o centro dos volumes é definida por $\mathbf{d} = \mathbf{x}_N - \mathbf{x}_P$. Uma malha é dita ortogonal quando \mathbf{d} é paralelo a \mathbf{S} para cada face da malha.

O objetivo do processo de discretização por volumes finitos é a transformação das equações diferenciais parciais de variáveis contínuas em um sistema de equações algébricas. A equação de transporte genérica para uma variável φ é dada por:

$$\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\varphi) = \nabla \cdot (\Gamma_\varphi \nabla \varphi) + S_\varphi(\varphi) \quad (3.1)$$

onde ρ é a massa específica, Γ_φ é a difusividade da grandeza conservada, $S_\varphi(\varphi)$ é o termo fonte da equação de transporte. A discretização por volumes finitos desta equação é obtida integrando-a para um dado volume V_p e um intervalo de tempo Δt [49]

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_V \frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} dV + \int_V \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\varphi) dV \right] dt = \\ \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_V \nabla \cdot (\Gamma_\varphi \nabla \varphi) dV + \int_V S_\varphi(\varphi) dV \right] dt \end{aligned} \quad (3.2)$$

A discretização dos termos da equação de transporte pode ser feita de forma explícita ou implícita. Rusche [3] *apud* Weller [50] apresentaram uma notação útil na representação do processo de discretização dos operadores pelo método dos volumes finitos. Dado um operador Ω , a discretização do mesmo é representada por $[\Omega[\varphi]]$, onde a variável entre colchetes possui tratamento implícito e deve possuir o mesmo valor em toda a equação.

O próximo passo é a aplicação do Teorema de Gauss na Eq.3.2, convertendo as integrais em volume das derivadas no espaço em integrais na superfície S dos volumes de controle.

$$\int_V (\nabla \cdot \varphi) dV = \int_{\partial V} d\mathbf{S} \cdot \varphi \quad (3.3)$$

Desta forma, os termos da Eq. 3.2 são aproximados pelos valores nas faces dos volumes de controle após a conversão das integrais de volume em integrais de superfície pelo teorema de Gauss. O termo convectivo $\nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\varphi)$, por exemplo, é aproximado por

$$\begin{aligned} \int_V \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\varphi) dV = \int_{\partial V} d\mathbf{S} \cdot (\rho\mathbf{u}\varphi) \approx \sum_f \mathbf{S} \cdot (\rho\mathbf{u})_f \varphi_{f(F,M,\gamma)} \\ = \sum_f F \varphi_{f(F,M,\gamma)} \end{aligned} \quad (3.4)$$

onde F é o fluxo mássico através da face, dado por $F = \mathbf{S} \cdot (\rho\mathbf{u})_f$. O termo $\varphi_{f(F,M,\gamma)}$ representa o valor da propriedade na face, sendo obtido através de uma função de interpolação M pré-estabelecida. As funções de interpolação utilizam informações do volume de controle e dos seus vizinhos, além de requerer os fluxos F sobre a face f e um conjunto de parâmetros γ para efetuar o cálculo. Entre os métodos de interpolação mais utilizados em CFD temos o de interpolação linear (diferenças centrais), *upwind*, QUICK, MUSCL, TVD (*Total Variation Diminishing*), NVD (*Normalised Variable Diagram*).

O termo difusivo também é aproximado através do teorema de Gauss, dando [49]

$$\int_V \nabla \cdot (\Gamma_\varphi \nabla \varphi) dV = \int_{\partial V} d\mathbf{S} \cdot (\Gamma_\varphi \nabla \varphi) \approx \sum_f \Gamma_{\varphi,f} (\mathbf{S} \cdot \nabla_f \varphi) \quad (3.5)$$

Se Γ_φ for considerado uma variável escalar. Em malhas ortogonais, o termo $(\mathbf{S} \cdot \nabla_f \varphi)$ é dado por

$$\mathbf{S} \cdot \nabla_f \varphi = \frac{\varphi_N - \varphi_P}{|\mathbf{d}|} |\mathbf{S}| \quad (3.6)$$

Alternativamente, o gradiente pode ser discretizado após aplicação do teorema de Gauss por

$$\int_V \nabla \varphi dV = \int_{\partial S} d\mathbf{S} \varphi \approx \sum_f \mathbf{S} \varphi_f \quad (3.7)$$

com o valor de φ_f obtido por funções de interpolação.

O termo fonte $S_\varphi(\varphi)$ é uma função genérica de φ , sendo linearizando antes de ser discretizado por

$$S_\varphi(\varphi) = S_I \varphi + S_E \quad (3.8)$$

sendo que S_I e S_E podem ser dependentes de φ . Após integrarmos este termo no volume de controle obtemos

$$\int_V S_\varphi(\varphi) dV = S_I \varphi_P V_P + S_E V_P \quad (3.9)$$

Assumindo que os volumes de controle são invariantes no tempo, a forma semi-discretizada da equação de transporte, Eq. 3.2, pode ser escrita como

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} \Big|_P V_P + \sum_f F \varphi_{f(F,M,\gamma)} \right] dt = \int_t^{t+\Delta t} \left[\sum_f \Gamma_f (\mathbf{S} \cdot \nabla_f \varphi) + (S_I \varphi_P + S_E) V_P \right] dt \quad (3.10)$$

A discretização temporal é feita assumindo-se uma variação linear de $\varphi(\mathbf{t})$ com o tempo. Desta forma, a integral e a derivada no tempo podem ser aproximadas por

$$\left(\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} \right)_P = \frac{\rho_P^n \varphi_P^n - \rho_P^0 \varphi_P^0}{\Delta t} \quad (3.11)$$

$$\int_t^{t+\Delta t} \varphi(t) dt = \frac{1}{2} (\varphi^0 + \varphi^n) \Delta t \quad (3.12)$$

que corresponde à formulação utilizando o método de segunda ordem de Crank-Nicholson. Nesta discretização os termos $\varphi^n = \varphi(t + \Delta t)$ representa o valor de φ a ser calculado e $\varphi^0 = \varphi(t)$ é o valor de φ para o tempo anterior. Podemos reescrever a Eq. 3.10 como

$$\begin{aligned} \rho_P \frac{\varphi_P^n - \varphi_P^0}{\Delta t} V_P &+ \frac{1}{2} \sum_f F^n \varphi_{f(F,M,\gamma)}^n - \frac{1}{2} \sum_f \Gamma_{\varphi,f}^n \mathbf{S} \cdot (\nabla_f \varphi)^n \\ &+ \frac{1}{2} \sum_f F^0 \varphi_{f(F,M,\gamma)}^0 - \frac{1}{2} \sum_f \Gamma_{\varphi,f}^0 \mathbf{S} \cdot (\nabla_f \varphi)^0 \\ &= \frac{1}{2} (S_E^n + S_E^0) V_P + \frac{1}{2} (S_I^n \varphi_P^n + S_I^0 \varphi_P^0) V_P \end{aligned} \quad (3.13)$$

Esta formulação requer os valores de φ e $\nabla\varphi$ do volume de controle e nas suas faces para dois instantes de tempo: o a ser resolvido e o anterior.

Utilizando a notação de Weller [50], a discretização implícita em φ da equação 3.1, é representada por [51]

$$\left[\frac{\partial(\rho[\varphi])}{\partial t} \right] + [\nabla \cdot (F[\varphi]_{f(F,M,\gamma)})] - [\nabla \cdot (\Gamma_\varphi \nabla[\varphi])] - [S_I[\varphi]] - S_E = 0 \quad (3.14)$$

onde $[S_I[\varphi]]$ representa um termo fonte discretizado implicitamente e S_E um termo fonte discretizado explicitamente.

3.1.2 Sistema Algébrico de Equações

O objetivo da equação anterior é calcular o novo valor de φ_P . Como φ_f e $\nabla_f\varphi$ dependem do valor de φ nos volumes vizinhos φ_N , podemos escrever a Eq. 3.13 na forma compacta

$$a_P\varphi_P^n + \sum_N a_N\varphi_N^n = b_P \quad (3.15)$$

Realizando o procedimento descrito acima para todos os volumes de controle da malha obtemos um sistema algébrico de equações lineares na forma

$$\mathcal{A}\varphi = b \quad (3.16)$$

sendo que a forma da matriz \mathcal{A} pode variar dependendo da dimensão do problema, dos métodos de discretização e de interpolação empregados e da forma como os volumes de controle estão distribuídos na malha. Os métodos numéricos empregados na solução de sistemas lineares são divididos em dois grupos. O primeiro grupo, chamado de métodos diretos, tem como filosofia a solução exata (exceto pelos erros de truncamento) a partir de um número finito de operações com a matriz. Fazem parte do segundo grupo os chamados métodos iterativos, que obtêm a solução aproximada para o sistema utilizando um procedimento iterativo a partir de uma solução aproximada inicial. A principal vantagem dos métodos iterativos é que para problemas de grande porte (grande número de equações lineares, tal como é encontrado em problemas CFD) os métodos diretos são excessivamente lentos, já que o custo computacional aumenta exponencialmente com a dimensão N do sistema. O elevado número de operações, além de levar a um tempo computacional proibitivo, degrada a acurácia numérica da solução. Os métodos mais comuns para aplicações em CFD são os métodos iterativos como Gauss-Seidel, o Gradiente Conjugado (e suas variantes) e o *Algebraic Multigrid* [52]. Todos estes métodos estão implementados no OpenFOAM.

3.2 Métodos Numéricos para a Solução da EBP

A equação de balanço populacional é uma equação integro-diferencial com dependência temporal e espacial e poucas soluções analíticas são conhecidas [51]. Na maioria dos

problemas práticos a solução analítica não é viável, tornando necessário a utilização de metodologias numéricas.

Os métodos analíticos mais comuns são os métodos de aproximações sucessivas, o método das características, o método das gerações sucessivas e o método da transformada de Laplace. Embora possuam aplicação limitada a problemas simples, as soluções obtidas são úteis no desenvolvimento e validação das metodologias numéricas [53, 54].

Entre os métodos numéricos mais comuns estão os métodos estocásticos (Monte Carlo), o método das classes, o método dos resíduos ponderados, o método dos momentos e os métodos híbridos. Entre os métodos mais relevantes e promissores para o acoplamento BP-CFD estão o método das classes, o QMoM, o DQMoM e o PPDC [51]. Os métodos que serão reportados neste trabalho serão somente o método das classes e o DQMoM, por terem sido utilizados de fato no desenvolvimento do trabalho, e o MOM, pela sua importância na gênese do DQMoM.

3.2.1 Método das Classes

O método das classes (MoC - *Method of Classes*) parte da discretização da distribuição numérica de partículas em um número finito de classes, onde dentro de cada classe o valor da variável interna é constante. Este processo transforma a equação integro-diferencial em um sistema de equações diferenciais, cuja solução é mais bem estabelecida [55].

Neste método, os valores da variável interna são atribuídos aos pivôs ξ_i de cada classe. Assim, ao se discretizar a distribuição em n classes, N_i é o momento seccional (ou restrito à classe) de ordem zero da distribuição, sendo igual ao número total de partículas com propriedade entre v_i e v_{i+1} , de forma que

$$N_i = \int_{v_i}^{v_{i+1}} f(\mathbf{x}, v, t) dv \quad (3.17)$$

Os limites de cada classe são calculados pelos pivôs das duas classes adjacentes por

$$v_i = \frac{\xi_{i-1} + \xi_i}{2}, \quad i = 1, \dots, n+1 \quad (3.18)$$

Desprezando os termos convectivos e difusivos da equação de balanço populacional à Eq. 2.25 e aplicando o método das classes reportado por Kumar & Ramkrishna [55], obtemos o seguinte sistema de equações diferenciais

$$\begin{aligned} \frac{dN_i}{dt} = & \sum_{\substack{j,k=1 \\ \xi_{i-1} \leq (\xi_k + \xi_j) \leq \xi_{i+1}}}^{k \geq j} \left[1 - \frac{1}{2} \delta'_{j,k} \right] \Psi_{kji} a(\xi_k, \xi_j) N_k N_j \\ & - N_i \sum_{k=1}^n a(\xi_k, \xi_i) N_k + \sum_{k=i}^n \varsigma(\xi_k) \psi_{i,k} b(\xi_k) N_k - b(\xi_i) N_i \end{aligned} \quad (3.19)$$

onde,

$$\Psi_{kji} = \begin{cases} \frac{\xi_{i+1} - (\xi_j + \xi_k)}{\xi_{i+1} - \xi_i}, & \xi_i \leq (\xi_j + \xi_k) \leq \xi_{i+1} \\ \frac{(\xi_j + \xi_k) - \xi_{i-1}}{\xi_i - \xi_{i-1}}, & \xi_{i-1} \leq (\xi_j + \xi_k) \leq \xi_i \end{cases} \quad (3.20)$$

e

$$\psi_{i,k} = \int_{\xi_i}^{\xi_{i+1}} \frac{\xi_{i+1} - v}{\xi_{i+1} - \xi_i} P(v|\xi_k) dv + \int_{\xi_{i-1}}^{\xi_i} \frac{v - \xi_{i-1}}{\xi_i - \xi_{i-1}} P(v|\xi_k) dv \quad (3.21)$$

onde $\delta'_{j,k}$ é o delta de Kronecker. O principal problema deste método é que para grandes modificações na distribuição de tamanhos é necessária a discretização em um número muito grande de classes. Daí surgem problemas de acurácia na solução numérica, já que quanto maior o número de classes menor é a quantidade de partículas em cada classe.

