



COPPE/UFRJ

RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE BALANÇO POPULACIONAL PELO  
MÉTODO DE QUADRATURA DIRETA BASEADO EM MOMENTOS  
GENERALIZADOS

Fábio Pereira dos Santos

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha  
Lage  
Carlos Eduardo Fontes da  
Costa Silva

Rio de Janeiro  
Março de 2010

RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE BALANÇO POPULACIONAL PELO  
MÉTODO DE QUADRATURA DIRETA BASEADO EM MOMENTOS  
GENERALIZADOS

Fábio Pereira dos Santos

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO  
ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE  
ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE  
JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A  
OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA  
QUÍMICA.

Examinada por:

---

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

---

Dr. Carlos Eduardo Fontes da Costa e Silva, D.Sc.

---

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

---

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

MARÇO DE 2010

Santos, Fábio Pereira dos

Resolução da Equação de Balanço Populacional pelo Método de Quadratura Direta Baseado em Momentos Generalizados/Fábio Pereira dos Santos. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2010.

XVII, 96 p.: il.; 29,7cm.

Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Carlos Eduardo Fontes da Costa Silva

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Química, 2010.

Referências Bibliográficas: p. 86 – 94.

1. DQMOM. 2. Equação de Balanço Populacional. 3. Momentos Generalizados. I. Lage, Paulo Laranjeira da Cunha *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

*À minha família, Edson, Luana  
e Regina, e à Luciana Moraes*

# Agradecimentos

Primeiramente gostaria de agradecer à minha família, por ser meu porto seguro, que acredita e apoia meus sonhos. Ao meu pai, Edson, pelos conselhos, à minha mãe, Regina, pela fé e à minha irmã, Luana, pela paciência e amizade. Agradeço pelo suporte e compreensão quanto minha escolha profissional.

Ao Prof. Dr. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, pela sua valiosa orientação para a conclusão desse trabalho. Obrigado também pela amizade e pelos conselhos, advertências e correções que foram fundamentais para decisão do meu futuro acadêmico.

Ao Dr. Carlos Eduardo Fontes da Costa, pela orientação em todos os aspectos. Agradeço por acreditar em mim e nas minhas escolhas. “Roubei” muito da sua inteligência nesse período que trabalhamos juntos.

Agradeço aos integrantes do LTFD: João, Livia, Jovani, Otávio, Antônio, Samel e Fábio Barros. Aos colegas e amigos do PEQ: Paula, Clarissa, Aldo, Guillo, Lia, Elis e Felipe. Em especial, à Luciana, por acreditar nos meus sonhos, pelo carinho, pela atenção e paciência.

Agradeço aos colegas e amigos da ESSS: Ricardo Damian, Fabio Ressel, Karolline Ropelato, Daniel Bruno, Lucilla Almeida e Vitor Lopes, pelas piadas e amizade. Aos amigos da Escola de Química: Igor, Rafael, Fernanda, Alexandre e Geovani. Muito importantes para construção do meu caráter. Aos meus amigos de boêmia: Tâmi, Priscilla e Hyago.

Agradeço aos membros da banca, Prof. Dr. Argemiro Secchi e Prof. Dr. Luiz Fernando L. R Silva, pelo apoio e sugestões para o desenvolvimento dessa dissertação.

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

RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE BALANÇO POPULACIONAL PELO  
MÉTODO DE QUADRATURA DIRETA BASEADO EM MOMENTOS  
GENERALIZADOS

Fábio Pereira dos Santos

Março/2010

Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha Lage  
Carlos Eduardo Fontes da Costa Silva

Programa: Engenharia Química

Aplicações que envolvem escoamentos multifásicos polidispersos são muito comuns na indústria. Por isso, o interesse em simular escoamentos dispersos, acoplados ou não com a sua hidrodinâmica, vem crescendo. De fato, existe a necessidade do desenvolvimento de técnicas precisas e robustas, para resolver a equação de balanço populacional (EBP). Um método recente porém promissor para realizar tal tarefa é o chamado DQMOM (*Direct Quadrature Methods Of Moments*) e será o foco desse estudo. O presente trabalho se propõe a desenvolver uma metodologia numérica capaz de resolver a EBP de maneira robusta e acurada. A essência dessa nova abordagem se baseia na idéia de utilizar momentos modificados, gerados a partir de qualquer base de polinômios ortogonais (Laguerre, Legendre e etc.), ao invés de monômios como no DQMOM tradicional. Foi realizado um estudo comparativo entre o DQMOM convencional e o DQMOM generalizado (DQMOGeM), utilizando duas formulações diferentes: uma derivada em termos dos pesos e abscissas e outra em termos dos pesos e abscissas ponderadas. Foi realizada também uma avaliação crítica sobre esses métodos com base em soluções analíticas bem estabelecidas. Observou-se que o DQMOGeM se mostrou mais adequado para problemas com domínio finito.

