

ACOPLAMENTO DE BALANÇO POPULACIONAL À SIMULAÇÃO
COMPUTACIONAL DE ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS POLIDISPERSOS

Ricardo Barbosa Damian

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS
PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE
FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM
ENGENHARIA QUÍMICA.

Aprovada por:

Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.

Prof. Cláudio Patrício Ribeiro Jr., D. Sc.

Prof. Emilio Ernesto Paladino, Dr. Eng.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

JUNHO DE 2007

DAMIAN, RICARDO BARBOSA

Acoplamento de Balanço Populacional
à Simulação Computacional de
Escoamentos Multifásicos Polidispersos
[Rio de Janeiro] 2007

XIII, 92 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ,
M.Sc., Engenharia Química, 2007)

Dissertação - Universidade Federal do
Rio de Janeiro, COPPE

1. Balanço populacional acoplado à CFD
2. Escoamento polidisperso
3. Quebra e coalescência

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

ACOPLAMENTO DE BALANÇO POPULACIONAL À SIMULAÇÃO
COMPUTACIONAL DE ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS POLIDISPERSOS

Ricardo Barbosa Damian

Junho/2007

Orientador: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Programa: Engenharia Química

Simulações de CFD de escoamentos polidispersos devem considerar os efeitos de interações entre partículas, como quebra e agregação, acoplando a equação de balanço populacional (PBE) com a modelagem multifásica. De fato, existe a necessidade de implementação de técnicas numéricas eficientes e precisas para a solução da PBE. O recente método DQMOM (*Direct Quadrature Method of Moments*) tem se mostrado como uma escolha promissora para este acoplamento. O presente trabalho realizou a implementação do método DQMOM no software ANSYS CFX via rotinas de FORTRAN. Rigorosos passos de verificação numérica da implementação foram seguidos utilizando uma solução analítica, que resolve a evolução temporal de um problema de balanço populacional monovariado com núcleos de quebra e coalescência simples. Foram simulados os casos de quebra dominante, coalescência dominante e o caso invariante, onde quebra e coalescência se anulam. Inicialmente, foram realizados testes zero-dimensionais transientes e unidimensionais em regime estacionário para explorar a precisão dos esquemas temporais e advectivos na solução da PBE. Aspectos numéricos importantes foram analisados, como a boa adequação do esquema advectivo padrão do ANSYS CFX baseado em limitadores de fluxo. Em seguida, foi realizada a simulação bidimensional transiente do escoamento laminar de uma emulsão de água em óleo passando por um degrau descendente considerando quebra e coalescência, onde pôde ser verificado o excelente desempenho desta metodologia em campos multidimensionais usando diferentes tipos de malha. Por fim, foram ressaltadas as vantagens da utilização da abordagem de acoplamento proposta neste trabalho, que considera um campo de velocidades individual para cada tamanho de partícula.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

POPULATION BALANCE COUPLING TO COMPUTATIONAL SIMULATION OF
POLYDISPERSED MULTIPHASE FLOW

Ricardo Barbosa Damian

June / 2007

Advisor: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Department: Chemical Engineering

CFD simulation of polydisperse flows must include the effects of particle - particle interaction, as breakage and aggregation, coupling the population balance equation (PBE) with the multiphase modelling. In fact, the implementation of efficient and accurate new numerical techniques to solve the PBE is necessary. The Direct Quadrature Method of Moments, known as DQMOM, came into view as a promising choice for this implementation. The present work accomplished the DQMOM implementation inside the ANSYS CFX software through FORTRAN routines. Rigorous numerical verification steps were followed using an analytical solution, which solves the temporal evolution of a univariate population balance problem with simple breakup and aggregation kernels. The cases of dominant breakup, dominant aggregation and the invariant (breakup equivalent to aggregation) cases were tested. Firstly, transient zero-dimensional and steady-state one-dimensional simulations were performed in order to explore the accuracy of transient and advective schemes in the PBE solution. Important numerical issues were analyzed, such as the good adequacy of the default ANSYS CFX advective scheme based on flux limiters. Next, the transient simulation of a laminar water-in-oil emulsion flow through a two-dimensional backward facing step geometry considering breakage and aggregation was carried out, showing the excellent performance of this methodology in multidimensional fields using different types of mesh. Finally, the advantages of the coupling approach proposed here, in which each particle size group has its own velocity field, were highlighted.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Motivação	1
1.2	Modelagem de Escoamentos Multifásicos	2
1.3	Modelagem por Balanço Populacional	4
1.4	Descrição do Trabalho	6
2	Revisão Bibliográfica	7
2.1	Estrutura do Balanço Populacional	7
2.1.1	A Equação de Balanço Populacional (PBE)	7
2.1.2	Processos de Agregação	9
2.1.3	Processos de Quebra	10
2.1.4	Simplificações Comuns	11
2.2	Métodos Numéricos para a Solução da PBE	13
2.2.1	Método dos Momentos	15
2.2.2	Métodos QMOM e DQMOM	16
2.3	Modelos de Quebra e Coalescência	18
2.4	Troca de Quantidade de Movimento entre Fases	19
2.5	Turbulência em Escoamentos Multifásicos	20
2.6	Acoplamento da PBE com CFD	21
3	Metodologia	25
3.1	Discretização do Balanço Populacional	25
3.2	Implementação no ANSYS CFX	30
3.2.1	Aspectos Numéricos	31
3.2.2	Equações Fluidodinâmicas	33
3.2.3	Equações Adicionais do DQMOM	36
3.2.4	Modelo Homogêneo	38
3.2.5	Rotinas de FORTRAN	40
3.2.6	Inicialização da Distribuição	42

SUMÁRIO

4	Resultados	44
4.1	Solução Analítica para Verificação	44
4.2	Simulação 0D Transiente	46
4.2.1	Estudo da Integração Temporal	54
4.3	Simulação 1D Estacionária	57
4.3.1	Teste de Refino de Malha	58
4.3.2	Teste dos Esquemas Advectivos	60
4.4	Simulação 2D em um Degrau Descendente	61
4.5	Modelo Heterogêneo	72
5	Conclusões e Sugestões	76
5.1	Conclusões	76
5.2	Sugestões para Trabalhos Futuros	79
A	Transformação de Coordenadas	81
A.1	Termos de Coalescência	81
A.2	Termos de Quebra	83
B	Algoritmo Produto-Diferença	85

Nomenclatura

- $B^A(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$ taxa de nascimento por agregação
 $B^B(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$ taxa de nascimento por quebra
 C_D coeficiente de arrasto
 $D^A(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$ taxa de morte por agregação
 $D^B(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$ taxa de morte por quebra
 $G(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$ taxa de crescimento
 $H(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$ taxa líquida de nascimento ou morte por agregação e quebra
 $H_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ taxa líquida de nascimento e morte por agregação e quebra (termo fonte da PBE) de partículas da classe α
 $J(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$ taxa de nucleação
 N número de pontos de quadratura
 N_T número total de partículas
 $P(\mathbf{x}, \mathbf{v} | \mathbf{x}', \mathbf{v}', \mathbf{y}, t)$ função de densidade de probabilidade das partículas formadas pela quebra de uma partícula de estado $(\mathbf{x}', \mathbf{v}')$ vir a possuir o estado (\mathbf{x}, \mathbf{v})
 $P(m | m_\alpha; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ função de densidade de probabilidade das partículas formadas pela quebra de uma partícula de estado m_α vir a possuir o estado m
 $S_{MS,\varphi}$ termo fonte de massa da fase
 S_{ω_α} termo fonte da equação de transporte de ω_α
 S_{ζ_α} termo fonte da equação de transporte de ζ_α
 $\Omega_{\mathbf{v}}$ domínio interno
 $\Omega_{\mathbf{x}}$ domínio externo
 $\Phi(\infty)$ solução em regime estacionário do número total de partículas adimensionado
 $\Phi(\tau)$ número total de partículas adimensionado
 $\bar{H}_k^{(N)}$ momento de ordem k do termo fonte H_α calculado usando a quadratura de N pontos. Idem para $\bar{B}_k^C, \bar{D}_k^C, \bar{B}_k^B$ e \bar{D}_k^B
 β *Blend Factor*, fator de mistura da correção anti-difusiva dos esquemas advectivos do ANSYS CFX
 $\dot{n}_0(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$ idem $J(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$
 η massa adimensional

SUMÁRIO

\mathbf{B}_φ	vetor de forças de corpo atuante na fase
$\mathbf{D}_v(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$	coeficiente de difusão anisotrópica do espaço interno
$\mathbf{D}_x(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$	coeficiente de difusão anisotrópica do espaço externo
\mathbf{M}_φ	vetor de forças interfaciais
$\mathbf{S}_{M,\varphi}$	vetor fonte de quantidade de movimento devido à mudança de fase
$\dot{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$	vetor das taxas de variação das propriedades das partículas
$\dot{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$	vetor de velocidade das partículas
\mathbf{u}_α	velocidade da fase dispersa associada à classe de massa m_α
\mathbf{u}_φ	vetor de velocidade da fase
\mathbf{u}_d	velocidade da fase dispersa
\mathbf{v}	espaço de variáveis internas (propriedades das partículas)
\mathbf{x}	espaço de variáveis externas (coordenadas espaciais)
$\mathbf{y}(\mathbf{x}, t)$	vetor de propriedades das partículas
\mathbf{z}	espaço de variáveis internas e externas
μ_φ	viscosidade dinâmica da fase
μ_k	momento de ordem k da distribuição f
μ_0^0	momento de ordem zero (numero total de partículas por unidade de volume) na condição inicial
μ_1^0	momento de ordem um (massa total de partículas por unidade de volume) na condição inicial
ω_i	peso i do cálculo de quadratura da distribuição f
ω_α	densidade numérica (peso) das partículas da classe α
ω_α^{adm}	peso adimensional
$\partial\Omega_0$	contorno do domínio interno
ϕ	variável escalar genérica
$\phi(\eta, \tau)$	distribuição adimensionada
ρ_φ	densidade da fase
ρ_{ref}	densidade de referência para cálculo do empuxo
τ	tempo adimensional
$v(\mathbf{v})$	volume da partícula com propriedades \mathbf{v}
$\vartheta(\mathbf{x}', \mathbf{v}', \mathbf{y}, t)$	número médio de partículas formado pela quebra da partícula de estado $(\mathbf{x}', \mathbf{v}')$ ($\vartheta \geq 2$)
$\vartheta_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$	número de partículas filhas geradas na quebra de uma partícula mãe de tamanho m_α
ξ_i	abscissa i do cálculo de quadratura da distribuição f
ζ_α^{adm}	abscissa ponderada adimensional
ζ_α	abscissa ponderada ($m_\alpha\omega_\alpha$) das partículas da classe α

SUMÁRIO

- $a(\mathbf{x}, \mathbf{v}'', \mathbf{v}', \mathbf{y}, t)$ frequência de agregação de partículas de estado $(\mathbf{x}, \mathbf{v}'')$ e $(\mathbf{x}, \mathbf{v}')$ integrada no volume físico
- $a_f(\mathbf{x}'', \mathbf{v}'', \mathbf{x}', \mathbf{v}', \mathbf{y}, t)$ frequência de agregação de partículas de estado $(\mathbf{x}'', \mathbf{v}'')$ e $(\mathbf{x}', \mathbf{v}')$
- $a_{\alpha\gamma}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ frequência de coalescência entre partículas de tamanho m_α e m_γ
- $b(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$ frequência de quebra de partículas de estado (\mathbf{x}, \mathbf{v}) integrada no volume físico
- $b_f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$ frequência de quebra de partículas de estado (\mathbf{x}, \mathbf{v})
- $b_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ frequência de quebra de partículas de tamanho m_α
- d_α diâmetro equivalente das partículas da fase α
- d_s diâmetro médio de Sauter
- $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ função de densidade numérica de partículas
- m massa da partícula
- m_α massa característica (abscissa) das partículas da classe α
- m_α^{adm} abscissa adimensional
- r_φ fração volumétrica da fase
- $r_d(\mathbf{x}, t)$ fração volumétrica da fase dispersa
- ERMG métrica de erro definida como o valor médio RMS (*root mean square*) do erro relativo de todos valores calculados
- t tempo

Lista de Figuras

4.1	Solução analítica dos 8 primeiros momentos para o caso invariante .	48
4.2	Solução analítica dos 8 primeiros momentos para o caso de coalescência dominante.	49
4.3	Solução analítica dos 8 primeiros momentos para o caso de quebra dominante.	49
4.4	Solução da DASSL para abscissas e pesos , considerando $N = 4$, para o caso invariante	50
4.5	Solução da DASSL para abscissas e pesos , considerando $N = 4$, para o caso de coalescência dominante.	51
4.6	Solução da DASSL para abscissas e pesos , considerando $N = 4$, para o caso de quebra dominante.	51
4.7	Erro relativo dos momentos da solução da DASSL para o caso invariante	52
4.8	Erro relativo dos momentos da solução da DASSL para o caso de coalescência dominante.	52
4.9	Erro relativo dos momentos da solução da DASSL para o caso de quebra dominante.	53
4.10	Comparação dos pesos obtidos pelo ANSYS CFX e DASSL para o caso de quebra	56
4.11	Domínio e condições de contorno da simulação 1D com 50 volumes.	58
4.12	Valores assumidos pelo <i>Blend Factor</i> β , utilizando o esquema HR na malha de 750 volumes para o caso de quebra.	61
4.13	Geometria 2D do BFS com dimensões paramétricas e indicação das condições de contorno.	63
4.14	Exemplos de malhas hexaédrica e tetraédrica utilizadas na simulação do BFS.	64
4.15	Típico campo de velocidades da fase contínua. Caso de coalescência, malha hexaédrica de 16 mil nós.	66

4.16	Típico campo de fração volumétrica da fase dispersa. Caso de coalescência, malha hexaédrica de 16 mil nós (variações de 0,05%).	66
4.17	Típico campo do número de Reynolds da partícula (<i>escala logarítmica</i>). Caso de coalescência, malha hexaédrica de 16 mil nós (regime de Stokes!).	67
4.18	Posição das linhas horizontal e vertical utilizadas para os estudos de malha. Em evidência o contorno do diâmetro médio de Sauter para o caso de coalescência dominante utilizando a malha hexaédrica mais refinada.	67
4.19	Teste de convergência de malha ao longo da linha horizontal para o caso de coalescência dominante.	68
4.20	Teste de convergência de malha ao longo da linha vertical para o caso de coalescência dominante.	68
4.21	Teste de convergência de malha ao longo da linha horizontal para o caso de quebra dominante.	69
4.22	Teste de convergência de malha ao longo da linha vertical para o caso de quebra dominante.	69
4.23	Gráfico de contorno do diâmetro médio de Sauter para o caso de coalescência dominante utilizando a malha hexaédrica mais refinada.	70
4.24	Gráfico de contorno do diâmetro médio de Sauter para o caso de coalescência dominante utilizando a malha tetraédrica mais refinada.	70
4.25	Gráfico de contorno do diâmetro médio de Sauter para o caso de quebra dominante utilizando malha hexaédrica com 4 mil nós.	71
4.26	Gráfico de contorno do diâmetro médio de Sauter para o caso de quebra dominante utilizando malha hexaédrica com 8 mil nós.	71
4.27	Gráfico de contorno do diâmetro médio de Sauter para o caso de quebra utilizando malha hexaédrica com 16 mil nós.	71
4.28	Gráfico de contorno do diâmetro médio de Sauter para o caso invariante utilizando malha hexaédrica mais refinada (variações de 0,2%).	72
4.29	Comparação do campo de fração volumétrica da fase contínua entre as duas metodologias (variações de 0,22%).	74
4.30	Comparação do campo do diâmetro médio de Sauter da fase dispersa entre as duas metodologias (variações de 0,011%).	74
4.31	Comparação do campo de fração volumétrica da fase contínua entre as duas metodologias considerando o efeito de gravidade . $\downarrow \vec{g}$.	75
A.1	Transformação de coordenadas utilizada no termo de nascimento por coalescência.	82

LISTA DE FIGURAS

A.2	Transformação de coordenadas utilizada no termo de nascimento por quebra.	83
-----	---	----

Lista de Tabelas

4.1	Condição inicial calculada pelo algoritmo PD.	48
4.2	Tempo total de simulação.	55
4.3	Condição inicial resolvida pela DASSL.	55
4.4	Comparação de erros da solução 0D transiente utilizando 1000 pontos de integração.	56
4.5	Parâmetros da simulação 1D estacionária.	57
4.6	Resultados do ERMG (%) das simulações 1D utilizando diferentes malhas hexaédricas uniformes.	59
4.7	Resultados do ERMG (%) das simulações 1D utilizando diferentes esquemas advectivos.	60
4.8	Propriedades físicas e condições de entrada da mistura bifásica. . . .	63
4.9	Parâmetros das simulações para os casos de coalescência e quebra dominante.	65

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação

Nos últimos anos a indústria de petróleo vem liderando a economia brasileira em faturamento e em volume de investimentos. Atualmente o país vive uma situação de vanguarda em relação às fontes de combustíveis. Somos auto-suficientes em petróleo, possuímos longa experiência com a produção de etanol, aproveitamos também o gás natural e já estamos na era do biodiesel. Além da posição e recursos geográficos que nos beneficiam, muito disto se deve aos elevados investimentos que a PETROBRAS – Petróleo Brasileiro S/A tem realizado em pesquisa e desenvolvimento nas últimas décadas. Estamos vivendo a época em que a expectativa de que a produção do petróleo mundial venha a diminuir nas próximas décadas se torna cada vez mais certa. Em vista deste cenário, a indústria de petróleo tem se preocupado cada vez mais com a melhoria do aproveitamento do petróleo de hoje e com a busca de novas forma de energia.

A técnica de CFD (*Computational Fluid Dynamics*) têm sido utilizada há décadas com bastante sucesso na engenharia, sobretudo pelo setor aeronáutico. No campo da engenharia química, hoje em dia CFD permite reproduzir detalhes locais do escoamento em equipamentos de forma tridimensional e transiente, além de possibilitar a análise de complexos fenômenos físicos, como escoamentos multifásicos, turbulentos e reacionais. CFD atualmente é definitivamente uma técnica barata, eficiente e altamente indispensável para a pesquisa, desenvolvimento e projeto de engenharia. A computação paralela tem expandido as fronteiras do, já bastante rápido, desenvolvimento dos processadores. Não menos rápido tem sido o desenvolvimento da tecnologia numérica presente hoje nos simuladores de CFD.

O emprego de CFD têm crescido em torno de 30 a 40% ao ano na indústria brasileira (dados da empresa ESSS) e não tem sido diferente na indústria de petróleo. Na PETROBRAS, as aplicações se iniciaram há duas décadas de forma bastante modesta. As primeiras análises eram uni ou bidimensionais, em regime estacionário, monofásicas e em geometria retangular. Foram então surgindo as análises em regime turbulento, transiente e em geometrias complexas. Hoje são simulados vários equipamentos acoplados, incluindo fenomenologia complexa e num número de aplicações impressionante. A tendência é utilizar CFD para resolver problemas ainda mais acoplados e em melhor detalhamento. Neste sentido, técnicas como LES (*Large Eddy Simulation*), otimização acoplada à CFD e balanço populacional acoplado à CFD, que até então eram consideradas inviáveis na indústria, estão ganhando espaço.

Os escoamentos multifásicos polidispersos estão presentes em diversos processos na indústria de petróleo, como por exemplo:

- Na área de **Refino**: Leitos Fluidizados, Colunas de Destilação, Vasos Dessalgadores, Reatores em Coluna de Borbulhamento, Tanques Agitados, Sprays, Emulsões, etc;
- Na área de **Exploração e Produção**: Hidrociclones, Flotadores, Elevação Artificial, Bombeamento e Medição de Escoamentos Multifásicos, etc.

1.2 Modelagem de Escoamentos Multifásicos

Escoamentos multifásicos caracterizam-se pela presença de uma interface entre as fases. Conforme a morfologia da interface, eles podem ser subdivididos em dispersos ou separados. Conforme as fases presentes, eles podem ser classificados como gás-líquido, líquido-líquido, líquido-sólido ou gás-sólido. Nos escoamentos dispersos, as partículas interagem entre si. Elas colidem e podem se agregar. Elas podem quebrar devido a colisões ou devido às interações com a fase contínua. Desta forma, a ocorrência de partículas com tamanhos diferentes é mais uma regra do que exceção em escoamentos dispersos. Em aplicações de escoamentos multifásicos dispersos, as partículas podem ser diferenciadas por diversas propriedades, como: tamanho, forma, composição, energia, etc. Quando as partículas não podem ser assumidas como iguais, o escoamento é classificado como multifásico polidisperso.

Em equipamentos separadores, é fundamental representar o perfil do escoamento

da fase contínua e a distribuição de tamanhos da fase dispersa. Em reatores, além do perfil do escoamento, é fundamental conhecer a densidade de área interfacial para efetuar os cálculos de transferência de calor e de massa, mudança de fase e reações. Em escoamentos polidispersos, a distribuição de tamanhos e as interações entre as partículas afetam não só o perfil de velocidade das fases, mas podem inclusive alterar o regime do escoamento.

Um exemplo de um equipamento multifásico bastante empregado na indústria é a coluna de borbulhamento, na qual observa-se um escoamento bifásico gás-líquido, sendo a fase dispersa formada por bolhas. Quando a velocidade superficial do gás ultrapassa um determinado limite, ocorre a transição do regime homogêneo de borbulhamento para o heterogêneo. O regime heterogêneo de borbulhamento se caracteriza pela presença de bolhas de diferentes tamanhos (e forma) que sobem com diferentes velocidades. A transição de regime ocorre justamente quando os processos de quebra e coalescência tornam-se significativos. Estas interações entre as partículas (bolhas) controlam a sua distribuição de tamanho, o que afeta diretamente a transferência de quantidade de movimento, calor e massa. Por outro lado, tais interações terão um efeito intensificador no processo de mistura, afetando a temperatura e a concentração de componentes nas bolhas. O regime heterogêneo é intrinsecamente instável, tridimensional e transiente e a sua correta representação deve levar isso em conta. Grande parte dos processos industriais em coluna de borbulhamento são realizados no regime heterogêneo, aumentando, portanto a motivação em modelar corretamente este processo complexo. O exemplo de coluna de borbulhamento será muito utilizado nesta dissertação, pois é um processo muito importante e tem sido a principal aplicação onde a técnica de balanço populacional aplicada à CFD vêm sendo estudada. Os trabalhos de JOSHI (2001), HAGESAETHER (2002), KRISHNA & van BATEN (2003) e JAKOBSEN *et al.* (2005) serviram de referência para o presente trabalho.

A simulação computacional de escoamentos multifásicos com detalhamento suficiente para capturar as escalas turbulentas e a forma das partículas, chamada de DNS (*Direct Numeric Simulation*) multifásico, ainda está distante das aplicações em escala industrial. Desta forma, é necessário o emprego de médias estatísticas para representar o escoamento com o objetivo de redução de custo computacional. A mais tradicional das médias empregadas na mecânica dos fluidos é a média de Reynolds. Muitos dos modelos de turbulência presentes ainda hoje utilizam esta média temporal. De forma semelhante, os modelos de escoamentos multifásicos empregam diversas médias.

Um dos resultados destas técnicas de representação média dos escoamentos multifásicos é o modelo multifluido, também chamado de modelo Euleriano-Euleriano, que consiste em equações de conservação para os campos médios das variáveis de cada fase (massa, quantidade de movimento, energia, composição, turbulência, etc.) ponderadas pela fração de volume de cada fase (ISHII, 1975; DREW & PRASSMAN, 1999; ANSYS CFX-11.0 Solver Theory Guide, 2006). Durante o processo de média estatística, surgem termos de troca entre as fases que precisam ser modelados considerando um comprimento característico da interface. Escoamentos dispersos são aqueles em que uma fase é um domínio contínuo conectado e todas as outras fases estão dispersas na forma de pequenas porções, as partículas, que podem ser gotas, bolhas ou partículas sólidas. Neste caso, o diâmetro da partícula caracteriza a escala de comprimento da interface entre as fases e é comumente usado na modelagem de todos os termos de troca interfaciais, os quais modelam a interação entre as partículas e a fase contínua. No entanto, eles não consideram as interações entre as partículas.

Atualmente existem dois grandes desafios na modelagem de escoamentos multifásicos: a troca de quantidade de movimento entre partículas durante colisões, a qual é especialmente importante para escoamentos gás-sólido densos (escoamentos granulares), e as mudanças em todas as outras propriedades das partículas devido à quebra e agregação. O primeiro problema tem sido modelado analisando cada uma das colisões utilizando Método dos Elementos Discretos (BERTRAND *et al.* (2005), entre outros) ou pela inclusão da média estatística dos efeitos das colisões no modelo multifluido conforme a Teoria Cinética Granular (GIDASPOW, 1994). O último problema é analisado pela técnica de balanço populacional (RAMKRISHNA, 2000), a qual inclui o efeito médio estatístico dos processos de quebra e agregação de partículas.

1.3 Modelagem por Balanço Populacional

Hoje em dia, grande parte da modelagem de escoamentos multifásicos utilizando CFD comumente empregada na indústria é essencialmente monodispersa. São utilizadas diversas correlações para cada regime de escoamento. A técnica de balanço populacional acoplada a CFD tem se mostrado uma ferramenta poderosa para representar a evolução de distribuição de partículas nos mais diversos equipamentos e processos, possibilitando uma representação mais ampla do padrão de escoamento

nos diferentes regimes.

Além da modelagem dos processos que afetam a densidade numérica de partículas, como quebra, agregação, nucleação e crescimento, ela também leva em conta a variação das propriedades das partículas devido à interação com outras partículas e com a fase contínua. A principal limitação para o acoplamento desta técnica com CFD é o esforço computacional extra adicionado à simulação de CFD.

As técnicas clássicas de solução da PBE (*Population Balance Equation*, isto é, Equação de Balanço Populacional), como Monte Carlo ou métodos seccionais, são muito caras computacionalmente. Portanto, novos métodos mais precisos e eficientes são necessários. Um novo método, chamado de DQMOM (*Direct Quadrature Method of Moments*) (MARCHISIO & FOX, 2005), tem se mostrado promissor para o acoplamento PBE-CFD. No DQMOM, a distribuição é representada por abscissas e pesos que estão posicionados de maneira ótima para minimizar os erros de quadratura no cálculo dos termos integrais de quebra e coalescência. A principal vantagem do DQMOM é que são necessárias poucas abscissas para uma representação conveniente dos efeitos da distribuição das partículas. Além disso, ao longo da simulação de CFD, as abscissas e pesos se adaptam localmente, isto é, em cada ponto da malha, para melhor representar a distribuição. Este ganho de precisão do DQMOM em relação aos outros métodos torna viável computacionalmente o uso de balanço populacional acoplado à uma simulação de CFD para a solução de escoamentos polidispersos.

Além do problema numérico da solução acoplada de PBE-CFD, outro grande desafio na simulação dos escoamentos multifásicos polidispersos é a modelagem dos termos de quebra e coalescência. Trabalhos anteriores, como o de ARAÚJO (2006), concluíram que os modelos disponíveis atualmente na literatura ainda não são adequados, sendo a principal causa de erro nas simulações. Além disso, as propostas de modelagem da turbulência em escoamentos multifásicos e das correlações para os termos de troca de quantidade de movimento entre as fases (arrasto, sustentação, massa virtual, dispersão turbulenta, entre outros) não estão unificadas na literatura. Com tantas incertezas na modelagem, validações experimentais destes tipos de escoamentos se tornam muito difíceis.

1.4 Descrição do Trabalho

O presente trabalho é focado na implementação do método DQMOM no software ANSYS CFX via rotinas de FORTRAN para a solução de escoamentos multifásicos polidispersos considerando quebra e coalescência. Dentro do escopo desta dissertação, não será dada atenção à modelagem das forças interfaciais de troca de quantidade de movimento e nem ao uso de modelos realísticos de quebra e coalescência. Serão realizados passos rigorosos de verificação numérica da implementação com o objetivo de aprender sobre o comportamento do acoplamento e garantir precisão numérica para a solução da PBE dentro do código de CFD. Deste modo, futuros trabalhos poderão prosseguir com mais segurança nos próximos estágios de modelagem.

A verificação numérica foi executada utilizando a solução analítica de McCOY & MADRAS (2003), que resolve a evolução temporal de um problema de balanço populacional monovariado com núcleos de quebra e coalescência simples. Foram testados casos de quebra dominante, coalescência dominante e o caso invariante, onde quebra e coalescência se anulam. Inicialmente foram realizados testes transientes zero-dimensionais para investigar a precisão da integração temporal. Depois a solução zero-dimensional transiente foi transformada para unidimensional em regime estacionário considerando um campo de velocidade constante. Então, foram realizados diversos testes de refino de malha unidimensionais e um estudo dos esquemas advectivos. Em seguida, foi realizada a simulação bidimensional transiente do escoamento laminar de uma emulsão de água em óleo passando por um degrau descendente, com o objetivo de avaliar o comportamento da metodologia em campos multidimensionais. Por fim, foram ressaltadas as vantagens da utilização da abordagem de acoplamento proposta neste trabalho, que considera um campo de velocidades individual para cada tamanho de partícula.