3.2.2 MoM e DQMoM

O método dos momentos (*Method of Moments* - MoM) e seus derivados fazem uso dos momentos da distribuição a fim de se acompanhar a evolução das propriedades da população. Nestes métodos, o operador momento é aplicado à equação de balanço populacional a fim de se obter um sistema de equações para os momentos de ordem mais baixa que, de uma forma geral, são suficientes para a estimativa das propriedades do sistema disperso. O momento de ordem k de uma dada distribuição é definido como

$$\mu_k = \int_{-\infty}^{+\infty} v^k f(\mathbf{x}, v, t) dv \quad (3.22)$$

Dependendo da forma com que a distribuição é descrita, estes momentos possuem interpretação física. Para a distribuição da densidade numérica de partículas utilizando o volume da partícula v como variável interna, o momento de ordem 0 ($k = 0$) representa a densidade numérica total da população (número total de partículas por unidade de volume), e o momento de primeira ordem ($k = 1$) é a conservação das variáveis internas da população, neste caso, a fração volumétrica. O momento fracional $k = \frac{1}{3}$ é igual ao diâmetro numérico médio e o momento $k = \frac{2}{3}$ é igual a área superficial média, que são parâmetros de grande relevância no estudo de escoamentos multifásicos ??.

Por ser uma metodologia que acompanha os momentos de ordem mais baixa em vez da própria distribuição, surgem alguns problemas de fechamento. Com exceção de casos particulares, as equações obtidas que descrevem a evolução do momento μ_k envolve os momentos de ordem superior μ_{k+1} , o que deixa o problema aberto.

O método DQMoM (*Direct Quadrature Method of Moments*) faz parte de uma família de métodos híbridos que surgiram a partir do MoM. Partindo do MoM, McGraw [56] desenvolveu o QMoM (*Quadrature Method of Moments*), onde a função distribuição das partículas é aproximada por uma quadratura Gaussiana. Com isso, os problemas originais de fechamento do MoM foram resolvidos. Neste método, os pesos e abscissas da distribuição são calculados a partir dos momentos de baixa ordem da distribuição. A evolução da distribuição com o tempo faz com que os valores dos pesos e abscissas sejam atualizados constantemente. Estes métodos são chamados métodos híbridos por possuírem características tanto do método das classes quanto do método dos momentos.

Na aplicação do DQMoM a distribuição é representada por uma soma de funções delta de Dirac

$$f(\mathbf{x}, v) \approx \sum_{i=1}^n w_i \delta(v - \xi_i) \quad (3.23)$$

Aplicando esta aproximação por quadratura na integral da Eq. 3.22, obtemos

$$\mu_k = \int_0^{+\infty} v^k f(\mathbf{x}, v, t) dv = \sum_{i=1}^n \xi_i^k w_i \quad (3.24)$$

onde n é o número de pontos de quadratura utilizado para caracterizar a distribuição. O método DQMoM consiste em aplicar a aproximação acima na equação de balanço populacional [57], seguida da aplicação do operador momento, definido por $\int_0^\infty v^k(\cdot) dv$, resultando em equações de transporte para os pesos e abscissas da distribuição

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_i w_i) - \nabla \cdot (\Gamma_D \nabla w_i) = \theta_i, \quad i = 0, \dots, n \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial \xi_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_i \xi_i) - \xi_i \cdot \nabla \mathbf{u}_i - \nabla \cdot (\Gamma_D \xi_i) - \frac{2\Gamma}{w_i} \nabla \xi_i \cdot \nabla w_i = \varrho_i, \quad i = 0, \dots, n \quad (3.26)$$

E no sistema linear

$$\sum_{i=1}^n \xi_i^k \theta_i + k \sum_{i=1}^n w_i \xi_i^{k-1} \varrho_i = k(k-1) \Gamma_D \sum_{i=1}^n w_i \xi_i^{k-2} \nabla \xi_i \cdot \nabla \xi_i + \bar{H}_k^{(n)}, \quad k = 0, \dots, 2n-1 \quad (3.27)$$

A solução da Eqs. 3.25, 3.26 e 3.27 é fortemente acoplada, já que os termos fonte das Eqs. 3.25 e 3.26 dependem da solução do sistema linear para cada ponto do domínio espacial.

O termo $H_k^{(n)}$ na Eq. 3.27 é o momento de ordem k do termo fonte de quebra e coalescência, representado na Eq. 2.26, sendo dado por

$$\begin{aligned} \bar{H}_k^{(n)} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [(\xi_i + \xi_j)^k - \xi_i^k - \xi_j^k] a(\xi_i, \xi_j) w_i w_j \\ &+ \sum_{i=1}^n b(\xi_i) w_i [\vartheta(\xi_i) \pi_k(\xi_i) - \xi_i^k] \end{aligned} \quad (3.28)$$

onde o termo $\pi_k(\xi_i)$ é definido como:

$$\pi_k(\xi_i) = \int_0^{\xi_i} v^k P(v|\xi_i) dv \quad (3.29)$$

3.3 Detalhamento do Solver multiPhasePbeFoam

O *solver* utilizado para solução da equação de balanço populacional acoplada à formulação Euleriana multi-fluido foi o desenvolvido por Silva [51] em sua tese de doutorado. No desenvolvimento deste trabalho foram feitas algumas alterações no código fonte original, como a atualização do mesmo para a versão 1.6 do OpenFOAM-ext e a implementação dos modelos de quebra e coalescência. Outra alteração foi a implementação do termo difusivo na equação de balanço populacional, realizada por Favero [58]. O objetivo desta seção é mostrar a modelagem efetivamente utilizada na solução do problema acoplado, descrevendo as metodologias utilizadas para solução dos sistemas de equações, chegando enfim ao algoritmo utilizado.

3.3.1 Equação de Conservação Multifásica

A modelagem utilizada é a mesma descrita por Rusche [3] e é obtida através da divisão da equação da quantidade de movimento multifásica (Eq. 2.4) pela massa específica ρ_α e pela fração volumétrica r_α obtendo

$$\frac{\partial \mathbf{u}_\alpha}{\partial t} + \mathbf{u}_\alpha \cdot \nabla \mathbf{u}_\alpha - \frac{1}{\rho_\alpha} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_\alpha^{eff} - \frac{\nabla r_\alpha}{\rho_\alpha r_\alpha} \cdot \boldsymbol{\tau}_\alpha^{eff} = -\frac{1}{\rho_\alpha} \nabla p + \frac{\hat{\mathbf{M}}_{I,\alpha}}{r_\alpha \rho_\alpha} + \mathbf{g} \quad (3.30)$$

Substituindo $\boldsymbol{\tau}_\alpha^{eff} = \boldsymbol{\tau}_\alpha^{lam} + \boldsymbol{\tau}_\alpha^{turb}$ e as definições contidas nas Eqs. 2.5 e 2.16 obtemos

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \mathbf{u}_\alpha}{\partial t} + \mathbf{u}_\alpha \cdot \nabla \mathbf{u}_\alpha \\ & - \frac{1}{\rho_\alpha r_\alpha} [\nabla \cdot (\mu_\alpha^{eff} r_\alpha \nabla \mathbf{u}_\alpha)] - \frac{1}{\rho_\alpha} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_\alpha^{effC} - \frac{\nabla r_\alpha}{\rho_\alpha r_\alpha} \cdot \boldsymbol{\tau}_\alpha^{effC} \\ & = -\frac{\nabla p}{\rho_\alpha} + \frac{\hat{\mathbf{M}}_{I,\alpha}}{r_\alpha \rho_\alpha} + \mathbf{g} \end{aligned} \quad (3.31)$$

onde a correção do tensor de Reynolds é dada por

$$\boldsymbol{\tau}_\alpha^{effC} = \mu_\alpha^{eff} (\nabla \mathbf{u}_\alpha)^T - \frac{2}{3} \mu_\alpha (\nabla \cdot \mathbf{u}_\alpha) \mathbf{I} - \frac{2}{3} \kappa_\alpha \mathbf{I} \quad (3.32)$$

O algoritmo proposto para solução parte da discretização do lado esquerdo desta equação. Neste caso, os termos contendo \mathbf{u}_α são discretizados implicitamente e o restante de forma explícita. Utilizando a notação utilizada para discretização por volumes finitos, o lado esquerdo discretizado da Eq. 3.31 é escrito como

$$\begin{aligned} \Upsilon^\alpha &= \left[\frac{\partial \mathbf{u}_\alpha}{\partial t} \right] + [\nabla \cdot (\phi_\alpha [\mathbf{u}_\alpha])] - [(\nabla \cdot \phi_\alpha) [\mathbf{u}_\alpha]] \\ &- \left[\nabla \cdot \left(\nu_{\alpha f}^{eff} \frac{\nabla_f^\perp r_\alpha}{r_{\alpha f} + \delta} \right) \right] + \left[\nu_{\alpha f}^{eff} \frac{\nabla_f^\perp r_\alpha}{r_{\alpha f} + \delta} \right] \\ &- \left[\nu_{\alpha f}^{eff} \nabla^2([\mathbf{u}_\alpha]) \right] + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_\alpha^{effC} + \frac{\nabla r_\alpha}{\langle \bar{r}_\alpha \rangle + \delta} \cdot \boldsymbol{\tau}_\alpha^{effC} \end{aligned} \quad (3.33)$$

nesta equação, $\phi_\alpha = \mathbf{S} \cdot (\mathbf{u}_\alpha)_f$ é o fluxo volumétrico da fase α e o subscrito f simboliza a interpolação da variável para a face do volume de controle, $\langle \bar{r}_\alpha \rangle$ representa o valor médio na área da fração volumétrica nas faces dos volumes de controle e δ é um número muito pequeno ($0 < \delta \ll 1$) usado para evitar problemas numéricos quando a fração volumétrica r_α tende a zero.

Reescrevendo a Eq. 3.31 na forma semi-discretizada obtém-se:

$$\Upsilon_\alpha = -\frac{\nabla p}{\rho_\alpha} + \frac{\boldsymbol{\Omega}_\alpha}{r_\alpha \rho_\alpha} + \mathbf{g} \quad (3.34)$$

Neste caso, o termo $\boldsymbol{\Omega}_\alpha$ representa a discretização dos termos de interação entre as fases. Considerando somente a força de arrasto, este termo pode ser escrito para as $\alpha = 1, \dots, n$ fases dispersas como:

$$\boldsymbol{\Omega}_\alpha = [r_{\alpha f} K_{\alpha f} (\mathbf{u}_0 - [\mathbf{u}_\alpha])] \quad (3.35)$$

onde

$$K_\alpha = \frac{1}{2}\rho_0 A_\alpha C_{D,\alpha} |\mathbf{u}_{r,\alpha}| \quad (3.36)$$

e o subescrito f representa o valor da variável interpolado na face. De maneira similar, este termo pode ser escrito para a fase contínua como

$$\mathbf{\Omega}_0 = - \sum_{\alpha=1}^n [r_{\alpha f} K_{\alpha f} ([\mathbf{u}_0] - \mathbf{u}_\alpha)] \quad (3.37)$$

Substituindo estes termos na Eq. 3.34 obtemos

$$\mathbf{\Upsilon}_\alpha^c = -\frac{\nabla p}{\rho_\alpha} + \frac{K_{\alpha f}}{\rho_\alpha} \mathbf{u}_0 + \mathbf{g} \quad (3.38)$$

$$\mathbf{\Upsilon}_0^c = -\frac{\nabla p}{\rho_0} + \frac{1}{r_0 \rho_0} \sum_{\alpha=1}^n r_{\alpha f} K_{\alpha f} \mathbf{u}_\alpha + \mathbf{g} \quad (3.39)$$

Estas equação não são conservativas em relação à massa. A conservação de massa é garantida através da correção dos perfis de velocidade utilizando-se um campo de pressão obtido de forma conservativa (ou seja, com uma equação derivada da equação da continuidade). O desenvolvimento desta equação de correção é visto logo abaixo.