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

## RESOLUTION OF POPULATION BALANCE EQUATION BY DIRECT QUADRATURE METHOD BASED ON GENERALIZED MOMENTS

Fábio Pereira dos Santos

March/2010

Advisors: Paulo Laranjeira da Cunha Lage  
Carlos Eduardo Fontes da Costa Silva

Department: Chemical Engineering

Applications involving polydisperse multiphase flows are very common in the industry. Therefore, the need to simulate dispersed flow, coupled or not with its hydrodynamics, is growing. In fact, there is a need to develop accurate and robust techniques for solving the population balance equation (PBE). A recent but promising method for performing this task is called DQMOM (*Direct Quadrature Methods Of Moments*) and will be the focus of this study. This study aims to develop a numerical methodology capable of solving the BPE in a robust and accurate way. The essence of this new approach is based on the idea of using modified moments generated from any orthogonal polynomials basis (Laguerre, Legendre and so on.) instead of monomials as in conventional DQMOM. We conducted a comparative study between conventional DQMOM and generalized DQMOM (DQMOMGeM) using two different formulations: one derived in terms of weights and abscissas and the other in terms of weights and transformed abscissas. We also did a critical evaluation of these methods based on analytical solutions well established. It was observed that the DQMOMGeM was better for problems with finite domain.

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>x</b>
<b>Lista de Símbolos</b>	<b>xiii</b>
<b>Lista de Abreviaturas</b>	<b>xvi</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Sistemas Polidispersos e Balanço Populacional . . . . .	1
1.1.1 Acoplamento BP-CFD . . . . .	2
1.2 Motivação e Objetivo . . . . .	3
1.3 Organização do Texto . . . . .	4
<b>2 Polinômios Ortogonais</b>	<b>6</b>
2.1 Teoria Básica . . . . .	6
2.1.1 Polinômios Ortogonais . . . . .	6
2.1.2 A Relação de Recorrência . . . . .	7
2.2 Métodos Baseados em Momentos . . . . .	9
2.2.1 Determinação Clássica Via Determinante de <i>Hankel</i> . . . . .	9
2.2.2 Algoritmo Produto Diferença . . . . .	10
2.2.3 Algoritmo de Chebyshev Modificado . . . . .	11
2.3 Regra de Quadratura de Gauss . . . . .	14
<b>3 Teoria de Balanço Populacional</b>	<b>17</b>
3.1 Equação de Balanço Populacional . . . . .	18
3.2 Fenômeno de Agregação . . . . .	21
3.3 Fenômeno de Quebra . . . . .	22
3.4 Simplificações e Hipóteses Usuais . . . . .	23
<b>4 Métodos de Solução da Equação de Balanço Populacional</b>	<b>26</b>
4.1 Métodos Estocásticos . . . . .	26
4.2 Método das Classes . . . . .	27
4.3 PPDC . . . . .	30