No segundo capítulo deste trabalho, será apresentada uma revisão crítica dos trabalhos da literatura relacionados ao escopo deste trabalho. Em seguida, no capítulo 3, será descrita a metodologia de modelagem e implementação do DQMOM no ANSYS CFX. Então, no capítulo 4, serão apresentadas as simulações 0D, 1D e 2D, relatando-se os detalhes das técnicas de análise de erros e interpretação dos resultados. Por fim, no capítulo 5, as conclusões deste estudo são listadas e algumas propostas para trabalhos futuros são sugeridas.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

2.1 Estrutura do Balanço Populacional

No ano de 2000, RAMKRISHNA (2000) lançou o principal livro sobre o tema “Balanço Populacional”, estabelecendo a modelagem de balanço populacional como uma ferramenta básica para ser aplicada a todos os processos que envolvem interação entre partículas. Neste livro, é apresentada uma descrição matemática formal e generalizada do assunto, facilitando a compreensão ampla do tema e a adaptação da técnica para casos específicos.

Esta seção apresenta a equação de balanço populacional (PBE), incluindo a sua formulação completa e o detalhamento dos termos de agregação e quebra de partículas. Devido à generalidade e à complexidade da modelagem da forma mais geral da PBE, serão apresentadas algumas hipóteses simplificadoras usuais.

2.1.1 A Equação de Balanço Populacional (PBE)

Define-se o espaço de estado das partículas, com vetor posição \mathbf{z} , como sendo o espaço formado pelo produto cartesiano das coordenadas internas, \mathbf{v} , e externas, \mathbf{x} . As coordenadas externas são as coordenadas do espaço físico tridimensional. As coordenadas internas são as propriedades das partículas usadas para a sua diferenciação, como tamanho, idade, forma, temperatura, concentração de componentes, etc. Por convenção, o vetor de coordenadas internas tem dimensão d , referente ao

número de propriedades internas das partículas.

Todas as c variáveis da fase contínua que afetam o comportamento de partículas individuais são agrupadas em um único vetor, $\mathbf{y}(\mathbf{x}, t)$, definido como o vetor de propriedades da fase contínua, conforme:

$$\mathbf{y}(\mathbf{x}, t) = \{y_1(\mathbf{x}, t), y_2(\mathbf{x}, t), \dots, y_c(\mathbf{x}, t)\} \quad (2.1)$$

É definida $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ como a função de distribuição ou densidade numérica de partículas, que quantifica o número médio esperado de partículas, por unidade de volume do espaço de estado, com propriedades dadas por \mathbf{v} existentes no ponto \mathbf{x} e no instante t . A partir da densidade numérica, variáveis importantes para os sistemas polidispersos podem ser calculadas. Por exemplo, o número total esperado de partículas, N_T , no domínio $\Omega_{\mathbf{x}} \times \Omega_{\mathbf{v}}$ do espaço de estado de partículas (\mathbf{x}, \mathbf{v}) é expresso por:

$$N_T(t) \doteq \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \int_{\Omega_{\mathbf{v}}} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) dV_{\mathbf{v}} dV_{\mathbf{x}} \quad (2.2)$$

Da mesma forma, outras funções de distribuição podem ser definidas para a população de partículas. Considerando $v(\mathbf{v})$ como o volume da partícula com propriedades \mathbf{v} , a densidade de volume de partículas pode ser definida como o produto $v(\mathbf{v})f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$. Assim, a fração volumétrica da fase dispersa incluindo todas as partículas, r_d , é dada por:

$$r_d(\mathbf{x}, t) \doteq \int_{\Omega_{\mathbf{v}}} v(\mathbf{v})f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) dV_{\mathbf{v}} \quad (2.3)$$

Ao contrário da densidade numérica, as densidades de massa e de volume se referem a uma propriedade extensiva do material disperso e, conseqüentemente, são variáveis mais relevantes em aplicações práticas.

A taxa de variação das coordenadas do espaço externo é definida por $\dot{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$, também interpretada como o vetor de velocidade das partículas. Da mesma forma, $\dot{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$ é taxa de variação das coordenadas do espaço interno, também interpretada como o vetor das taxas de variação das propriedades das partículas. $\mathbf{D}_x(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$ e $\mathbf{D}_v(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$ são matrizes quadradas de dimensão 3 e d , respectivamente, que representam os coeficientes de difusão anisotrópica nos espaços interno e externo. Normalmente o efeito de difusividade é associado a variações randômicas, como originadas de movimento browniano ou de turbulência. Por fim, $H(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$

é taxa líquida de nascimento ou morte por quebra ou agregação por unidade do espaço de estado.

Por simplicidade de escrita, as dependências em relação ao tempo, às variáveis internas e externas e às variáveis da fase contínua serão suprimidas na representação das equações abaixo. Assim, podemos agora apresentar a PBE generalizada proposta por RAMKRISHNA (2000):

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot [\dot{\mathbf{x}}f] + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot [\dot{\mathbf{v}}f] = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot [\mathbf{D}_x \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{D}_x^T f)] + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot [\mathbf{D}_v \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \cdot (\mathbf{D}_v^T f)] + H \quad (2.4)$$

Para facilidade de entendimento, pode-se agrupar os termos referentes às mudanças no espaço interno definindo $G(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$ como o divergente do fluxo das variáveis internas em seu respectivo estado. Assim, a equação geral para o termo de crescimento é dada por¹:

$$G = -\nabla_{\mathbf{v}} \cdot [\dot{\mathbf{v}}f] + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot [\mathbf{D}_v \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \cdot (\mathbf{v}\mathbf{D}_v^T f)] \quad (2.5)$$

O efeito de nucleação é normalmente modelado como uma condição de fluxo de partículas no contorno $\partial\Omega_0$ do domínio interno onde as partículas tem tamanho nulo:

$$\dot{n}_0(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) = \dot{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t), \quad \mathbf{v} \in \partial\Omega_0 \quad (2.6)$$

onde \dot{n}_0 é a taxa de nucleação de partículas. É possível também considerar o efeito de nucleação de partículas com tamanho não nulo. Neste caso, a nucleação aparece como um termo fonte na PBE na forma $J(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot [\dot{\mathbf{x}}f] = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot [\mathbf{D}_x \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{D}_x^T f)] + H + G + J \quad (2.7)$$

O termo $H(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$ possui os termos de nascimento (B) e morte (D) por quebra (índice superior B) e agregação (índice superior A), conforme:

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) = B^A(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) - D^A(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) + B^B(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) - D^B(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) \quad (2.8)$$

2.1.2 Processos de Agregação

Define-se a frequência de agregação $a_f(\mathbf{x}''', \mathbf{v}''', \mathbf{x}', \mathbf{v}', \mathbf{y}, t)$ como a fração do par de partículas estado $(\mathbf{x}''', \mathbf{v}''')$ e $(\mathbf{x}', \mathbf{v}')$ que se agregam por unidade de tempo.

¹Alguns exemplos didáticos do significado físico e aplicação dos termos advectivos e difusivos do espaço de estado podem ser encontrados no livro RAMKRISHNA (2000), pp. 37–44.

As taxas de nascimento e morte por agregação, que fazem parte do termo fonte da EBP, mostrado na equação 2.8, são dadas por RAMKRISHNA (2000) na forma:

$$B^A(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) = \frac{1}{\delta} \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \int_{\Omega_{\mathbf{v}}} a_f(\mathbf{x}'', \mathbf{v}''; \mathbf{x}', \mathbf{v}'; \mathbf{y}, t) f(\mathbf{x}'', \mathbf{v}'', t) f(\mathbf{x}', \mathbf{v}', t) \frac{\partial(\mathbf{x}'', \mathbf{v}'')}{\partial(\mathbf{x}, \mathbf{v})} dV_{\mathbf{v}'} dV_{\mathbf{x}'} \quad (2.9)$$

$$D^A(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) = \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \int_{\Omega_{\mathbf{v}}} a_f(\mathbf{x}, \mathbf{v}; \mathbf{x}', \mathbf{v}'; \mathbf{y}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) f(\mathbf{x}', \mathbf{v}', t) dV_{\mathbf{v}'} dV_{\mathbf{x}'} \quad (2.10)$$

onde δ representa o número de vezes que pares idênticos foram considerados no intervalo de integração, de forma que $1/\delta$ corrige a redundância. O termo $\partial(\mathbf{x}'', \mathbf{v}'')/\partial(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ corresponde ao jacobiano da transformação de coordenadas, dado por:

$$\frac{\partial(\mathbf{x}'', \mathbf{v}'')}{\partial(\mathbf{x}, \mathbf{v})} = \begin{vmatrix} \frac{\partial \mathbf{x}''_1}{\partial \mathbf{x}_1} & \frac{\partial \mathbf{x}''_1}{\partial \mathbf{x}_2} & \frac{\partial \mathbf{x}''_1}{\partial \mathbf{x}_3} & \frac{\partial \mathbf{x}''_1}{\partial \mathbf{v}_1} & \dots & \frac{\partial \mathbf{x}''_1}{\partial \mathbf{v}_n} \\ \frac{\partial \mathbf{x}''_2}{\partial \mathbf{x}_1} & \frac{\partial \mathbf{x}''_2}{\partial \mathbf{x}_2} & \frac{\partial \mathbf{x}''_2}{\partial \mathbf{x}_3} & \frac{\partial \mathbf{x}''_2}{\partial \mathbf{v}_1} & \dots & \frac{\partial \mathbf{x}''_2}{\partial \mathbf{v}_n} \\ \frac{\partial \mathbf{x}''_3}{\partial \mathbf{x}_1} & \frac{\partial \mathbf{x}''_3}{\partial \mathbf{x}_2} & \frac{\partial \mathbf{x}''_3}{\partial \mathbf{x}_3} & \frac{\partial \mathbf{x}''_3}{\partial \mathbf{v}_1} & \dots & \frac{\partial \mathbf{x}''_3}{\partial \mathbf{v}_n} \\ \frac{\partial \mathbf{v}''_1}{\partial \mathbf{x}_1} & \frac{\partial \mathbf{v}''_1}{\partial \mathbf{x}_2} & \frac{\partial \mathbf{v}''_1}{\partial \mathbf{x}_3} & \frac{\partial \mathbf{v}''_1}{\partial \mathbf{v}_1} & \dots & \frac{\partial \mathbf{v}''_1}{\partial \mathbf{v}_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial \mathbf{v}''_n}{\partial \mathbf{x}_1} & \frac{\partial \mathbf{v}''_n}{\partial \mathbf{x}_2} & \frac{\partial \mathbf{v}''_n}{\partial \mathbf{x}_3} & \frac{\partial \mathbf{v}''_n}{\partial \mathbf{v}_1} & \dots & \frac{\partial \mathbf{v}''_n}{\partial \mathbf{v}_n} \end{vmatrix} \quad (2.11)$$

Ele converte o número de agregações por unidade de volume do espaço de estado $(\mathbf{x}'', \mathbf{v}'')$, dada por $a_f(\mathbf{x}'', \mathbf{v}''; \mathbf{x}', \mathbf{v}'; \mathbf{y}, t) f(\mathbf{x}'', \mathbf{v}'', t) f(\mathbf{x}', \mathbf{v}', t) dV_{\mathbf{v}'} dV_{\mathbf{x}'}$, no número de agregações por unidade de volume do espaço de estado $(\mathbf{x}, \mathbf{v})^2$.

O chamado modelo de agregação consiste na modelagem da frequência de agregação, $a_f(\mathbf{x}'', \mathbf{v}''; \mathbf{x}', \mathbf{v}'; \mathbf{y}, t)$, oriunda de um ou mais mecanismos físicos. Existem na literatura várias propostas para a modelagem deste termo, normalmente específicas para cada tipo de aplicação.

2.1.3 Processos de Quebra

As taxas de nascimento e morte por quebra que fazem parte do termo fonte da EBP, mostrado na equação (2.8), são propostas por RAMKRISHNA (2000) na forma:

$$B^B(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) = \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \int_{\Omega_{\mathbf{v}}} \vartheta(\mathbf{x}', \mathbf{v}', \mathbf{y}, t) b_f(\mathbf{x}', \mathbf{v}', \mathbf{y}, t) P(\mathbf{x}, \mathbf{v} | \mathbf{x}', \mathbf{v}', \mathbf{y}, t) f(\mathbf{x}', \mathbf{v}', t) dV_{\mathbf{v}'} dV_{\mathbf{x}'} \quad (2.12)$$

²Um exemplo didático do significado e uso deste jacobiano da transformação de coordenadas pode ser encontrado no livro RAMKRISHNA (2000), pp. 84–92.

$$D^B(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) = b(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad (2.13)$$

onde $\vartheta(\mathbf{x}', \mathbf{v}', \mathbf{y}, t)$ é o número médio de partículas formado pela quebra da partícula de estado $(\mathbf{x}', \mathbf{v}')$ ($\vartheta \geq 2$), $P(\mathbf{x}, \mathbf{v} | \mathbf{x}', \mathbf{v}', \mathbf{y}, t)$ é a função de densidade de probabilidade das partículas formadas pela quebra de uma partícula de estado $(\mathbf{x}', \mathbf{v}')$ vir a possuir o estado (\mathbf{x}, \mathbf{v}) e $b_f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$ é a frequência de quebra, ou seja, é a fração de partículas no estado (\mathbf{x}, \mathbf{v}) que quebra em uma unidade de tempo.

O modelo de quebra consiste na modelagem dos termos $\vartheta(\mathbf{x}', \mathbf{v}', \mathbf{y}, t)$, $P(\mathbf{x}, \mathbf{v} | \mathbf{x}', \mathbf{v}', \mathbf{y}, t)$ e $b_f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$. Da mesma forma que os modelos de quebra, a literatura apresenta diversas propostas para a modelagem destes termos, usualmente específicas para cada tipo de aplicação.

2.1.4 Simplificações Comuns

Devido a generalidade e complexidade da modelagem de balanço populacional, normalmente são adotadas algumas simplificações na PBE e no desenvolvimento de funções de agregação e quebra (RAMKRISHNA, 2000).

A primeira simplificação a ser adotada é a de agregação local. Desta forma, as posições \mathbf{x}' e \mathbf{x}'' das duas partículas que aglomeram e a posição \mathbf{x} da partícula aglomerada são considerada idênticas. Assumindo a hipótese de agregação local e efetuando a integração no volume físico as equações (2.9) e (2.10) são simplificadas conforme:

$$B^A(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) = \frac{1}{\delta} \int_{\Omega_{\mathbf{v}}} a(\mathbf{x}, \mathbf{v}'', \mathbf{v}', \mathbf{y}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}'', t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t) \frac{\partial(\mathbf{v}'')}{\partial(\mathbf{v})} dV_{\mathbf{v}'} \quad (2.14)$$

$$D^A(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) = \int_{\Omega_{\mathbf{v}}} a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{v}', \mathbf{y}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t) dV_{\mathbf{v}'} \quad (2.15)$$

Note que agora $a(\mathbf{x}, \mathbf{v}'', \mathbf{v}', \mathbf{y}, t)$ é a frequência de agregação de partículas de estado $(\mathbf{x}, \mathbf{v}'')$ e $(\mathbf{x}, \mathbf{v}')$ integrada no volume físico.

Considerando o problema multivariado com d variáveis internas e a hipótese de agregação local, o jacobiano de transformação de coordenadas pode ser simplificado

conforme:

$$\frac{\partial(\mathbf{v}'')}{\partial(\mathbf{v})} = \begin{vmatrix} \frac{\partial v''_1}{\partial v_1} & \dots & \frac{\partial v''_1}{\partial v_d} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial v''_d}{\partial v_1} & \dots & \frac{\partial v''_d}{\partial v_d} \end{vmatrix} \quad (2.16)$$

Em problemas monovariados que adotem uma variável interna que possua a propriedade aditiva na agregação, o jacobiano de transformação se torna unitário. É bastante comum utilizar massa ou volume como variável interna da distribuição para simplificar a forma dos termos da PBE.

Quando os processos de quebra ocorrem em uma escala de tempo muito menor do que a evolução da população, pode-se adotar a hipótese de quebra instantânea. Desta maneira, as posições da partícula mãe \mathbf{x} e de suas filhas \mathbf{x}' podem ser consideradas iguais. Esta hipótese aplicada à equação (2.12) para nascimento por quebra resulta em:

$$B^B(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t) = \int_{\Omega_{\mathbf{v}}} \vartheta(\mathbf{x}, \mathbf{v}', \mathbf{y}, t) b(\mathbf{x}, \mathbf{v}', \mathbf{y}, t) P(\mathbf{x}, \mathbf{v} | \mathbf{v}'; \mathbf{y}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t) dV_{\mathbf{v}'} \quad (2.17)$$

Note que agora $b(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, t)$ é a frequência de quebra de partículas de estado (\mathbf{x}, \mathbf{v}) integrada no volume físico.

Os termos difusivos da equação (2.4) estão relacionados a fenômenos aleatórios não modelados, como efeitos de turbulência. Quando as partículas estão imersas em uma fase contínua cuja modelagem multifásica já trata a questão do espalhamento das partículas por dispersão turbulenta, é mais conveniente não adotar o termo difusivo (do espaço externo) na PBE.

Por fim, a dedução dos métodos numéricos no presente trabalho considera um problema de balanço populacional monovariado, sendo que a massa é a variável interna. Quebra e agregação são consideradas assumindo agregação local, quebra instantânea e desprezando os termos difusivos, a nucleação e o crescimento de partículas. Desta forma, após terem sido feitas estas considerações e as devidas substituições de variáveis ($\mathbf{v} = m$ e $m = m' + m''$), a PBE empregada neste trabalho

simplifica para:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial f(\mathbf{x}, m, t)}{\partial t} &+ \nabla_{\mathbf{x}} \cdot [\dot{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, m, \mathbf{y}, t)f(\mathbf{x}, m, t)] \\
 &= \frac{1}{2} \int_0^m a(\mathbf{x}, m - m', m', \mathbf{y}, t)f(\mathbf{x}, m - m', t)f(\mathbf{x}, m', t) dm' \\
 &- f(\mathbf{x}, m, t) \int_0^\infty a(\mathbf{x}, m, m', \mathbf{y}, t)f(\mathbf{x}, m', t) dm' \\
 &+ \int_m^\infty \vartheta(\mathbf{x}, m', \mathbf{y}, t)b(\mathbf{x}, m', \mathbf{y}, t)P(\mathbf{x}, m | m'; \mathbf{y}, t)f(\mathbf{x}, m', t) dm' \\
 &- b(\mathbf{x}, m, \mathbf{y}, t)f(\mathbf{x}, m, t) \tag{2.18}
 \end{aligned}$$

2.2 Métodos Numéricos para a Solução da PBE

Conforme foi visto, a PBE é uma equação integro-diferencial com dependência temporal e espacial (espaço interno e externo) com forte presença de termos não-lineares. O emprego de soluções analíticas somente se torna viável em situações bastante simples, usualmente não-realísticas. A exemplo desta afirmação, os trabalhos de PATIL & ANDREWS (1998), LAGE (2002) e McCOY & MADRAS (2003) mostram típicas soluções analíticas para PBEs monovariadas com apenas dependência temporal. Entre as técnicas analíticas usuais, estão a Transformada de Laplace (exata), o Método das Características (exata) e o Método das Aproximações Sucessivas (aproximada), conforme descrito por RAMKRISHNA (2000), além do Método das Gerações Sucessivas (aproximada) proposto por LIOU *et al.* (1997). Ademais, para a solução de problemas mais complexos, são empregados métodos numéricos.

Os métodos estocásticos de Monte Carlo simulam o comportamento do sistema usando técnicas de geração de números aleatórios para realizar as funções de probabilidade do sistema (RAMKRISHNA, 2000). Deste modo, o cálculo direto das funções integrais e diferenciais é substituído pela simulação estocástica do sistema. Ao contrário da abordagem determinística, a abordagem estocástica modela os fenômenos de nucleação, crescimento, quebra e agregação como processos discretos e aleatórios.

O Método dos Resíduos Ponderados é uma técnica geral para a solução de equações diferenciais parciais. Neste caso, tenta-se aproximar a função que é a solução da equação através de sua expansão em uma base de funções conhecidas. A solução

é obtida pela substituição desta expansão funcional com seus coeficientes a determinar na equação, cujos resíduos são convenientemente ponderados, isto é, integrais da equação no domínio são igualadas a zero. Estes resíduos formam um conjunto de equações algébricas (ou diferenciais ordinárias) linearmente independentes em termos dos coeficientes da expansão. Uma revisão sobre os métodos de resíduos ponderados pode ser encontrada em RAMKRISHNA (2000) e PINTO & LAGE (2001).

O Método das Classes (CM) se baseia na discretização do domínio das variáveis internas, representando a distribuição da população neste domínio através de um número finito de classes de partículas. Desta forma, este método transforma a PBE integro-diferencial em um sistema de equações diferenciais de solução numérica bem estabelecida (RAMKRISHNA, 2000). Cada uma destas “classes” é um agrupamento de partículas que possuem, supostamente, as mesmas propriedades. Matematicamente, cada classe é representada por uma função delta de Dirac em um ponto no domínio interno, chamado de pivô.

Este método de discretização foi uma das primeiras técnicas a ser acoplada a uma simulação de CFD (LO, 1996), pois permite que as classes resultantes da discretização do domínio interno sejam resolvidas como equações de transporte adicionais nas simulações de CFD. No entanto, foi verificado em diversos trabalhos (KUMAR & RAMKRISHNA, 1996a; LO, 1996; OLMOS *et al.*, 2001, 2003; SANYAL *et al.*, 2005; CHEN *et al.*, 2005b; WANG *et al.*, 2006) que é necessário um número muito grande de classes (entre 20 e 40) para se representar com boa precisão uma distribuição de tamanho de partículas, aumentando demasiadamente o custo computacional.

RAMKRISHNA (2000) descreve em seu livro a evolução deste método. A primeira versão do CM utilizou uma metodologia relativamente simples, empregando o teorema do valor médio e malhas uniformes. A principal desvantagem desta forma de discretização é a impossibilidade de refinamento da malha discreta das classes devido a uma inconsistência interna do método para malhas não-uniformes. Visando a melhorar a precisão do CM, KUMAR & RAMKRISHNA (1996a) propuseram uma nova abordagem que conserva número e massa (ou dois outros momentos quaisquer) na solução das equações diferenciais das densidades numéricas das classes, tornando então possível o uso de malhas não-uniformes (geométricas). Em seu trabalho seguinte, KUMAR & RAMKRISHNA (1996b) apresentam o CM com a possibilidade de utilizar pivôs móveis, de forma que a posição das abscissas que representam a distribuição se ajustem de forma a eliminar os erros de discretização. No último

trabalho da série, KUMAR & RAMKRISHNA (1996c) descrevem o tratamento da técnica do CM com pivôs móveis para acompanhar a evolução da distribuição em problemas com nucleação, crescimento e agregação de partículas. Apesar desta última versão do CM possuir uma certa flexibilidade de adaptação com a distribuição, ela conserva apenas os dois primeiros momentos da PSD e ainda requer muitas classes para realizar o cálculo com precisão.

Uma metodologia derivada do CM chamada de *Parallel Parent and Daughter Classes* (PPDC) foi desenvolvida recentemente por BOVE *et al.* (2005). O conceito deste método é uma decomposição de operadores aliada ao uso de várias malhas para as partículas nascidas. Desta forma, os efeitos de nascimento e morte (por quebra e agregação) de partículas são separados em diferentes malhas. Em sua tese de doutorado, BOVE (2005) apresenta uma comparação entre diferentes métodos numéricos de solução de PBEs. Este método parece ser uma abordagem viável para acoplamento com CFD e está sendo estudado para este fim pelos grupos de BOVE e LAGE, pelo menos.

2.2.1 Método dos Momentos

Uma outra abordagem faz uso dos momentos da distribuição de partículas para simular sistemas dispersos de forma apropriada. De modo geral, a função de distribuição de partículas é sistematicamente substituída por um conjunto de momentos de baixa ordem que são, na grande maioria dos casos, suficientes para estimar as propriedades físicas do sistema disperso simulado (HULBURT & KATZ, 1964). O momento k de uma distribuição monovariada (considerando v um tamanho qualquer) é definido por:

$$\mu_k = \int_{-\infty}^{+\infty} v^k f(\mathbf{x}, v, t) dv \quad (2.19)$$

Os momentos fornecem detalhes importantes sobre a descrição estatística da população. O momento de ordem zero ($k = 0$) representa a densidade numérica total da população (número total de partículas por unidade de volume). Se a distribuição é na massa da partícula ($v \doteq m$), o momento de primeira ordem ($k = 1$) é a densidade mássica da população (massa total por unidade de volume), e os momentos fracionais, $k = \frac{1}{3}$ e $k = \frac{2}{3}$ fornecem respectivamente informações sobre o diâmetro médio e a área superficial média.

O Método dos Momentos (MOM) é uma técnica promissora que possui vantagens únicas ao simular sistemas dispersos dinâmicos (HULBURT & KATZ, 1964). MOM é uma metodologia que acompanha diretamente os momentos de baixa ordem ao invés da distribuição propriamente dita e, portanto, não necessita de maiores conhecimentos sobre a última. O MOM convencional formula as equações para acompanhar a evolução em uma forma fechada, ou seja, são equações que só envolvem funções dos momentos. Infelizmente, este método só possui forma fechada para poucos casos. Na grande maioria das situações, as equações que descrevem a evolução do momento μ_k envolvem momentos de maior ordem como μ_{k+1} , deixando o problema sem fechamento (HULBURT & KATZ, 1964). A necessidade de uma formulação de fechamento é uma restrição severa deste método e é a principal razão deste não ter recebido mais atenção da comunidade acadêmica.

2.2.2 Métodos QMOM e DQMOM

Baseado no conceito do MOM, McGRAW (1997) propôs o *Quadrature Method of Moments* (QMOM), onde as equações dinâmicas para a evolução dos momentos tem um fechamento aproximado pelo uso de uma aproximação por quadratura. Esta formulação satisfaz a condição de fechamento para uma ampla faixa de problemas sem a necessidade de assumir uma forma matemática especial para representar a distribuição de tamanho ou o crescimento de partículas. A essência do fechamento baseado em quadratura encontra-se no fato de que as suas abscissas ξ_i e pesos ω_i sejam completamente especificados em termos dos momentos de menor ordem da função de distribuição.

A formulação inicial proposta por McGRAW (1997) admite uma distribuição monovariada (tamanho qualquer v) sem dependência com variáveis externas, de forma que os $2N$ primeiros momentos são aproximados por uma quadratura com N pontos, conforme:

$$\mu_k = \int_{-\infty}^{+\infty} v^k f(v, t) dv = \sum_{i=1}^n \xi_i^k \omega_i \quad , \quad k = 0 \dots 2N - 1 \quad (2.20)$$

A grande contribuição de McGRAW (1997) foi a utilização da quadratura ótima de GORDON (1968), que utiliza o algoritmo Produto-Diferença (PD) para calcular os N pesos e N abscissas com a informação dos $2N$ primeiros momentos. A quadratura de Gordon é uma quadratura Gaussiana onde a própria distribuição é a

função peso, de forma que a mesma calcula com a maior precisão possível integrais da função distribuição, para um dado número de pontos de quadratura.

Posteriormente, os trabalhos de MARCHISIO *et al.* (2003a) e MARCHISIO *et al.* (2003b) continuaram a estender o QMOM, no entanto ressaltando a dificuldade em tornar a metodologia multivariada. O trabalho de MARCHISIO *et al.* (2003c) implementou o QMOM em um código de CFD com bastante sucesso, devido ao baixo número de equações adicionais (3-4 pontos de quadratura) necessário ao cálculo de CFD. Porém, foi citada ainda como dispendiosa computacionalmente a necessidade de se utilizar o algoritmo PD em cada ponto da malha e a cada passo de tempo. O algoritmo PD é baseado na solução de um problema de autovalor e seu tempo de solução é considerável.

A grande evolução do QMOM foi o *Direct Quadrature Method of Moments* (DQMOM), desenvolvido por MARCHISIO & FOX (2005). O DQMOM é baseado na idéia de acompanhar diretamente os pesos e abscissas presentes na aproximação de quadratura ao invés de acompanhar os momentos da distribuição propriamente ditos. A função de distribuição é representada pelo somatório de funções delta de Dirac, conforme:

$$f(\mathbf{x}, v, t) = \sum_{i=1}^N \omega_i(\mathbf{x}, t) \delta[v - \xi_i(\mathbf{x}, t)] \quad (2.21)$$

Esta forma funcional pode ser analisada como um conjunto de N fases dispersas e cada fase é caracterizada por um peso ω_i e uma abscissa ξ_i , que representam a densidade numérica e o valor da propriedade considerada em cada fase dispersa. A formulação do DQMOM se baseia na substituição da equação (2.21) diretamente na PBE (Eq. 2.4), resultando em $2N$ equações de transporte para os pesos e abscissas após a aplicação de $2N$ integrais, que são usualmente os $2N$ primeiros momentos. Desta forma, o algoritmo PD só é necessário no início do cálculo para a inicialização dos pesos e abscissas.

O trabalho de MARCHISIO & FOX (2005) desenvolve a formulação para os casos de crescimento, dispersão, nucleação, agregação e quebra homogêneos monovariados, difusão pura monovariada e estende a agregação homogênea e o crescimento com dependência espacial para casos bivariados. Os autores ainda colocam a formulação do DQMOM para casos multivariados, contudo não apresentam testes com esta última. Paralelamente, FAN *et al.* (2004) aplicaram o DQMOM em uma simulação de CFD para o problema de leito fluidizado polidisperso. Posteriormente, FOX (2006)

apresenta uma aplicação do DQMOM bivariado para o problema de sinterização e coagulação de partículas descrevendo em detalhes como a metodologia foi expandida para o caso bivariado para esta situação mais geral. Em um outro trabalho, SANYAL *et al.* (2005) compararam o CM com o QMOM e DQMOM acoplados com CFD para a solução de problemas de simulação de colunas de borbulhamento, confirmando o melhor desempenho do DQMOM.