3.3.2 Equação de Correção do Momentum

A equação da pressão é obtida a partir da forma semi-discretizada da equação da conservação da quantidade de movimento multifásica (Eq. 3.38). O operador $()_H$ representa a solução aproximada do sistema linear, obtida das equações discretizadas e inclui apenas os termos não-diagonais da matriz.

$$(\mathbf{A}_\alpha)_D \mathbf{u}_\alpha = (\mathbf{A}_\alpha)_H - \frac{\nabla p}{\rho_\alpha} + \frac{K_\alpha}{\rho_\alpha} \mathbf{u}_0 + \mathbf{g} \quad (3.40)$$

onde \mathbf{A}_α representa o sistema linear de equações que surge da discretização e o operador $()_D$ representa os coeficientes da diagonal da matriz. A Eq. 3.40 é rearranjada para dar origem à equação de correção do *momentum* para as fases dispersas e contínua

$$\mathbf{u}_\alpha = \frac{(\mathbf{A}_\alpha)_H}{(\mathbf{A}_\alpha)_D} - \frac{\nabla p}{\rho_\alpha (\mathbf{A}_\alpha)_D} + \frac{K_\alpha}{\rho_\alpha (\mathbf{A}_\alpha)_D} \mathbf{u}_0 + \frac{\mathbf{g}}{\rho_\alpha (\mathbf{A}_\alpha)_D} \quad (3.41)$$

$$\mathbf{u}_0 = \frac{(\mathbf{A}_0)_H}{(\mathbf{A}_0)_D} - \frac{\nabla p}{\rho_0 (\mathbf{A}_0)_D} + \frac{1}{r_0 \rho_0 (\mathbf{A}_0)_D} \sum_{\alpha=1}^n r_{\alpha f} K_{\alpha f} \mathbf{u}_\alpha + \frac{\mathbf{g}}{\rho_0 (\mathbf{A}_0)_D} \quad (3.42)$$

3.3.3 Equação da Pressão

A equação da continuidade para a mistura multifásica considerando todas as fases como incompressíveis é dada por

$$\nabla \cdot \left(r_{0f} \phi_0 + \sum_{\alpha=1}^n r_{\alpha f} \phi_\alpha \right) = 0 \quad (3.43)$$

onde os fluxos volumétricos ϕ_α são obtidos através da interpolação das velocidades obtidas da equação de correção da quantidade de movimento (Eqs. 3.41 e 3.42) nos centros das faces, de uma forma geral

$$\phi_\alpha = \phi_\alpha^* - \left(\frac{1}{\rho_\alpha(A_\alpha)_D} \right)_f |\mathbf{S}| \nabla_f^\perp p \quad (3.44)$$

onde ϕ_α^* é expresso para as fases dispersas $\alpha = 1, \dots, n$ como

$$\phi_\alpha^* = \left(\frac{(\mathbf{A}_\alpha)_H}{(\mathbf{A}_\alpha)_D} \right)_f \cdot \mathbf{S} + \left(\frac{K_\alpha}{\rho_\alpha(\mathbf{A}_\alpha)_D} \right)_f \phi_0 \quad (3.45)$$

e para a fase contínua

$$\phi_0^* = \left(\frac{(\mathbf{A}_0)_H}{(\mathbf{A}_0)_D} \right)_f \cdot \mathbf{S} + \left(\frac{1}{r_0 \rho_0(\mathbf{A}_0)_D} \right)_f \sum_{\alpha=1}^n r_{\alpha f} K_{\alpha f} \phi_\alpha \quad (3.46)$$

Substituindo os fluxos volumétricos obtidos na equação da continuidade obtém-se a seguinte equação para a pressão.

$$\left[\nabla \cdot \left[r_{0f} \left(\frac{1}{\rho_0(\mathbf{A}_0)_D} \right)_f + \sum_{\alpha=1}^n r_{\alpha f} \left(\frac{1}{\rho_\alpha(\mathbf{A}_\alpha)_D} \right)_f \right] \nabla[p] \right] = \nabla \cdot \left(r_{0f} \phi_0^* + \sum_{\alpha=1}^n r_{\alpha f} \phi_\alpha^* \right) \quad (3.47)$$

Desta forma o campo de pressão é determinado de forma coerente com a equação da continuidade.

3.3.4 Equação da Fração Volumétrica

A equação da fração volumétrica multifásica é obtida utilizando a definição de velocidade média da mistura, $\bar{\mathbf{u}} = \sum_{\alpha=0}^n r_\alpha \mathbf{u}_\alpha$, obtendo-se

$$\mathbf{u}_\alpha = \bar{\mathbf{u}} + r_0 \mathbf{u}_{r,0} + \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq \alpha}}^n r_i \mathbf{u}_{r,i} \quad (3.48)$$

O acoplamento entre CFD e a equação de balanço populacional é dado pela equação da fração volumétrica. No desenvolvimento do DQMOM, a abscissa ξ_i representa o volume da partícula, peso w_i representa densidade numérica de partículas. A fração volumétrica global da fase dispersa é calculada por:

$$\sum_{\alpha=1}^n r_\alpha = \int_0^\infty v f(\mathbf{x}, v, t) dv \quad (3.49)$$

utilizando a representação pelos pesos e abscissas a integral se torna:

$$\int_0^\infty v f(\mathbf{x}, v, t) dv \simeq \sum_{\alpha=1}^n \xi_\alpha w_\alpha = \sum_{\alpha=1}^n \varsigma_\alpha \quad (3.50)$$

onde $\varsigma_\alpha = \xi_\alpha w_\alpha$, chamada de abscissa ponderada, representa a fração volumétrica da fase α . Desta forma, a fração de fase é obtida a partir da aplicação do DQMoM na equação de conservação da densidade numérica de partículas, obtendo-se equações de transporte para os pesos e abscissas da distribuição. A formulação do DQMoM que foi implementada utiliza equações de transporte para os pesos e abscissas adimensionalizados da distribuição. Este processo de adimensionalização tem como objetivo evitar problemas numéricos de precisão de cálculo. A forma adimensionalizada destes pesos e abscissas estão mostrados nas Eqs. 3.51 e 3.52.

$$w_i^\phi = \frac{1}{N_T(0)} w_i \quad (3.51)$$

$$\xi_i^\phi = \frac{N_T(0)}{r_d(0)} \xi_i \quad (3.52)$$

onde w_i^ϕ e ξ_i^ϕ são os pesos e abscissas adimensionalizadas e $N_T(0)$ e $r_d(0)$ são, respectivamente, o número total de partículas (μ_0) e a fração volumétrica (μ_1) da distribuição inicial. Assim, o processo inverso de dimensionalização deve ser realizado sempre que o cálculo da fração volumétrica e diâmetro da fase dispersa forem necessários, o que pode ser feito através da equação

$$d_i = \left(\frac{6\xi_i}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{r_d(0)}{N_T(0)} \frac{6\xi_i^\phi}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.53)$$

Aplicando-se o processo de adimensionalização às Eqs. 3.25, 3.26, 3.27 e 3.29 e aplicando-se a metodologia de discretização por volumes finitos, obtém-se a seguinte formulação para solução das equações de transporte do DQMOM:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial[w_i^\phi]}{\partial t} \right] &+ \left[\nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}}[w_i^\phi]) \right] + \left[\nabla \cdot (r_0 \mathbf{u}_{r,0}[w_i^\phi]) \right] \\ &+ \left[\nabla \cdot \left(\sum_{i=1, i \neq \alpha}^n r_i \mathbf{u}_{r,i}[w_i^\phi] \right) \right] - \left[\nabla \cdot (\Gamma \nabla[w_i^\phi]) \right] = \theta_i^\phi, \quad i = 0, \dots, n \end{aligned} \quad (3.54)$$

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial[\xi_i^\phi]}{\partial t} \right] &+ \left[\nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}}[\xi_i^\phi]) \right] + \left[\nabla \cdot (r_0 \mathbf{u}_{r,0}[\xi_i^\phi]) \right] \\ &+ \left[\nabla \cdot \left(\sum_{i=1, i \neq \alpha}^n r_i \mathbf{u}_{r,i}[\xi_i^\phi] \right) \right] - \left[\nabla \cdot (\Gamma \nabla[\xi_i^\phi]) \right] \\ &- \xi_i^\phi \nabla \cdot \mathbf{u}_i - \frac{2\Gamma}{w_i} \nabla \xi_i^\phi \cdot \nabla w_i^\phi = \varrho_i^\phi, \quad i = 0, \dots, n \end{aligned} \quad (3.55)$$

e o sistema linear do DQMoM, que deve ser resolvido para cada ponto do domínio computacional, de onde se obtêm os termos fonte adimensionalizados θ_i^ϕ e ϱ_i^ϕ

$$\sum_{i=1}^n (\xi_i^\phi)^k \theta_i^\phi + k \sum_{i=1}^n w_i^\phi (\xi_i^\phi)^{k-1} \varrho_i^\phi = k(k-1) \Gamma \sum_{i=1}^n w_i^\phi (\xi_i^\phi)^{k-2} \nabla \xi_i^\phi \cdot \nabla \xi_i^\phi + \bar{H}_k^\phi, \quad k = 0, \dots, 2n-1 \quad (3.56)$$

$$\begin{aligned} \bar{H}_k^\phi &= \frac{N_T(0)}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [(\xi_i^\phi + \xi_j^\phi)^k - (\xi_i^\phi)^k - (\xi_j^\phi)^k] a(d_i, d_j) w_i^\phi w_j^\phi \\ &+ \sum_{i=1}^n b(d_i) w_i^\phi [\vartheta(\xi_i^\phi) \pi_k(\xi_i^\phi) - (\xi_i^\phi)^k] \end{aligned} \quad (3.57)$$

3.3.5 Equações do Modelo $\kappa - \epsilon$

A formulação do modelo $\kappa - \epsilon$ é a mesma mostrada nas Eqs. 2.17 e 2.18, sendo a forma discretizada das mesmas mostrada abaixo.

$$\left[\frac{\partial(r_0[\kappa_0])}{\partial t} \right] + [\nabla \cdot (r_0 \mathbf{u}_0[\kappa_0])] - [\nabla \cdot (r_0 \mathbf{u}_0[\kappa_0])] - \left[\nabla \cdot \left(\frac{r_0 \nu_0^{eff}}{\sigma_k} \nabla[\kappa_0] \right) \right] = r_0 P_0 - \frac{r_0 \epsilon_0}{\kappa_0} [\kappa_0] \quad (3.58)$$

$$\left[\frac{\partial(r_0[\epsilon_0])}{\partial t} \right] + [\nabla \cdot (r_0 \mathbf{u}_0[\epsilon_0])] - [\nabla \cdot (r_0 \mathbf{u}_0[\epsilon_0])] - \left[\nabla \cdot \left(\frac{r_0 \nu_0^{eff}}{\sigma_k} \nabla[\epsilon_0] \right) \right] = \left[r_0 C_1 P_0 \frac{[\epsilon_0]}{\kappa} \right] - [r_0 C_2 P_0 \frac{\epsilon_0}{\kappa} [\epsilon_0]] \quad (3.59)$$

A viscosidade efetiva ν_0^{eff} é calculada pela Eq. 3.60.

$$\nu_0^{eff} = \nu_0 + \nu^{turb} = \nu_0 + C_\mu \frac{\kappa_0^2}{\epsilon_0} \quad (3.60)$$

3.3.6 Algoritmo de Solução

O algoritmo de solução das equações utilizados pelo solver `multiPhasePbeFoam` pode ser resumido pelos seguintes passos

1. Leitura dos parâmetros de entrada do problema: dados da malha, condições de contorno e iniciais para os campos de velocidade, pressão, pesos e abscissas da distribuição e propriedades físicas das fases dispersas e contínua.
2. Passo de tempo t^n .
 - 2.1 Solução das equações de transporte e sistema linear do DQMOM.
 - 2.1.1 Cálculo das funções de quebra e coalescência para cada volume de controle da malha e obtenção do termo fonte $H_k^{(n)}$ (Eq. 3.58).
 - 2.1.2 Solução do sistema linear, Eq. 3.56, para cada volume da malha por fatoração LU.
 - 2.1.3 Armazenamento dos termos fonte θ_k e ϱ_k para cada volume da malha.
 - 2.1.4 Discretização e solução das equações de transporte do DQMOM, Eqs. 3.54 e 3.55.