4.4	Método dos Resíduos Ponderados . . . . .	32
4.5	Método dos Momentos . . . . .	33
4.6	Métodos Híbridos . . . . .	34
<b>5</b>	<b>Metodologia Numérica</b>	<b>40</b>
5.1	Discretização da Equação de Balanço Populacional . . . . .	40
5.2	Termos Fontes de Quebra e Agregação . . . . .	43
5.2.1	Processo de Agregação . . . . .	43
5.2.2	Processo de Quebra . . . . .	45
5.3	Equacionamento Final da Formulação Tradicional . . . . .	46
5.4	Equacionamento Final Formulação Alternativa . . . . .	47
<b>6</b>	<b>Resultados</b>	<b>48</b>
6.1	Caso 1 . . . . .	49
6.1.1	Solução de McCoy e Madras [2003] . . . . .	50
6.1.2	Casos Teste . . . . .	51
6.2	Caso 2 . . . . .	52
6.2.1	Solução de Lage [2010] . . . . .	52
6.2.2	Casos Teste . . . . .	53
6.3	Comparação entre o APD e o Algoritmo de <i>Chebyshev</i> Modificado . .	53
6.4	Equivalência quanto aos pesos e abscissas . . . . .	54
6.4.1	Método Tradicional e Alternativo . . . . .	54
6.4.2	Momentos Generalizados e Padrão . . . . .	59
6.5	Avaliação dos Erros na Evolução dos Momentos . . . . .	62
6.5.1	Método Tradicional e Alternativo . . . . .	63
6.5.2	Momentos Generalizados e Padrão . . . . .	74
6.6	Robustez . . . . .	77
6.7	Tempo Computacional . . . . .	80
<b>7</b>	<b>Conclusões e Sugestões</b>	<b>84</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>86</b>
<b>A</b>	<b>Transformação de Momentos Padrão em Momentos Generalizados</b>	<b>95</b>

# Lista de Figuras

3.1	Exemplo de variável externa e interna . . . . .	18
3.2	Mecanismos de quebra e agregação . . . . .	24
5.1	Transformação de coordenadas utilizada no termo de nascimento por agregação. . . . .	44
5.2	Transformação de coordenadas utilizada no termo de nascimento por quebra. . . . .	46
6.1	Comparação entre os perfis das abscissas para os métodos DQMOM e DQMOMa no Caso 1.1. . . . .	54
6.2	Comparação entre os perfis dos pesos para os métodos DQMOM e DQMOMa no Caso 1.1. . . . .	55
6.3	Comparação entre os perfis das abscissas para os métodos DQMOM e DQMOMa no Caso 2.1. . . . .	56
6.4	Comparação entre os perfis dos pesos para os métodos DQMOM e DQMOMa no Caso 2.1. . . . .	56
6.5	Comparação entre os perfis das abscissas para os métodos DQMOGeM e DQMOGeMa no Caso 1.1. . . . .	57
6.6	Comparação entre os perfis dos pesos para os métodos DQMOGeM e DQMOGeMa no Caso 1.1. . . . .	57
6.7	Comparação entre os perfis das abscissas para os métodos DQMOGeM e DQMOGeMa no Caso 2.1. . . . .	58
6.8	Comparação entre os perfis dos pesos para os métodos DQMOGeM e DQMOGeMa no Caso 2.1. . . . .	59
6.9	Comparação entre os perfis das abscissas para os métodos DQMOGeM e DQMOM no Caso 1.1. . . . .	60
6.10	Comparação entre os perfis dos pesos para os métodos DQMOGeM e DQMOM no Caso 1.1. . . . .	60
6.11	Comparação entre os perfis das abscissas para os métodos DQMOGeM e DQMOM no Caso 2.1. . . . .	61

6.12	Comparação entre os perfis dos pesos para os métodos DQMOGeM e DQMOM no Caso 2.1. . . . .	61
6.13	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 4$ para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 1.1. . . . .	63
6.14	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 8$ para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 1.1. . . . .	64
6.15	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 4$ para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 1.2. . . . .	64
6.16	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 8$ para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 1.2. . . . .	65
6.17	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 4$ para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 1.3. . . . .	65
6.18	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 8$ para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 1.3. . . . .	66
6.19	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 4$ para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 2.1. . . . .	66
6.20	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 8$ para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 2.1. . . . .	67
6.21	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 4$ para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 2.2. . . . .	67
6.22	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 8$ para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 2.2. . . . .	68
6.23	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 4$ para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 1.1. . . . .	69
6.24	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 8$ para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 1.2. . . . .	69
6.25	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 4$ para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 1.2. . . . .	70
6.26	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 8$ para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 1.2. . . . .	70
6.27	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 4$ para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 1.3. . . . .	71
6.28	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 8$ para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 1.3. . . . .	71
6.29	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 4$ para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 2.1. . . . .	72
6.30	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 8$ para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 2.1. . . . .	72