Entre todos os métodos revisados, o DQMOM se mostrou bastante eficiente para ser utilizado em conjunto com CFD. A implementação de balanço populacional deste trabalho escolheu o DQMOM pelos seguintes motivos:

- O pequeno número de equações de transportes adicionais requerido (em relação ao do CM).
- O algoritmo PD só é utilizado no início do cálculo (diferentemente do QMOM).
- Já foram demonstradas extensões do problema para o caso multivariado sem grandes dificuldades técnicas.
- O PPDC parece ser promissor, mas ainda precisa ser melhor investigado.

2.3 Modelos de Quebra e Coalescência

Conforme foi visto no início deste capítulo na equação (2.18), os termos de coalescência³ e quebra $a(\mathbf{x}, m, m', \mathbf{y}, t)$, $\vartheta(\mathbf{x}, m', \mathbf{y}, t)$, $b(\mathbf{x}, m', \mathbf{y}, t)$ e $P(\mathbf{x}, m | m'; \mathbf{y}, t)$ precisam ser modelados. Os modelos de quebra e coalescência não são gerais e dependem do tipo de aplicação.

ARAÚJO (2006) realizou um excelente trabalho investigativo dos principais modelos de quebra e coalescência da literatura para escoamentos gás-líquido. Uma de suas principais conclusões foi que modelos de quebra são a principal fonte de erro nas simulações. Segundo ARAÚJO (2006), os clássicos modelos de PRINCE & BLANCH (1990) para coalescência e de LUO & SVENDSEN (1996) para quebra apresentaram o pior desempenho. Este par de modelos foram os primeiros modelos a conseguirem visibilidade na literatura, principalmente pelo fato de que eles não necessitam parâmetros experimentais. O desempenho inferior destes modelos

³O termo coalescência é o caso particular de agregação aplicado à bolhas e gotas.

foi apontado por ARAÚJO (2006) como sendo devido a erros conceituais adotados na formulação dos modelos. Entre os modelos testados, o modelo de quebra proposto nos artigos MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* (1999a) e MARTÍNEZ-BAZÁN *et al.* (1999b) e o modelo de coalescência de KAMP *et al.* (2001) desempenharam melhor, apesar de ainda apresentarem erros significativos no ajuste de seus parâmetros.

Note que os modelos de PRINCE & BLANCH (1990) e LUO & SVENDSEN (1996) vêm sendo utilizados por grande parte dos trabalhos de modelagem de colunas de borbulhamento na literatura (JAKOBSEN *et al.*, 2005; ARAÚJO, 2006) e estão implementados nos principais códigos comerciais de CFD (ANSYS CFX e FLUENT). Em sua tese de doutorado, HAGESAETHER (2002) apresenta uma evolução do modelo de quebra de LUO & SVENDSEN (1996) e ainda sugere outros diversos parâmetros que devem ser levados em conta para melhorias futuras. WANG *et al.* (2006) e CHEN *et al.* (2005a) apresentam simulações de colunas de borbulhamento utilizando modelos de quebra e coalescência evoluídos de PRINCE & BLANCH (1990), LUO & SVENDSEN (1996) e LEHR *et al.* (2002) com resultados interessantes, mas admitem que ainda muito deve ser feito para melhorar a modelagem de quebra e coalescência.

Evidentemente, outras situações físicas, como escoamentos gás-sólido, líquido-sólido, líquido-líquido, de sprays, entre outros, necessitam de modelos para quebra e agregação adaptados a sua realidade.

2.4 Troca de Quantidade de Movimento entre Fases

Na modelagem multifásica Euleriana-Euleriana, devido ao procedimento de média adotado, surgem termos que precisam ser modelados (DREW & PRASSMAN, 1999). Na equação de quantidade de movimento, em escoamentos com morfologia dispersa normalmente são considerados (ANSYS CFX-11.0 Solver Theory Guide, 2006; FRANK, 2005; JAKOBSEN *et al.*, 2005; JOSHI, 2001) os termos de:

- Arrasto;
- Sustentação;
- Massa Virtual;
- Lubrificação de Parede;

- Dispersão Turbulenta;
- Turbulência Induzida pelas Partículas.

O trabalho de FRANK (2005) apresenta uma compilação das correlações mais indicadas para escoamentos gás-líquido. JAKOBSEN *et al.* (2005) e JOSHI (2001) mostram diversas correlações usualmente utilizadas em simulações de colunas de borbulhamento. Para o termo de arrasto, existem na literatura diversas correlações para cada regime de escoamento, mas pode-se notar que não há um consenso entre os autores.

As forças de sustentação, massa virtual e lubrificação de parede, apresentadas inicialmente por ISHII (1975), ainda são utilizadas na sua forma básica original, porém com valores diferentes dos coeficientes (JAKOBSEN *et al.*, 2005; JOSHI, 2001) ou até com correlações para os mesmos (FRANK *et al.*, 2004; FRANK, 2005).

As maiores divergências estão no termo de dispersão turbulenta. Existem diversas propostas na literatura (LOPES de BERTODANO, 1998; BURNS *et al.*, 2004; DREW, 2001), além de algumas sugestões (JAKOBSEN *et al.*, 2005; JOSHI, 2001) e inclusive autores que a desconsideram completamente. BOVE (2005) apresenta uma revisão sobre a dispersão turbulenta, inclusive comentando que ela depende muito do modelo de turbulência.

O termo de turbulência induzida por bolhas proposto por SATO & SEKOGUSHI (1975), parece ser o termo melhor aceito, sendo sugerido em consenso por FRANK (2005), JAKOBSEN *et al.* (2005) e BOVE (2005).

2.5 Turbulência em Escoamentos Multifásicos

De fato, a modelagem de turbulência para escoamentos multifásicos é um tema ainda bastante inconclusivo. Os modelos de turbulência para escoamentos monofásicos já apresentam resultados bastante divergentes para k (energia cinética turbulenta) e ϵ (dissipação da energia cinética). Nas revisões de FRANK (2005), JAKOBSEN *et al.* (2005) e BOVE (2005), não se percebe consenso algum relativo a qual modelo de turbulência deve ser empregado em simulações de, por exemplo, colunas de borbulhamento. JAKOBSEN *et al.* (2005) não demonstraram muita preocupação quando ao modelo de turbulência (usaram o tradicional $k - \epsilon$ com poucas modificações),

porém eles apontaram que os modelos de quebra e coalescência são muito sensíveis ao campo de turbulência. Os pesquisadores da ANSYS CFX (FRANK *et al.*, 2004; FRANK & ZWART, 2005) sugerem seguramente o emprego do modelo SST (*Shear Stress Transport*). BOVE (2005) faz uma revisão e reflexão interessante sobre o uso de modelos *Large Eddy Simulation* (LES).

O emprego de simulações LES para problemas multifásicos têm apresentado resultados muito realísticos, pois consegue capturar as principais estruturas turbulentas que causam o espalhamento de partículas, eliminando assim a necessidade de modelagem da dispersão turbulenta. Apesar do grande esforço computacional exigido, pesquisadores da PETROBRAS estão bastante otimistas com os resultados obtidos com esta modelagem nas mais diversas aplicações de escoamentos multifásicos. No entanto, deve-se pesquisar ainda muito na linha da modelagem de turbulência para escoamentos multifásicos, pois a descrição da estrutura do escoamento e das propriedades de turbulência influencia muito na quebra e coalescência. Além disso, ainda não foram apresentados modelos de quebra e coalescência desenvolvidos com a base fluidodinâmica de simulações LES.

2.6 Acoplamento da PBE com CFD

Em 1996, LO (1996) desenvolveu o modelo MUSIG (*Multiple Size Group*) para o software ANSYS CFX (na época, o CFX pertencia à empresa AEA Technology). Esta metodologia de solução utiliza o método das classes (CM) com pivôs fixos, que no mesmo ano havia sido apresentado por KUMAR & RAMKRISHNA (1996a). Uma das suas hipóteses simplificadoras mais marcante é o uso de um único campo de velocidades para as partículas. Note que a adoção de campos de velocidade individuais para cada partícula é inviável quando se utiliza o CM, devido ao grande número de classes.

Recentemente foi descoberto um erro na implementação da discretização do termo de quebra, conforme apresentado em LAGE *et al.* (2006). A ANSYS CFX já tomou conhecimento deste problema, mas até o momento não implementou a correção. Este erro torna a quebra conservativa em massa mas não em número. Acredita-se que todos os trabalhos que utilizaram o MUSIG até hoje tenham sido afetados em precisão por causa deste problema.

Em 2005, os pesquisadores FRANK & ZWART (2005) lançaram o modelo MUSIG Não-Homogêneo (também chamado de MUSIG $M \times N$). Este modelo consiste na adoção de M campos de velocidade para N grupos de partículas. Assim, as diversas classes de partículas são agrupadas em poucos campos de velocidade. Esta evolução ajuda a representar os escoamentos com maior realidade (principalmente simulações de equipamentos separadores), porém é extremamente dispendiosa computacionalmente.

Foi confirmado pela ANSYS que o erro do MUSIG $1 \times N$ (original) ainda persiste no MUSIG $M \times N$. Os únicos modelos de quebra e coalescência implementados no ANSYS CFX para escoamentos gás-líquido são os de LUO & SVENDSEN (1996) e PRINCE & BLANCH (1990). No entanto, a implementação permite inserir modelos próprios.

Além das simulações apresentadas pelos pesquisadores da ANSYS em seus relatórios de validação (LO, 1996; FRANK & ZWART, 2005), outros autores utilizaram o MUSIG. O trabalho de OLMOS *et al.* (2001) utiliza o MUSIG original com os modelos de LUO & SVENDSEN (1996) e PRINCE & BLANCH (1990) em simulações de coluna de borbulhamento. Seus resultados não conseguiram prever a transição para o regime heterogêneo. Posteriormente, OLMOS *et al.* (2003) conseguiram simular o regime heterogêneo usando 10 classes de tamanho e 2 classes de velocidade de bolhas, mas sem resolver a PBE simultaneamente. Mais recentemente, WANG *et al.* (2006) apresentam resultados sensivelmente melhores empregando o MUSIG $1 \times N$ (campo de velocidade único para a fase dispersa) com diversas classes (30-40) aliado à modelos de quebra e coalescência evoluídos.

O trabalho de LEHR *et al.* (2002) utilizou o CFX4.2 (sem utilizar o MUSIG) para resolver o escoamento em coluna de borbulhamento adotando um modelo simplificado de PBE que se baseia em apenas 2 tamanhos de partícula. Neste trabalho, modelos de quebra e coalescência evoluídos são apresentados e os resultados para a previsão de transição de regime são razoáveis, dado o baixo custo computacional desta implementação.

CHEN *et al.* (2005b) estudou o acoplamento CFD-PBE também para o estudo de coluna de borbulhamento. Neste trabalho, foi utilizado o FLUENT e a PBE foi resolvida utilizando o CM com apenas 10 classes. Foram testadas 3 abordagens de acoplamento: o modelo de dois fluidos (um campo de velocidades para a fase contínua e apenas um outro para a fase dispersa), o modelo de *slip* algébrico sim-

ples (velocidade única da fase dispersa determinada por expressão algébrica) e o modelo de *slip* algébrico múltiplo (varias classes de velocidade para a fase dispersa determinadas por expressões algébricas). Os resultados encontrados ainda não se mostraram satisfatórios.

Um estudo semelhante de estratégias de acoplamento da PBE com CFD foi apresentado por BOVE (2005). No entanto, ele inova apresentando o PPCD e compara com o QMOM, DQMOM e CM simulando o escoamento de coluna de borbulhamento. BOVE (2005) conclui que os melhores resultados são obtidos quando se considera um campo de velocidades para cada fase no modelo multifluido. Conforme foi comentado anteriormente, o PPDC é um método promissor que precisa ser melhor investigado.

Os trabalhos de MARCHISIO *et al.* (2003c) e FAN *et al.* (2004) implementaram respectivamente o QMOM e o DQMOM no software MFIX. Em 2003, o software FLUENT recebeu a implementação do CM e QMOM. Em 2005, com o trabalho comparativo de SANYAL *et al.* (2005), foi implementado o DQMOM no FLUENT via rotinas externas (UDFs) de usuário. O emprego do QMOM e DQMOM em códigos de CFD mostrou-se bastante eficiente por dois motivos: reduzido número de equações de transporte (de 2 a 4 vezes) e abscissas (pivôs) móveis que se adaptam localmente em cada ponto da malha para representar de maneira ótima a distribuição naquele ponto. Quando se utiliza pivôs fixos, como no modelo MUSIG, é comum ocorrer o deslocamento da distribuição para os extremos do domínio interno (se ou quebra ou coalescência forem dominantes), resultando em perda de precisão nas integrações dos termos de quebra e coalescência. Devido ao baixo custo computacional do QMOM e DQMOM, as implementações destes métodos no FLUENT e MFIX consideram um campo de velocidade para cada classe de tamanho da fase dispersa, possibilitando uma representação mais realista do escoamento. Este tipo de abordagem de acoplamento será denominada nesta dissertação como “Abordagem Heterogênea”.

Em suma, vários autores que se propuseram a simular o escoamento de bolhas acoplando PBE com CFD (LO, 1996; OLMOS *et al.*, 2001; LEHR *et al.*, 2002; OLMOS *et al.*, 2003; FRANK & ZWART, 2005; BOVE, 2005; SANYAL *et al.*, 2005; CHEN *et al.*, 2005b; WANG *et al.*, 2006) chegaram a conclusões muito parecidas. Existem muitas incertezas envolvidas, como a modelagem da turbulência, dos termos interfaciais de troca de quantidade de movimento e das funções de quebra e coalescência. Os resultados obtidos por estes trabalhos são, em geral, qualitativos

e apresentam erros consideráveis. A correta previsão de transição de regime de escoamento é ainda difícil de se obter. É importante que se investigue melhor estes fenômenos de turbulência, forças interfaciais, quebra e coalescência, ajustando os parâmetros dos modelos. No entanto, é imperativo que estudos de estimação de parâmetros e validações sejam feitos separadamente para cada fenômeno. Com tantos modelos e incertezas presentes, se torna impossível saber qual a causa do erro e qual parâmetro ajustar.

Capítulo 3

Metodologia

3.1 Discretização do Balanço Populacional

No capítulo anterior, foi apresentada a Equação de Balanço Populacional (Eq. 2.4) na sua forma genérica. Agora será visto o equacionamento e discretização do problema de balanço populacional assumindo as hipóteses simplificadoras do presente trabalho.

Neste trabalho, foi tratado o problema de balanço populacional monovariado, ou seja, as partículas são diferenciadas apenas pelo seu tamanho. Uma particularidade desta implementação foi a escolha da massa m como a variável interna da distribuição. No trabalho de KUMAR & RAMKRISHNA (1996a) e no modelo MUSIG (LO, 1996) foi adotado o volume. Já FAN *et al.* (2004) adotaram o comprimento característico como variável interna. Diferente do volume ou comprimento, a massa das partículas é conservada nos processos de interação entre as partículas. Matematicamente, isto significa que quando as leis de conservação são aplicadas na formulação, os termos fontes resultantes serão mais simples.

Conforme comentado no capítulo anterior, neste trabalho foram adotadas algumas hipóteses simplificadoras na PBE original (Eq. 2.4), resultando na equação (2.18). Por didática, esta equação e seus termos serão reescritos a seguir:

$$\frac{\partial f(m; \mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot [\dot{\mathbf{x}}(m; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) f(m; \mathbf{x}, t)] = H(m; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) \quad (3.1)$$

onde \mathbf{x} é o vetor de coordenadas espaciais, t é o tempo, \mathbf{y} é o vetor de propriedades da fase contínua, $\dot{\mathbf{x}}(m; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ é o vetor velocidades das partículas e $H(m; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ é

o termo fonte da PBE dado por:

$$H(m; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = B^C(m; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) - D^C(m; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) + B^B(m; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) - D^B(m; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) \quad (3.2)$$

O termo B^C , que representa o nascimento de partículas por coalescência, é dado por:

$$B^C(m; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = \frac{1}{2} \int_0^m f(m - m'; \mathbf{x}, t) f(m'; \mathbf{x}, t) a(m - m', m'; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) dm' \quad (3.3)$$

onde $a(m - m', m'; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ é a frequência de coalescência de partículas de tamanho $m - m'$ com partículas m' .

O termo de morte por coalescência, D^C , é dado por:

$$D^C(m; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = f(m; \mathbf{x}, t) \int_0^\infty f(m'; \mathbf{x}, t) a(m, m'; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) dm' \quad (3.4)$$

O termo de nascimento por quebra, B^B , é dado por:

$$B^B(m; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = \int_m^\infty f(m'; \mathbf{x}, t) \vartheta(m'; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) P(m | m'; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) b(m'; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) dm' \quad (3.5)$$

onde $\vartheta(m'; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ é o número de partícula filhas produzidas durante a quebra de uma partícula mãe de massa m' , $P(m | m'; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ é a probabilidade condicional de uma partícula de massa m ser gerada a partir da quebra de uma partícula de massa m' e $b(m'; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ é a frequência de quebra de partículas de massa m' .

Por fim, o termo de morte por quebra, D^B , é dado por:

$$D^B(m; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = f(m; \mathbf{x}, t) b(m; \mathbf{x}, \mathbf{y}, t) \quad (3.6)$$

Conforme foi mostrado no capítulo anterior, o método DQMOM consiste na representação discreta da função $f(m; \mathbf{x}, t)$ por N funções delta de Dirac:

$$f(m; \mathbf{x}, t) = \sum_{\alpha=1}^N \omega_\alpha(\mathbf{x}, t) \delta(m - m_\alpha(\mathbf{x}, t)) \quad (3.7)$$

onde ω_α e m_α são os pesos e abscissas da quadratura numérica de N pontos, respectivamente.

Note que as abscissas são a representação discreta do domínio da variável interna da distribuição. Pode-se dizer que as N abscissas representam as N classes de tamanho de partículas. Neste trabalho, foi considerado que cada classe de partículas possui o seu próprio campo de velocidades. Este tipo de estratégia de acoplamento será denominada “Abordagem Heterogênea”. Desta forma, o escoamento multifásico aqui descrito é composto por uma fase contínua β e N fases dispersas α .

Por motivos de compactação de escrita, daqui para frente, as dependências espaciais e temporais serão suprimidas.

Substituindo a equação (3.7) na equação (3.1), obtém-se:

$$H_\alpha(m) = \sum_{\alpha=1}^N \delta(m - m_\alpha) \left[\frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{u}_\alpha \omega_\alpha) \right] - \sum_{\alpha=1}^N \delta'(m - m_\alpha) \omega_\alpha \left[\frac{\partial m_\alpha}{\partial t} + \mathbf{u}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{x}} m_\alpha \right] \quad (3.8)$$

onde $\delta'(m - m_\alpha)$ é a derivada de primeira ordem da função generalizada $\delta(m - m_\alpha)$ (ARFKEN & WEBER, 2004) e \mathbf{u}_α é a velocidade da fase dispersa associada à classe de massa m_α .

Introduzindo a definição $\zeta_\alpha = m_\alpha \omega_\alpha$, chamada de abscissa ponderada, pode-se reescrever a equação anterior como:

$$H_\alpha(m) = \sum_{\alpha=1}^N \delta(m - m_\alpha) \left[\frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{u}_\alpha \omega_\alpha) \right] - \sum_{\alpha=1}^N \delta'(m - m_\alpha) \left\{ \frac{\partial \zeta_\alpha}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{u}_\alpha \zeta_\alpha) - m_\alpha \left[\frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{u}_\alpha \omega_\alpha) \right] \right\} \quad (3.9)$$

Assumindo o seguinte sistema de equações de transporte para ω_α e ζ_α :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{u}_\alpha \omega_\alpha) &= S_{\omega_\alpha} \\ \frac{\partial \zeta_\alpha}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{u}_\alpha \zeta_\alpha) &= S_{\zeta_\alpha} \end{aligned} \quad (3.10)$$

pode-se reescrever a equação (3.9) como:

$$\sum_{\alpha=1}^N [\delta(m - m_\alpha) + \delta'(m - m_\alpha) m_\alpha] S_{\omega_\alpha} - \sum_{\alpha=1}^N \delta'(m - m_\alpha) S_{\zeta_\alpha} = H_\alpha(m) \quad (3.11)$$

onde S_{ω_α} e S_{ζ_α} são os termos fontes das equações de transporte de ω_α e ζ_α , respectivamente.

Usando a quadratura, os momentos da distribuição $f(m)$, μ_k , são calculados por:

$$\mu_k = \int_0^\infty m^k f(m) dm = \sum_{\alpha=1}^N \omega_\alpha m_\alpha^k, \quad k = 0, \dots, 2N - 1 \quad (3.12)$$

Aplicando esta mesma integral à função generalizada delta de Dirac e sua derivada de primeira ordem (ARFKEN & WEBER, 2004), tem-se:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty m^k \delta(m - m_\alpha) dm &= m_\alpha^k \\ \int_0^\infty m^k \delta'(m - m_\alpha) dm &= -k m_\alpha^{k-1} \end{aligned} \quad (3.13)$$

Aplicando a integral que define os momentos à forma da PBE dada pela equação (3.11), chega-se no seguinte sistema de equações lineares algébricas (SELA):

$$(1 - k) \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha^k S_{\omega_\alpha} + k \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha^{k-1} S_{\zeta_\alpha} = \bar{H}_k^{(N)}, \quad k = 0, \dots, 2N - 1 \quad (3.14)$$

onde $\bar{H}_k^{(N)}$ é o momento de ordem k do termo fonte calculado usando a quadratura de N pontos, definido por:

$$\bar{H}_k^{(N)} = \int_0^\infty m^k H_\alpha(m) dm = \bar{B}_k^C - \bar{D}_k^C + \bar{B}_k^B - \bar{D}_k^B \quad (3.15)$$

A barra superior identifica a aplicação da integral de definição dos momentos e o índice superior (N) indica que a quadratura de N pontos foi utilizada no seu cálculo. As equações lineares do sistema dado pela equação (3.14) representam uma forma aproximada das equações de conservação dos $2N$ primeiros momentos da distribuição. Devido ao seu caráter aproximado, associado ao uso da quadratura, o método não garante a conservação exata destes momentos. A precisão do cálculo de quadratura é diretamente ligada ao aumento de N .

Para facilitar a sua compreensão, o sistema dado pela equação (3.14) será reescrito na seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{Ax} &= \mathbf{d} \\ \mathbf{x} &= [S_{\omega_1} \dots S_{\omega_N} S_{\zeta_1} \dots S_{\zeta_N}]^T \\ \mathbf{d} &= [\bar{H}_0^{(N)} \dots \bar{H}_{2N-1}^{(N)}]^T \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{A} &= [\mathbf{A}_1 \mid \mathbf{A}_2] & (3.17) \\
\mathbf{A}_1 &= \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ 0 & \cdots & 0 \\ -m_1^2 & \cdots & -m_N^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 2(1-N)m_1^{2N-1} & \cdots & 2(1-N)m_N^{2N-1} \end{bmatrix} \\
\mathbf{A}_2 &= \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ 1 & \cdots & 1 \\ 2m_1 & \cdots & 2m_N \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ (2N-1)m_1^{2N-2} & \cdots & (2N-1)m_N^{2N-2} \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{d} \quad (3.18)$$

Em suma, os termos fontes do SELA (Eq. 3.14), $\bar{H}_k^{(N)}$, são transformados linearmente pela matriz \mathbf{A} nos termos fontes do sistema de equações de transporte de ω_α e ζ_α (Eq. 3.11), S_{ω_α} e S_{ζ_α} .

A seguir, o detalhamento dos termos de $\bar{H}_k^{(N)}$ será apresentado. Segue-se o mesmo procedimento de aplicação da integral de definição dos momentos às equações (3.3), (3.4), (3.5) e (3.6). Além disso, foi efetuada a mudança no domínio de integração para que todas as integrais fiquem no domínio completo da massa, ou seja, $m \in (0, \infty]$, de forma a aplicar diretamente a quadratura (ver apêndice A). Assim, o termo de nascimento por coalescência, \bar{B}_k^C , fica:

$$\begin{aligned}
\bar{B}_k^C &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty (m' + m'')^k f(m'') f(m') a(m'', m') dm' dm'' \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\gamma=1}^N \omega_\alpha \omega_\gamma (m_\alpha + m_\gamma)^k a_{\alpha\gamma} & (3.19)
\end{aligned}$$

onde $a_{\alpha\gamma}$ é a frequência de coalescência entre partículas de tamanho m_α e m_γ .

O termo de morte por coalescência, \bar{D}_k^C , é dado por:

$$\begin{aligned}\bar{D}_k^C &= \int_0^\infty \int_0^\infty m^k f(m) f(m') a(m, m') dm dm' \\ &= \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\gamma=1}^N \omega_\alpha \omega_\gamma m_\alpha^k a_{\alpha\gamma}\end{aligned}\quad (3.20)$$

Já o termo nascimento por quebra, \bar{B}_k^B , é dado por:

$$\begin{aligned}\bar{B}_k^B &= \int_0^\infty f(m') \vartheta(m') b(m') \left[\int_0^{m'} m^k P(m | m') dm \right] dm' \\ &= \sum_{\alpha=1}^N \omega_\alpha \vartheta_\alpha b_\alpha \bar{P}_\alpha^k \\ \bar{P}_\alpha^k &= \int_0^{m_\alpha} m^k P(m | m_\alpha) dm\end{aligned}\quad (3.21)$$

onde ϑ_α é o número de partículas filhas geradas na quebra de uma partícula mãe de tamanho m_α , b_α é a frequência de quebra de partículas de tamanho m_α e $P(m | m_\alpha)$ é a probabilidade condicional de se gerar uma partícula de massa m uma vez que ocorra a quebra de uma partícula de massa m_α . Note que o termo \bar{P}_α^k é uma integral que deve ser avaliada por alguma técnica de integração numérica ou analítica, dependendo da forma de $P(m | m_\alpha)$.

Por fim, o termo de morte por quebra, \bar{D}_k^B , é dado por:

$$\bar{D}_k^B = \int_0^\infty m^k f(m) b(m) dm = \sum_{\alpha=1}^N \omega_\alpha m_\alpha^k b_\alpha \quad (3.22)$$

3.2 Implementação no ANSYS CFX

O ANSYS CFX é um pacote comercial de CFD multi-propósito desenvolvido pela ANSYS Inc. Atualmente, o ANSYS CFX é o principal *software* de CFD utilizado na América do Sul. Neste trabalho, foi escolhido o ANSYS CFX devido a vários motivos como:

- Comprovada eficiência do *software* na solução de problemas multifásicos.

- Boa escalabilidade paralela do *software* para simulações em grandes malhas.
- Experiência de vários anos do autor e orientador no uso desta ferramenta.
- Incentivo da ESSS, distribuidora do *software* na América do Sul e empresa onde o autor trabalha.

Para a implementação do DQMOM no ANSYS CFX, procurou-se aproveitar ao máximo as equações governantes já presentes no *software*. Todo o conjunto de equações que descrevem a solução fluidodinâmica do escoamento multifásico, modelos de forças interfaciais, modelos de turbulência, etc, foram aproveitados. Apenas um conjunto de equações de transporte para as variáveis do DQMOM foi acrescentado e os respectivos termos fontes foram implementados via rotinas de FORTRAN. Desta forma, esta implementação incorpora muitas das vantagens do software em termos de metodologia numérica e adiciona pouco esforço computacional extra à simulação.

3.2.1 Aspectos Numéricos

O núcleo numérico do ANSYS CFX é baseado no Método de Volumes Finitos Baseado em Elemento (EbFVm) (MALISKA, 2004), que permite o tratamento de malhas não-estruturadas em coordenadas cartesianas mantendo o caráter conservativo do método de volumes finitos. O sistema de equações lineares proveniente da discretização é resolvido de forma acoplada e totalmente implícita utilizando o método *Algebraic Multigrid* (AMG) acelerado pela técnica de fatoração *Incomplete Lower Upper* (ILU). O acoplamento Pressão-Velocidade é realizado em malha colocalizada empregando uma formulação semelhante ao *método de Rhie and Chow* (RAW, 1994; ANSYS CFX-11.0 Solver Theory Guide, 2006). Em simulações de regime estacionário, é utilizada a técnica de falso transiente para o avanço da solução.

No EbFVm, o volume de controle é gerado em torno de cada nó da malha conectando por planos todos os centros dos elementos vizinhos com os correspondentes centros das suas arestas, formando um poliedro. Esta abordagem apresenta maior precisão numérica do que o método tradicional de volumes finitos, pois possui mais pontos de integração por volume de controle (24 para elementos hexaédricos e 60 para elementos tetraédricos) (RAW, 1994; ANSYS CFX-11.0 Solver Theory Guide, 2006; MALISKA, 2004).

A discretização dos termos temporais no CFX é realizada utilizando o método de

Backward Euler de segunda ordem (ANSYS CFX-11.0 Solver Theory Guide, 2006), conforme mostrado abaixo para passo uniforme Δt :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) \approx \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{3}{2}(\rho\phi) - 2(\rho\phi)^o + \frac{1}{2}(\rho\phi)^{oo} \right) \quad (3.23)$$

Este esquema é robusto, implícito, conservativo no tempo e não cria limitação no passo de tempo, tendo precisão de segunda ordem. No entanto, não é limitado e pode produzir oscilações numéricas (não físicas). O manual (ANSYS CFX-11.0 Solver Theory Guide, 2006) comenta superficialmente que para variáveis limitadas como a fração volumétrica, um esquema *Backward Euler* de segunda ordem *modificado* é empregado.