2.1.5 Cálculo das propriedades das fases dispersas, como a fração volumétrica $\sum_{\alpha=1}^n r_{\alpha}$, Eq. 3.50 e o diâmetro de cada fase d_{α} , Eq. 3.53.

2.2 Cálculo dos termos de interação para as fases dispersas, Eqs. 3.35 e 3.37.

2.3 Discretização do lado esquerdo das equações do movimento para a fase contínua e as dispersas e cálculo dos operadores $(\mathbf{A}_{\alpha})_D$ e $(\mathbf{A}_{\alpha})_H$, Eqs. 3.38 e 3.39.

2.4 Loop de acoplamento PISO (*Pressure Implicit with Splitting of Operators*)

2.4.1 Solução da equação multifásica da pressão, Eq. 3.47.

2.4.2 Correção dos fluxos volumétricos, Eqs. 3.44, 3.45 e 3.46, e velocidades, Eqs. 3.41 e 3.42.

2.4.3 Volta para 2.4 por um número especificado de vezes (Número de loops do PISO é especificado pelo usuário).

2.5 Solução das equações do modelo de turbulência, Eqs. 3.58, 3.59 e 3.60.

3. Volta para 2 com $n = n + 1$.

4. Fim da simulação quando $t^n = t^{final}$.

z

Capítulo 4

Resultados

Nesta seção serão mostrados os resultados obtidos durante o desenvolvimento do trabalho, que pode ser dividido nas seguintes etapas:

1. Verificação dos códigos utilizados para solução dos problemas de balanço populacional 0-D transientes.
2. Implementação e avaliação do modelo de quebra e coalescência de partículas na escala sub-Kolmogorov para o caso 0-D transiente.
3. Execução e avaliação de simulações com acoplamento PB-CFD utilizando o modelo proposto.

A metodologia aplicada na primeira etapa é baseada nas avaliações feitas por Silva *et al.* [59] dos diferentes métodos numéricos para solução de problemas de balanço populacional, e seus detalhes serão explicados mais à frente, por conveniência.

Neste ponto faz-se necessário apresentar um breve resumo do trabalho de Araujo [4], já que as etapas 2 e 3 se baseiam no modelo de quebra e coalescência e nas condições experimentais descritas pelo mesmo.

Os dados experimentais usados por Araujo [4] foram obtidos no Núcleo de Separadores Compactos da UNIFEI (Universidade Federal de Itajubá). Seu objetivo foi avaliar diferentes modelos para os termos de quebra e a coalescência para uma emulsão de água em óleo que escoava através de uma seção de testes que simula uma válvula de mistura, detalhada nas Figs. 4.1 e 4.2. Estes dados experimentais foram obtidos durante um projeto intitulado “Estudo experimental sobre o efeito do escoamento através de singularidades na formação de emulsões de água em óleo”, contratado pela Engenharia Básica do Centro de Pesquisa e Desenvolvimento Leopoldo Américo Miguez de Mello (CENPES) da PETROBRAS [11, 12].

O acoplamento da equação de balanço populacional com a abordagem multifásica torna o esforço computacional para solução do problema demasiadamente elevado para

ser utilizado na estimação de parâmetros. Desta forma, Araujo [4] utiliza uma abordagem mais simplificada que elimina a dependência espacial da equação de balanço populacional, considerando somente a variação temporal da função de distribuição numérica de partículas aplicando o método das classes e integrando numericamente a Eq. 4.1 para um dado tempo característico que corresponde ao tempo de residência da emulsão na região do espaço considerada em que a quebra e a coalescência de partículas ocorre.

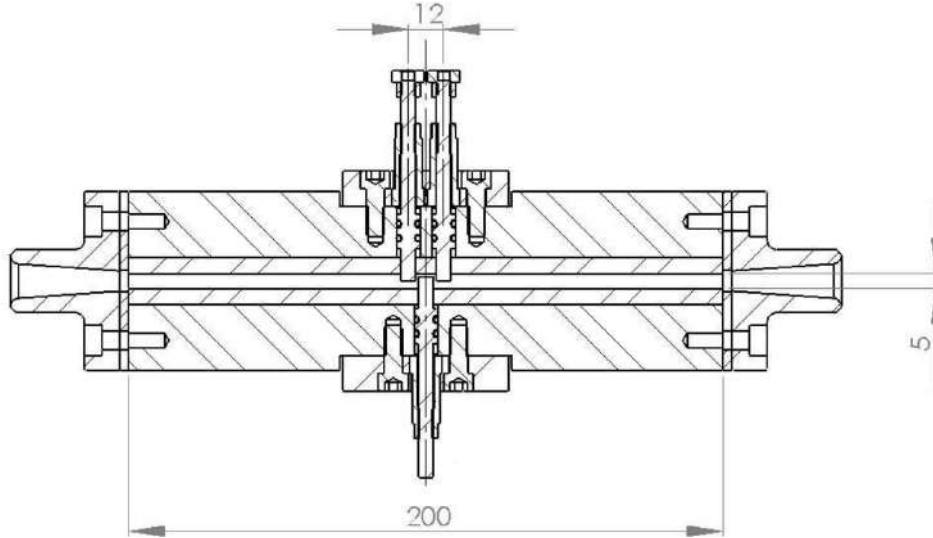


Figura 4.1: Vista em corte longitudinal da seção de testes com as gavetas parcialmente fechadas (cotas em milímetros, retirado de Araujo [4]).

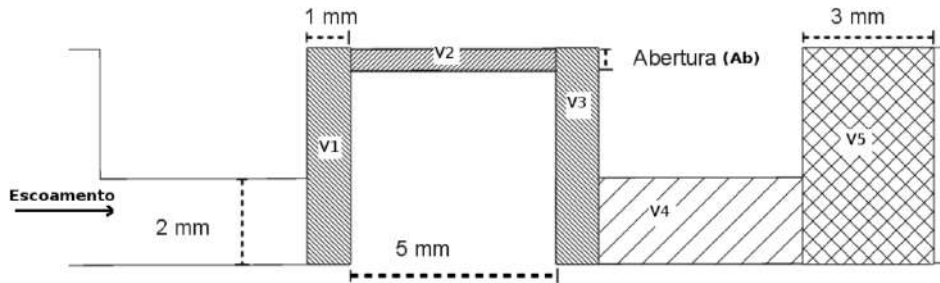


Figura 4.2: Volume de controle considerado para calcular o tempo de residência, que é dado por $V_c = 25(7 + Ab) \text{ mm}^2$, onde Ab é a abertura da válvula, em milímetros (retirado de Araujo [4]).

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial f(v, t)}{\partial t} &= \int_0^v a(v - v', v') f(v - v', t) f(v', t) dv' \\
 &- \int_0^\infty a(v, v') f(v, t) f(v', t) dv' \\
 &+ \int_v^\infty \vartheta(v') b(v') P(v|v') f(v', t) dv' \\
 &- b(v) f(v, t)
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Os dados experimentais realizados pelo Núcleo de Separadores Compactos [11, 12] e disponibilizados pela PETROBRAS possuem os valores da distribuição numérica de partículas

na entrada e na saída da seção de testes. Sendo assim, a Eq. 4.1 foi integrada com a condição inicial igual à distribuição na entrada do equipamento utilizando-se o método das classes. Os resultados na saída foram utilizados para a estimação dos parâmetros do modelo. Detalhes sobre a etapa de estimação de parâmetros, como o algoritmo e o critério de otimização adotados, não serão abordados aqui e podem ser encontrados em Araujo [4].

4.1 Verificação dos Códigos para Solução da EBP

A primeira etapa do trabalho é a verificação das implementações utilizadas. Isso foi feito através da comparação dos resultados numéricos obtidos com soluções analíticas encontradas na literatura. Desta forma, para validação da implementação do DQMoM e do método das classes foram realizadas simulações 0-D transientes para casos particulares, cuja solução analítica foi desenvolvida por McCoy & Madras [54]. Para isso, foi utilizado o solver `pbeFoam`, cuja formulação é descrita em Silva [51]. Este *solver* utiliza o DQMoM para solucionar um problema de balanço populacional com campo de velocidades estabelecido (ou seja, sem acoplamento CFD). Para avaliação do método das classes foi utilizado um simulador implementado em FORTRAN 90 [4]. Embora os modelos de quebra e coalescência utilizados nestas soluções sejam irreais (ou seja, não possuem significado físico apresentando limitações severas na modelagem de processos reais), a existência de soluções analíticas torna estes modelos importantes na validação de códigos para a solução da equação de balanço populacional.

A avaliação minuciosa da acurácia do MoC e do DQMoM, além de outros métodos numéricos para solução das equações de balanço populacional, foi feita por Silva [51] e não será repetida aqui. Os resultados obtidos nessa análise inicial foram avaliados apenas do ponto de vista de validação da implementação, e não possuem a pretensão de analisar detalhadamente a eficiência, acurácia ou mesmo convergência dos métodos. Os parâmetros numéricos (passo de tempo, número pontos de quadratura/classes) foram escolhidos de acordo com os resultados obtidos por Silva [51] que mostraram um desvio aceitável em relação à solução analítica. Foram escolhidos 4 pontos de quadratura para o DQMoM e 150 classes para o MoC.

Os erros máximos obtidos para o DQMoM são da ordem de 10^{-2} , e se concentram nos momentos de segunda e terceira ordem. Para os momentos de ordem mais baixa ($k = 0, 1$), a solução numérica possui excelente concordância com a analítica, com erros máximos da ordem de 10^{-4} para o caso de coalescência dominante e 10^{-3} para o caso com quebra dominante. Os resultados para o método das classes seguem a mesma tendência, mostrando erros da ordem de 10^{-2} para os momentos de ordem mais alta e de 10^{-3} para os de ordem mais baixa. Estes valores estão em concordância com os reportados por Silva [51], validando a solução numérica dada pelo código.

Parâmetro	<i>Exp1</i>	<i>Exp2</i>
σ (N/m)	$2,22 \times 10^{-2}$	$2,22 \times 10^{-2}$
t_{res} (s)	$2,918 \times 10^{-3}$	$4,137 \times 10^{-3}$
Re_{max}	1.273	1.041
We_{crit}	6,0	6,0
Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, ϵ (m^2/s^3)	$1,34 \times 10^5$	$4,73 \times 10^4$

Tabela 4.1: Parâmetros adicionais do modelo Araujo para os casos 1, 2, 3 e 4 [4].

4.2 Avaliação da Solução Numérica

Um vez que os códigos para solução da EBP implementados no OpenFOAM e em FORTRAN 90 foram verificados, a próxima etapa é a implementação dos modelos de Araujo [4].

Nesta etapa, os desempenhos do MoC e do DQMoM na solução da Eq. 4.1 são comparados novamente, porém com os *kernels* de quebra e coalescência mostrados nas seções 2.2.2 e 2.2.3.

O desempenho do MoC e do DQMoM foi comparado para dois conjuntos de parâmetros físicos distintos, simulando dois casos experimentais do conjunto de dados utilizado por Araujo [4], que foram identificados aqui como *Exp1* e *Exp2*, que são mostrados na tabela 4.1. As propriedades termofísicas e outros parâmetros adicionais necessários para a utilização do modelo são mostrados na tabela 4.2. As soluções obtidas para o caso *Exp1* foram comparadas em três condições distintas: coalescência pura ($b(v, \mathbf{y}) = 0$, caso 1), quebra pura ($a(v, v', \mathbf{y}) = 0$, caso 2) e quebra e coalescência simultâneas (caso 3). Um outro caso com quebra e coalescência simultânea foi avaliado utilizando os parâmetros do caso *Exp2*, sendo referenciado como caso 4.

Para inicialização do DQMoM utilizando um número n de pesos e abscissas são necessários os primeiros $2n$ momentos da distribuição. A obtenção dos pesos e abscissas da distribuição a partir dos momentos pode ser feita através da solução do sistema não-linear

$$\mu_k = \sum_{i=1}^n \xi_i^k w_i, \quad k = 0, \dots, 2n - 1 \quad (4.2)$$

No entanto, a solução deste sistema é demasiadamente custosa do ponto de vista computacional. Uma alternativa é a utilização do algoritmo produto-diferença (*Product-Difference Algorithm*, PDA), proposto por Gordon [60], que é extremamente eficiente e robusto. Este naturalmente foi o caminho escolhido.