6.31	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 4$ para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 2.2. . . . .	73
6.32	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 8$ para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 2.2. . . . .	73
6.33	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 8$ para os métodos DQMOGeM e DQMOM no Caso 1.1. . . . .	74
6.34	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 8$ para os métodos DQMOGeM e DQMOM no Caso 1.2. . . . .	75
6.35	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 8$ para os métodos DQMOGeM e DQMOM no Caso 1.3. . . . .	75
6.36	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 8$ para os métodos DQMOGeM e DQMOM no Caso 2.1. . . . .	76
6.37	Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com $N = 8$ para os métodos DQMOGeM e DQMOM no Caso 2.2. . . . .	76
6.38	Número de condicionamento por número de pontos de quadratura para o caso 1.1. . . . .	78
6.39	Número de condicionamento por número de pontos de quadratura para o caso 2.1. . . . .	79
6.40	Número de condicionamento por número de pontos de quadratura para o caso 2.2. . . . .	79
6.41	Tempo computacional para o Caso 1.1 em todos os métodos, onde $N$ é o número de pontos de quadratura . . . . .	81
6.42	Tempo computacional para o Caso 1.2 em todos os métodos, onde $N$ é o número de pontos de quadratura . . . . .	81
6.43	Tempo computacional para o Caso 1.3 em todos os métodos, onde $N$ é o número de pontos de quadratura . . . . .	82
6.44	Tempo computacional para o Caso 2.1 em todos os métodos, onde $N$ é o número de pontos de quadratura . . . . .	82
6.45	Tempo computacional para o Caso 2.2 em todos os métodos, onde $N$ é o número de pontos de quadratura . . . . .	83

# Lista de Símbolos

$A_{i,j}$	Densidade numérica de partículas para classe de filhas $ij$ geradas por agregação de mães $i$ e $j$ , p. 31
$B_k^{(i)}$	Densidade numérica de partículas para classe de filhas $k$ geradas por quebra de uma partícula mãe $i$ , p. 31
$B_a$	Termo de nascimento por agregação, p. 43
$B_b$	Termo de nascimento por quebra, p. 43
$D_a$	Termo de morte por agregação, p. 43
$D_b$	Termo de morte por quebra, p. 43
$D_x$	Coefficiente de difusão anisotrópico, p. 41
$E$	Operador expectativa, p. 18
$G$	Termo de crescimento, p. 20
$J$	Termo de nucleação, p. 20
$N$	Número de pesos e abscissas, p. 41
$N_T$	Número total de partículas médio no domínio., p. 19
$N_i$	Número de partículas no subintervalo $i$ , p. 28
$N_x$	Número de partículas no espaço físico. , p. 19
$S$	Taxa líquida de quebra e coalescência monovariada, p. 41
$S_{\lambda\alpha}$	Fonte para abscissas ponderada do sistema linear derivado do DQMOM, p. 47
$S_{\omega\alpha}$	Fonte relativa aos pesos no método DQMOM, p. 38
$S_{e\alpha}$	Fonte relativa às abscissas no método DQMOM, p. 38

$\Delta'_k$	Segundo determinante de <i>Hankel</i> , p. 10
$\Delta_k$	Primeiro determinante de <i>Hankel</i> , p. 10
$\Omega_r$	Domínio de variáveis internas, p. 17
$\Omega_x$	Domínio de variáveis externas, p. 17
$\alpha_k$	primeiro coeficiente de recursão de ordem $k$ , p. 8
$\bar{C}_k$	Momento do termo difusivo desenvolvido no método DQMOM, p. 38
$\bar{H}_k$	Momento da taxa líquida de nascimento e morte desenvolvido no método DQMOM, p. 38
$\beta_k$	segundo coeficiente de recursão de ordem $k$ , p. 8
$\delta$	Função delta de Dirac, p. 29
$\gamma_\alpha$	Fração volumétrica de partículas, p. 19
$\lambda_\alpha$	Abscissa ponderada, p. 47
$\mathbb{P}$	Espaço de polinômios com coeficientes reais, p. 7
$\mathbb{P}_d$	Espaço de polinômios de grau menor que $d$ , p. 7
$\mathbb{R}$	Domínio Real, p. 7
$\mathbf{D}_r$	Coefficiente de difusão anisotrópico no espaço de variáveis internas, p. 20
$\mathbf{J}_n$	Matriz de Jacobi de ordem $n$ , p. 14
$\dot{\mathbf{R}}$	“Velocidade” no espaço de variáveis internas, p. 19
$\dot{\mathbf{X}}$	“Velocidade” no espaço de variáveis externas, p. 19
$\mathbf{r}$	Vetor de variáveis internas, p. 17
$\mathbf{u}$	Velocidade média condicionada à propriedade interna, p. 41
$\mathbf{x}$	Vetor de variáveis externas, p. 17
$\mathcal{R}_n^G(h)$	erro associado aproximação por quadratura, p. 14
$\mu_k$	Momento de ordem $k$ , p. 6
$\mu_n^\phi$	Momento generalizado de ordem $k$ ., p. 94