Este tipo de esquema temporal também é classificado como o BDF (*Backward Differencing Scheme*) de segunda ordem (PINTO & LAGE, 2001). Apesar do ANSYS CFX possuir a opção de emprego de passo de tempo adaptativo, o manual (ANSYS CFX-11.0 Solver Theory Guide, 2006) não cita nenhum tratamento específico para emprego de passo de tempo variável (ver metodologias em PINTO & LAGE (2001)). Outro fato não citado no manual é a técnica de inicialização do primeiro passo de tempo empregada no ANSYS CFX. Em função da falta de informações, assume-se que a simulação parte com primeira ordem. Lacunas como estas na documentação do detalhamento da implementação são comuns em códigos comerciais.

Os termos advectivos são interpolados para os pontos de integração utilizando esquemas advectivos baseados no *Blend Factor*, β , e podem ser descritos pela seguinte expressão:

$$\phi_{ip} = \phi_{up} + \beta \mathbf{r} \cdot \nabla \phi \quad (3.24)$$

onde ϕ_{up} é o valor da variável no nó a montante (*upwind*), \mathbf{r} é o vetor que une o nó a montante *up* ao ponto de integração *ip* e $\nabla \phi$ é a aproximação numérica do gradiente no nó a montante. Quando β é zero, este método resulta no esquema *Upwind* de primeira ordem. Quando β é 1, obtêm-se o esquema *Upwind* de segunda ordem. O termo $\beta \mathbf{r} \cdot \nabla \phi$, também chamado de *Numerical Advection Correction* (NAC), pode ser interpretado como uma correção anti-difusiva aplicada ao esquema *Upwind* (ANSYS CFX-11.0 Solver Theory Guide, 2006).

No ANSYS CFX o valor de β pode ser especificado como uma constante entre 0 e 1 para todos os nós da malha ou pode-se empregar o método *High Resolution* (HR). O esquema advectivo HR escolhe automaticamente um valor para β em cada

nó da malha baseado em limitadores de fluxo, com o objetivo de evitar oscilações da solução em regiões com fortes gradientes. Nas demais regiões, o HR mantém o β igual a 1 para assegurar a precisão de segunda ordem (BARTH & JESPERSEN, 1989). Assim, este esquema advectivo gera soluções de segunda ordem e evita a oscilação numérica (ANSYS CFX-11.0 Solver Theory Guide, 2006).

3.2.2 Equações Fluidodinâmicas

Neste trabalho foi adotada a formulação multifásica Euleriana-Euleriana completa, também chamado de modelo multifluido, que considera a existência dos campos de variáveis distintos (quantidade de movimento, massa, energia, turbulência, etc) para cada fase, mas restrito ao fato de que todas as fases estão expostas a um único campo de pressão. Desta forma, efeitos de tensão interfacial não são levados em conta. Assim, conforme já foi colocado, o escoamento multifásico aqui descrito é composto por uma fase contínua β e N fases dispersas α . Quando o subscrito φ for utilizado, o termo da equação refere-se tanto à fase contínua β quanto às N fases dispersas α .

A seguir será apresentado o conjunto de equações hidrodinâmicas empregadas no ANSYS CFX para a solução do modelo multifluido não-homogêneo. Conforme foi comentado anteriormente, este trabalho concentrou-se na modelagem dos efeitos fluidodinâmicos considerando distribuição de tamanho de partículas com interações de quebra e coalescência em escoamentos dispersos. Dentro do escopo desta dissertação, não foram abordados outros fenômenos necessários para o entendimento de escoamentos industriais como conservação de energia e massa de componentes químicos, entre outros.

O primeiro conjunto de equações refere-se à conservação de massa de cada fase, também chamada de continuidade de cada fase, definida por:

$$\frac{\partial(r_\varphi\rho_\varphi)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\varphi\rho_\varphi\mathbf{u}_\varphi) = S_{MS,\varphi} \quad (3.25)$$

onde r_φ é a fração volumétrica, ρ_φ é a densidade, \mathbf{u}_φ é o vetor velocidade e $S_{MS,\varphi}$ é o termo fonte de massa da fase φ . Note que $S_{MS,\beta} = 0$, pois não há alteração na massa da fase contínua no problema aqui considerado. Já o termo $S_{MS,\alpha}$ está relacionado ao surgimento ou desaparecimento de massa entre as fases dispersas devido aos fenômenos de quebra e coalescência.

Agora são apresentadas as Equações de Conservação de Quantidade de Movimento, considerado escoamentos laminares:

$$\frac{\partial(r_\varphi\rho_\varphi\mathbf{u}_\varphi)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\varphi\rho_\varphi\mathbf{u}_\varphi\mathbf{u}_\varphi) = -r_\varphi\nabla p + \nabla \cdot [r_\varphi\mu_\varphi(\nabla\mathbf{u}_\varphi + \nabla\mathbf{u}_\varphi^T)] + \mathbf{S}_{M,\varphi} + \mathbf{M}_\varphi + \mathbf{B}_\varphi \quad (3.26)$$

onde μ_φ é a viscosidade dinâmica da fase, $\mathbf{S}_{M,\varphi}$ é vetor fonte de quantidade de movimento devido à mudança de fase, \mathbf{M}_φ é o vetor de forças interfaciais (arrasto, sustentação, massa virtual, lubrificação de parede, colisão entre partículas sólidas e, na extensão a escoamentos turbulentos, dispersão turbulenta) e \mathbf{B}_φ é o vetor de forças de corpo atuante na fase φ .

Quando o efeito da gravidade é modelado, ele é incorporado através da inclusão do empuxo líquido através de $\mathbf{B}_\varphi = (\rho_\varphi - \rho_{ref})\mathbf{g}$.

Conforme o manual (ANSYS CFX-11.0 Solver Theory Guide, 2006), a modelagem padrão do ANSYS CFX não inclui o termo $-\nabla \cdot (\frac{2}{3}r_\varphi\mu_\varphi\nabla \cdot \mathbf{u}_\varphi)$ no lado direito da equação (3.26). É comentado que este termo pode ser significativo em escoamentos monofásicos compressíveis e que o usuário pode ativá-lo se assim desejar. Para o caso multifásico, nada é comentado. Não foi encontrada nenhuma explicação sobre o porquê deste termo ter sido desprezado. Neste trabalho foi utilizado a formulação padrão do ANSYS CFX, ou seja, este termo não está presente.

Como uma hipótese simplificadora, foi adotado que quando ocorre mudança de fase a quantidade de movimento da fase não é alterada, logo $\mathbf{S}_{M,\varphi} = S_{MS,\varphi}\mathbf{u}_\varphi$. Sabe-se que os processos de quebra a coalescência entre as partículas promovem a mistura de suas propriedades (KRISHNA & van BATEN, 2003) como quantidade de movimento, energia, concentração de componentes, etc.

Em relação às forças interfaciais, conforme foi comentado, ainda não há um consenso na literatura sobre a melhor modelagem. O mesmo ocorre para a modelagem da turbulência em escoamentos multifásicos. Grande parte das simulações deste trabalho foram realizadas em regime laminar e apenas a força de arrasto entre as fases foi considerada. O objetivo destas simplificações é reduzir o escopo do trabalho, concentrar os esforços na implementação numérica do balanço populacional e evitar utilizar modelos não consolidados, embora saibamos da importância destes outros efeitos na representação de escoamentos realísticos.

Como apenas a força de arrato foi considerada, $\mathbf{M}_\varphi = \mathbf{M}_\varphi^D$. Em escoamentos de fases fluidas dispersas no ANSYS CFX, as forças de arrasto interfaciais \mathbf{M}_φ^D são

calculadas apenas entre a fase contínua e as dispersas. É desprezada a possível existência de arrasto entre as fases dispersas. Considerando partículas esféricas, as forças de arrasto por unidade de volume \mathbf{M}_β^D e \mathbf{M}_α^D são modeladas como:

$$\mathbf{M}_\beta^D = \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{M}_{\beta\alpha}^D \quad (3.27)$$

$$\mathbf{M}_\alpha^D = -\mathbf{M}_{\beta\alpha}^D \quad (3.28)$$

$$\mathbf{M}_{\beta\alpha}^D = \frac{3}{4} \frac{C_{D,\beta\alpha}}{d_\alpha} r_\alpha \rho_\beta |\mathbf{u}_\alpha - \mathbf{u}_\beta| (\mathbf{u}_\alpha - \mathbf{u}_\beta) \quad (3.29)$$

onde $C_{D,\beta\alpha}$ é o coeficiente de arrasto e d_α é o diâmetro equivalente das partículas da fase α . Nestas simulações, foi adotada a correlação de arraste de SCHILLER & NAUMANN (1933), conforme a equação a seguir:

$$C_{D,\beta\alpha} = \begin{cases} \frac{24(1 + 0,15Re_{\beta\alpha}^{0,687})}{Re_{\beta\alpha}} & \text{if } Re_{\beta\alpha} < 1000 \\ 0,44 & \text{if } Re_{\beta\alpha} > 1000 \end{cases} \quad (3.30)$$

onde $Re_{\beta\alpha}$ é o número de Reynolds da partícula, definido por:

$$Re_{\beta\alpha} = \frac{\rho_\beta d_\alpha |\mathbf{u}_\alpha - \mathbf{u}_\beta|}{\mu_\beta} \quad (3.31)$$

Esta correlação é indicada para partículas esféricas isoladas. Ela foi escolhida por ser bastante simples e se adaptar para uma ampla faixa de $Re_{\beta\alpha}$. Evidentemente existem outras correlações de arrasto mais realísticas e complexas que devem ser consideradas conforme o tipo de aplicação. o ANSYS CFX utiliza uma modificação na expressão de SCHILLER & NAUMANN (1933), limitando o menor valor de $C_{D,\beta\alpha}$ para o regime de Newton.

Por último, para completar o conjunto das equações fluidodinâmicas, introduz-se a Equação de Conservação Volume que se baseia no fato de que $\sum_{\varphi=1}^{N+1} r_\varphi = 1$. Assim, temos:

$$\sum_{\varphi=1}^{N+1} \frac{1}{\rho_\varphi} \left[\frac{\partial(r_\varphi \rho_\varphi)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\varphi \rho_\varphi \mathbf{u}_\varphi) \right] = \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{\rho_\alpha} S_{MS_\alpha} \quad (3.32)$$

O ANSYS CFX utiliza esta equação de conservação de volume para gerar uma equação discretizada para a pressão, com o objetivo de acoplar a pressão com a velocidade.

Note que, para o problema com uma fase contínua e N dispersas, o conjunto das equações fluidodinâmicas é composto por $4N + 5$ equações de transporte $((N + 1) \times 3$

devido às equações vetoriais para \mathbf{u}_φ , $N + 1$ equações de conservação de massa e uma equação de conservação de volume). Todas elas são resolvidas de forma acoplada em um único sistema linear na atual versão 11.0 do ANSYS CFX (ANSYS CFX-11.0 Solver Theory Guide, 2006).

3.2.3 Equações Adicionais do DQMOM

Conforme foi visto na primeira seção deste capítulo, para acoplar o DQMOM com um código de CFD, além das equações fluidodinâmicas, é necessário resolver as equações de transporte para os pesos e abscissas ponderadas (Eq. 3.11) com seus devidos termos fontes calculados pelo SELA (Eq. 3.17). O primeiro passo para adaptar as equações de transporte do DQMOM no ANSYS CFX é utilizar a seguinte relação:

$$r_\alpha \rho_\alpha = m_\alpha \omega_\alpha = \zeta_\alpha \quad (3.33)$$

Assim podemos associar diretamente as equações de transporte de ζ_α com as equações de fração volumétrica das fases dispersas, isto é:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = S_{MS_\alpha} \right] &\equiv \left[\frac{\partial \zeta_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\zeta_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = S_{\zeta_\alpha} \right] \\ \Rightarrow S_{MS_\alpha} &= S_{\zeta_\alpha} \end{aligned} \quad (3.34)$$

Assim, é necessário incorporar apenas as equações de transporte para ω_α no ANSYS CFX através da adição de equações de transporte de variáveis escalares. Seja ϕ_α uma variável adicional escalar qualquer transportada pela fase dispersa α . Então, a forma geral destas equações no ANSYS CFX, desprezando o termo difusivo, é dada por (ANSYS CFX-11.0 Solver Theory Guide, 2006):

$$\frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha \phi_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha \phi_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = S_{\phi_\alpha} \quad (3.35)$$

Para escrever a equação para ω_α na forma dada pela Eq. (3.35), interna ao ANSYS CFX, é necessário fazer uma manipulação de variáveis para obter:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\omega_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = S_{\omega_\alpha} &\Rightarrow \frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha \omega_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha \omega_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = S_{\phi_\alpha} \\ \text{onde } S_{\phi_\alpha} &= r_\alpha \rho_\alpha S_{\omega_\alpha} + \omega_\alpha S_{\zeta_\alpha} - r_\alpha \rho_\alpha \omega_\alpha \nabla \cdot \mathbf{u}_\alpha \end{aligned} \quad (3.36)$$

O operador divergente não está diretamente disponível no ANSYS CFX, ao contrário dos operadores gradiente e rotacional. O cálculo do termo $\nabla \cdot \mathbf{u}_\alpha$ foi realizado

de maneira indireta utilizando o traço da matriz dos gradientes do vetor de velocidade da fase. Sabe-se que o ANSYS CFX internamente discretiza o termo divergente através de um somatório dos fluxos nos pontos de integração, mas não se conseguiu acesso a este tipo de cálculo interno do *solver*.

Adimensionamento

Neste ponto, é necessário refletir sobre a dimensão dos valores nas equações em questão. A quantidade ζ_α , equivalente a $r_\alpha \rho_\alpha$, possui a dimensão de $[kg/m^3]$ e pode ser interpretada como massa de partículas de uma determinada fase por unidade de volume da mistura. Imaginando uma situação extrema onde há poucas bolhas dispersas em uma fase líquida, o valor de ζ_α pode assumir valores extremamente pequenos. Da mesma forma, a quantidade ω_α , que possui a dimensão $[m^{-3}]$, é o número de partículas da fase α por unidade de volume, que, certamente, poderá assumir valores extremamente altos como, por exemplo, no caso de gotas ou partículas muito pequenas em alta concentração.

Para evitar problemas numéricos no tratamento de quantidades numéricas muito pequenas ou muito grandes, se tornou necessária a normalização das variáveis do DQMOM. Foi utilizado o procedimento de adimensionamento desenvolvido nos trabalhos de LAGE (2002) e PATIL & ANDREWS (1998), também utilizado no trabalho de McCOY & MADRAS (2003), que é a solução analítica de referência utilizada para a verificação do código.

A relação entre os pesos e abscissas dimensionais e adimensionais (índice superior adm) é efetuada com informação sobre os dois primeiros momentos da distribuição em uma condição característica (índice superior 0), por exemplo, uma alimentação ou na condição inicial. Assim:

$$m_\alpha^{adm} = \frac{\mu_0^0}{\mu_1^0} m_\alpha \quad (3.37)$$

$$\omega_\alpha^{adm} = \frac{1}{\mu_0^0} \omega_\alpha \quad (3.38)$$

$$\zeta_\alpha^{adm} = \frac{1}{\mu_1^0} \zeta_\alpha \quad (3.39)$$

$$\zeta_\alpha = r_\alpha \rho_\alpha = \mu_1^0 \zeta_\alpha^{adm} \quad (3.40)$$

Assim, aplicando as relações de adimensionamento nas equações (3.34) e (3.36),

obtém-se:

$$\frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = \mu_1^0 S_{\zeta_\alpha}^{adm} \quad (3.41)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha \omega_\alpha^{adm})}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha \omega_\alpha^{adm} \mathbf{u}_\alpha) = \\ \mu_1^0 \zeta_\alpha^{adm} S_{\omega_\alpha}^{adm} + \mu_1^0 \omega_\alpha^{adm} S_{\zeta_\alpha}^{adm} - \mu_1^0 \zeta_\alpha^{adm} \omega_\alpha^{adm} \nabla \cdot \mathbf{u}_\alpha \end{aligned} \quad (3.42)$$

Finalmente, após as devidas substituições de variáveis, é apresentada a expressão para o cálculo do diâmetro equivalente da fase:

$$d_\alpha = \sqrt[3]{\frac{6}{\pi} \frac{\mu_1^0}{\mu_0^0} \frac{m_\alpha^{adm}}{\rho_\alpha}} \quad (3.43)$$

As equações de transporte dadas pelas equações (3.41), (3.26), (3.32) e (3.42) são resolvidas no ANSYS CFX em dois blocos de matrizes. Primeiro o conjunto hidrodinâmico e depois as variáveis adicionais. Até o momento, considerando escoamento laminar, esta implementação possui $5N + 5$ equações de transporte. Caso seja adicionado um modelo de turbulência para a fase contínua do tipo RANS (*Reynolds Average Navier-Stokes*) como, por exemplo, o clássico modelo $k - \epsilon$, e um modelo de zero equação para as fases dispersas, teríamos apenas mais duas equações de transporte.

3.2.4 Modelo Homogêneo

Nesta dissertação também foi estudado o caso particular em que todas as classes de partículas possuem o mesmo campo de velocidade, aqui denominada como “Abordagem Homogênea”. Esta aproximação é razoavelmente boa quando as partículas são muito pequenas e há pouca diferença de velocidade entre as fases. A principal vantagem desta simplificação é a redução significativa do número de equações de transporte a serem resolvidas. Neste caso, existem apenas duas fases, uma contínua e outra dispersa, que agrupa todas as classes de partículas. Assim, no conjunto hidrodinâmico são resolvidas 9 equações e posteriormente mais $2N$ variáveis adicionais, ou seja, $2N + 9$.

Desta forma, as equações de continuidade das fases se reduzem à apenas duas. Agora, o subscrito φ representa ou a fase contínua β ou a única fase dispersa d :

$$\frac{\partial(r_\varphi \rho_\varphi)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\varphi \rho_\varphi \mathbf{u}_\varphi) = 0 \quad (3.44)$$

Note que a equação de continuidade da fase dispersa não está mais associada com o cálculo de ζ_α , pois equivale à soma de todas as equações das diferentes classes de partículas, tendo assim seus termos fontes nulos. Da mesma forma, seguem as seis equações de quantidade de movimento:

$$\frac{\partial(r_\varphi\rho_\varphi\mathbf{u}_\varphi)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\varphi\rho_\varphi\mathbf{u}_\varphi\mathbf{u}_\varphi) = -r_\alpha\nabla p + \nabla \cdot [r_\varphi\mu_\varphi(\nabla\mathbf{u}_\varphi + \nabla\mathbf{u}_\varphi^T)] + \mathbf{S}_{M_\varphi} + \mathbf{M}_\varphi + \mathbf{B}_\varphi \quad (3.45)$$

Note que não há praticamente alteração alguma, a não ser do índice φ que assume os valores β e d , apenas. No entanto, o termo \mathbf{M}_φ agora é expressado como:

$$\mathbf{M}_\beta^D = \mathbf{M}_{\beta d}^D \quad (3.46)$$

$$\mathbf{M}_d^D = -\mathbf{M}_{\beta d}^D \quad (3.47)$$

$$\mathbf{M}_{\beta d}^D = \frac{3C_D}{4} \frac{r_d\rho_\beta}{d_s} |\mathbf{u}_d - \mathbf{u}_\beta| (\mathbf{u}_d - \mathbf{u}_\beta) \quad (3.48)$$

onde C_D é o coeficiente de arrasto das partículas calculado usando o diâmetro médio de Sauter, d_s (Eq. 3.54), da distribuição de partículas. Assim, a correlação para o coeficiente de arrasto de SCHILLER & NAUMANN (1933) é rescrita conforme:

$$C_D = \begin{cases} \frac{24(1 + 0,15Re_d^{0,687})}{Re_d} & \text{if } Re_d < 1000 \\ 0,44 & \text{if } Re_d > 1000 \end{cases} \quad (3.49)$$

onde Re_d é o número de Reynolds calculado com o diâmetro médio de Sauter das partículas, definido por:

$$Re_d = \frac{\rho_\beta d_s |\mathbf{u}_d - \mathbf{u}_\beta|}{\mu_\beta} \quad (3.50)$$

A equação de conservação de volume é simplificada para:

$$\sum_{\varphi=1}^2 \frac{1}{\rho_\varphi} \left[\frac{\partial(r_\varphi\rho_\varphi)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\varphi\rho_\varphi\mathbf{u}_\varphi) \right] = 0 \quad (3.51)$$

Agora são necessárias N equações de transporte para ω_α e ζ_α , conforme:

$$\frac{\partial(r_d\rho_d\omega_\alpha^{adm})}{\partial t} + \nabla \cdot (r_d\rho_d\omega_\alpha^{adm}\mathbf{u}_d) = r_d\rho_d S_{\omega_\alpha}^{adm} - r_d\rho_d\omega_\alpha^{adm}\nabla \cdot \mathbf{u}_d \quad (3.52)$$

$$\frac{\partial(r_d\rho_d\zeta_\alpha^{adm})}{\partial t} + \nabla \cdot (r_d\rho_d\zeta_\alpha^{adm}\mathbf{u}_d) = r_d\rho_d S_{\zeta_\alpha}^{adm} - r_d\rho_d\zeta_\alpha^{adm}\nabla \cdot \mathbf{u}_d \quad (3.53)$$

Por fim, diâmetro médio de Sauter é calculado por:

$$d_s = \left[\frac{6}{\pi} \frac{\mu_1^0}{\mu_0^0} \frac{1}{\rho_\alpha} \right]^{\frac{1}{3}} \frac{\sum_{\alpha=1}^N m_\alpha^{adm} \omega_\alpha^{adm}}{\sum_{\alpha=1}^N (m_\alpha^{adm})^{\frac{2}{3}} \omega_\alpha^{adm}} \quad (3.54)$$

3.2.5 Rotinas de FORTRAN

O cálculo dos $2N$ termos fontes, S_{ω_α} e S_{ζ_α} , $\alpha = 1, \dots, N$, é realizado pela solução do SELA (Eq. 3.14). A matriz \mathbf{A} possui basicamente informações sobre as abscissas m_α . Já o vetor \mathbf{d} possui todas informações sobre os processos de quebra e coalescência. Note que o cálculo deste vetor depende dos pesos ω_α e abscissas m_α , bem como dos detalhes dos modelos de quebra e coalescência como $a(m, m'; \mathbf{y})$, $\vartheta(m; \mathbf{y})$, $P(m | m'; \mathbf{y})$ e $b(m; \mathbf{y})$, que dependem das variáveis $\mathbf{y}(\mathbf{x}, t)$ da fase contínua (normalmente turbulência, velocidade de escorregamento, cisalhamento).

O ANSYS CFX possibilita o acoplamento de rotinas de FORTRAN nas suas simulações. Durante a etapa de pré-processamento é realizada a compilação das rotinas, gerando bibliotecas dinâmicas (".dll" em Windows e ".so" em Linux) que serão chamadas durante a rodada em tempo real (ANSYS CFX-11.0 Solver Theory Guide, 2006). Existem duas modalidades de rotinas:

- **USER Cel:** É um tipo de rotina que funciona segundo o conceito de função que estamos habituados. Dentro do ANSYS CFX, define-se que ela será chamada para calcular um determinado valor em uma determinada região (todo o domínio, em subdomínios, condições de contorno, etc). É passado um vetor de argumentos e a função retorna um valor. Toda vez que o *solver* do ANSYS CFX precisar do valor da função ela será chamada.
- **Junction Box:** É uma forma mais ampla de utilizar rotinas de FORTRAN acopladas ao *solver*. Diferente do USER Cel, as rotinas Junction Box não possuem argumentos ou retorno. Ao invés disso, as variáveis de interesse são acessadas diretamente na pilha de memória do *solver* e após terem sido feitos os devidos cálculos, o resultado também é diretamente escrito na pilha de memória. Outra diferença é que este tipo de rotina só é acessada quando o usuário definir (ex: início da rodada, início do passo de tempo, início da iteração interna, etc).

É importante ressaltar que o cálculo de S_{ω_α} e S_{ζ_α} deve ser realizado em todos os nós da malha e atualizado a cada iteração do *solver*. Portanto, é muito importante que esta rotina seja a mais eficiente possível para não penalizar o tempo computacional da simulação. Após diversos testes e estudos sobre a estrutura interna do ANSYS CFX, foi adotada a estratégia descrita a seguir.

- Uma primeira rotina, denominada "*FirstCall*", do tipo Junction Box, é chamada no início da rodada para criar uma área de memória na pilha do *solver* onde serão posteriormente guardados os valores de S_{ω_α} e S_{ζ_α} . O tamanho desta área é $2N \times \text{Número de Nós}$.
- A segunda rotina, chamada de "*Update*", também do tipo Junction Box, é chamada no início de cada iteração do *solver* para realizar o cálculo de S_{ω_α} e S_{ζ_α} em todos os nós da malha e depois armazenar na área de memória criada.
- A última rotina, chamada "*Get*", esta agora do tipo USER Cel, é usada para retornar o valor dos termos fontes no instante e região da simulação que eles forem requisitados. Como argumento, são utilizados dois índices para referenciar qual o termo fonte a ser retornado: o primeiro indica qual a fase α e o segundo indica se é o termo fonte de ω ou ζ . Diferente da rotina anterior, esta rotina é muito rápida, pois somente acessa a memória.

A rotina "*Update*" é composta dos seguintes passos:

- Leitura do endereço na memória das variáveis de interesse (m_α , ω_α e demais variáveis necessárias para os modelos de quebra e coalescência) na pilha de memória do *solver*.
- Leitura do endereço na memória da área criada na pilha de memória do *solver* para armazenar os termos fontes S_{ω_α} e S_{ζ_α} .
- Chamada da rotina externa "*Dqmom*" para cálculo dos termos fontes, fazendo um laço de cálculo em todos nós da malha. Esta rotina, por sua vez, efetua os seguintes passos:
 - Montagem do vetor \mathbf{d} , composto pelos termos definidos nas equações (3.19), (3.20), (3.21) e (3.22) para $k = 0, \dots, 2N - 1$. Neste ponto, são chamadas as rotinas dos modelos de quebra e coalescência para o cálculo de $a(m, m'; \mathbf{y})$, $\vartheta(m; \mathbf{y})$, $P(m | m'; \mathbf{y})$ e $b(m; \mathbf{y})$.
 - Montagem da matrix \mathbf{A} , de tamanho $2N \times 2N$.
 - Solução do SELA conforme Eq. (3.18) empregando uma rotina que utiliza o método de eliminação de Gauss com pivotamento.
- Gravação dos termos fontes na área de memória.

No pré-processamento do ANSYS CFX é definido o valor de N (Número de Pontos de Quadratura) que é informado para as rotinas e todos os cálculos são funções deste parâmetro. O cálculo das funções dos modelos de quebra e coalescência, $a(m, m'; \mathbf{y})$, $\vartheta(m; \mathbf{y})$, $P(m | m'; \mathbf{y})$ e $b(m; \mathbf{y})$ são efetuadas em rotinas a parte, facilitando assim o uso de diferentes modelos.

O ANSYS CFX pode executar simulações em precisão simples (ponto flutuante representado por 4 bytes) ou dupla (8 bytes). As rotinas podem ser compiladas em precisão simples ou dupla. No entanto, devido à natureza altamente não-linear dos elementos da matriz \mathbf{A} , do vetor \mathbf{d} e das funções de quebra e coalescência, foi decidido trabalhar sempre com precisão dupla nestas rotinas. É importante lembrar que devido ao procedimento de adimensionamento das equações, este problema de precisão foi minimizado. Assim, é possível rodar a simulação de CFD em precisão simples ou dupla, mas os cálculos dos termos fontes do DQMOM serão sempre realizados em precisão dupla. As rotinas foram testadas com sucesso em sistema operacional Windows e Linux, com processadores 32 e 64-bit, tanto AMD quanto Intel, em processamento serial e processamento paralelo, mostrando excelente portabilidade. Os compiladores testados foram: Compaq Visual Fortran 6.6, Intel Fortran Compiler 9.1, PGI Fortran 7.0 e g77.

3.2.6 Inicialização da Distribuição

O DQMOM é fundamentado no princípio de que, dada uma distribuição qualquer representada por N abscissas e seus respectivos pesos, o método evolui a distribuição no espaço e no tempo tentando conservar os seus $2N$ primeiros momentos. Desta forma, nas condições de contorno e na condição inicial da simulação é necessário informar as abscissas e pesos que representam a respectiva distribuição nesta condição. Para tanto, é empregado o procedimento baseado no algoritmo Produto-Diferença (PD) desenvolvido por GORDON (1968), conforme proposto por McGRAW (1997) (ver apêndice B).

Este algoritmo informa as abscissas e respectivos pesos para o cálculo da quadratura ótima (gaussiana tendo como função peso a própria distribuição) dados os $2N$ primeiros momentos da distribuição, resolvendo um problema de autovalor. Para informar os $2N$ primeiros momentos necessários ao algoritmo PD, são propostos dois procedimentos, dependendo da forma de como a distribuição inicial é apresentada.