Os perfis dos momentos calculados para os casos de coalescência puras são importantes na determinação da origem de possíveis erros numéricos ocasionados pelo cálculo pouco acurado dos termos fonte do sistema linear do DQMoM. Embora o código tenha sido verificado e tenha apresentado uma boa concordância com a solução analítica utilizando apenas 4 pontos de quadratura, nada garante que para uma distribuição e *kernels* de coalescência e quebra diferentes essa acurácia será mantida. Na verdade, o *kernel* analisado

Variável	<i>Exp1</i>	<i>Exp2</i>
Vazão mássica de emulsão Q (kg/s)	4,3	3,0
Concentração volumétrica de água, r_d	0,145	0,083
Densidade da fase contínua, ρ_c (kg/m^3)	$8,65 \times 10^2$	$8,62 \times 10^2$
Densidade da fase dispersa, ρ_d (kg/m^3)	$9,85 \times 10^2$	$9,85 \times 10^2$
Viscosidade dinâmica da fase contínua, μ_c ($Pa.s$)	$1,11 \times 10^{-2}$	$9,50 \times 10^{-3}$
Queda de pressão através da seção, ΔP (Pa)	$3,39 \times 10^5$	$1,71 \times 10^5$

Tabela 4.2: Condições experimentais e propriedades termofísicas medidas pelo Núcleo de Separadores Compactos [4, 11, 12].

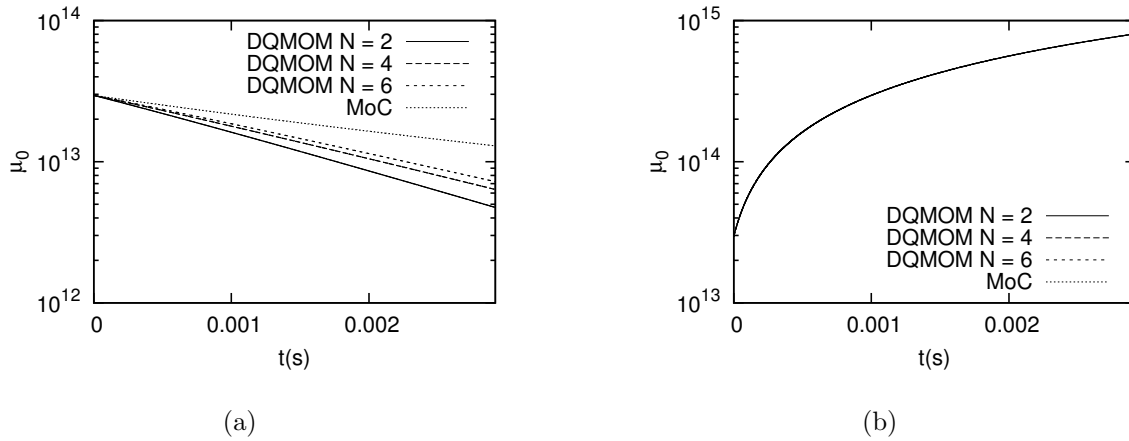


Figura 4.3: Perfis do momento 0 para os casos 1 (a) e 2 (b).

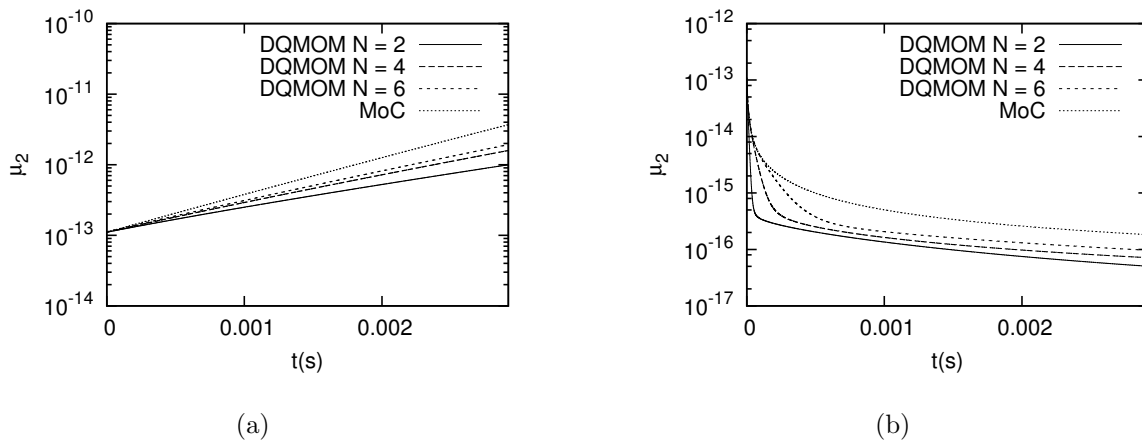


Figura 4.4: Perfis do momento 2 para os casos 1 (a) e 2 (b).

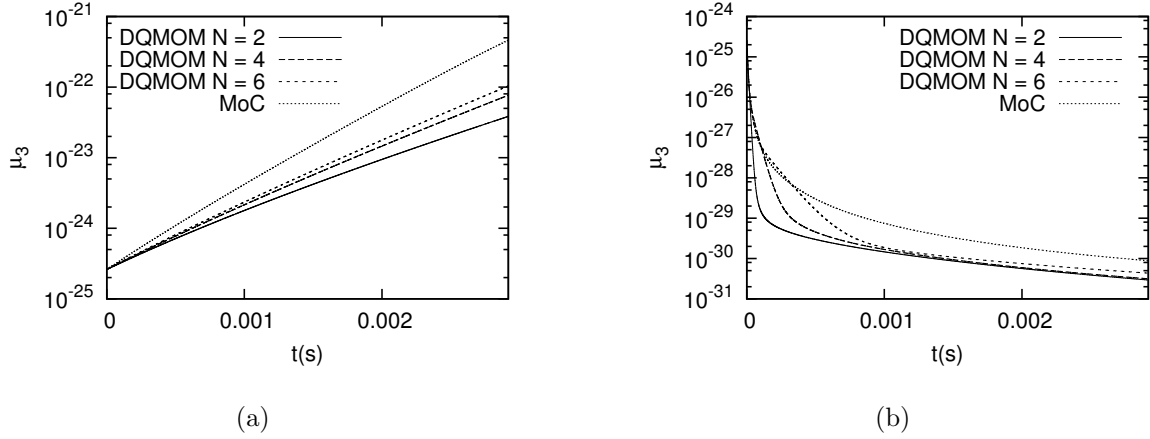
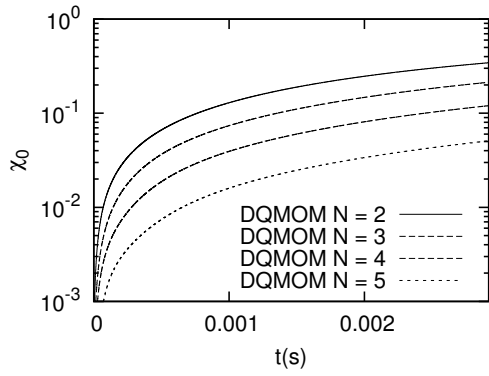


Figura 4.5: Perfis do momento 3 para os casos 1 (a) e 2 (b).

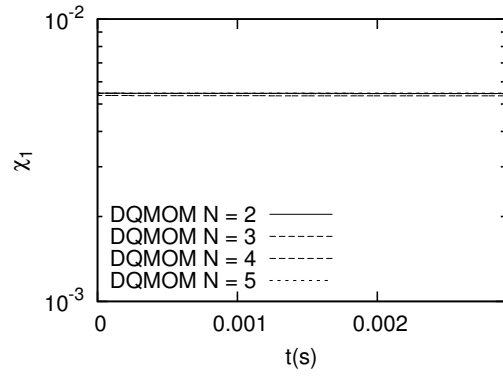
por McCoy & Madras [54] é extremamente simples quando comparado aos modelos fisicamente mais realistas. Essa complexidade matemática, aliada às mais variadas condições iniciais para a função de densidade numérica de partículas, torna a análise da convergência e verificação dos parâmetros do DQMoM para o novo modelo uma tarefa necessária antes da sua aplicação.

Analisando os perfis do momento de ordem 0 para os casos 1 e 2 (Fig. 4.3) nota-se um desvio maior do DQMoM em relação ao método das classes no caso de coalescência pura (caso 1), além de existir uma baixa taxa de convergência com o aumento dos pontos de quadratura neste mesmo caso. Para os momentos de ordem superior (Figs. 4.4 e 4.5), o erro relativo do DQMoM em relação ao MoC é elevado para ambos os casos, mas nota-se que para o caso 2 os resíduos estabilizam ao final do intervalo de integração, enquanto para o caso 1 estes resíduos tendem a aumentar. Um possível motivo para este comportamento está relacionado à não-linearidade do termo que modela a frequência de coalescência $a(v, v')$, o que dificulta a integração acurada do termo fonte pelo DQMoM com um número pequeno de pontos de quadratura, levando a um acúmulo do erro. Isto poderia ser verificado através da utilização de mais pontos de quadratura, ou através da análise da convergência do método com o aumento do número de pontos de quadratura. No entanto, um fator que impede a extensão desta análise para um número maior de pontos de quadratura foi o fato de que a distribuição inicial de gotas é muito estreita, de forma que abscissas com pesos muito próximo de zero acabam sendo geradas durante a aplicação do PDA. Isso fez com que a análise se limitasse ao máximo de 6 pontos de quadratura.

Desta forma, uma análise de convergência de pontos de quadratura foi realizada para o DQMoM para o caso de coalescência dominante. Simulações com $N = 2, 3, 4, 5$ e 6 pontos de quadratura foram comparadas. Os resultados apresentados nas figs. 4.6 e 4.7 mostram o perfil temporal dos erros relativos, usando como comparação o resultado obtido com $N = 6$ pontos de quadratura, para os quatro primeiros momentos calculados. O padrão de convergência do DQMoM para o momento de ordem 0 mostra que o método está convergido em relação ao número de pontos de quadratura. Os erros obtidos na comparação com o MoC podem ser explicados pelo fato de que os resultados obtidos por Araujo [4] podem ter sido oriundos de uma malha ainda não convergida.

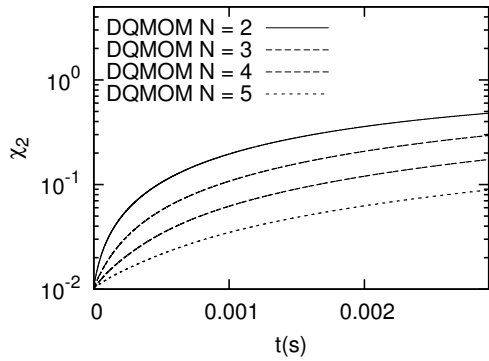


(a)

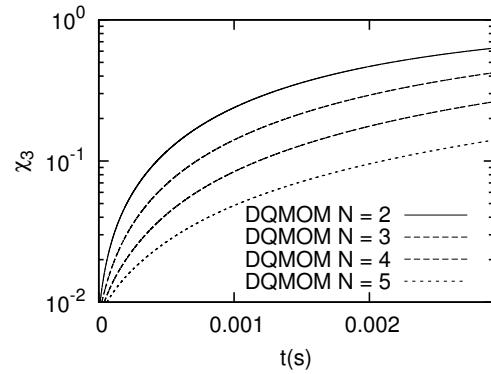


(b)

Figura 4.6: Convergência do DQMoM no cálculo do momento 0 (a) e momento 1 (b) para o caso 1. Erros relativos ao caso com $N = 6$ pontos de quadratura

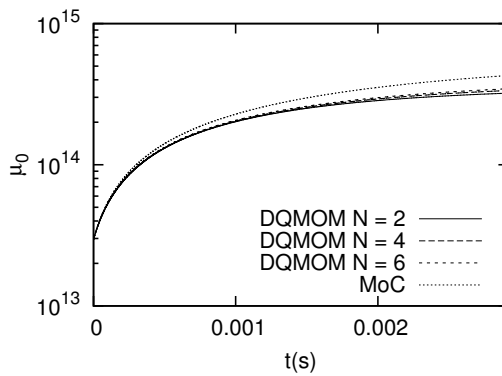


(a)