$\nu$	Número de partículas formadas na quebra, p. 23
$\omega_\alpha$	Peso, p. 41
$\pi_k$	Polinômio ortogonais mônicos de ordem $k$ , p. 8
$\sigma_{k,k}$	Momento misto de ordens $k$ e $k$ , p. 12
$\theta$	Variável de integração dos momentos no domínio, p. 7
$a$	Frequência de agregação, p. 21
$b$	Frequência de quebra, p. 23
$c_i$	Constante da expansão polinômial do Método dos Resíduos Ponderados, p. 33
$d\Lambda(\theta)$	Função estritamente positiva no domínio real, p. 7
$f$	Função densidade numérica monovariada, p. 41
$m$	Variável interna, p. 41
$m_\alpha$	Abscissa, p. 41
$p_k$	Polinômio de ordem $k$ , p. 41
$t$	Tempo, p. 41
$y_{ij}$	Abcissas da componente de nascimento por agregação, p. 31
$z_k^{(i)}$	Abcissas da componente de nascimento por quebra, p. 31
$\{\tilde{\pi}_k\}$	Base polinômial ortonormal, p. 14

# Lista de Abreviaturas

ACM	Algoritmo de <i>Chebyshev</i> Modificado, p. 53
APD	Algoritmo Produto Diferença, p. 10
CFD	Computational Fluid Dynamics, p. 3
CNMC	Constant Number Monte Carlo, p. 27
DN	Densidade Numérica, p. 34
DQMOGeM	Direct Quadrature Method of Generalized Moments, p. 41
DQMOGeMa	Direct Quadrature Method of Generalized Moments with abscissa evolution, p. 41
DQMOM	Direct Quadrature Method of Moments, p. 40
DQMOMa	Direct Quadrature Method of Moments with abscissa evolution, p. 41
DSMC	Direct Simulation Monte Carlo, p. 27
EAD	Equações Algébricas Diferenciais, p. 49
EBP	Equação de Balanço Populacional, p. 41
FDN	Função Densidade Numérica, p. 17
LAG	Polinômial de Laguerre, p. 39
MC	Método das Classes, p. 27
MMC	Multi-Monte Carlos, p. 27
MOM	Method of Moments, p. 34
MRP	Método dos Resíduos Ponderados, p. 32
MUSIG	Multiple Size Group, p. 3

PPDC	Parallel Parent Daughter Classes, p. 3
QMOM	Quadrature Method of Moments, p. 3
SCVMC	Stepwise Constant Volume Monte Carlo, p. 27
TMJ	Transformação da Matriz Jacobiana, p. 37

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Sistemas Polidispersos e Balanço Populacional

Escoamentos multifásicos dispersos são escoamentos que consistem de, pelo menos, duas fases, tais como gotas em um gás ou bolhas em um líquido. Esses elementos discretos não estão conectados entre si, pois existe uma fase contínua que os separa (CROWE *et al.* [8]).

O termo sistema polidisperso refere-se à uma população de partículas sólidas, bolhas ou gotas, caracterizadas por uma ou mais propriedades dispostas num intervalo definido, em oposição a um sistema monodisperso, em que todas as partículas são idênticas (RIGOPOULOS [61])

Muitas tecnologias se fundamentam nas propriedades de uma polidispersão, fato que impulsiona o desenvolvimento de técnicas numéricas capazes de prever o comportamento dinâmico da população de partículas. Normalmente, almeja-se que essas técnicas auxiliem engenheiros a prever e controlar a influência das partículas sobre um dado sistema. Em especial, na indústria química, há uma série de equipamentos que envolvem escoamentos multifásicos polidispersos. Entre eles, pode-se citar os seguintes exemplos:

- Separadores ciclônicos;
- *Spray drying*;<sup>1</sup>
- Leitos fluidizados;
- Flotadores;
- Sedimentadores;
- Colunas de borbulhamento;

---

<sup>1</sup>Pulverização de um líquido em uma corrente de ar quente.