- **Função Analítica:** Sendo $f(m)$ conhecida analiticamente, o cálculo dos momentos é realizado empregando a sua própria definição:

$$\mu_k = \int_0^{\infty} m^k f(m) dm \quad , \quad k = 0, \dots, 2N - 1 \quad (3.55)$$

- **Pontos Experimentais:** Assumindo que a distribuição é representada discretamente por N_{exp} pontos experimentais, caracterizados por uma massa m_i e sua respectiva fração ω_i , pode-se calcular os momentos por:

$$\mu_k = \sum_{i=1}^{N_{exp}} m_i^k \omega_i \quad , \quad k = 0, \dots, 2N - 1 \quad (3.56)$$

Capítulo 4

Resultados

4.1 Solução Analítica para Verificação

A solução analítica utilizada para verificação desta implementação foi desenvolvida por McCOY & MADRAS (2003). Nela, é tratado o caso particular da evolução temporal de um problema de balanço populacional sem variação espacial, monovariado, envolvendo quebra e coalescência, considerando uma frequência de coalescência constante, quebra binária com distribuição uniforme e com frequência proporcional ao tamanho. Assim, a PBE se reduz para:

$$\frac{\partial f(m; t)}{\partial t} = H(m; t) \quad (4.1)$$

Conforme as hipóteses adotadas, as funções de quebra e coalescência são definidas por:

$$\begin{aligned} a(m, m') &= C, \quad C = \text{constante} \\ \vartheta(m) &= 2 \\ P(m | m') &= \frac{1}{m'} \\ b(m) &= Sm, \quad S = \text{constante} \end{aligned}$$

A condição inicial deste problema é uma distribuição exponencial dada por:

$$f(m; 0) = \frac{\mu_0(0)^2}{\mu_1(0)} e^{-\frac{\mu_0(0)}{\mu_1(0)}m} \quad (4.2)$$

McCOY & MADRAS (2003) também adotaram o procedimento de adimensionamento das variáveis definido por LAGE (2002) e PATIL & ANDREWS (1998). Conforme descrito anteriormente, dois parâmetros são utilizados para a normalização da distribuição:

- O momento de ordem zero da distribuição inicial $\mu_0^0 = \mu_0(0) = \int_0^\infty f(m; t) dm$, que representa o número total de partículas inicialmente;
- O momento de ordem 1 da distribuição inicial $\mu_1^0 = \mu_1(0) = \int_0^\infty mf(m; t) dm$, que representa a massa total de partículas, conservada durante os processos de quebra e coalescência para o problema em questão ($\mu_1(t) = \mu_1^0, \forall t$);

Assim, são propostas novas variáveis adimensionais conforme:

$$\tau = \mu_0^0 Ct, \quad \eta = \frac{m\mu_0^0}{\mu_1^0}, \quad \phi(\eta, \tau) = \frac{f(m; t)\mu_1^0}{[\mu_0^0]^2}, \quad \Phi(\tau) = \frac{\mu_0(t)}{\mu_0^0} \quad (4.3)$$

onde τ é o tempo adimensional, η é a massa adimensional, $\Phi(\tau)$ é o número total de partículas adimensionado e $\phi(\eta, \tau)$ é a distribuição adimensionada. Também é definida uma outra variável auxiliar:

$$\Phi(\infty) = \frac{\sqrt{\frac{2S\mu_1^0}{C}}}{\mu_0^0} \quad (4.4)$$

que representa a solução em regime estacionário do número total de partículas adimensionado.

Assumindo estas variáveis, a PBE é reescrita como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi(\eta, \tau)}{\partial t} &= \frac{1}{2} \int_0^\eta \phi(\eta - x, \tau) \phi(x, \tau) dx \\ &- \phi(\eta, \tau) \Phi(\tau) \\ &+ [\Phi(\infty)]^2 \int_\eta^\infty \phi(x, \tau) dx \\ &- \frac{\eta}{2} [\Phi(\infty)]^2 \phi(\eta, \tau) \end{aligned} \quad (4.5)$$

possuindo a seguinte condição inicial:

$$\phi(\eta, 0) = e^{-\eta} \quad (4.6)$$

Empregando Transformada de Laplace, (McCOY & MADRAS, 2003) chegaram à seguinte solução analítica:

$$\phi(\eta, \tau) = \Phi^2(\tau) e^{-\eta \Phi(\tau)}, \quad \text{onde} \quad \Phi(\tau) = \Phi(\infty) \left[\frac{1 + \Phi(\infty) \tanh(\Phi(\infty)\tau/2)}{\Phi(\infty) + \tanh(\Phi(\infty)\tau/2)} \right] \quad (4.7)$$

A partir da equação (4.7), os momentos da distribuição adimensional podem ser calculados por:

$$\mu_k(\tau) = \left\{ \frac{\Phi(\infty) + \tanh\left(\frac{\Phi(\infty)\tau}{2}\right)}{\Phi(\infty) \left[1 + \Phi(\infty) \tanh\left(\frac{\Phi(\infty)\tau}{2}\right)\right]} \right\}^{k-1} \Gamma(k+1) \quad (4.8)$$

enquanto que os momentos iniciais da distribuição adimensional são dados por:

$$\mu_k(0) = \Gamma(k+1) \quad (4.9)$$

Note que, $\Gamma(k+1) = k!$, quando k é inteiro.

Quando $\Phi(\infty) = 1$, a solução do problema é invariante, ou seja, a quebra é equilibrada com a coalescência. Esta situação será bastante utilizada nas simulações para testar se realmente a implementação está conservando a distribuição. Esta solução analítica pode ser particularizada definindo os dois primeiros momentos da distribuição real mais duas constantes (S , C ou $\Phi(\infty)$) e utilizando a relação dada pela equação (4.4). Foi arbitrado que $\mu_0^0 = 1$, $\mu_1^0 = 1$ e $C = 1$, logo $S = \Phi(\infty)^2/2$. Assim, $\Phi(\infty)$ se torna o único parâmetro desta solução. Quando $\Phi(\infty) > 1$, temos o caso de quebra dominante. Da mesma forma, quando $\Phi(\infty) < 1$, a coalescência é dominante.

4.2 Simulação 0D Transiente

Inicialmente foi utilizada uma rotina em FORTRAN a parte com o algoritmo PD, para calcular os pesos e abcissas dados os momentos da solução analítica, definidos na equação (4.9). A seguir, foi implementado o caso particular da solução analítica em um programa de FORTRAN independente do ANSYS CFX, conforme o problema descrito na equação (4.11), com o objetivo de garantir que a programação da discretização do DQMOM havia sido realizada corretamente. Esta implementação externa do DQMOM utilizou a rotina DASSL (PETZOLD, 1982) para a integração

no tempo.

$$\begin{aligned}
\frac{d(m_\alpha \omega_\alpha)}{dt} &= S_{\zeta_\alpha} \\
\frac{d(\omega_\alpha)}{dt} &= S_{\omega_\alpha} \\
\mathbf{x} &= [S_{\omega_1} \dots S_{\omega_N} S_{\zeta_1} \dots S_{\zeta_N}]^T \\
\mathbf{Ax} &= \mathbf{d} \\
\mathbf{d} &= [\bar{H}_0^{(N)} \dots \bar{H}_{2N-1}^{(N)}]^T \\
\bar{H}_k^{(N)} &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\gamma=1}^N \omega_\alpha \omega_\gamma (m_\alpha + m_\gamma)^k - \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\gamma=1}^N \omega_\alpha \omega_\gamma m_\alpha^k \\
&\quad + \frac{\Phi(\infty)^2}{k+1} \sum_{\alpha=1}^N \omega_\alpha m_\alpha^{k+1} - \frac{\Phi(\infty)^2}{2} \sum_{\alpha=1}^N \omega_\alpha m_\alpha^{k+1}
\end{aligned} \tag{4.10}$$

A solução do sistema de EDO acima fornece os valores de m_α e ω_α ($\alpha = 1, \dots, N$) ao longo do tempo. Foram testados 3 casos de $\Phi(\infty)$:

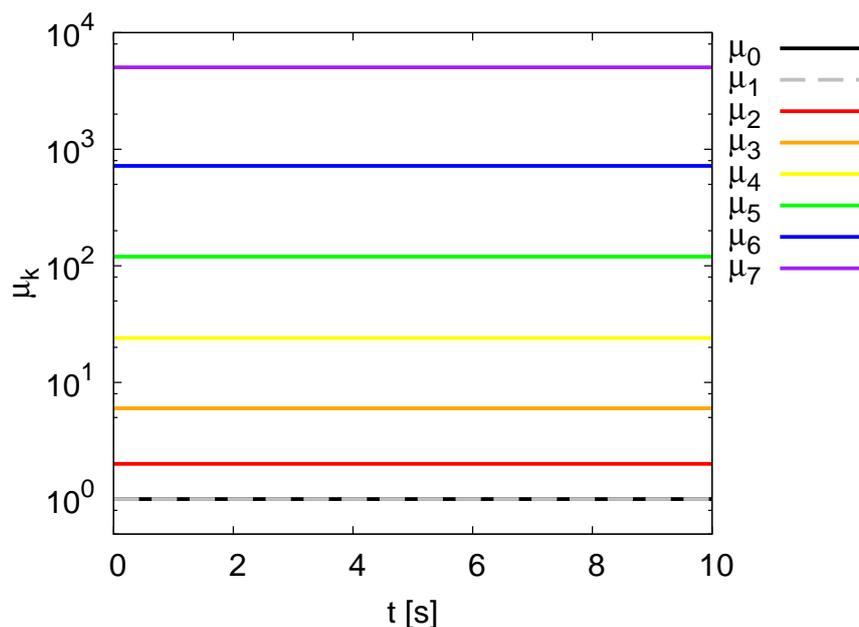
- $\Phi(\infty) = 1$: É o caso invariante, onde a quebra e coalescência se anulam. A distribuição $f(m, 0) = e^{-m}$, representada no DQMOM pelos $2N$ primeiros momentos ou pelas N abscissas e N pesos, deve permanecer inalterada com o tempo. Este caso será bastante utilizado para a validação, pois qualquer diferença representa algum tipo de erro numérico;
- $\Phi(\infty) = 0,1$: É o caso de coalescência dominante;
- $\Phi(\infty) = 10$: É o caso de quebra dominante;

Foram testados diversos valores de N , para cada um dos 3 casos de $\Phi(\infty)$. A implementação mostrou o comportamento de convergência dos resultados conforme se aumenta o N . Também foi verificado que o erro numérico é reduzido drasticamente com o aumento de N , conforme já havia sido relatado nos trabalhos anteriores de McGRAW (1997), MARCHISIO *et al.* (2003a) e MARCHISIO & FOX (2005). Especificamente FAN *et al.* (2004) e SANYAL *et al.* (2005) mostraram que $N = 3$ ou 4 já é suficiente para representar distribuições de partículas para propósitos de acoplamento com CFD. Sendo assim, foi adotado $N = 4$ para a maioria dos testes realizados neste trabalho.

Adotando $N = 4$ e utilizando a expressão $\mu_k(0) = k!$ para calcular os momentos da distribuição inicial $f(m, 0) = e^{-m}$, o algoritmo PD foi utilizado para calcular

Tabela 4.1: Condição inicial calculada pelo algoritmo PD.

α	ω_α	ζ_α
1	$6,03154 \times 10^{-1}$	$1,94546 \times 10^{-1}$
2	$3,57419 \times 10^{-1}$	$6,23968 \times 10^{-1}$
3	$3,88879 \times 10^{-2}$	$1,76420 \times 10^{-1}$
4	$5,39295 \times 10^{-4}$	$5,06671 \times 10^{-3}$

Figura 4.1: **Solução analítica** dos 8 primeiros **momentos** para o caso **invariante**.

os pesos e abscissas que foram utilizados como condição inicial para as simulações cujos resultados estão descritos na Tabela 4.1.

Os gráficos dados nas Figuras 4.1, 4.2 e 4.3 mostram a evolução dos 8 primeiros momentos da distribuição calculados pela solução analítica (Eq. 4.8).

Note que μ_1 , que representa a massa total de partículas, é sempre constante, conforme uma das premissas básicas da solução analítica de McCOY & MADRAS (2003).

A rotina DASSL é bastante reconhecida no meio científico pela sua eficiência e precisão na solução de sistemas de EDO. A combinação das modernas técnicas de integração da DASSL, como passo de tempo e ordem de integração adaptativas, com critérios de convergência bastante rígidos (tolerância absoluta e relativa de 10^{-10} e

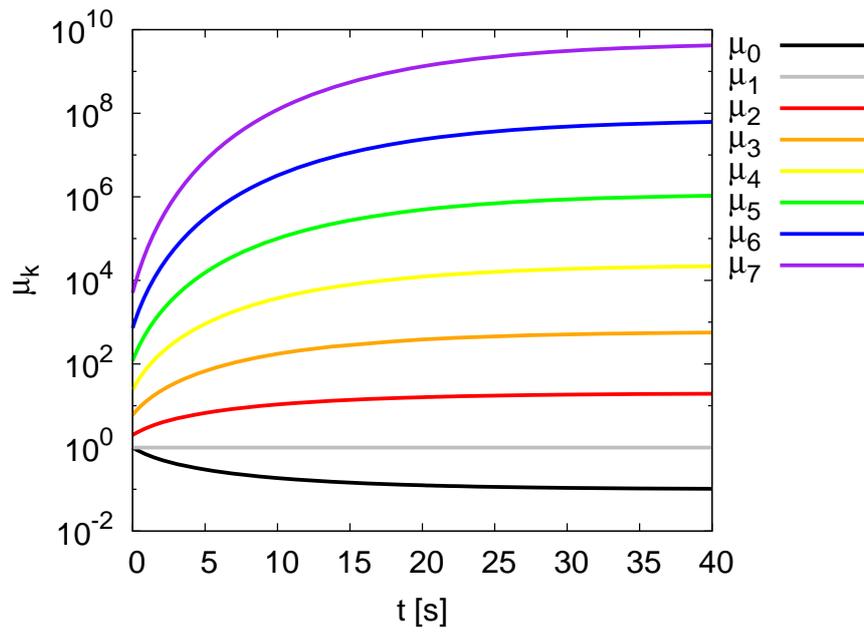


Figura 4.2: **Solução analítica** dos 8 primeiros **momentos** para o caso de **coalescência** dominante.

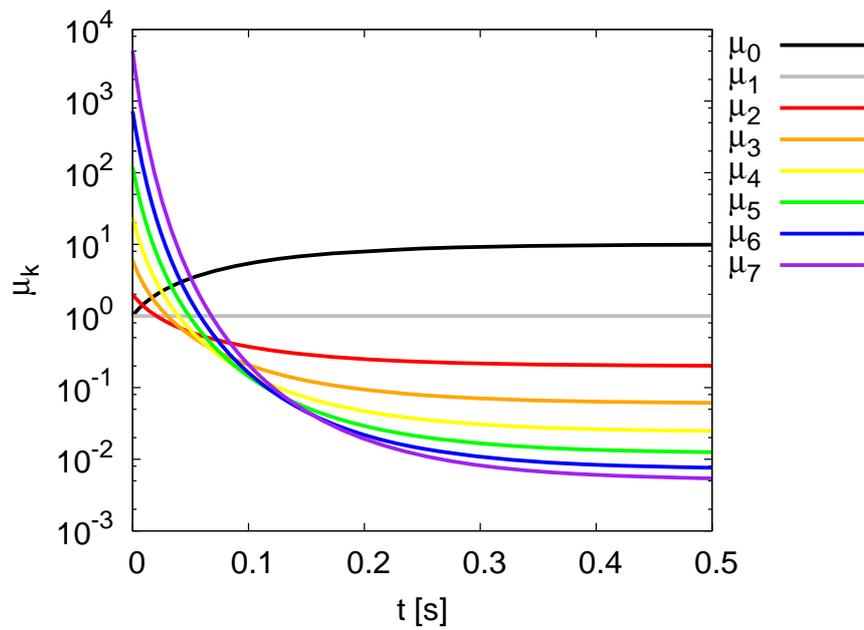


Figura 4.3: **Solução analítica** dos 8 primeiros **momentos** para o caso de **quebra** dominante.

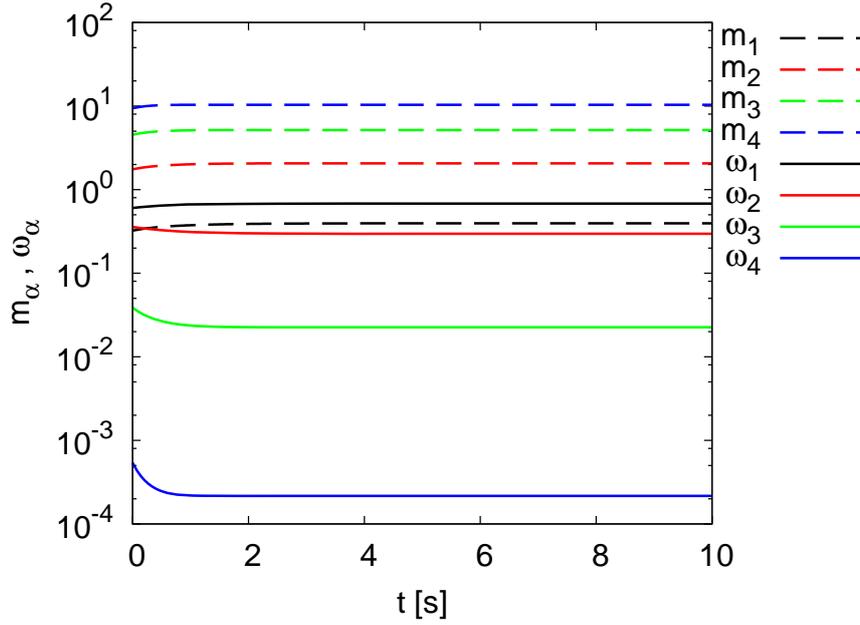


Figura 4.4: Solução da **DASSL** para **abscissas** e **pesos**, considerando $N = 4$, para o caso **invariante**.

10^{-12} , respectivamente) resultaram em uma solução numérica virtualmente livre de erros de integração temporal. No entanto, é preciso ressaltar que existe ainda o erro de quadratura do método DQMOM.

Os gráficos dados nas Figuras 4.4, 4.5 e 4.6 mostram a evolução das abscissas e pesos calculados pela implementação do DQMOM resolvida pela rotina DASSL.

Note que a solução analítica não é dada na forma de pesos e abscissas, e sim na forma analítica de $f(m, t)$. Portanto, para a comparação entre simulações e a solução analítica, os $2N$ primeiros momentos da solução analítica foram comparados com os $2N$ momentos simulados, calculados por $\mu_k = \sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha}^k \omega_{\alpha}$. Os gráficos representados nas Figuras 4.7, 4.8 e 4.9 mostram o erro relativo dos momentos calculados pela DASSL em relação à solução analítica.

Pode-se verificar que os 2 primeiros momentos os erros são bastante pequeno. No entanto, os demais momentos apresentam erros significativos. Estes erros estão diretamente associados à aproximação feita no cálculo da quadratura. Na simulação do caso invariante (Figs. 4.4 e 4.7) existe uma pequena variação em relação à condição inicial (Tab. 4.1), mas a solução tende a se estabilizar com o tempo.

Os diversos testes realizados nesta implementação do DQMOM resolvida pela DASSL tiveram bastante sucesso, assegurando que a dedução e implementação do

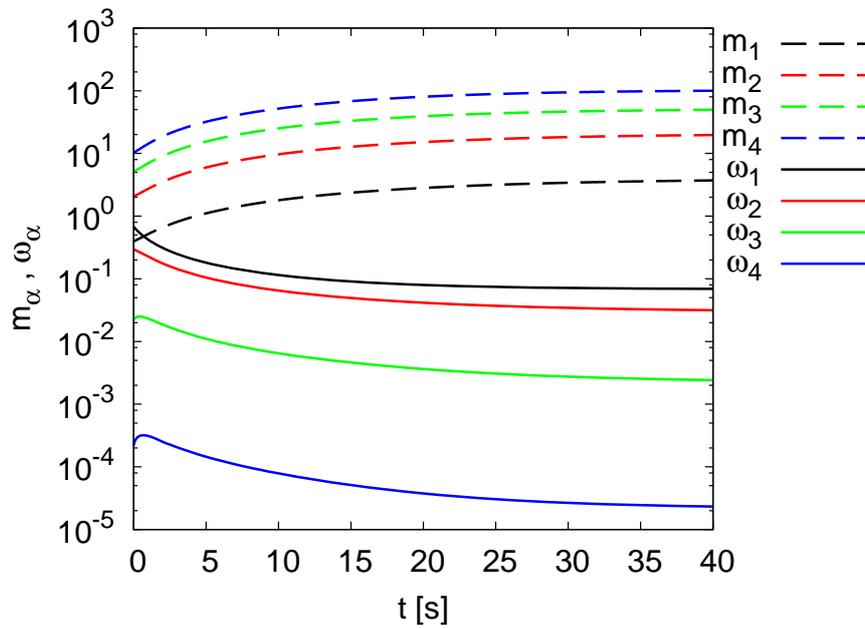


Figura 4.5: Solução da **DASSL** para **abscissas** e **pesos**, considerando $N = 4$, para o caso de **coalescência** dominante.

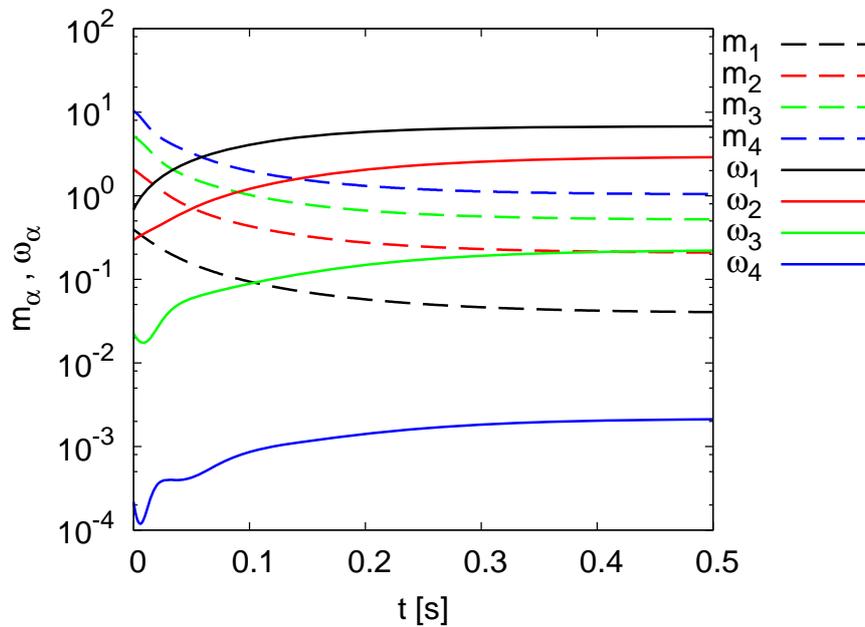


Figura 4.6: Solução da **DASSL** para **abscissas** e **pesos**, considerando $N = 4$, para o caso de **quebra** dominante.

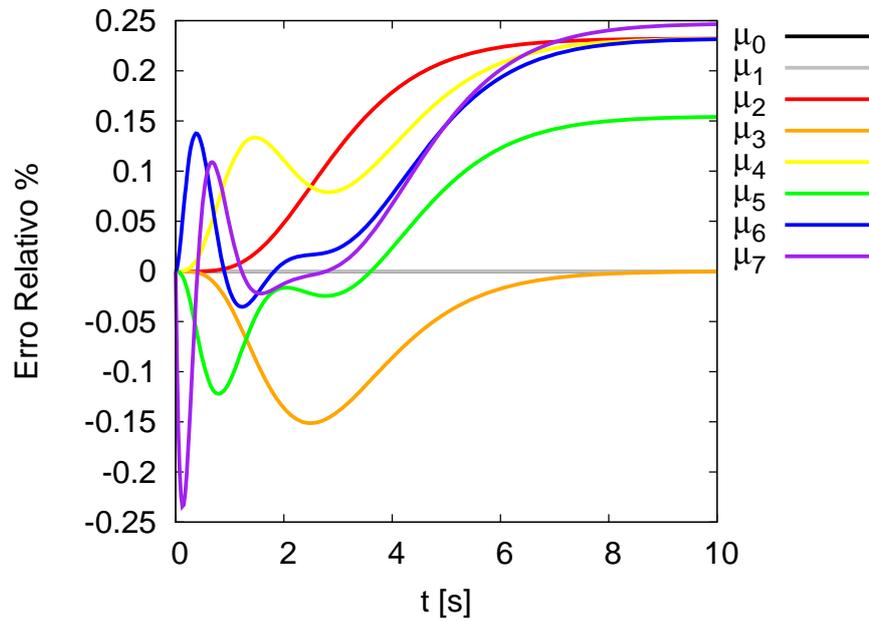


Figura 4.7: Erro relativo dos momentos da solução da DASSL para o caso invariante.

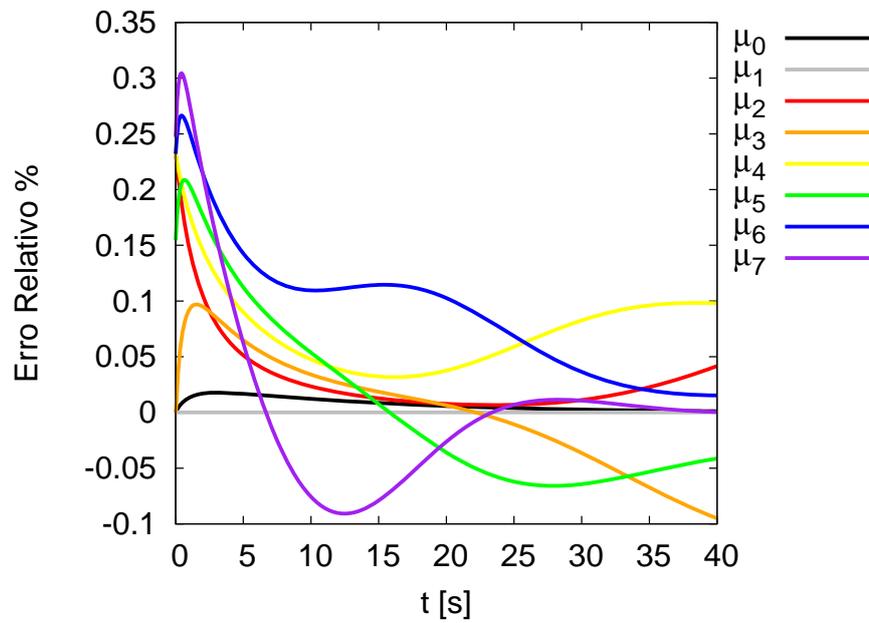


Figura 4.8: Erro relativo dos momentos da solução da DASSL para o caso de coalescência dominante.

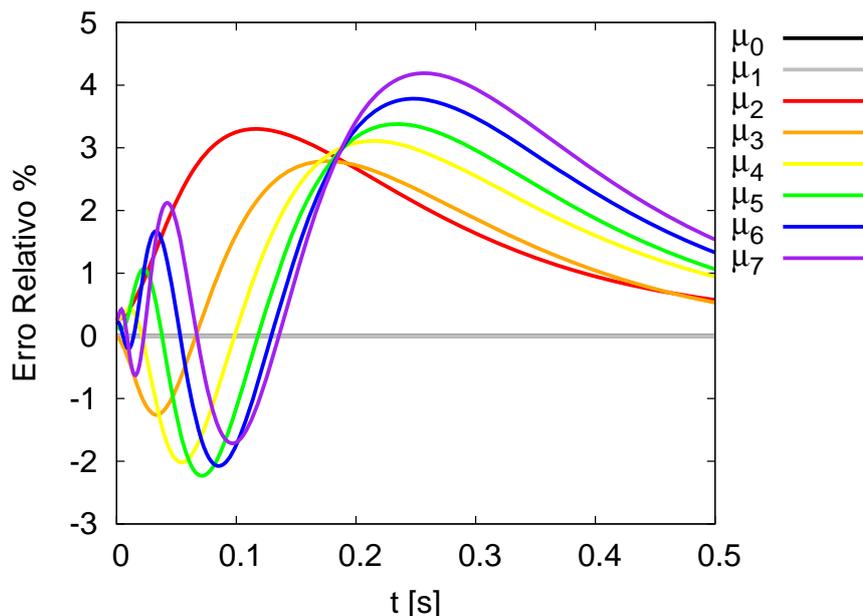


Figura 4.9: **Erro relativo** dos **momentos** da solução da **DASSL** para o caso de **quebra** dominante.

DQMOM feita neste trabalho estavam corretas. Além disso, também foi possível concluir alguns pontos importantes que serviram como base para as próximas etapas, como:

- Presença de erros de quadratura, principalmente nos momentos de alta ordem.
- Na solução do caso invariante, devido aos erros associados à quadratura, surgem leves perturbações iniciais nos momentos e, conseqüentemente, nas abscissas e pesos, que fazem a solução numérica convergir ao longo do tempo para valores levemente diferentes dos analíticos.
- No caso de quebra dominante, os erros de quadratura dos momentos são uma ordem de grandeza maiores do que nos outros casos.

Será visto, no decorrer desse capítulo de resultados, que o caso de quebra dominante apresentará sempre maior dificuldade de convergência. Isto deve-se ao fato de que as funções do núcleo de quebra são mais complexas do que no caso de coalescência. Este comportamento complexo pode ser observado na Figura 4.6, onde a solução dos pesos apresenta variações mais fortes, principalmente no início da simulação.

Conforme foi comentado anteriormente, outros trabalhos já estudaram a convergência do método DQMOM em função do número de pontos de quadratura. O

objetivo deste trabalho é realizar uma verificação numérica rigorosa da implementação de uma solução acoplada de balanço populacional com CFD. Para entender melhor os erros de integração temporal e espacial relativos à solução das equações do DQMOM dentro do código de CFD, foi necessário suprimir o erro relativo à quadratura do DQMOM. Desta forma, foi adotada como referência a solução numérica da DASSL, pelos seguintes motivos.