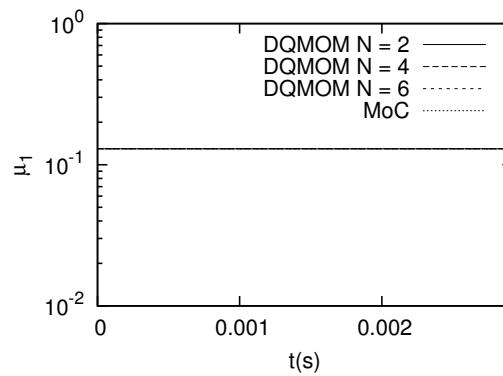


(b)

Figura 4.7: Convergência do DQMoM no cálculo do momento 2 (a) e momento 3 (b) para o caso 1. Erros relativos ao caso com $N = 6$ pontos de quadratura

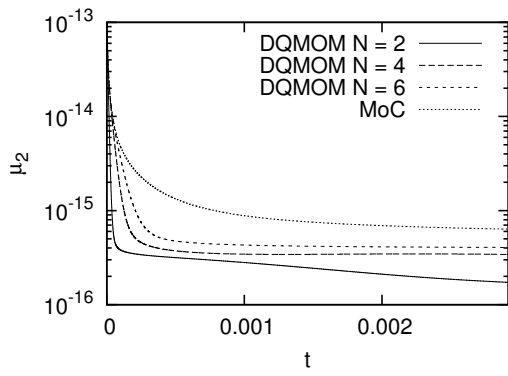


(a)

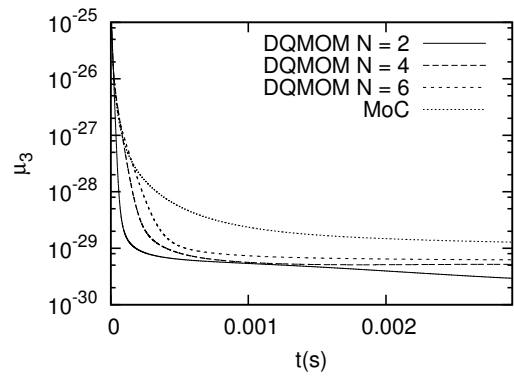


(b)

Figura 4.8: Perfis do momento 0 (a) e momento 1 (b) para o caso 3.

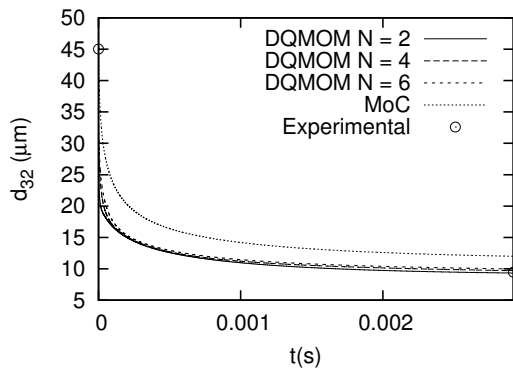


(a)

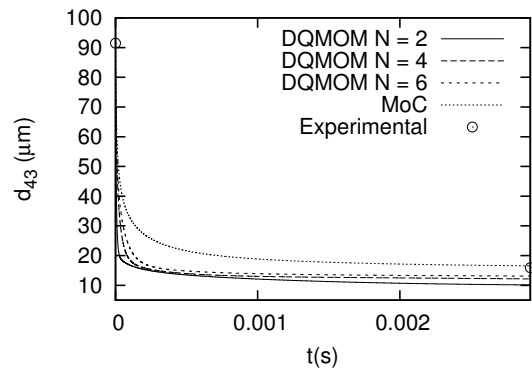


(b)

Figura 4.9: Perfis dos momentos 2 (a) e momentos 3 (b) para o caso 3.

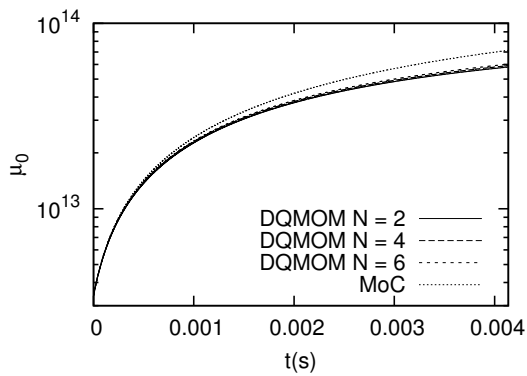


(a)

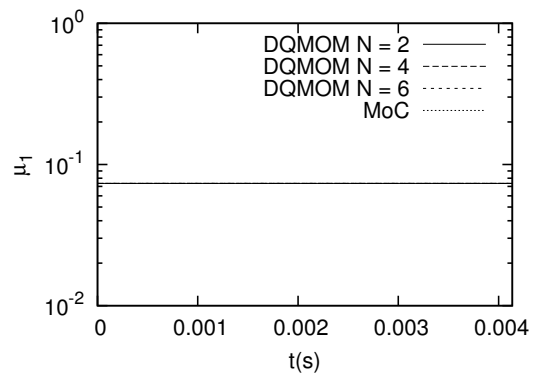


(b)

Figura 4.10: Perfis dos diâmetros d_{32} (a) e d_{43} (b) para o caso 3.

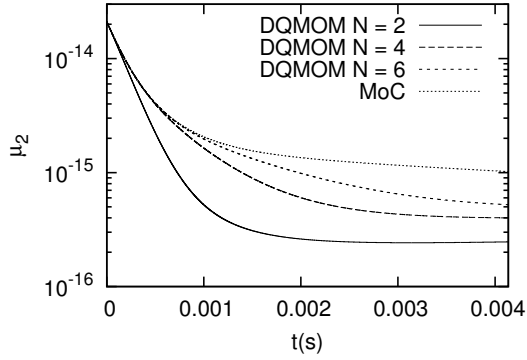


(a)

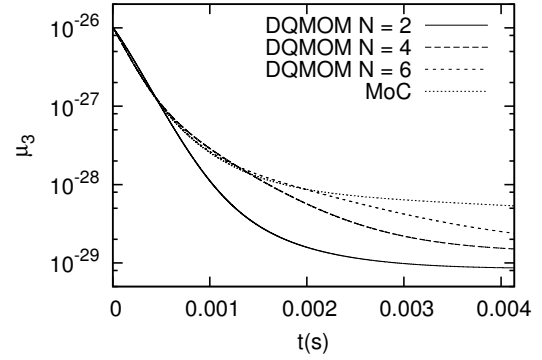


(b)

Figura 4.11: Perfis do momento 0 (a) e momento 1 (b) para o caso 4.

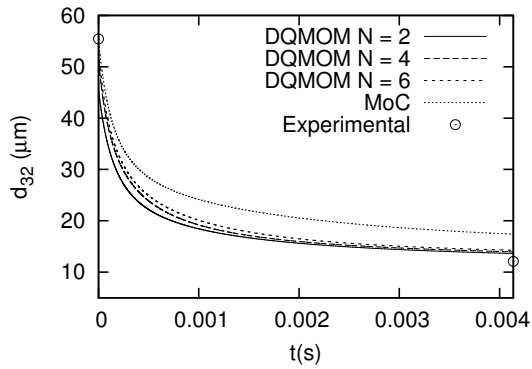


(a)

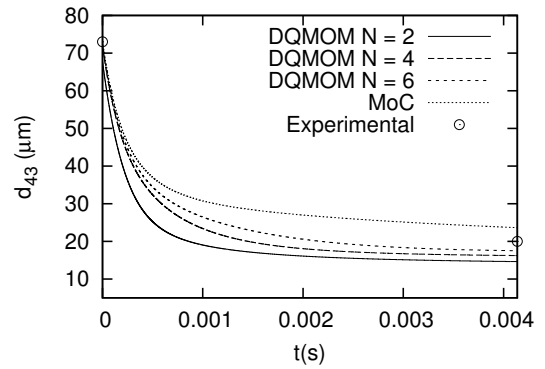


(b)

Figura 4.12: Perfis dos momentos 2 (a) e momentos 3 (b) para o caso 4.



(a)



(b)

Figura 4.13: Perfis dos diâmetros d_{32} (a) e d_{43} (b) para o caso 4.

Realizando a comparação dos momentos para o caso 3 (quebra e coalescência simultâneas) o mesmo problema se apresenta. Da análise dos casos 1 e 2 é possível inferir que os desvios do momento μ_0 obtido pelo DQMoM em relação ao MoC no caso 6 (Fig. 4.8) se deve principalmente à falta de acurácia na integração dos termos de coalescência. Para os momentos de ordem superior, μ_2 e μ_3 , os desvios mostrados na Fig. 4.9 se devem tanto à não convergência do DQMoM quanto ao fato de que o MoC perde precisão ao calcular os momentos de ordem superior. O mesmo se pode concluir para os perfis dos momentos obtidos para o caso 4 (Figs. 4.11 e 4.12).

Um ponto a favor da aplicação do DQMoM na solução deste problema é que, particularmente para as distribuições analisadas, os momentos de ordem superior exercem pouca influência nas propriedades de interesse da população. Além disso, apesar de existirem erros consideráveis na integração dos termos de coalescência, o fenômeno dominante é a quebra de partículas, e esta está sendo calculada de forma acurada pelo DQMoM, isto é, em concordância com o MoC para os momentos de ordem mais baixa (μ_0 e μ_1). A análise das Figs. 4.10 e 4.13 mostra claramente que os diâmetros médios de Sauter (d_{32} , definido na Eq. 4.3) e volumétrico (d_{43} , definido na Eq. 4.4) estimados pelo DQMoM e pelo MoC concordam entre si e com os resultados experimentais dentro do erro reportado por Araujo [4] para o modelo, que é aproximadamente 20% para o d_{32} e de 8% para o d_{43} .

$$d_{32} = \left(\frac{6}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{\sum_{\alpha=1}^n \xi_{\alpha} w_{\alpha}}{\sum_{\alpha=1}^n \xi_{\alpha}^{2/3} w_{\alpha}} \quad (4.3)$$

$$d_{43} = \left(\frac{6}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{\sum_{\alpha=1}^n \xi_{\alpha}^{4/3} w_{\alpha}}{\sum_{\alpha=1}^n \xi_{\alpha} w_{\alpha}} \quad (4.4)$$

Desta forma os resultados obtidos até agora estão coerentes com o esperado para o DQMoM, e as soluções obtidas até então são consideradas satisfatórias. A próxima etapa da análise é o acoplamento da equação de balanço populacional em um problema de fluidodinâmica computacional utilizando a modelagem proposta.

4.3 Acoplamento PB-CFD

4.3.1 Parâmetros da Simulação

Os resultados anteriores mostraram que a utilização do DQMoM na solução da equação de balanço populacional usando o modelo de Araujo [4] obteve um bom desempenho na predição dos diâmetros médio de Sauter e do diâmetro médio volumétrico da distribuição utilizando a modelagem 0-D. O objetivo da etapa atual é verificar o desempenho do mesmo em problemas envolvendo acoplamento entre a modelagem multi-fluido e a equação de balanço populacional. Nesta etapa foi realizada uma simulação em CFD utilizando o solver `multiPhasePbeFoam`, cuja modelagem e metodologia numérica foi descrita no capítulo 3.

A geometria modelada para as simulações foi baseada nas dimensões mostradas nas Figs. 4.1 e 4.2, considerando uma abertura da gaveta central de $2,5\text{mm}$. A malha computacional bidimensional utilizada foi construída utilizando o *software* comercial ICEM CFD, da ANSYS, e possui 7.923 elementos hexaédricos. A Fig. 4.14 mostra o refino da malha localizado na região do acidente, que é a região do escoamento de interesse para a análise. O método de interpolação utilizado para os termos advectivos das equações

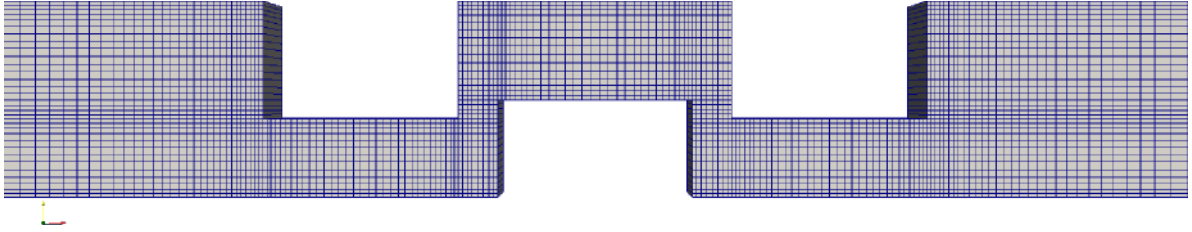


Figura 4.14: Detalhe da malha na região do acidente.

de transporte foi o método de Van Leer, já que métodos de alta ordem com limitadores de fluxo são recomendados para a solução do DQMoM [51]. Para a integração temporal foi utilizado o método de Crank-Nicholson com um passo de tempo inicial de 10^{-8}s , importante para o acoplamento pressão-velocidade nos instantes iniciais da simulação, e durante a simulação foi utilizado um critério adaptativo para este passo de tempo baseado no número de Courant máximo na malha sendo igual a 0,6. Como este critério ignora a evolução da solução da equação de balanço populacional, o passo de tempo máximo foi restrito a 10^{-5}s , já que passos de tempo maiores poderiam desestabilizar a solução do DQMoM. O tempo total de simulação foi de 1s.