- Reatores químicos;
- Sistemas de extração;
- Leitos fluidizados;
- Transporte de petróleo.

Em sua maioria, os fenômenos associados aos processos de engenharia química dependem significativamente das propriedades das partículas de um sistema polidisperso. Um ótimo exemplo de equipamento multifásico polidisperso é a coluna de borbulhamento, na qual se observa um escoamento gás-líquido em que a fase dispersa é formada por bolhas que definem a eficiência desse equipamento. Neste exemplo, a distribuição de tamanho de partícula controla os fenômenos de transferência de massa, energia e quantidade de movimento, que por sua vez, afetam a temperatura e a concentração dos componentes transferidos para as bolhas. No entanto, ainda não se tem total entendimento da fluidodinâmica tanto da fase dispersa quanto da fase contínua (SILVA [69]).

Visando descrever o comportamento de uma distribuição, surge a teoria de balanço populacional (BP) como ferramenta essencial para cientistas e engenheiros (RAMKRISHNA [60]). O estudo dessa teoria e os métodos de solução da equação de balanço populacional vem sendo realizado com grande afincamento pela comunidade acadêmica<sup>2</sup>, devido a sua vasta aplicabilidade.

Importante realçar que, muitas das vezes, o tratamento da equação de balanço populacional está conectado com a solução do escoamento do sistema multifásico. Deste modo o acoplamento entre BP e CFD (*Computational Fluid Dynamics*) é considerado de vital importância para os problemas reais de engenharia.

### 1.1.1 Acoplamento BP-CFD

Além do desafio de desenvolver a teoria de balanço populacional e aprimorar métodos de solução, ainda existe a meta de acoplar as equações fluidodinâmicas das fases com a equação de balanço populacional. Na maioria dos casos, as partículas distribuídas no domínio não têm comportamento homogêneo<sup>3</sup>. Isso implica que o campo de velocidade das partículas, bem como os termos fonte (relacionados aos fenômenos de quebra e agregação), dependem da fluidodinâmica da fase contínua, da mesma forma que a velocidade da fase contínua depende da fase dispersa.

Esse efeito de duas vias pode ser capturado combinando a abordagem multifásica Euleriana/Euleriana<sup>4</sup> com a equação de balanço populacional. A primeira tentativa

---

<sup>2</sup>336 artigos nos últimos 5 anos (levantamento da ISI Web of Knowledge com palavra chave a *Population Balance Equation*)

<sup>3</sup>Dependência com as coordenadas espaciais.

<sup>4</sup>Cada fase é modelada com suas respectivas equações Eulerianas de transporte.

de acoplar a EBP com CFD foi a proposta por LO [42], que criou o método MUSIG (*Multiple Size Group*). Neste método, uma das fases representa a fase contínua e a outra representa todas as classes<sup>5</sup> da fase dispersa. Essa modelagem assume que as velocidades de todas as partículas são iguais, o que não ocorre na maioria dos sistemas polidispersos.

Para driblar essa limitação, KREPPER *et al.* [30] propuseram usar duas fases dispersas distintas, sendo que uma com classes de tamanhos pequenos e outra com classes de tamanhos grandes, e cada uma dessas fases teria campos de velocidades diferentes.

Outra metodologia de acoplamento PB-CFD é o modelo algébrico de mistura com escorregamento. Esse método consiste em resolver as equações de transporte para a mistura, permitindo diferenciar o perfil de velocidade de cada classe a partir de uma equação algébrica de deslizamento (MANNINEN *et al.* [45]).

MARCHISIO *et al.* [49] introduziram uma nova técnica numérica de acoplamento PB-CFD utilizando o método QMOM, *Quadrature Method of Moments*, desenvolvido por MCGRAW [52]. Em 2005, MARCHISIO e FOX [46] desenvolveram um método original denominado DQMOM, *Direct Quadrature Method of Moments*, que hoje é o mais indicado para o acoplamento PB-CFD (SILVA *et al.* [67]). Ainda em 2005, BOVE *et al.* [5] desenvolveram o método PPDC, *Parallel Parent Daughter Classes*, e obtiveram resultados satisfatórios para uma coluna de borbulhamento 2D. Não obstante, os resultados ainda eram considerados qualitativos. Em 2008, SILVA *et al.* [67] realizaram testes comparativos entre o acoplamento PB-CFD utilizando dois *softwares*: ANSYS CFX - *softwares* comercial - e OpenFOAM - código aberto, confirmando a eficiência do método DQMOM em realizar simulações acopladas.