- Ausência de erros de integração significativos, pois a solução foi calculada com critérios bem rígidos (tolerâncias bem baixas).
- Esta solução incorpora exatamente os mesmos erros de quadratura que estarão presentes na solução do DQMOM acoplada ao código de CFD.
- Ela já fornece a solução em termos de abscissas e pesos, facilitando a comparação com os resultados do código de CFD.

4.2.1 Estudo da Integração Temporal

A integração temporal no ANSYS CFX, por *default*, é realizada utilizando o método *Backward Euler* de segunda ordem. Há também a opção de utilizar o método *Backward Euler* de primeira ordem, que não é recomendada. Portanto, adotaremos apenas o método de segunda ordem neste trabalho. Como é comum ocorrer em códigos comerciais, não se tem acesso aos detalhes de implementação numérica e a documentação não é muito aprofundada neste assunto. Foi considerado prudente neste trabalho, testar a precisão da solução temporal do ANSYS CFX.

Estas simulações zero-dimensionais foram realizadas em uma malha de apenas 1 volume, considerando um campo de velocidades nulo. Baseado nos resultados analíticos e simulados pela DASSL apresentados anteriormente, foi definido um o tempo limite de simulação de cada um dos casos de $\Phi(\infty)$, conforme a Tabela 4.2.

A Tabela 4.1 mostrou os valores dos pesos e abscissas iniciais originados pelo algoritmo PD. No entanto, na sessão anterior, foi discutida a questão do erro de quadratura que é evidenciado quando comparado com a solução analítica. A Figura 4.4 ilustra exatamente este efeito, pois os pesos e abscissas do caso invariante sofrem um leve desvio da condição inicial devido à aproximação de quadratura do DQMOM. Visando a eliminar este efeito nas comparações daqui para frente, a condi-

Tabela 4.2: Tempo total de simulação.

Caso, fenômeno dominante	Tempo [s]
$\Phi(\infty) = 0,1$, coalescência	40
$\Phi(\infty) = 1$, invariante	15
$\Phi(\infty) = 10$, quebra	0,5

Tabela 4.3: Condição inicial resolvida pela DASSL.

α	ω_α	ζ_α
1	$6,80737 \times 10^{-1}$	$2,69044 \times 10^{-1}$
2	$2,96482 \times 10^{-1}$	$6,12194 \times 10^{-1}$
3	$2,25641 \times 10^{-2}$	$1,16519 \times 10^{-1}$
4	$2,16619 \times 10^{-4}$	$2,24372 \times 10^{-3}$

ção inicial utilizada será dada pelos valores dos pesos e abscissas da solução do caso invariante resolvida pela DASSL no final dos 15 segundos, conforme a Tabela 4.3:

Foram utilizados 1000 pontos de integração (Passo de tempo = $T_{total}/1000$) em cada caso. O critério de convergência foi de 10^{-6} para o resíduo máximo. Inicialmente a solução necessitou de mais de uma iteração para convergir, mas após aproximadamente 10–30% do tempo total, a simulação já avançava com apenas uma iteração.

Os resultados do ANSYS CFX foram bastante concordantes com os resultados da DASSL. Quando comparados de forma gráfica, na maior parte dos casos, ficou difícil perceber a diferença entre as curvas. O caso com maior diferença foi o de quebra dominante, mais especificamente os seus pesos, conforme o gráfico dado na Figura 4.10.

Com o objetivo de quantificar de forma consistente o erro para as comparações futuras, foi definida a métrica chamada ERMG, que consiste no valor médio RMS (*root mean square*) do erro relativo de todos os pesos e abscissas ao longo do tempo, conforme:

$$(ERMG)^2 = \frac{1}{2NM} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N \left\{ \left[\frac{\omega_{i,j}^{(a)} - \omega_{i,j}}{\omega_{i,j}^{(a)}} \right]^2 + \left[\frac{m_{i,j}^{(a)} - m_{i,j}}{m_{i,j}^{(a)}} \right]^2 \right\} \quad (4.11)$$

onde M é o número de pontos de integração da simulação transiente no ANSYS CFX

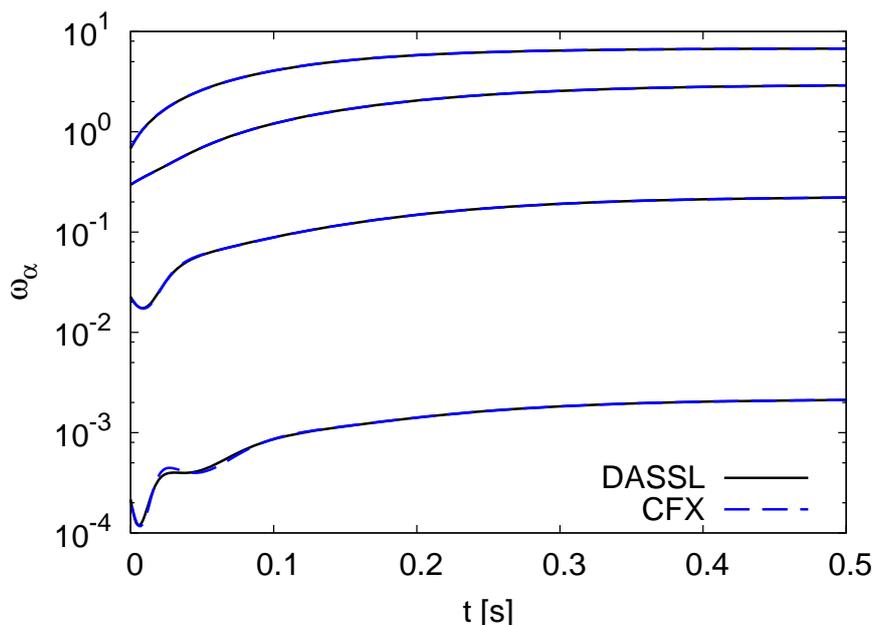


Figura 4.10: Comparação dos pesos obtidos pelo ANSYS CFX e DASSL para o caso de quebra.

Tabela 4.4: Comparação de erros da solução 0D transiente utilizando 1000 pontos de integração.

Caso	ERMG [%]
$\Phi(\infty) = 0,1$	0,022
$\Phi(\infty) = 1$	0,00015
$\Phi(\infty) = 10$	0,34

e o subscrito j representa o índice das amostras temporais. O índice superior (a) encontrado em $\omega_{i,j}^{(a)}$ e $m_{i,j}^{(a)}$ referencia a solução da DASSL, adotada como “solução analítica”.

Analisando os resultados do ERMG apresentados na Tabela 4.4, pode-se concluir que o caso de quebra dominante apresenta maior dificuldade de convergência. Analisando a Figura 4.10, é possível verificar as fortes variações nos valores dos pesos de alta ordem que ocorrem nos instantes iniciais da simulação.

Para testar ainda a convergência da solução com o passo de tempo, foi simulado o caso de coalescência dominante com 2000 pontos de integração no mesmo intervalo de tempo, ou seja, com o passo de tempo duas vezes menor. O resultado do ERMG foi 4,6 vezes menor do que o anterior, mostrando que o esquema temporal possui

Tabela 4.5: Parâmetros da simulação 1D estacionária.

Caso	Tempo Advectivo [s]	Velocidade [m/s]
$\Phi(\infty) = 0,1$	40	0,025
$\Phi(\infty) = 1$	15	0,0666667
$\Phi(\infty) = 10$	0,5	2

realmente precisão de segunda ordem. Desta forma, conclui-se que o nível dos erros encontrados na solução temporal do ANSYS CFX são suficientemente baixos.

4.3 Simulação 1D Estacionária

As equações de transporte dos pesos e abscissas ponderadas do DQMOM (Eqs. 3.41 e 3.42) não contemplam termos difusivos, contendo apenas os termos temporal, advectivo e fonte, possuindo, assim, comportamento hiperbólico. Sabe-se que este tipo de problema numérico é bastante sensível ao esquema advectivo (LeVEQUE, 2004). Portanto, foi considerado prudente analisar a acurácia da solução espacial das equações do DQMOM no ANSYS CFX.

Embora a solução analítica tenha sido desenvolvida para uma situação zero-dimensional transiente, é possível transformá-la em um problema unidimensional em regime estacionário. Considerando um escoamento unidimensional com velocidade constante, pode-se transformar as derivadas temporais em espaciais, conforme mostrado na equação (4.12) para uma variável genérica ϕ :

$$\frac{d\phi}{dt} = \varphi \quad \implies \quad u_z \frac{d\phi}{dz} = \varphi \quad (4.12)$$

Para um domínio unidimensional de comprimento L na direção z , L/u_z representa o tempo advectivo da propagação da PBE através do domínio. Foi adotado o tempo advectivo igual ao tempo total de simulação do problema transiente, conforme a Tabela 4.2. Os valores de u_z foram calculados de forma a representar o mesmo perfil dos pesos e abscissas do problema transiente zero-dimensional, conforme a Tabela 4.5 (com $L = 1$ m).

A geometria do domínio é um paralelepípedo de dimensões $0,1 \times 0,1 \times 1,0$ metros, conforme a Figura 4.11. O ANSYS CFX trabalha apenas com elementos volumé-

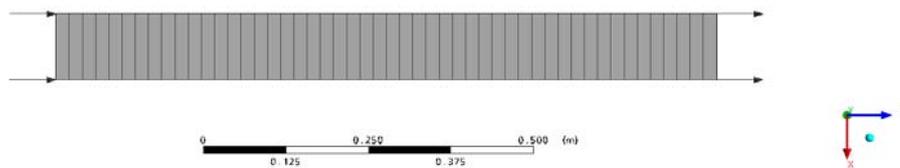


Figura 4.11: Domínio e condições de contorno da simulação 1D com 50 volumes.

tricos, no entanto devido à natureza unidimensional do problema, nas direções x e y existe apenas 1 elemento. As malhas empregadas foram do tipo hexaédrica com espaçamento uniforme. Os valores da Tabela 4.3 foram empregados como condição de contorno na entrada. Na saída, foi adotada a condição de pressão prescrita nula e gradientes nulos na direção do escoamento para todas as variáveis. Nas paredes laterais, foi utilizada a condição de simetria.

Para facilitar a convergência, o domínio foi inicializado com as mesmas condições da entrada. Conforme foi comentado no capítulo anterior, o ANSYS CFX emprega a técnica de falso transiente para a relaxação das simulações em regime estacionário. O valor do falso passo de tempo empregado foi calculado pela expressão $dt = 0,5T_{adv}/N_{vol}$, onde T_{adv} é o tempo advectivo da simulação e N_{vol} é o número de volumes da malha. Desta forma, o número de *Courant*¹ da simulação fica com o valor de 0,5 garantindo a mesma estabilidade numérica para cada um dos casos de $\Phi(\infty)$. Foram necessárias aproximadamente $2,5N_{vol}$ iterações para a convergência. As simulações foram assumidas convergidas quando todos os valores dos resíduos máximos eram inferiores a 10^{-6} .

4.3.1 Teste de Refino de Malha

Foi realizado o teste de refino de malha para descobrir quantos volumes eram necessários para que o valor do ERMG ficasse abaixo de 1%. O cálculo do ERMG foi realizado seguindo a mesma expressão dada pela equação 4.11, sendo que, agora, $M = N_{vol}$. Todas as simulações relativas ao teste de refino de malha utilizaram o esquema advectivo padrão do ANSYS CFX, o *High Resolution*. O caso invariante mostrou-se independente do número de volumes e os erros associados foram despresi-

¹O número de *Courant* é equivalente a um passo de tempo adimensional, definido unidimensionalmente como $Courant = u\Delta t/\Delta x$, onde u é a velocidade, Δt é o passo de tempo e Δx é o tamanho da malha. O ANSYS CFX utiliza uma generalização multidimensional desta expressão onde a velocidade e comprimento característico são baseados no fluxo de massa e dimensão do volume de controle.

Tabela 4.6: Resultados do ERMG (%) das simulações 1D utilizando diferentes malhas hexaédricas uniformes.

Coalescência dominante	N_{vol}	25	50	100
$\Phi(\infty) = 0,1$	ERMG (%)	2,31	1,06	0,37
Quebra dominante	N_{vol}	250	500	750
$\Phi(\infty) = 10$	ERMG (%)	1,76	0,10	0,05

veis. No caso de coalescência dominante ($\Phi(\infty)=0,1$), foram necessários 100 volumes para que o ERMG fosse menor do que 1%. Já no caso de quebra ($\Phi(\infty)=10$) foram necessários 500 volumes. A Tabela 4.6 mostra o resumo dos testes de refino de malha.

De fato, como já era esperado, o caso de quebra apresentou maior dificuldade de convergência. Devido à rápida dinâmica de quebra originada pelo seu núcleo linear, o caso de quebra dominante necessitou muito mais volumes para convergir com estabilidade. Quando as variáveis do DQMOM (ω_α e ζ_α) não estão bem convergidas, a solução do SELA pode falhar ou gerar termos fontes muito intensos que em seguida causarão divergência na solução de CFD.

Da mesma forma que o problema transiente, os maiores erros foram encontrados no início do domínio. Foi realizado um teste de refino local no caso de coalescência empregando uma malha com 50 volumes, mais refinada na entrada e com o tamanho do elemento sendo expandindo geometricamente (fator de 1,075) até a saída. Os resultados foram surpreendentes, pois o valor do ERMG foi de 0,11%, menor inclusive do que a malha de 100 volumes.

Um outro teste foi realizado empregando uma malha composta por elementos tetraédricos de tamanho uniforme. Foram utilizados aproximadamente 50 volumes através do domínio para o caso de coalescência. Os resultados foram semelhantes aos obtidos utilizando a malha hexaédrica, mostrando que a implementação não é sensível ao tipo de elemento.

Em suma, foi verificado o comportamento de convergência dos resultados com o refino de malha.

Tabela 4.7: Resultados do ERMG (%) das simulações 1D utilizando diferentes esquemas advectivos.

Esquema Advectivo	$\Phi(\infty) = 0,1$	$\Phi(\infty) = 10$
$\beta = 0$ (UD)	4,55	1,06
$\beta = 0,75$	1,65	0,25
$\beta = 1$	0,61	0,18
HR	1,06	0,10
QUICK	0,36	0,04

4.3.2 Teste dos Esquemas Advectivos

No capítulo anterior, foi descrito a forma com que o ANSYS CFX trata os seus esquemas advectivos. Além dos esquemas baseados no *Blend Factor* β , existe também a possibilidade de utilizar o método QUICK e o Diferenças Centrais (CD), descritos em detalhe, por exemplo, em VERSTEEG & MALALASEKERA (1995). Foram realizados testes com todos os esquemas advectivos disponíveis utilizando as malhas hexaédricas uniformes, com 50 volumes para o caso de coalescência e 500 volumes para o caso de quebra.

No teste anterior de refino de malha, as simulações haviam sido feitas empregando o *High Resolution* (HR). O ANSYS CFX recomenda este tipo de esquema para a maioria dos casos, pois possui precisão de segunda ordem e é bastante adaptável nas situações de fortes gradientes. É importante observar que o caso de quebra dominante transiente (0D) teve um erro de 0,34% utilizando 1000 pontos de integração. Já o caso de quebra dominante estacionário (1D) utilizando 750 pontos obteve um erro de 0,05%, consideravelmente menor. Isto é um indício que a integração espacial no CFX possui um tratamento melhor que a temporal.

A Tabela 4.7 mostra os resultados dos testes para os esquemas baseados no β uniforme, como o $\beta = 0$ (*Upwind* de primeira ordem), $\beta = 0,75$ e $\beta = 1$ (*Upwind* de segunda ordem), bem como o HR que possui β adaptável localmente e o QUICK. O CD apresentou grande dificuldade de convergência, principalmente no caso de quebra dominante, ficando então de fora da comparação.

Naturalmente, o *Upwind* de primeira ordem (UD) mostrou o pior resultado. O método QUICK apresentou resultados sensivelmente melhores que o HR, mostrando

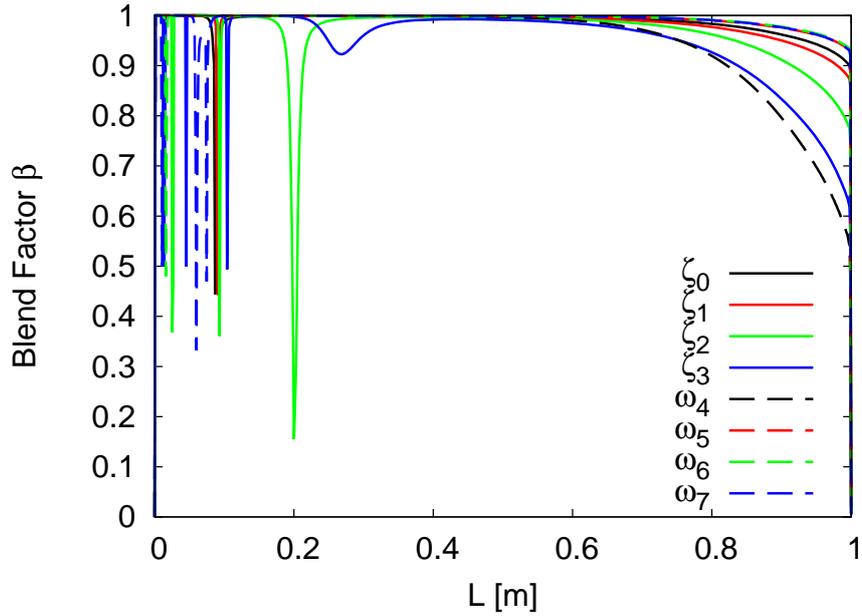


Figura 4.12: Valores assumidos pelo *Blend Factor* β , utilizando o esquema HR na malha de 750 volumes para o caso de quebra.

a sua característica de terceira ordem em malhas uniformes. Analisando o valor assumido para β nas simulações com o HR (Fig. 4.12), pode-se perceber os limitadores de fluxo atuando nas regiões de fortes gradientes para evitar oscilação numérica. Um fato curioso é que tanto no início como no fim do domínio o β se torna 0 (é difícil ver isso no gráfico da Fig. 4.12), possivelmente por causa de limitações na implementação das condições de contorno.

De uma forma geral, o HR apresentou bons resultados. Em função da sua generalidade e robustez, ele será adotado para os próximos estudos multidimensionais.

4.4 Simulação 2D em um Degrau Descendente

Esta etapa mostrou-se necessária para testar a implementação em uma situação multidimensional. Foi escolhida a geometria de um degrau descendente (*Backward Facing Step* - BFS) por ser um tipo de escoamento que apresenta regiões de recirculação, onde se encontram fortes gradientes, que geram diferentes tempos de residência para as partículas.

Adicionalmente, algumas simplificações foram adotadas. Como os efeitos de fortes gradientes já podem ser visualizados em 2D, foi evitado o escoamento 3D para

poupar esforço computacional. Com o objetivo de evitar o uso de correlações para os termos de troca de quantidade de movimento interfaciais que ainda não estão bem solidificadas na literatura, foi adotado um escoamento laminar empregando apenas a força de arrasto. O termo fonte de empuxo foi eliminado num primeiro momento.

O escoamento adotado foi uma emulsão fictícia de água em óleo. Esta mistura bifásica é composta por uma fase contínua de óleo que carrega uma fase dispersa de gotículas de água. A fase dispersa é representada por uma distribuição de tamanho de partículas, onde a quebra e a coalescência são consideradas, utilizando os mesmos modelos de quebra e coalescência não-físicos da solução analítica de McCOY & MADRAS (2003). Deve-se enfatizar que esta etapa não é uma validação experimental, pois não haviam dados experimentais para a comparação. Como o objetivo deste trabalho é realizar testes de verificação numérica, os modelos empregados para quebra e coalescência possuem importância secundária. Note que os núcleos de quebra e coalescência de McCOY & MADRAS (2003) são bastante simples e não dependem de variáveis da fase contínua, como tensão de cisalhamento ou energia de dissipação turbulenta, de forma que eles podem ser empregados em um escoamento laminar sem a preocupação com as incertezas da modelagem de escoamentos multifásicos turbulentos.

A primeira parte desta simulações adotou a “Abordagem Homogênea” de acoplamento. Isto implica que todas as partículas possuem o mesmo campo de velocidades, logo seguirão o mesmo caminho no escoamento. Esta consideração é razoavelmente aceita para partículas muito pequenas em um escoamento líquido-líquido com pouca diferença de velocidade, onde o arrasto é predominante. Neste caso, a velocidade de escorregamento entre as fases é muito pequena. O objetivo desta simplificação, em um primeiro momento, foi reduzir o esforço computacional para os diversos testes de malha realizados e, posteriormente, permitir comparar os resultados com aqueles gerados para a situação mais realística de diferentes campos de velocidades para cada tamanho de partícula.

Como a distribuição de tamanho de partículas é advectada pela fase contínua, as taxas de quebra e de coalescência são responsáveis pela sua evolução. Desta forma, a intensidade de variação da distribuição é proporcional ao tempo de residência da fase dispersa. Como os núcleos de quebra e de coalescência simples empregados nestas simulações não dependem de nenhuma variável da fase contínua, apenas o tempo de residência da fase dispersa (logo, o caminho do escoamento) influenciará na solução da PBE. Conforme foi comentado no capítulo anterior, para o modelo homogêneo a

Tabela 4.8: Propriedades físicas e condições de entrada da mistura bifásica.

Propriedades Físicas	Óleo	Água
ρ ($kg\ m^{-3}$)	900	1000
η ($kg\ m^{-1}\ s^{-1}$)	1×10^{-5}	1×10^{-6}
Variável	Condição de Entrada	
d_s (μm)	-	50
r_α (-)	0,9	0,1



Figura 4.13: Geometria 2D do BFS com dimensões paramétricas e indicação das condições de contorno.

força de arrasto entre as fases contínua e dispersa é calculada usando-se o diâmetro médio de Sauter obtido a partir do balanço populacional. Portanto, o diâmetro médio das partículas será a única influência da solução da PBE na simulação de CFD deste escoamento bifásico.

As propriedades físicas da dispersão líquido-líquido, o diâmetro médio inicial da distribuição e a fração de fase dispersa estão listados na Tabela 4.8, sendo baseados em emulsões água-óleo reais. A distribuição inicial continuou sendo na forma exponencial, sendo representada com 4 pontos de quadratura, conforme os testes anteriores (ver Tab. 4.3).

Na entrada do canal foi prescrito um perfil de velocidade constante (Tab. 4.3). Nas paredes, foi adotada a condição de não deslização. Na saída, foi prescrita a condição de gradientes nulos na direção normal, considerando a pressão média nula.

A geometria do BFS e condições de contorno estão ilustradas na Figura 4.13. Neste caso, $L = 11H$, $l = H$ and $h = H/2$. Os valores de utilizados H estão descritos na Tabela 4.9.

As simulações foram realizadas em malhas hexaédricas e tetraédrica-prismática, mostradas na Figura 4.14, as quais serão denominadas daqui para frente como hexaédrica (hexa) e tetraédrica (tetra), conforme a prática comum. Nas malhas he-

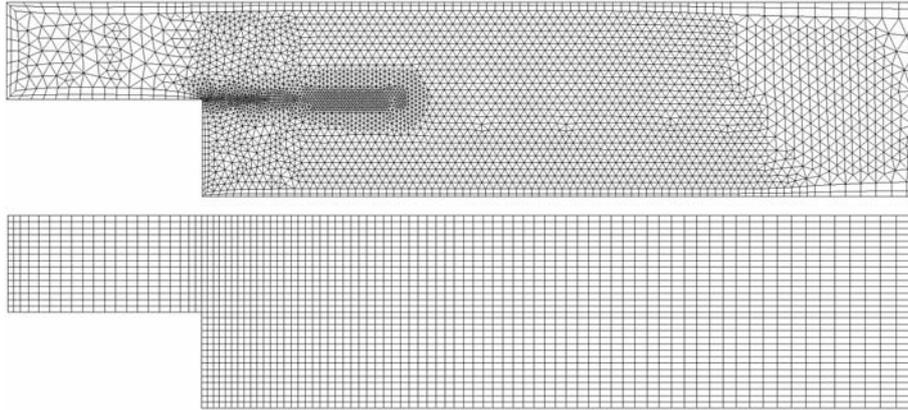


Figura 4.14: Exemplos de malhas hexaédrica e tetraédrica utilizadas na simulação do BFS.

xaédricas, procurou-se refinar mais na região de recirculação e menos no final do canal. Já nas malhas tetraédricas, além disso, foi efetuado o refino especialmente na região de forte cisalhamento entre a corrente principal e zona de recirculação.

Em malhas tetraédricas, uma camada de prismas próxima à parede é comumente utilizada para refinar na direção normal com o objetivo de capturar os fortes gradientes da camada limite. As malhas hexaédricas possuem a vantagem de serem ortogonais (ou quase), com a possibilidade de refino específico para cada direção e em algumas regiões estão alinhadas com o escoamento. No entanto, facilmente elas propagam o refino para regiões distantes e podem desperdiçar muitos nós. A malha tetraédrica pode ser refinada especificamente nas regiões de interesse, podendo ser construída de maneira bastante automática sendo facilmente adaptável a geometrias complexas. Porém, não é possível refinar direcionalmente e ela nunca está alinhada com o escoamento.

Pelo fato da geometria ser 2D e da necessidade do ANSYS CFX de trabalhar apenas com elementos volumétricos, na verdade as malhas (Fig. 4.14) são extrudadas na direção z contendo apenas um elemento. Os elementos quadriláteros se tornam hexaédricos e os triangulares se tornam prismas. No entanto, por conveniência, continuaremos a chamá-las de malhas hexaédricas e tetraédricas.

Foram realizados testes de refino de malha em cada tipo de malha empregando-se 4000, 8000 e 16000 nós no plano bidimensional. Foram testados os casos de coalescência e quebra dominante, bem como o invariante.

Tabela 4.9: Parâmetros das simulações para os casos de coalescência e quebra dominante.

Parâmetro	$\Phi(\infty) = 6$	$\Phi(\infty) = 0,1$
Altura do Canal, H [m]	0,01	0,1
Velocidade de Entrada [m/s]	0,1	0,01
Tempo de Simulação [s]	0,1	10

Nas simulações unidimensionais, foi verificado que a distribuição evoluía muito mais rápido no caso de quebra dominante do que no de coalescência dominante. Desta forma, visando a utilizar tempos advectivos do escoamento no canal adequados com o tempo de evolução da distribuição, mantendo o mesmo número de Reynolds para ambos os casos, foi decidido utilizar tamanhos de geometria e valores de velocidade diferentes, conforme mostra a Tabela 4.9. O número de Reynolds da fase contínua ficou em torno de 100, assegurando o regime laminar.

Além disso, em função dos fortes gradientes do problema de quebra e da sua rápida dinâmica, seriam necessárias malhas ainda mais refinadas. Com o objetivo de utilizar a mesma malha para ambos os casos, apenas mudando a escala das mesmas, foi adotado um valor menor de $\Phi(\infty)$, passando de 10 para 6, reduzindo, assim, a intensidade de quebra.

As simulações do escoamento transiente foram realizadas partindo de um escoamento estagnado com as mesmas propriedades da entrada. Os resultados foram comparados quando as simulações atingiam o tempo total (Tab. 4.9). Como o escoamento no BFS possui altos gradientes nas regiões de recirculação, dificuldades numéricas na captura da solução nas diferentes malhas puderam ser observadas.

Cada simulação utilizou 1000 passos de tempo até atingir o tempo final. O critério de convergência adotado foi 10^{-4} para o resíduo máximo. O esquema advectivo adotado foi o HR, conforme definido nos testes 1D.

Em média, o número de *Courant* da fase contínua ficou abaixo de 1. Entretanto, seu valor máximo foi superior a 1 em algumas regiões, principalmente nas malhas mais refinadas. Não foi observada nenhuma dificuldade adicional na convergência em função dos altos números de *Courant*. Foi observado que as variáveis do DQMOM convergiram, em geral, mais rápido que as variáveis do campo fluidodinâmico. Estas constatações são muito importantes, pois asseguram que esta implementação do

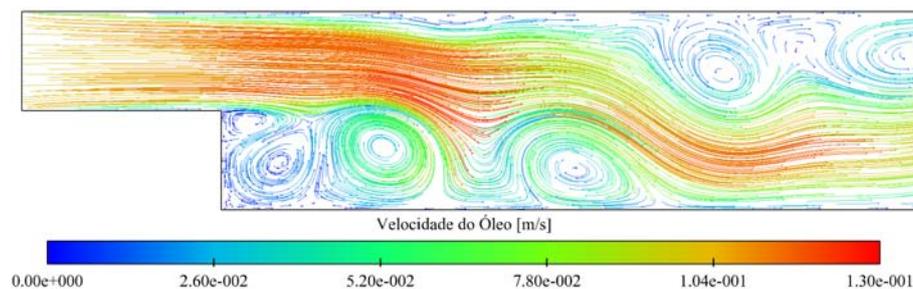


Figura 4.15: Típico campo de **velocidades** da fase contínua. Caso de coalescência, malha hexaédrica de 16 mil nós.