As condições de contorno na entrada do canal são listadas na tabela 4.3. A condição de contorno da velocidade foi calculada utilizando a vazão mássica experimental dividida pela área da seção reta do canal, e o mesmo perfil plano foi considerado igual para todas as fases. A componente normal à superfície de contorno do gradiente de pressão foi especificado como nula na entrada. As condições de contorno das variáveis relativas à turbulência, κ e ϵ , foram obtidas considerando uma intensidade de turbulência de 5% na entrada do canal, através da equação

$$I = \frac{(\frac{2}{3}\kappa)^{2/3}}{U_{ref}} \quad (4.5)$$

onde I é a intensidade da turbulência e U_{ref} é uma velocidade de referência do escoamento médio [48], neste caso tomado como a média da magnitude da velocidade na superfície de contorno considerada. O valor de ϵ na entrada é calculado por

$$\epsilon = \frac{C_\mu^{3/4} k^{3/2}}{l_c} \quad (4.6)$$

onde l_c é a escala de comprimento da turbulência, considerado como sendo 10% da altura do canal.

O valor da fração volumétrica e diâmetros das fases representativas a serem especificados na entrada são introduzidos indiretamente pela especificação das condições de contorno para os pesos e abscissas dimensionais da distribuição, que são calculados pelas

Eqs. 3.52 e 3.51. Desta forma, os valores dos momentos μ_0 e μ_1 da distribuição original devem ser alimentados ao *solver* para que o processo de dimensionalização dos pesos e abscissas seja realizado sempre que necessário. A condição padrão de não-deslizamento foi aplicada a ambas as fases ao considerar a condição de contorno nas paredes do canal. Para todas as outras variáveis, a condição de contorno imposta foi a de componente normal do gradiente nula. Esta mesma condição foi imposta para todas as variáveis na saída, inclusive para a velocidade das fases, com exceção da pressão, que foi especificada como sendo igual a 0. Como a modelagem aplicada considera o fluido como incompressível, o valor absoluto da pressão é usado somente como um referencial.

O caso analisado considerou uma fase contínua e $N = 2$ fases dispersas e a única força de interação entre as fases considerada foi a força de arrasto. As propriedades termofísicas da fase contínua e as fases dispersas consideradas são as do caso *Exp2* e estão listadas na tabela 4.2.

Variável	Condição na entrada
\mathbf{u}_i	$(2,30, 0, 0) \text{ m/s}$
p	$\nabla p \cdot \mathbf{n}_f = 0$
ϵ	$1,30 \text{ m}^2/\text{s}^3$
κ	$0,020 \text{ m}^2/\text{s}^2$
w_1^ϕ	0,9742
w_2^ϕ	0,02581
ξ_1^ϕ	0,43018
ξ_2^ϕ	22,51

Tabela 4.3: Condições de contorno na entrada do canal.

4.3.2 Avaliação do Modelo

A comparação entre as hipóteses simplificadoras utilizadas na modelagem de Araujo [4] com os resultados obtidos nas simulações é, naturalmente, o primeiro passo na avaliação da modelagem CFD. Como pode ser visto na Fig. 4.15, o perfil de pressão na região da válvula concorda com a hipótese utilizada na formulação do modelo de que a queda de pressão está localizada toda no acidente. Outra variável de interesse é a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, cujo perfil é mostrado na Fig. 4.16. Esta variável está diretamente ligada aos fenômenos de quebra e coalescência. A análise deste perfil em conjunto com os perfis dos diâmetros médios de Sauter e volumétricos, mostrados nas Figs. 4.17 e 4.18, respectivamente, mostram as regiões onde os fenômenos de quebra e coalescência ocorrem de forma mais substancial. Grande parte da quebra está localizada na região entre as duas primeiras gavetas, que é a região em que ϵ assume os seus maiores valores. No entanto, o diâmetro médio das partículas cai consideravelmente a ponto da quebra se tornar mais lenta. A coalescência ocorre com maior intensidade na região a jusante da válvula, quando os valores de ϵ começam a diminuir, sendo observado um aumento considerável do diâmetro na região de recirculação após a terceira gaveta.

A comparação entre os valores experimentais e simulados para a pressão e os diâmetros

médios estão mostrados na tabela 4.4, com seus respectivos erros relativos, $\eta(x)$, definidos pela Eq. 4.7.

$$\eta(x) = \frac{|x_{exp} - x_{sim}|}{x_{exp}} \quad (4.7)$$

onde x_{exp} é o valor experimental da variável e x_{sim} é o valor obtido pela simulação numérica.

Para comparação dos diâmetros obtidos pelas simulações CFD com os valores experimentais é necessário extrair um valor “*bulk*” dos perfis calculados nas simulações CFD. Desta forma os diâmetros na saída e na entrada do acidente foram calculados utilizando os valores “*bulk*” dos pesos e abscissas nestes contornos. O valor “*bulk*” de uma variável escalar Φ_α genérica numa dada superfície de contorno Ω é definido como

$$\langle \Phi_\alpha \rangle_\Omega = \frac{\int_\Omega \Phi_\alpha \mathbf{u}_\alpha \cdot \hat{\mathbf{n}} dA}{\int_\Omega \mathbf{u}_\alpha \cdot \hat{\mathbf{n}} dA} \quad (4.8)$$

onde $\hat{\mathbf{n}}$ é o vetor unitário normal à superfície Ω . Os diâmetros médios são calculados a partir dos valores “*bulk*” dos pesos e abscissas dimensionais por

$$d_{32}^\Omega = \left(\frac{6}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{\sum_{\alpha=1}^n \langle \xi_\alpha \rangle_\Omega \langle \omega_\alpha \rangle_\Omega}{\sum_{\alpha=1}^n (\langle \xi_\alpha \rangle_\Omega)^{2/3} \langle \omega_\alpha \rangle_\Omega} \quad (4.9)$$

$$d_{43}^\Omega = \left(\frac{6}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{\sum_{\alpha=1}^n (\langle \xi_\alpha \rangle_\Omega)^{4/3} \langle \omega_\alpha \rangle_\Omega}{\sum_{\alpha=1}^n \langle \xi_\alpha \rangle_\Omega \langle \omega_\alpha \rangle_\Omega} \quad (4.10)$$

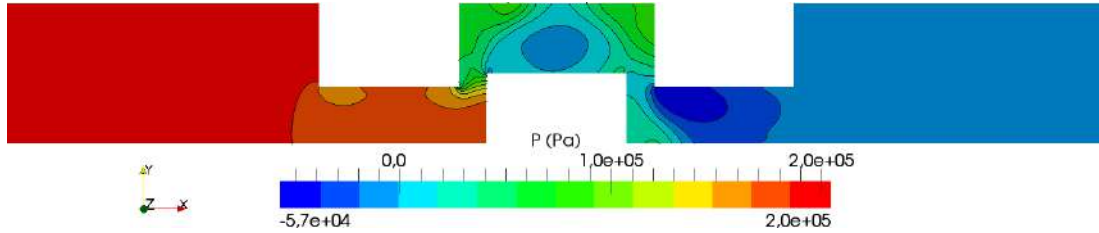


Figura 4.15: Perfil de pressão.

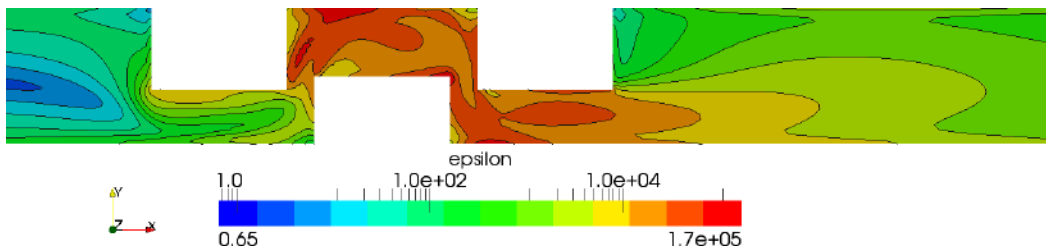


Figura 4.16: Perfil da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, ϵ (m^2/s^3).

Os resultados mostraram erros acima de 100% na predição do diâmetro médio de Sauter, e acima de 50% para o diâmetro médio volumétrico. Estes erros podem possuir múltiplas origens. Uma das possíveis origens, que já foi apresentada na avaliação da modelagem 0-D, é a incapacidade do DQMoM em integrar acuradamente os termos fonte

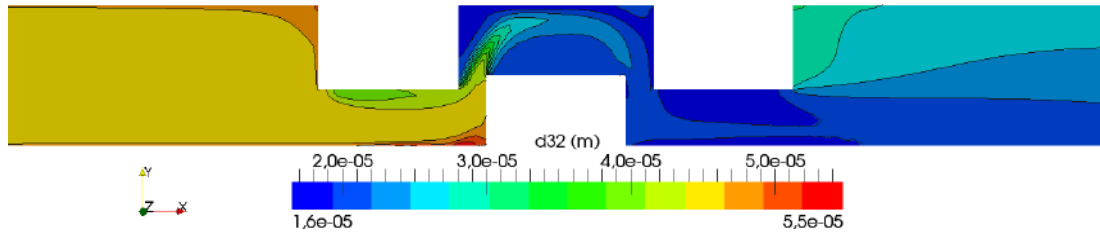


Figura 4.17: Perfil do diâmetro médio de Sauter (d_{32}).

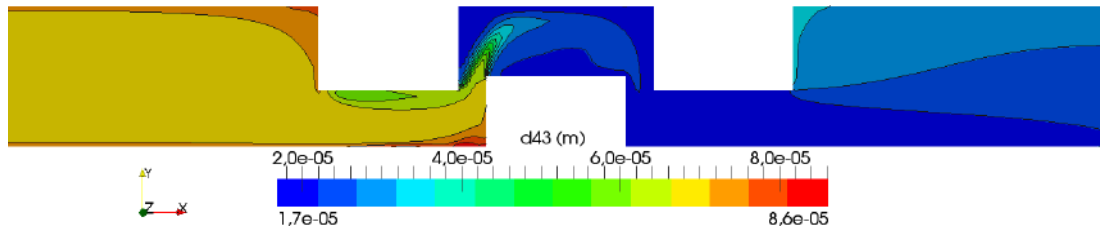


Figura 4.18: Perfil do diâmetro médio volumétrico (d_{43}).

não-lineares oriundos do termo de frequência de coalescência. Para verificar este ponto seria necessária uma análise de convergência de pontos de quadratura para o método das classes, e a implementação de metodologias mais sofisticadas para contornar este problema. No entanto, estas análises seriam demasiadamente custosas do ponto de vista computacional, e estão fora do escopo deste trabalho.

Uma outra possível fonte de erros é o fato do modelo de turbulência não ter sido aplicado corretamente. Os valores de y^+ mínimo, médio e máximo nas paredes são 0,25, 1,95 e 6,95, respectivamente. Mesmo sem um refino excessivo da malha na região da camada limite, os valores de y^+ estão muito abaixo do limite de validade da lei de parede, que é $y^+ > 30$. Além disso, na região de entrada e na saída do canal, longe do acidente, o regime de escoamento é laminar. As condições de contorno de κ e ϵ na entrada do canal foram impostas baseadas em estimativas para escoamentos turbulentos, e o modelo $\kappa - \epsilon$ prevê erroneamente uma produção de energia cinética turbulenta relativamente alta na faixa laminar.