Em suma, os métodos de solução e acoplamento PB-CFD ainda são incipientes, e muito tempo de desenvolvimento deve ser empregado. Vários autores propuseram técnicas de acoplamento diferentes, obtendo resultados satisfatórios. Todavia, ainda existem muitas incertezas envolvidas, tais como a modelagem da turbulência e das funções de quebra e de agregação. Portanto, os resultados obtidos até hoje podem ser considerados qualitativos.

## 1.2 Motivação e Objetivo

Nos últimos anos, a indústria do petróleo vem crescendo e alavancando a economia brasileira. Para que esse crescimento seja continuado, existe a necessidade de constante renovação tecnológica. Por esta razão, as companhias de petróleo, em especial a PETROBRAS, Petróleo Brasileiro S/A, têm se dedicado à pesquisa e ao desenvolvimento de técnicas de obtenção e beneficiamento de petróleo. Outro aspecto

---

<sup>5</sup>Metodologia desenvolvida inicialmente para o software comercial ANSYS CFX.

relevante, que é destaque e preocupa a sociedade, é o meio ambiente. Tal preocupação tem sido constantemente notícia na mídia mundial, levando à tona também aspectos políticos e econômicos. Nesse contexto, as empresas petrolíferas devem se adequar e desenvolver novas tecnologias que sigam as novas tendências mundiais.

O emprego de CFD vem se tornando mais popular na indústria, deixando cada vez mais sua característica acadêmica e ganhando vida nos projetos engenharia. A expansão da computação paralela e o desenvolvimento de técnicas numéricas rápidas, precisas e robustas são os principais motivos pelos quais CFD se tornou uma ferramenta de projeto. Por isto, hoje, é factível simular escoamentos complexos com um grau de detalhamento inviável há algumas décadas atrás.

Na PETROBRAS, o uso de CFD cresce em torno de 40% ao ano (DAMIAN [9]), dado que evidencia o interesse por essa tecnologia. Atualmente, o volume de aplicações de CFD na empresa é vasto, atuando desde bioengenharia até engenharia básica.

Neste sentido, algumas técnicas como acoplamento entre balanço populacional e CFD vem ganhando espaço, exigindo assim o desenvolvimento de técnicas numéricas mais precisas e robustas. Em vista disso, o presente trabalho tem como objetivo analisar métodos numéricos capazes de resolver a EBP com maior robustez e acurácia que métodos tradicionais. Modificando essencialmente o método DQ-MOM tradicional, substituindo os momentos padrão por momentos generalizados, mais especificamente derivando momentos generalizados, utilizando base polinomial de Laguerre, como no trabalho de GROSCH *et al.* [23], e inovando com a base polinomial de Legendre para derivação de uma nova metodologia.

### 1.3 Organização do Texto

O trabalho apresenta um estudo comparativo entre variações do método DQMOM aqui desenvolvidas. Dentro do escopo dessa dissertação não foram levados em consideração os efeitos da fluidodinâmica, já que o interesse era mensurar a qualidade dos métodos sem a influência de outras fontes de erro. A verificação numérica foi executada com os problemas com solução analítica de domínio semi-infinito de MCCOY e MADRAS [51] e de LAGE [35].

No capítulo 2, apresenta-se uma fundamentação teórica básica do uso de polinômios ortogonais e sua relevância nos métodos computacionais descritos nesse trabalho. Este capítulo apresenta alguns teoremas importantes, técnicas de obtenção dos três termos de recorrência e como mapear os pesos e abscissas de uma quadratura tipo Gaussiana. Os fundamentos da teoria de balanço populacional são mostrados no capítulo 3. Este capítulo abrange desde a formulação dos conceitos básicos até o equacionamento geral e suas possíveis simplificações. Já no capítulo 4 é

apresentada uma revisão dos diversos métodos de solução da EBP. O método das classes, os métodos híbridos e o PPDC receberão maior atenção, pois são os mais relevantes para o acoplamento PB-CFD (BOVE *et al.* [5]).