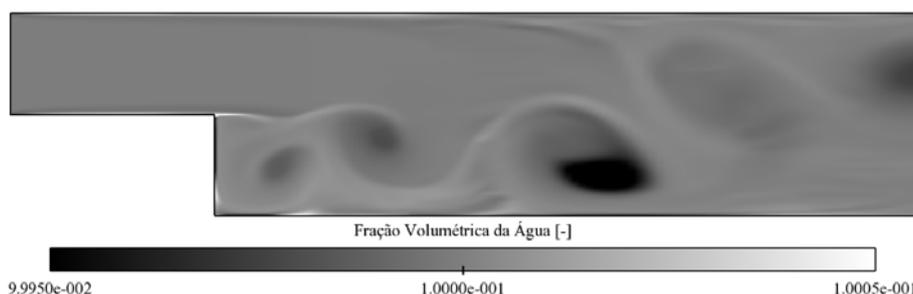


Figura 4.16: Típico campo de **fração volumétrica** da fase dispersa. Caso de coalescência, malha hexaédrica de 16 mil nós (variações de 0,05%).

acoplamento do DQMOM no ANSYS CFX não implica a necessidade de redução do passo de tempo. Este é apenas controlado pela física do escoamento, e não pelas questões numéricas envolvidas.

A Figura 4.15 mostra um típico campo de velocidades da fase contínua no instante final da simulação. Pode-se observar a corrente principal do escoamento em alta velocidade e as diversas recirculações com fortes gradientes de velocidade.

A fração volumétrica da fase dispersa manteve-se bastante uniforme, conforme mostra a Figura 4.16. Pode-se atribuir este comportamento de baixa segregação à hipótese de um único campo de velocidade para a fase dispersa e à elevada força de arrasto presente neste escoamento laminar. A Figura 4.17 mostra o número de Reynolds da partícula. Note que ele está assumindo valores extremamente baixos, praticamente dentro do regime de Stokes ($Re_d \ll 1 \Rightarrow C_D = 24/Re_d$), o que resulta em valores de força de arrasto extremamente altos. Isto faz com que a velocidade de escorregamento entre as fases seja muito pequena.

Para investigar em detalhe os resultados de refino de malha, foram amostrados valores do d_s (diâmetro médio de Sauter) em duas linhas conforme ilustrado na

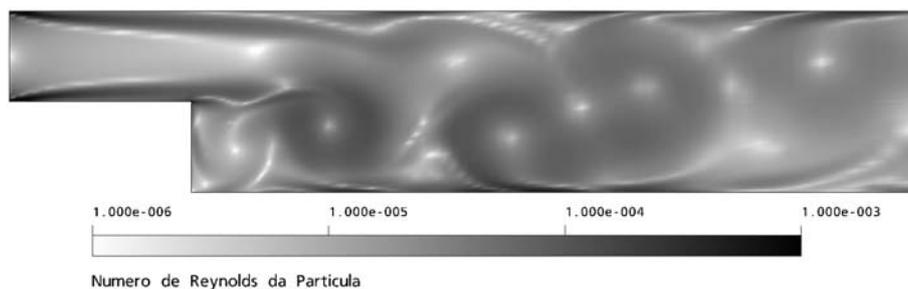


Figura 4.17: Típico campo do **número de Reynolds da partícula** (*escala logarítmica*). Caso de coalescência, malha hexaédrica de 16 mil nós (regime de Stokes!).

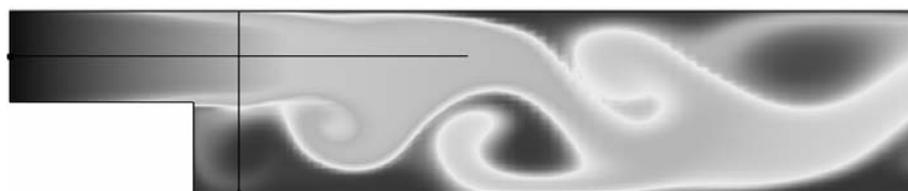


Figura 4.18: Posição das linhas horizontal e vertical utilizadas para os estudos de malha. Em evidência o contorno do diâmetro médio de Sauter para o caso de coalescência dominante utilizando a malha hexaédrica mais refinada.

Figura 4.18. A linha horizontal passa pelo centro do canal de entrada e acompanha a corrente principal. A linha vertical atravessa o canal após o acidente, passando pela corrente principal e por uma zona de recirculação.

Os gráficos dados nas Figuras 4.19, 4.20, 4.21 e 4.22 mostram os resultados do teste de convergência de malha ao longo destas linhas para os casos de quebra ou coalescência dominante. Para ambos os casos, foi verificado o comportamento de tendência de convergência com o refino da malha. Para o caso de coalescência dominante, as malhas tetraédricas² apresentaram comportamento muito semelhante ao das malhas hexaédricas.

Analisando as diversas simulações realizadas, pode-se concluir que o campo de d_s é totalmente dependente do caminho que o escoamento realiza. Desta forma, qualquer pequena variação na solução fluidodinâmica deve alterar o tempo de residência e conseqüentemente a solução da PBE. Os resultados de convergência ao longo da linha horizontal mostraram uma excelente convergência, principalmente devido ao fato de que, na corrente principal do canal de entrada, não existem grandes variações do campo de velocidade. No entanto, os gráficos verticais mostram diferenças mais visíveis, especialmente na região de recirculação, que é mais suscetível às variações

²Considerou-se desnecessário simular todas as malhas tetraédricas para o caso de coalescência.

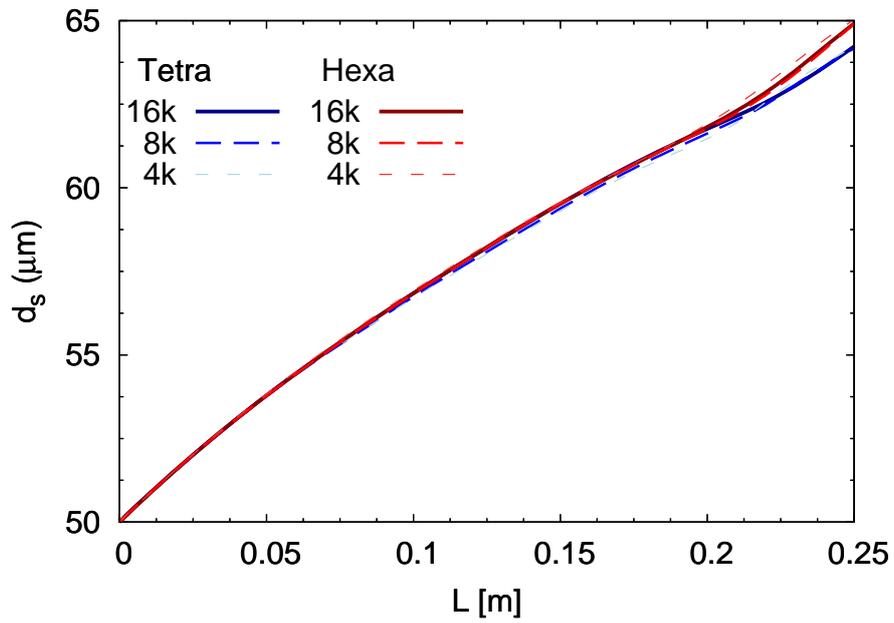


Figura 4.19: Teste de convergência de malha ao longo da linha **horizontal** para o caso de **coalescência** dominante.

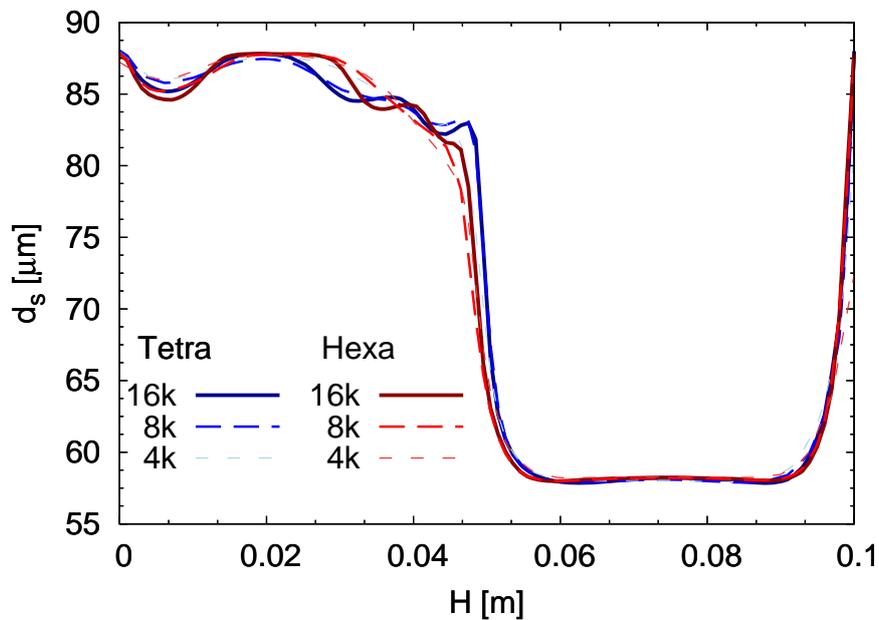


Figura 4.20: Teste de convergência de malha ao longo da linha **vertical** para o caso de **coalescência** dominante.

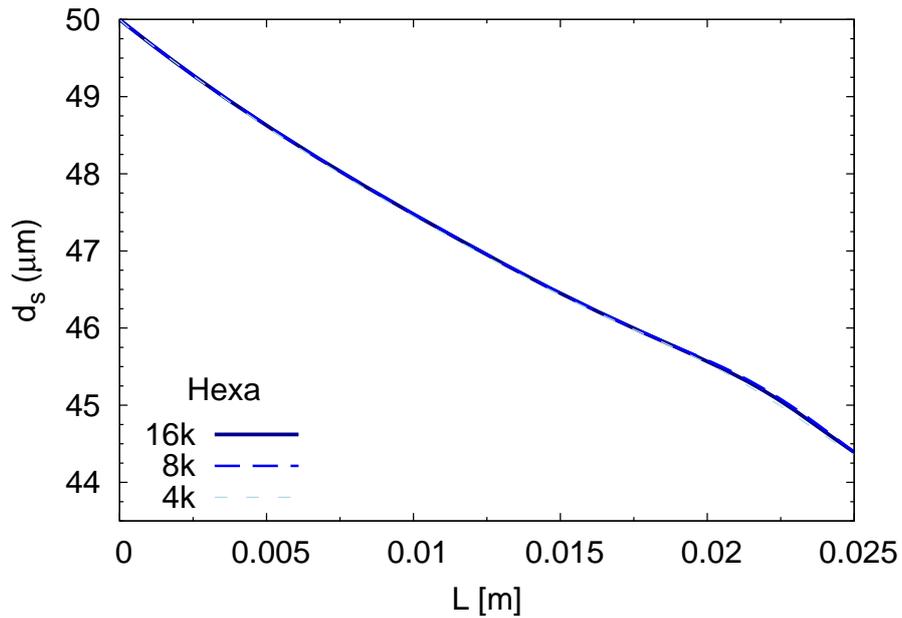


Figura 4.21: Teste de convergência de malha ao longo da linha **horizontal** para o caso de **quebra** dominante.

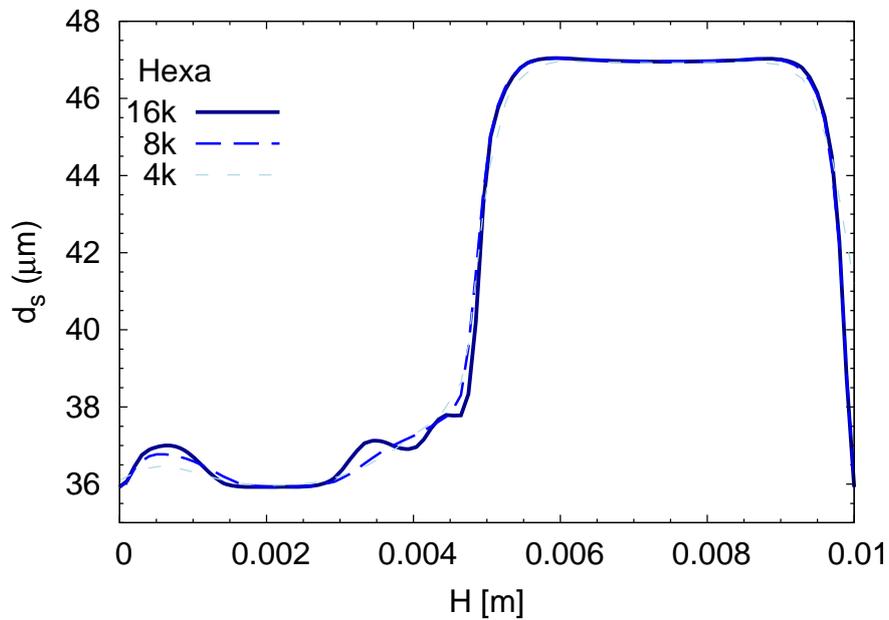


Figura 4.22: Teste de convergência de malha ao longo da linha **vertical** para o caso de **quebra** dominante.

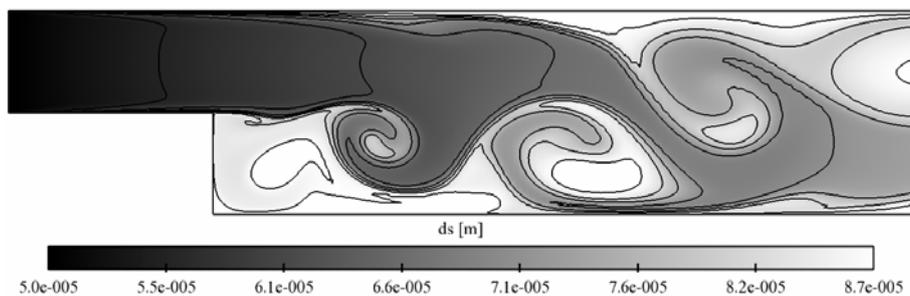


Figura 4.23: Gráfico de contorno do diâmetro médio de Sauter para o caso de **coalescência** dominante utilizando a malha **hexaédrica** mais refinada.

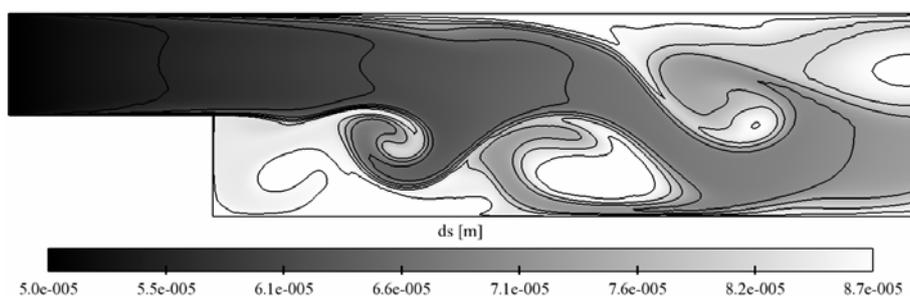


Figura 4.24: Gráfico de contorno do diâmetro médio de Sauter para o caso de **coalescência** dominante utilizando a malha **tetraédrica** mais refinada.

do caminho do escoamento.

As Figuras 4.23 e 4.24 mostram o contorno de d_s para o caso de coalescência dominante para as malhas hexaédricas e tetraédricas mais refinadas. Em geral, os resultados são bastante similares. Note que a captura dos detalhes das recirculações ocorre melhor ora na tetraédrica e ora na hexaédrica.

Acompanhando as Figuras 4.25, 4.26 e 4.27 pode-se verificar a evolução do detalhamento da solução de d_s em função do refino de malha. É importante ressaltar que os resultados ainda não estão completamente convergidos em malha, apenas é possível uma clara tendência de convergência.

Foi simulado o caso invariante com os mesmos parâmetros (Tab. 4.9) da simulação de coalescência. Ao contrário das simulações 0D ou 1D, agora a distribuição é afetada pela advecção no escoamento. Note que, devido à presença do termo $\nabla \cdot \mathbf{u}_d$ nos termos fontes das equações (3.52) e (3.53), surgem pequenas modificações na distribuição. Os demais termos fontes destas equações são inicialmente nulos, pois a distribuição inicial satisfaz o caso invariante. No entanto, os termos em $\nabla \cdot \mathbf{u}_d$ expressam os efeitos associados às mudanças da fração volumétrica da fase dispersa (maior ou menor concentração de partículas) que são mais intensos onde a velocidade

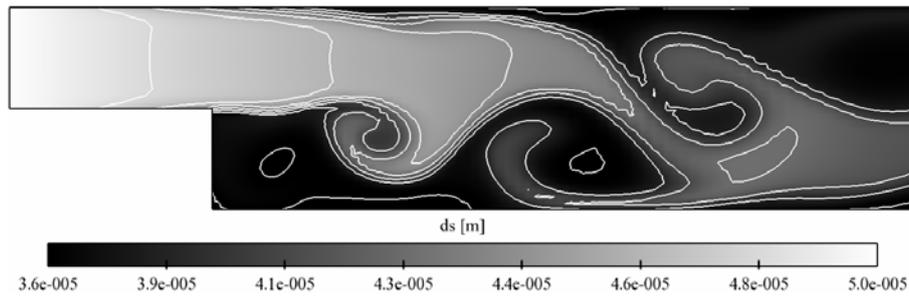


Figura 4.25: Gráfico de contorno do diâmetro médio de Sauter para o caso de **quebra** dominante utilizando malha **hexaédrica** com **4 mil** nós.

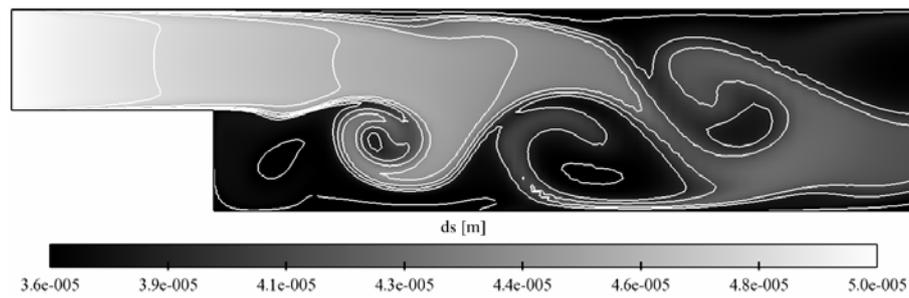


Figura 4.26: Gráfico de contorno do diâmetro médio de Sauter para o caso de **quebra** dominante utilizando malha **hexaédrica** com **8 mil** nós.

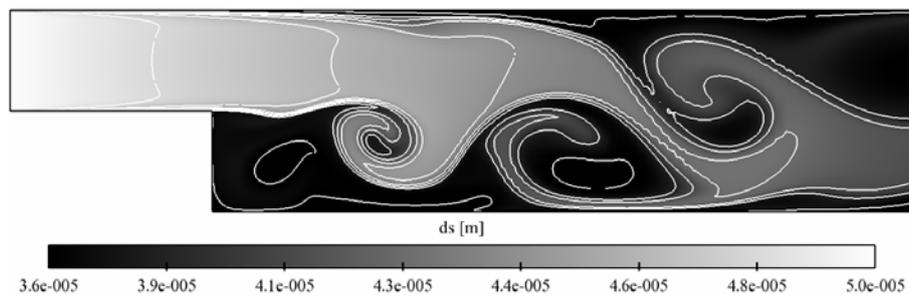


Figura 4.27: Gráfico de contorno do diâmetro médio de Sauter para o caso de **quebra** utilizando malha **hexaédrica** com **16 mil** nós.

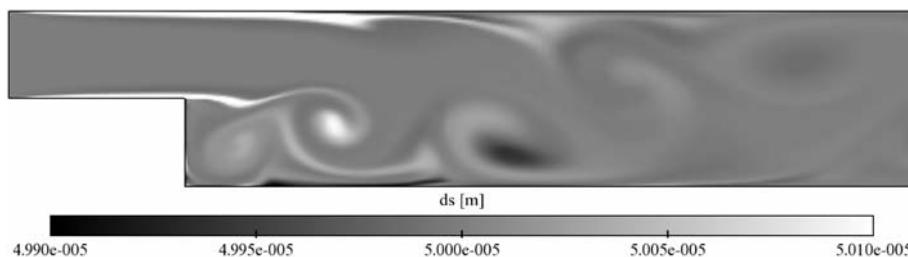


Figura 4.28: Gráfico de contorno do diâmetro médio de Sauter para o caso **invariante** utilizando malha hexaédrica mais refinada (variações de 0,2%).

de escorregamento entre as fases é maior. Pela Figura 4.28, pode-se observar que nas regiões de fortes gradientes, como na formação da camada limite na entrada do canal e logo após o degrau, este termo atua sensivelmente na distribuição.

Assim, os resultados das simulações de estudo de malha utilizando a hipótese de campo de velocidade homogêneo para as partículas foram bastante coerentes, tanto para os casos de coalescência como de quebra. A seguir, serão apresentados os resultados da implementação considerando diferentes campos de velocidade para os diferentes tamanhos de partículas (modelo heterogêneo).

4.5 Modelo Heterogêneo

O objetivo do teste desta implementação é apresentar a diferença causada nos resultados quando se considera que cada classe de partículas possui o seu próprio campo de velocidade. É de se esperar que as gotículas de água maiores sejam mais facilmente segregadas nas zonas de recirculação da fase contínua, pois sofrem menor influência da força de arrasto.

Deve-se ressaltar que agora a simulação possui 5 fases, 1 contínua β e 4 dispersas α . A força de arrasto em cada fase dispersa é calculada utilizando o diâmetro característico d_α dado pela expressão dada pela equação (3.43). O d_s é calculado apenas para fins de comparação com o caso anterior. As condições de simulação e propriedades das fases continuam as mesmas. A fração de volume total das fases dispersas continua 0,1, no entanto a fração volumétrica de cada fase dispersa é calculada pela relação dada pela equação (3.40).

Para visualizar este efeito de forma isolada, foi escolhido repetir a simulação

do caso invariante utilizando a metodologia heterogênea. Note que agora, além do termo $\nabla \cdot \mathbf{u}_\alpha$ atuar na equação do peso (Eq. 3.42), as partículas não percorrem o mesmo caminho. Assim, o fenômeno de segregação individual de cada fase dispersa deve modificar mais ainda a distribuição.

Conforme esperado, os primeiros resultados da simulação heterogênea do caso invariante apresentaram variações pequenas pelo fato de que o d_s é muito pequeno, gerando assim valores muito altos de C_D , o que torna a influência da força de arrasto muito grande, fazendo com que as velocidades de escorregamento entre as fases dispersas e a contínua sejam muito pequenas. Para tornar o efeito de segregação mais visível, foi adotado um d_s inicial de $500\mu m$.

Em todos os testes seguintes, foi utilizada apenas a malha hexaédrica mais refinada.

A Figura 4.29 compara o campo de fração volumétrica da fase contínua para os casos homogêneo e heterogêneo. É possível perceber que o caso heterogêneo apresenta uma segregação das fases levemente maior. Apesar destes resultados terem sido simulados com um diâmetro médio 10 vezes maior, o efeito do arrasto ainda é predominante.

Para quantificar melhor a segregação, foi calculada a média espacial da velocidade de escorregamento entre a fase contínua e cada fase dispersa. No caso homogêneo, o valor foi de $3,1 \times 10^{-6} m/s$. No caso heterogêneo, o valor foi 2,2 vezes menor para a fase dispersa de menor diâmetro e 3,9 vezes maior para a fase de maior diâmetro. O número de Reynolds da partícula calculado para as simulações acima ainda está abaixo de 1 em todo o domínio. Em função dos baixos valores da velocidade de escorregamento nos casos simulados, não foram percebidas mudanças visíveis no caminho do escoamento.

Analisando agora o campo de d_s na Figura 4.30, podemos notar diferenças entre as simulações usando as duas metodologias. No caso homogêneo, ocorre o aumento do diâmetro médio próximo à camada limite da entrada do canal devido ao efeito de acúmulo da fase dispersa associado à redução da sua velocidade. Já no caso heterogêneo, esta redução de velocidade se dá de forma diferenciada, sendo menos intensa para as partículas maiores. Em consequência disto, o comportamento do d_s é invertido nesta região. Já nos vórtices, o comportamento de segregação de partículas por centrifugação ocorre de forma semelhante, mostrando que as partículas menores

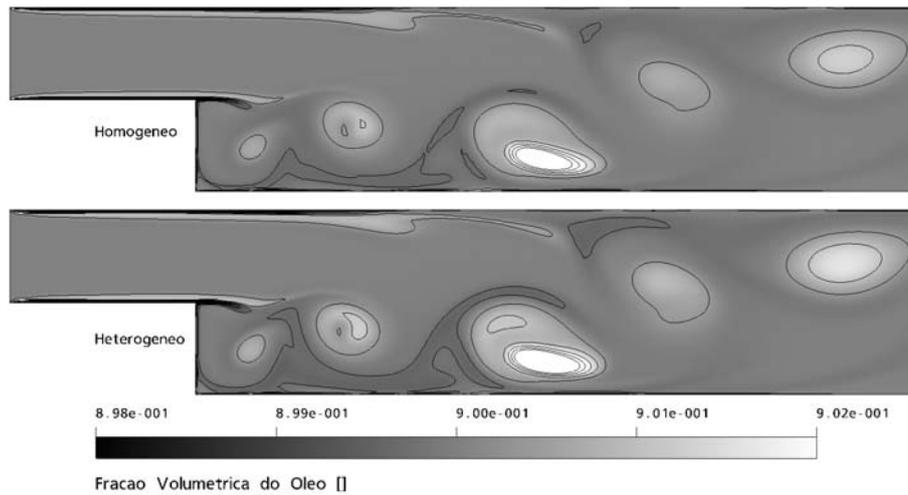


Figura 4.29: Comparação do campo de **fração volumétrica** da **fase contínua** entre as duas metodologias (variações de 0.22%).

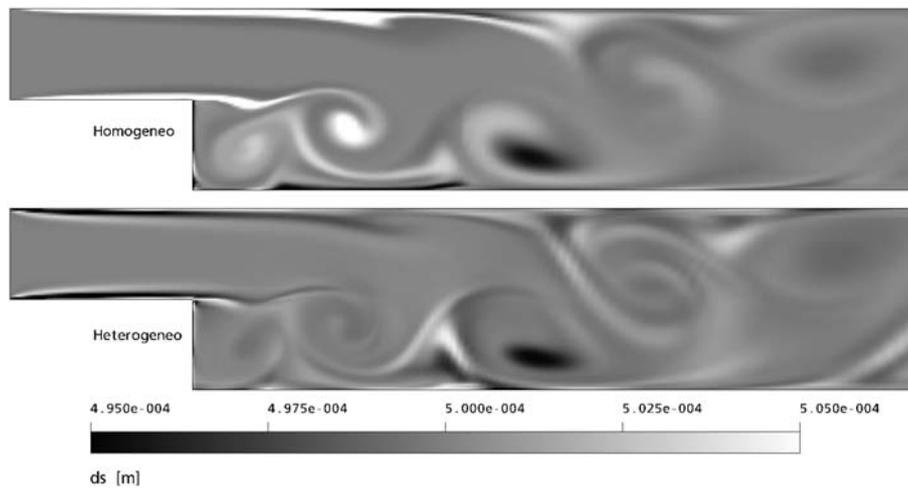


Figura 4.30: Comparação do campo do **diâmetro médio de Sauter** da **fase dispersa** entre as duas metodologias (variações de 0.011%).

se concentram no interior dos vórtices.

Em uma última simulação, foi desejado analisar o comportamento da metodologia heterogênea com outras forças envolvidas além do arrasto. Para tanto, foi inserida a força de empuxo nas simulações originais do caso invariante considerando o d_s inicial de $50\mu m$. A Figura 4.31 apresenta uma comparação do campo de fração volumétrica da fase contínua entre as duas metodologias. É possível perceber que a presença da gravidade modificou sensivelmente as características gerais do campo de fração volumétrica. Agora, pode-se observar também o efeito de segregação pela gravidade, mostrando claramente maior intensidade no caso heterogêneo.

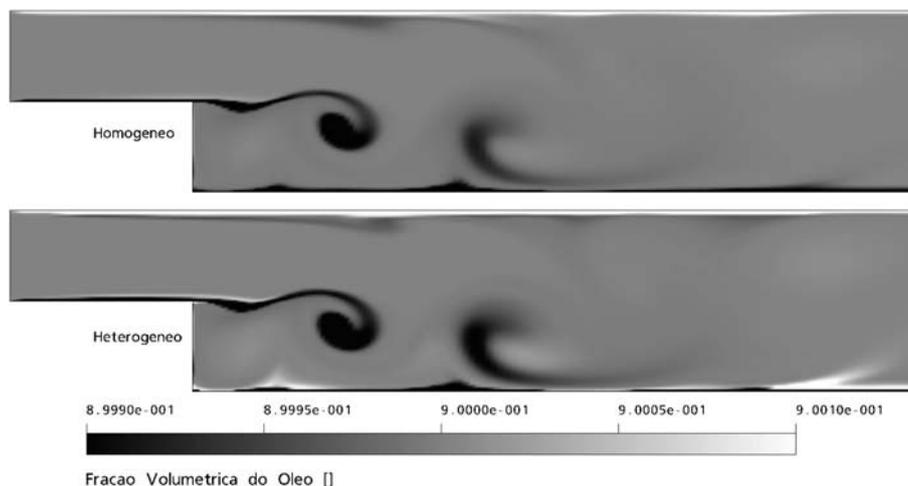


Figura 4.31: Comparação do campo de **fração volumétrica** da **fase contínua** entre as duas metodologias considerando o efeito de **gravidade**. $\downarrow \vec{g}$

A convergência das simulações heterogêneas ocorreu de forma bastante semelhante à do caso homogêneo. A solução do balanço populacional não exige passo de tempo menor que a solução fluidodinâmica. Considerando os 4 pontos de quadratura utilizados, o modelo homogêneo resolveu 17 equações de transporte, contra 25 do modelo heterogêneo. De uma forma geral, foi possível concluir que a hipótese homogênea foi suficiente para representar este escoamento de emulsão em regime laminar. A comparação com a metodologia heterogênea mostrou sensíveis diferenças. O custo computacional adicional de aproximadamente 50% da abordagem heterogênea se justificará em escoamentos com maior escorregamento entre as fases. Acredita-se que esta metodologia heterogênea se mostrará bastante poderosa para simulações de escoamentos polidispersos com quebra e coalescência onde a velocidade de escorregamento entre as fases é alta, como em equipamentos separadores ou colunas de borbulhamento.