Simulações CFD em geral produzem bons resultados para a queda de pressão, mas nesse caso foi observado um erro relativo em torno de 20% para a mesma. Este erro está relacionado ao fato desta variável estar diretamente relacionada à taxa de dissipação da energia cinética turbulenta. Modelos de turbulência contendo leis de parede para baixos Reynolds devem ser aplicados no futuro a fim de se contornar estes problemas.

Variável	Experimental	CFD	Erro
Δp	$1,71 \times 10^5$ Pa	$2,04 \times 10^5$ Pa	19,6%
d_{32}^{out}	$1,21 \times 10^{-5}$ m	$2,81 \times 10^{-5}$ m	132%
d_{43}^{out}	$1,99 \times 10^{-5}$ m	$3,09 \times 10^{-5}$ m	54,5%

Tabela 4.4: Comparação entre os resultados da simulação CFD e os resultados experimentais.

Capítulo 5

Conclusão

A implementação de um modelo validado com dados experimentais para a quebra e coalescência de gotas no escoamento de emulsões foi realizada com sucesso. Esta implementação foi realizada no solver `multiPhasePbeFoam`, que foi desenvolvido a partir da biblioteca CFD de código livre e aberto `OpenFOAM` por Silva [51], que utiliza o DQMoM para solução da equação de balanço populacional.

A comparação dos resultados obtidos pelo DQMoM para 2, 4 e 6 pontos de quadratura com o método das classes usando uma modelagem 0-D mostrou resultados discordantes, sendo necessária uma melhor investigação das soluções obtidas por ambos os métodos. Por não ter sido feita uma análise de convergência de pontos de quadratura para o método das classes, as informações obtidas não foram suficientes para diagnosticar o verdadeiro motivo dos desvios.

Os resultados das simulações CFD não foram bons. A comparação entre o resultado experimental e simulado mostra um erro da ordem de 100% para o diâmetro médio de Sauter na saída da seção de testes. Entretanto, isso não invalida o modelo, já que este erro pode ter origens diversas. Análises mais aprofundadas das origens destes erros demandariam um esforço computacional muito grande e estão fora do escopo deste trabalho. Entretanto, ficam como sugestões para trabalhos futuros:

- Análise da convergência de malha para o problema proposto.
- Análise da modelagem de turbulência a ser aplicada, com a utilização de uma lei de parede apropriada para o caso.
- Análise da convergência de pontos de quadratura, ou seja, usar mais fases dispersas para caracterizar a distribuição.
- Adaptação do modelo de Araujo [4] para o caso multidimensional considerando o tempo de residência da fase dispersa como uma variável de campo.
- Realizar as simulações CFD utilizando a geometria tridimensional.

- Desenvolvimento e implementação de métodos mais robustos para a solução da EBP, alternativos ao DQMoM.

Referências Bibliográficas

- [1] H. Schlichting. *Boundary-Layer Theory*. McGraw Hill: Nova York, 7 edition, 1979.
- [2] D. Legendre and J. Magnaudet. The lift force on a spherical bubble in a viscous linear shear flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 368:81–126, 1998.
- [3] H. Rusche. Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions. *Ph.D. Thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, Londres, Reino Unido*, 2002.
- [4] J. F. Mitre. Estudo dos modelos de quebra e coalescência de gotas para o escoamento de emulsões. *Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, RJ, Brasil*, 2010.
- [5] C. Brennen. *Fundamentals of Multiphase Flow*. Cambridge University Press, 2005.
- [6] J. M. Smith and Van Ness. *Introduction to chemical engineering thermodynamics*. McGraw-Hill, 7 edition, 1995.
- [7] G. H. Yeoh and Jiyuan Tu. *Computational Techniques for Multiphase Flows*. Butterworth-Heinemann, 1 edition, 2009.
- [8] D. Ramkrishna and A. W. Mahoney. Population balance modeling. promise for the future. *Chemical Engineering Science*, 57:595–606, 2002.
- [9] L. F. L. R. Silva and P. L. C. Lage. Development and implementation of a poly-dispersed multiphase flow model in openfoam. *Comp. & Chem. Eng.*, 35:2653–2666, 2011.
- [10] M. Ishii. *Thermo-Fluid Dynamic Theory of Two-Phase Flow*. Paris, Eyrolles, 1975.
- [11] M. A. D. Souza E. Silva, L. F. Barca. Estudo experimental sobre o efeito do escoamento através de singularidades na formação de emulsões de água em óleo. síntese de resultados experimentais. *Relatório técnico, Laboratório de Separação de Fases, Instituto de Engenharia Mecânica da UNIFEI, Itajubá*, 2010.
- [12] M. A. D. Souza E. Silva, L. F. Barca. Estudo experimental sobre o efeito do escoamento através de singularidades na formação de emulsões de água em óleo. resultados dos testes da fase 1. *Relatório técnico, Laboratório de Separação de Fases, Instituto de Engenharia Mecânica da UNIFEI, Itajubá*, 2010.
- [13] B. G. M. Van Wachem and A. E. Almstedt. Methods for multiphase computational fluid dynamics. *Chemical Engineering Journal*, 96:81–98, 2003.

- [14] M. Sussman and E. G. Puckett. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 162:301–337, 2000.
- [15] L. F. L. R Silva, C. E. Fontes, and P. L. C. Lage. Front tracking in recirculating flows: a comparison between the tvd and rcm methods in solving the vof equation. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 22:105–116, 2005.
- [16] M. Ishii and T. Hibiki. *Thermo-Fluid Dynamics of Two-Phase Flow*. Springer, New York, EUA, 2006.
- [17] M. Maninnen, V. Taivassalo, and S. Kallio. On the mixture model for multiphase flow. *Tec. Re, 228, Technical Research Centre of Finland*, 1996.
- [18] D. A. Drew and S. L. Passman. *Theory of Multicomponent Fluids*. Springer, 1998.
- [19] R. Byron Bird, Warren E. Stewart, and Edwin N. Lightfoot. *Fenômenos de transporte*. Editora LTC, 2 edition, 2004.
- [20] D. Pflieger, S. Gomes, N. Gilbert et al, and H. G. Wagner. Hydrodynamic simulations of laboratory scale bubble columns fundamental studies of the eulerian-eulerian modelling approach. *Chemical Engineering Science*, 54:5091–5099, 1999.
- [21] S. Sundaresan. Modeling the hydrodynamics of multiphase flow reactors: Current status and challenges. *AIChE Journal*, 46:1102–1105, 2000.
- [22] H. Enwald, E. Peirano, and A-E Almstedt. Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. *International Journal of Multiphase Flow*, 22:21–66, 1996.
- [23] T. R. Auton. The lift force on a spherical body in a rotational flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 183:199–218, 1987.
- [24] D. A. Drew and R. T. Lahey. Some supplemental analysis concerning the virtual mass and lift force on a sphere in a rotating and straining flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 16:1127–1130, 1990.
- [25] R. Clift, J. R. Grace, and M. E. Weber. *Bubbles, Drops and Particles*. Academic Press: Londres, 1978.
- [26] E. Loth. Numerical approaches for motion of dispersed particles, droplets and bubbles. *Progress in Energy and Combustion Science*, 26:161–223, 2000.
- [27] J. Boussinesq. Théorie de l'Écoulement tourbillant. *Mem. Présentés par Divers Savants Acad. Aci. Instr. Fr.*, 23:46–50, 1877.
- [28] B. E. Launder and B. I. Sharma. Application of the energy dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. *Letters in Heat and Mass Transfer*, vol. 1, no.2:131–138, 1974.
- [29] G. Eigenberger A. Sokolichin. Applicability of the standart k-e turbulence model to the dynamic simulation of bubble columns: Part i. detailed numerical simulations. *Chemical Engineering Science*, v. 54:2273–2284, 1999.

- [30] N. Gilbert et al. D. Peleger, S. Gomes. Hydrodynamic simulations of laboratory scale bubble columns fundamental studies of the eulerian-eulerian modelling approach. *Chemical Engineering Science*, v. 54:5091–5099, 1999.
- [31] B. S. Pope. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 1 edition, 2000.
- [32] D. Ramkrishna. *Population Balances - Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering*. Academic Press: Nova York, 2000.
- [33] J. Baldyga and W. Orciuch. Some hydrodynamic aspects of precipitation. *Powder Technology*, 121:9–19, 2001.
- [34] J. F. Mitre. Estudo dos modelos de quebra e coalescência para o escoamento disperso. *Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, RJ, Brasil*, 2006.
- [35] A. K. Chesters. The modelling of coalescence processes in fluid-liquid dispersions: A review of current understanding. *Trans IChemE*, 69, part A:259–270, 1991.
- [36] Y. Liao and D. Lucas. A literature review on mechanisms and models for the coalescence process of fluid particles. *Chemical Engineering Science*, in press, 2010.
- [37] J. S. Turner P. G. Saffman. On the collisions of drops in turbulent clouds. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 1:16–30, 1956.
- [38] G. I. Taylor. The formation of emulsions in definable fields of flow. *Proceedings of the Royal Society of London, Seria A*, 146:501–523, 1934.
- [39] J. O. Hinze. Fundamentals of the hydrodynamic mechanism of splitting in dispersions processes. *AIChE Journal*, 1, n.3:289–295, 1955.
- [40] A. N. Kolmogorov. On the breakage of drops in a turbulent flow. *Dokl. Akad. Navk SSSR*, 66:825–828, 1949.
- [41] V. Cristini, J. Blawdziewicz, and M. Loewenberg. Breakup in stochastic stokes flows: sub-kolmogorov drops in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 492:231–250, 1955.
- [42] CM Tchen. Motion of small particles in skew shape suspended in a viscous liquid. *Journal of Applied Physics*, 25:463–473, 1954.
- [43] J. O. Hinze. *Turbulence*. McGraw-Hill, New York, 1975.
- [44] H. G. Weller, G. Tabor, H. Jasak, and C. Fureby. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. *Computers in physics*, 12:620–631, 1998.
- [45] J. C. Pinto and P. L. C. Lage. *Métodos Numéricos em Problemas de Engenharia Química*. E-papers: Brasil, RJ, 2001.
- [46] J. C. Pinto and P. L. C. Lage. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Taylor & Francis Group: Nova York, 1980.

- [47] C. R. Maliska. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. LTC, Rio de Janeiro, 2 edition, 2004.
- [48] H. K. Versteeg and W. Malalasekera. *An introduction to computational fluid dynamics - The finite volume method*. Longman Scientific & Technical, 1995.
- [49] H. Jasak. Error analysis and stimation for the finite volume method with applications to fluid flows. *Ph.D. Thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, Londres, Reino Unido*, 1996.
- [50] G. H. Weller. Derivation, modelling and solution of the conditionally averaged two-phase flow equations. *Tech. Rep. TR/HGW/02, Nabla Ltd.*, 2002.
- [51] L. F. L. R. Silva. Desenvolvimento de metodologias para simulação de escoamentos polidispersos usando código livre. *Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, RJ, Brasil*, 2008.
- [52] Y. Saad. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. 2nd ed. SIAM, 2 edition, 1995.
- [53] P. L. C. Lage. Comments on the an analytical solution to the population balance equation with coalescence and breakage – the special case with constant number of particles. by d.p. patil j.r.g. andrews [chemical engineering science 53(3) 599 – 601. *Chemical Engineering Science*, v.57, n. 57:4253–4254, 2002.
- [54] B. J. McCoy and G. Madras. Analytical solution for a population balance equation with aggregation and fragmentation. *Chemical Engineering Science*, v.58:3049–3051, 2003.
- [55] S. Kumar and D. Ramkrishna. On the solution of population balance equations by discretization - ii. a moving pivot technique. *Chemical Engineering Science*, v.51, n.8:1333, 1996.
- [56] R. McGraw. Description of the aerosol dynamics by the quadrature method of moments. *Aerosol Science and Technology*, v.27:255–265, 1997.
- [57] D. L. Fox and R. O. Marchisio. Solution of the population balance equation using the direct quadrature method of moments. *Journal of Aerosol Science*, v.36:43–73, 2005.
- [58] J. M. Favero. Comunicação pessoal, 2012.
- [59] L. F. L. R. Silva, R. C. Rodrigues, J. F. Mitre, and P. L. C. Lage. Comparison of the accuracy and performance of quadrature-based methods for population balance problems with simultaneous breakage and aggregation. *Comp. & Chem. Eng.*, 34:286–29, 2010.
- [60] R. G. Gordon. Error bounds in equilibrium statistical mechanics. *A.I.Ch.E. Journal*, 9:322–334, 2003.