Capítulo 5

Conclusões e Sugestões

5.1 Conclusões

A presente dissertação realizou a implementação da equação de balanço populacional (PBE) via o método DQMOM – *Direct Quadrature Method of Moments* no software ANSYS CFX via rotinas de FORTRAN. Foi executado um trabalho extensivo de verificação numérica do comportamento da solução acoplada PBE-CFD. Uma solução analítica para o problema de balanço populacional monovariado unicamente dependente do tempo com núcleos de quebra e coalescência simples foi utilizada para comparação. O uso de uma solução de referência foi fundamental, num primeiro momento, para corrigir os erros de implementação. Ao longo do trabalho, questões importantes como o efeito do refino de malha, esquemas de discretização temporais e advectivos foram analisadas. Visando a estudar especificamente os erros relativos à solução das equações de transporte do DQMOM dentro do código de CFD, foi suprimido o erro de quadratura da aproximação do DQMOM. A análise numérica dos erros foi realizada utilizando a média RMS calculada em todos os resultados simulados.

Dentro do escopo de uma dissertação de mestrado, algumas simplificações foram adotadas. A implementação do balanço populacional considera um problema monovariado, empregando a massa das partículas para a descrição da distribuição de tamanhos, incluindo apenas os efeitos de quebra e coalescência. Apesar de terem sido revisados na literatura, questões importantes para a reprodução de escoamentos multifásicos polidispersos realísticos como a modelagem da turbulência, termos

de troca de quantidade de movimento e modelos de quebra e coalescência não foram investigados. Os esforços foram concentrados na implementação e verificação numérica do DQMOM.

Inicialmente o DQMOM foi implementado em uma rotina de FORTRAN a parte do ANSYS CFX, utilizando a rotina DASSL para a solução numérica do problema proposto pela solução analítica. Verificou-se rapidamente a forte convergência da solução em função do número de pontos de quadratura. Por conveniência, foi adotado 4 pontos de quadratura nas simulações deste trabalho. Em seguida, a solução numérica da DASSL resolvida com precisão extrema foi utilizada como referência. Após a validação desta rotina, o DQMOM foi, então, implementado no ANSYS CFX.

A análise zero-dimensional, realizada para avaliar a precisão da integração temporal, mostrou resultados bastante satisfatórios para o esquema de integração temporal *Backward Euler* de segunda ordem, recomendado como padrão no ANSYS CFX. Verificou-se uma dificuldade maior de convergência do problema com quebra dominante, supostamente por causa dos efeitos do núcleo de quebra utilizado.

Como as equações do DQMOM utilizadas neste trabalho possuem o comportamento hiperbólico, foi dada uma atenção especial para a precisão dos esquemas advectivos. Foram realizados testes unidimensionais utilizando a solução de referência zero-dimensional transiente transformada. Após o bem sucedido estudo de refinamento de malha, foram analisados os esquemas advectivos presentes no ANSYS CFX. O melhor resultado foi conseguido com o método QUICK, logo seguido pelo *High Resolution* (HR). O esquema advectivo HR do ANSYS CFX é método híbrido que ajusta a ordem da solução em função dos gradientes, baseado em limitadores de fluxo. Ele é recomendado como o método padrão do ANSYS CFX e foi verificado que a precisão dele é bastante satisfatória, sendo inclusive mais preciso que a solução temporal. Em função da generalidade e robustez do HR em relação ao QUICK, ele foi escolhido para os testes seguintes.

Simulações bidimensionais transientes do escoamento laminar de uma emulsão de água em óleo passando por um degrau descendente foram realizadas para avaliar o comportamento da metodologia em campos multidimensionais. A convergência das equações do DQMOM se mostrou mais rápida do que as equações do movimento, assegurando que o passo de tempo e refino de malha ainda são controlados pelo escoamento do fluido. O acoplamento do balanço populacional não

adicionou dificuldades numéricas à simulação de CFD. Verificou-se que a solução da evolução da distribuição é diretamente dependente da solução do escoamento.

Nesta primeira etapa dos testes 2D, foi utilizada a metodologia de acoplamento homogênea, onde todas as partículas possuem um mesmo campo de velocidade. Esta consideração, que é razoavelmente aceita para escoamento de emulsões em baixas velocidades, foi adotada para reduzir o esforço computacional dos primeiros testes. Como principal parâmetro de comparação da evolução da distribuição, foi adotado o diâmetro médio de Sauter.

As simulações de refino de malha se mostraram bastante coerentes, tanto para o caso de coalescência dominante como para o de quebra dominante. Foi também testado o caso invariante, onde a quebra se equilibra com a coalescência, onde foi ressaltada a alteração na forma da distribuição devido ao efeito fluidodinâmico de aceleração da fase dispersa. Adicionalmente, foram testadas malhas não-estruturadas tetraédricas, que apresentaram resultados muito semelhantes às malhas hexaédricas estruturadas. Em geral, os resultados obtidos com os testes de malha foram bastante satisfatórios e estão de acordo com as características numéricas do ANSYS CFX.

Por fim, desejou-se testar a metodologia completa de acoplamento, chamada de heterogênea, onde cada classe de partículas possui o seu próprio campo de velocidades. Para visualizar melhor o efeito de separação de fases, foi adotado um diâmetro médio maior para as gotas da emulsão. Foi simulado o mesmo caso invariante que, na metodologia homogênea apresenta apenas o efeito do divergente da velocidade da fase dispersa. Conforme esperado, no caso heterogêneo foi observado uma maior segregação de partículas pelo efeito de centrifugação nos vórtices. Em uma outra simulação, foi adicionado o efeito de empuxo por gravidade. Conforme o esperado, foi verificada uma segregação mais intensa na abordagem heterogênea, mostrando que esta metodologia consegue representar o fenômeno de separação seletiva de partículas.

A implementação do algoritmo DQMOM no ANSYS CFX foi verificada. Não foi encontrada nenhuma dificuldade no tratamento das equações de transporte hiperbólicas do DQMOM. O emprego de um método eficiente como o DQMOM torna computacionalmente viável a simulação com acoplamento heterogêneo. O software ANSYS CFX mostrou-se poderoso pela sua precisão, independência de tipo de malha e pela escalabilidade na solução de várias fases com grande número de equações. Esta implementação é precisa e confiável o suficiente para ser aplicada à simulações

da fluidodinâmica de escoamentos polidispersos com núcleos de quebra e coalescência realísticos. Esta metodologia heterogênea é indicada para simulações de escoamentos polidispersos com quebra e coalescência onde o escorregamento entre as fases é alto, como em equipamentos separadores ou colunas de borbulhamento.

5.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

Em relação à tecnologia numérica da implementação de balanço populacional acoplada a CFD, é importante que novos estudos avancem nos seguintes tópicos.

- Implementação de métodos para a PBE multivariada, considerando variáveis internas como temperatura e concentração de componentes. Este é o passo seguinte necessário à simulação de reatores.
- Implementação de efeitos de crescimento e nucleação. Estes efeitos estão presentes na mudança de fase por transferência de calor e massa.
- Modelar a mistura de propriedades (quantidade de movimento, temperatura e concentração de componentes) entre as partículas durante a quebra e coalescência. Este fenômeno assume um papel importante na mistura de propriedades em reatores que operam com intensa quebra e coalescência. Neste trabalho, este termo foi simplificado.

Em relação à reprodução realística de escoamentos multifásicos polidispersos, é necessário que sejam desenvolvidos modelos mais precisos para os seguintes fenômenos.

- Quebra e coalescência. Atualmente eles são a principal fonte de erro. Também é sugerida a estimativa de parâmetros destes modelos empregando simulações de CFD tridimensionais.
- Termos de troca de quantidade de movimento entre as fases. Ainda há muita divergência na literatura.
- Turbulência em escoamentos multifásicos. Junto com o item anterior, estes fenômenos são os principais responsáveis pela descrição do caminho do escoamento. Foi verificado neste trabalho que isto afeta diretamente a solução da distribuição de tamanhos.

O DQMOM apresenta resultados locais para a distribuição em cada ponto da malha na forma de pesos e abscissas. A partir destes, pode-se calcular os primeiros momentos da distribuição. Para facilitar o pós-processamento, seria interessante desenvolver um procedimento matemático de representação da distribuição na forma de uma função contínua. Um caminho para esta metodologia é apresentado por LAGE (2007).

Apêndice A

Transformação de Coordenadas

Neste apêndice será apresentada a transformação de coordenadas da integral de momentos dos termos fontes de quebra e coalescência (equações 3.19, 3.20, 3.21 e 3.22).

A.1 Termos de Coalescência

Na equação 3.3 o domínio de integração de m' vai de 0 a m . Visando utilizar a representação discreta das integrais por somatórios do DQMOM, é necessário transformar este domínio para que os limites de integração fiquem de 0 a ∞ .

A figura A.1 mostra que o domínio de integração em m' pode ser transformado para m , indo de m' a ∞ . Agora, assumindo a relação $m = m' + m''$, onde m' e m'' são partículas que coalescem para formar uma partícula mãe m , pode-se também transformar o domínio de m para m'' conforme:

- Note que: $m'' = m - m'$;
- Logo: $dm'' = dm$;
- Além disso, quando $m \rightarrow m'$, $m'' \rightarrow 0$;
- E quando $m \rightarrow \infty$, $m'' \rightarrow \infty$;
- Assim, a integração original no domínio $0 < m' < m$ é transformada para $0 < m'' < \infty$.

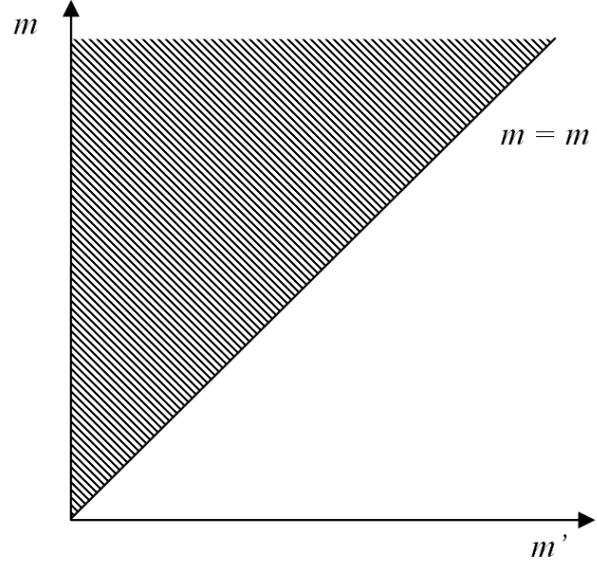


Figura A.1: Transformação de coordenadas utilizada no termo de nascimento por coalescência.

Agora a equação 3.3 pode ser reescrita como:

$$B^C(m) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} f(m'') f(m') a(m'', m') dm'' \quad (\text{A.1})$$

Quando a integral de momentos (Eq. 3.12) é aplicada a equação A.1, tem-se:

$$\bar{B}_k^C(m) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} (m)^k f(m - m') f(m') a(m - m', m') dm dm'' \quad (\text{A.2})$$

No entanto, a integral de momentos aplicada em m pode ter seu domínio de integração facilmente transformado para m' , conforme:

- Note que: $m = m' + m''$;
- Logo: $dm = dm'$;
- Além disso, quando $m \rightarrow 0$, $m' \rightarrow 0$;
- E quando $m \rightarrow \infty$, $m' \rightarrow \infty$;
- Assim, a integração no domínio $0 < m < \infty$ é transformada para $0 < m' < \infty$.

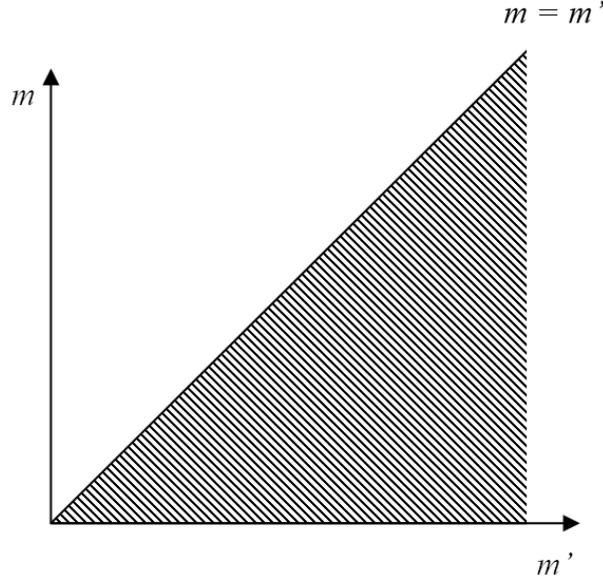


Figura A.2: Transformação de coordenadas utilizada no termo de nascimento por quebra.

Desta forma, a equação A.2 pode ser reescrita como:

$$\bar{B}_k^C(m) = \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty (m' + m'')^k f(m'') f(m') a(m'', m') dm' dm'' \quad (\text{A.3})$$

O termo de morte por coalescência não precisa de transformação alguma, pois na equação 3.4 já está sendo integrada de 0 a ∞ . Aplicando a transformação de momentos, tem-se:

$$\bar{D}_k^C = \int_0^\infty \int_0^\infty m^k f(m) f(m') a(m, m') dm dm' \quad (\text{A.4})$$

A.2 Termos de Quebra

Na equação 3.5 o domínio de integração de m' vai de m a ∞ . Visando utilizar a representação discreta das integrais por somatórios do DQMOM, é necessário transformar este domínio para que os limites de integração fiquem de 0 a ∞ .

A figura A.2 mostra que o domínio de integração em m' , que vai de m a ∞ , pode ser transformado para o domínio de m , indo de 0 a m' . Já a integral de momentos, que originalmente está no domínio completo (de 0 a ∞) de m , pode ser transformada diretamente para o domínio completo de m' . Assim, o termo de

nascimento por quebra é dado por:

$$\bar{B}_k^B = \int_0^\infty f(m') \vartheta(m') b(m') \left[\int_0^{m'} m^k P(m | m') dm \right] dm' \quad (\text{A.5})$$

O termo de morte por quebra também não precisa de transformação alguma, pois na equação 3.6 não é integrada. Aplicando agora a transformação de momentos, tem-se:

$$\bar{D}_k^B = \int_0^\infty m^k f(m) b(m) dm \quad (\text{A.6})$$

Apêndice B

Algoritmo Produto-Diferença

Neste apêndice serão apresentados os principais passos da construção do algoritmo PD. Primeiramente, deve-se montar a matriz \mathbf{P} com componentes $P_{i,j}$ partindo dos momentos. Os componentes da primeira coluna de \mathbf{P} são dados por:

$$P_{i,1} = \delta'_{i,1} \quad , \quad i = 1, \dots, 2N + 1 \quad (\text{B.1})$$

onde $\delta'_{i,1}$ é o delta de Kronecker. Agora, seguem os componentes da segunda coluna de \mathbf{P} :

$$P_{i,2} = (-1)^{i-1} \mu_{i-1} \quad , \quad i = 1, \dots, 2N + 1 \quad (\text{B.2})$$

Dado que os pesos finais resultantes deste algoritmo podem ser corrigidos pela multiplicação pelo μ_0 real da distribuição, os cálculos a seguir serão feitos assumindo uma distribuição normalizada, ou seja, $\mu_0 = 1$. Assim, os componentes restantes são obtidos pelo algoritmo PD através de:

$$P_{i,j} = P_{i,j-1}P_{i+1,j-2} - P_{i,j-2}P_{i+1,j-1}, \\ j = 3, \dots, 2N + 1, \quad i = 1, \dots, 2N + 2 - j \quad (\text{B.3})$$

Considerando, por exemplo, $N = 2$ têm-se \mathbf{P} como:

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \mu_1 & \mu_2 - \mu_1^2 & \mu_3\mu_1 - \mu_2^2 \\ 0 & -\mu_1 & -\mu_2 & -\mu_3 + \mu_2\mu_1 & 0 \\ 0 & \mu_2 & \mu_3 & 0 & 0 \\ 0 & -\mu_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.4})$$

Os coeficientes (φ_i) são gerados através da seguinte expressão:

$$\varphi_i = \frac{P_{1,i+1}}{P_{1,i}P_{1,i-1}}, \quad i = 1, \dots, 2N \quad \text{onde } P_{1,0} = 1 \quad (\text{B.5})$$

Uma matriz tridiagonal simétrica é obtida através de operações de somas e produtos de φ_i , conforme as equações a seguir:

$$\begin{aligned} a_1 &= \varphi_2 \\ a_i &= \varphi_{2i} + \varphi_{2i-1}, \quad i = 2, \dots, N \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

$$b_i = -\sqrt{\varphi_{2i-2}\varphi_{2i-1}}, \quad i = 2, \dots, N \quad (\text{B.7})$$

onde a_i e b_i são, respectivamente, a diagonal principal e a co-diagonal da matriz tridiagonal.

Uma vez determinada a matriz, a obtenção dos pesos e abscissas é feita calculando seus autovalores (λ_α) e autovetores (χ_α) . As relações que satisfazem a quadratura de Gordon e definem os pesos e as abscissas são dadas por:

$$m_\alpha = \lambda_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (\text{B.8})$$

$$\omega_\alpha = \varphi_1 \chi_{\alpha,1}^2, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (\text{B.9})$$

onde $\chi_{\alpha,1}$ é o primeiro componente do autovetor χ_α .

Referências Bibliográficas

- ANSYS, Inc., 2006, *ANSYS CFX – Solver Theory Guide. ANSYS CFX Release 11.0*, Canonsburg, PA, USA.
- ARAÚJO, J. F. M., 2006, *Estudo dos modelos de quebra e coalescência para escoamentos polidispersos*. Dissertação de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- ARFKEN, G. B. & WEBER, H. J., 2005, *Mathematical Methods for Physicists*, Elsevier Academic Press.
- BARTH, T. J. & JESPERSEN, D. C., 1989, *The design and application of upwind schemes on unstructured meshes*. AIAA Paper 89–0366.
- BERTRAND, F., LECLAIRE, L.-A. & LEVECQUE, G., 2005, “DEM-based models for the mixing of granular materials”, *Chemical Engineering Science*, v. 60, pp. 2517–2531.
- BOVE, S., 2005, *Computational fluid dynamics of gas-liquid flows including bubble population balances*. PH.D. Thesis, Esbjerg Institute of Engineering, Denmark.
- BOVE, S., SOLBERG, T., HJERTAGER, B., 2005, “A novel algorithm for solving population balance equations: the parallel parent and daughter classes. Derivation, analysis and testing”, *Chemical Engineering Science*, v. 60, pp. 1449–1464.
- BURNS, A. D., FRANK, T., HAMIL, I., SHI, J., 2004, “The Favre Averaged Drag Model for Turbulent Dispersion in Eulerian Multi-Phase Flows”. *5th Int. Conf. Multiphase Flow*, Yokohama, Japan.
- CHEN, P., SANYAL, J., DUDUKOVIĆ, M. P., 2005a, “Numerical simulation of bubble columns flows: effect of different breakup and coalescence closures”, *Chemical Engineering Science*, v. 60, pp. 1085–1101.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- CHEN, P., SANYAL, J., DUDUKOVIĆ, M. P., 2005b, “Three-dimensional simulation of bubble column flows with bubble coalescence and breakup”, *A.I.Ch.E. Journal*, v. 51, n. 3, pp. 696–712.
- DREW, D., 2001, “A turbulent dispersion model for particles or bubbles”, *Journal of Engineering Mathematics*, v. 41, pp. 259–274.
- DREW, D. A. & PRASSMAN, S. L., 1999, *Theory of Multicomponent Fluids*, Springer.
- FAN, R., MARCHISIO, D. L., FOX, R. O., 2004, “Application of the direct quadrature method of moments to polydisperse gas-solid fluidised beds”, *Powder Technology*, V. 139, pp. 7–20.
- FOX, R. O., 2006, “Bivariate direct quadrature method of moments for coagulation and sintering of particle populations”, *Journal of Aerosol Science*, v. 37, pp. 1562–1580.
- FRANK, T., 2005, “Advances in Computational Fluid Dynamics (CFD) of 3-dimensional Gas-Liquid Multiphase Flows”, *NAFEMS Seminar: “Simulation of Complex Flows (CFD)”*, Niedernhausen/Wiesbaden, Germany, 25–26 April.
- FRANK, T. & ZWART, P., 2005, “Inhomogeneous MUSIG Model - a Population Balance Approach for Polydispersed Bubbly Flows”. *International Conference: Nuclear Energy for New Europe 2005*, Bled, Slovenia, 5-8 September.
- FRANK, T., SHI, J., BURNS, A. D., 2004, “Validation of Eulerian multiphase flow models for nuclear reactor safety applications”. *3rd International Symposium on Two-Phase Flow Modelling and Experimentation*, Pisa, Italy, 22–24 September.
- GIDASPOW, D., 1994, *Multiphase Flow and Fluidization*, San Diego, Academic Press.
- GORDON, R. G., 1968, “Error bounds in equilibrium statistical mechanics”, *A.I.Ch.E. Journal*, v. 9, n. 5, pp. 655–663.
- HAGESAETHER, L., 2002, *Coalescence and Break-up of Drops and Bubbles*. PH.D. Thesis, Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway.
- HULBURT, H. M. & KATZ, S., 1964, “Some problems in particle technology”, *Chemical Engineering Science*, v. 19, pp. 555–574.
- ISHII, M., 1975, *Thermo-fluid Dynamic Theory of Two-phase Flow*, Paris, Eyrolles.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- JAKOBSEN, H. A., LINDBORG, H., DORAO, C. A., 2005, “Modeling of Bubble Column Reactors; Progress and Limitations”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 44, pp. 5107–5151.
- JOSHI, J. B., 2001, “Computational flow modelling and design of bubble column reactors”, *Chemical Engineering Science*, v. 56, pp. 5893–5933.
- KAMP, A. M., CHESTERS, A. K., COLIN, C., FABRE, J., 2001, “Bubble coalescence in turbulent flows: A mechanistic model for turbulence-induced coalescence applied to microgravity pipe flows”, *International Journal of Multiphase Flows*, v. 27, pp. 1363–1396.
- KRISHNA, R., van BATEN, J. M., 2003, “Mass transfer in bubble columns”, *Catalysis Today*, v. 79–80, 67–75.
- KUMAR, S., RAMKRISHNA, D., 1996a, “On the solution of PBE by discretization – I. A fixed pivot technique”, *Chemical Engineering Science*, v. 51, n. 8, pp. 1311–1332.
- KUMAR, S., RAMKRISHNA, D., 1996b, “On the solution of PBE by discretization – II. A moving pivot technique”, *Chemical Engineering Science*, v. 51, n. 8, pp. 1333–1342.
- KUMAR, S., RAMKRISHNA, D., 1996c, “On the solution of PBE by discretization – III. Nucleation, growth and aggregation of particles”, *Chemical Engineering Science*, v. 52, n. 24, pp. 4659–4679.
- LAGE, P. L. C., 2002, “Comments on the “An analytical solution to the population balance equation with coalescence and breakage - the special case with constant number of particles” by PATIL, D. P. & ANDREWS, J. R. G. [Chemical Engineering Science, v. 53, n. 3, pp. 599–601]”, *Chemical Engineering Science*, v. 57, pp. 4253–4254.
- LAGE, P. L. C., 2007, “The quadrature method of moments for continuous thermodynamics”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 31, n. 7, pp. 782–799.
- LAGE, P. L. C., RODRIGUES, R. C., ARAÚJO, J. F. M., 2006, “Droplet evolution in the flow of water in oil emulsions through duct accidents - Analysis of droplet breakage”, *CFD OIL 2006*, Rio de Janeiro, Brazil, 15-17 August.
- LEHR, F., MILLIES, M., MEWES, D., 2002, “Bubble-Size distributions and flow fields in bubble columns”, *A.I.Ch.E. Journal*, v. 48, n. 11, pp. 2426–2443.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- LeVEQUE, R., 2004, *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*, Cambridge, Cambridge University Press.
- LIU, J. -J., SRIENC., F., FREDRICKSON, A. G., 2002, “Solutions of population balance models based on a successive generations approach”, *Chemical Engineering Science*, v. 52, n. 9, pp. 1529–1540.
- LO, S., 1996, *Applications of the MUSIG model to bubbly flows*. Technical Report AEAT-1096, AEA Technology.
- LOPES de BERTODANO, M., 1998, “Two-fluid model for two-phase turbulent jet”, *Nuclear Engineering Design*, v. 179, pp. 65–74.
- LUO, H., SVENDSEN, H., 1996, “Theoretical model for drop and bubble break-up in turbulent dispersions”, *A.I.Ch.E. Journal*, v. 42, 1225–1233.
- MALISKA, C. R., 2004, *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, 2 ed., Rio de Janeiro, LTC.
- MARCHISIO, D. L. & FOX, R. O., 2005, “Solution of the population balance equation using the direct quadrature method of moments”, *Journal of Aerosol Science*, v. 36, pp. 43–73.
- MARCHISIO, D. L., PIKTURMA, J., FOX, R. O., VIRGIL, R. D., BARRESI, A. A., 2003a, “Quadrature method of moments for population balances”, *A.I.Ch.E. Journal*, v. 49, pp. 1266–1276.
- MARCHISIO, D. L., VIRGIL, R. D., FOX, R. O., 2003b, “Quadrature method of moments for aggregation-breakage processes”, *Journal of Colloid & Interface Science*, v. 258, pp. 322–334.
- MARCHISIO, D. L., VIRGIL, R. D., FOX, R. O., 2003c, “Implementation of the quadrature method of moments in CFD codes for aggregation-breakage problems”, *Chemical Engineering Science*, v. 58, pp. 3337–3351.
- MARTÍNEZ-BAZÁN, C., MONTAÑÉZ, J. L., LASHERAS, J. C., 1999a, “On the breakup of an air bubble injected into a fully developed turbulent flow. Part 1: breakup frequency”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 401, pp. 157–182.
- MARTÍNEZ-BAZÁN, C., MONTAÑÉZ, J. L., LASHERAS, J. C., 1999b, “On the breakup of an air bubble injected into a fully developed turbulent flow. Part 2: size PDF of the resulting daughter bubbles”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 401, pp. 183–2007.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- McCOY, B. J. & MADRAS, G., 2003, “Analytical solution for a population balance equation with aggregation and fragmentation”, *Chemical Engineering Science*, v. 58, pp. 3049–3051.
- McGRAW, R., 1997, “Description of the aerosol dynamics by the quadrature method of moments”, *Aerosol Science and Technology*, v. 27, pp. 255–265.
- OLMOS, E., GENTRIC, C., VIAL, C., MIDOUX, N., 2001, “Numerical simulation of multiphase flow in BCR Influence of bubble coalescence and break-up”, *Chemical Engineering Science*, v. 56, pp. 6359–6365.
- OLMOS, E., GENTRIC, C., VIAL, C., MIDOUX, N., 2003, “Numerical description of flow regime transitions in bubble column reactors by a multiple gas phase model”, *Chemical Engineering Science*, v. 58, pp. 2113–2121.
- PATIL, D. P. & ANDREWS, J. R. G., 1998, “An analytical solution to the population balance equation with coalescence and breakage - the special case with constant number of particles”, *Chemical Engineering Science*, v. 53, n. 3, pp. 599–601.
- PETZOLD, L. R., 1982, *A description of DASSL: A differential/algebraic system solver*. Technical Report SAND82-8637, Sandia National Laboratories.
- PINTO, J. C. & LAGE, P. L. C., 2001, *Métodos Numéricos em Problemas de Engenharia Química*, Rio de Janeiro, E-papers.
- PRINCE, M. J. & BLANCH, H. W., 1990, “Bubble coalescence and break-up in air-sparged bubble columns”, *A.I.Ch.E. Journal*, v. 36, 1485–1499.
- RAMKRISHNA, D., 2000, *Population Balances – Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering*, New York, Academic Press.
- RAW, M. J., 1994, “A coupled algebraic multigrid method for the 3D Navier-Stokes equations”, *10th GAMM Seminar*, Kiel, Germany.
- SANYAL, J., MARCHISIO, D. L., FOX, R. O., KUMAR, D., 2005, “On the comparison between population balance models for CFD simulation of bubble columns”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 44, pp. 5063–5072.
- SATO, Y., SEKOGUSHI, K., 1975, “Liquid velocity distribution in two phase bubble flow”, *International Journal of Multiphase Flows*, v. 2, pp. 79–95.
- SCHILLER, L. & NAUMANN, A., 1933, “Über die grundlegenden Berechnungen bei der Schwerkraftaufbereitung”, *Z. Vereins Deutscher Ing.*, v. 77, n. 12, pp. 318–320.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

VERSTEEG, H. K. & MALALASEKERA, W., 1995, *An introduction to computational fluid dynamics - The finite volume method*, UK, Longman Scientific & Technical.

WANG, T., WANG, J., JIN, Y., 2006, “A CFD-PBM coupled model for gas-liquid flows”, *A.I.Ch.E. Journal*, v. 52, n. 1, pp. 125–140.