O capítulo 5 fornece a descrição e a derivação das técnicas numéricas propostas nesse trabalho. No capítulo seguinte são mostrados os resultados da comparação entre os métodos DQMOM, DQMOMa, DQMOGeM e DQMOGeMa, para resolver a EBP homogênea. A avaliação de equivalência dos pesos e abscissas no tempo, testes de tempo computacional e robutez foram analisados nesta etapa. Finalmente, no capítulo 7, são apresentadas as conclusões e sugestões a partir dos resultados obtidos no capítulo 6.

# Capítulo 2

## Polinômios Ortogonais

Neste capítulo será apresentada uma breve discussão sobre polinômios ortogonais e, sua relevância sobre os métodos computacionais estudados nesse trabalho. No primeiro item, algumas definições e demonstração importantes serão abordadas para o melhor entendimento das seções seguintes. No segundo item, serão apresentados os procedimentos de como mapear os coeficientes de recursão a partir dos momentos padrão e modificados e no último item são dados os passos para obter os pesos e as abscissas da aproximação por quadratura Gaussiana (GAUTSCHI [19]).

### 2.1 Teoria Básica

#### 2.1.1 Polinômios Ortogonais

##### Definição de polinômios ortogonais

Seja  $\Lambda(\theta)$  uma função não decrescente na reta real, cuja medida induzida  $d\Lambda(\theta)$  tem momentos finitos,  $\mu_k$ , de todas as ordens:

$$\mu_k = \mu_k(d\Lambda(\theta)) := \int_{\mathbb{R}} \theta^k d\Lambda(\theta), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad \mu_0 > 0 \quad (2.1)$$

Seja  $\mathbb{P}$  o espaço de polinômios com coeficientes reais e  $\mathbb{P}_d \subset \mathbb{P}$  o espaço de polinômios de grau  $\leq d$ . Para qualquer par  $w$  e  $q$  pertencentes a  $\mathbb{P}$  (GAUTSCHI [19]), pode-se definir o produto interno como:

$$(w, q)_{d\Lambda} = \int_{\mathbb{R}} w(\theta)q(\theta)d\Lambda(\theta). \quad (2.2)$$

Então, se  $(w, q)_{d\Lambda} = 0$ ,  $w$  é ortogonal a  $q$ . Permitindo  $w = q$ , então

$$\|w\| = \sqrt{(w, w)_{d\Lambda}} = \sqrt{\int_{\mathbb{R}} w(\theta)^2 d\Lambda(\theta)}. \quad (2.3)$$

em que,  $\|w\|$  é a norma de  $w$ .

### Definição de polinômios ortogonais mônicos

Sendo  $\pi_k(\theta) = \theta^k + \dots$ ,  $k = 0, 1, \dots$ , diz-se que  $\pi_k(\theta)$  são polinômios ortogonais mônicos com respeito a medida  $d\Lambda(\theta)$ , se

$$\begin{aligned} (\pi_k, \pi_l)_{d\Lambda} &= 0 & k \neq l & \quad k, l = 0, 1, \dots \\ \|\pi_k\| &> 0 & & \quad k = 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (2.4)$$

**Lema 2.1.1** *Se  $\pi_0(\theta), \pi_1(\theta), \dots, \pi_n(\theta)$  são polinômios ortogonais mônicos, e  $p \in \mathbb{P}_n$ , então  $p$  pode ser escrito unicamente por:*

$$p = \sum_{k=0}^n c_k \pi_k \quad (2.5)$$

onde  $c_k$  são constantes reais.

### Zeros

**Teorema 2.1.1** *Todos os zeros do polinômio  $\pi_k(\theta)$ , para  $k \geq 1$ , são reais simples e estão localizados no interior do suporte de  $d\Lambda(\theta)$ .*

As definições acima serão úteis para o desenrolar das próximas seções, uma vez que algumas demonstrações utilizarão os conceitos citados.

### 2.1.2 A Relação de Recorrência

A relação de recorrência (equação (2.7)) contém as informações mais importantes para construção dos polinômios ortogonais - computacionalmente (GAUTSCHI [19]). A partir desses termos, pode-se gerar facilmente bases polinomiais ortogonais e suas derivadas, além de possibilitar construir todas as regras importantes de quadratura Guassiana.

A principal razão para existir esses termos é a seguinte propriedade:

$$(\theta w, q)_{d\Lambda} = (w, \theta q)_{d\Lambda} \quad \forall \quad w \text{ e } q \in \mathbb{P}, \quad (2.6)$$

propriedade que será utilizada para demonstração do teorema abaixo:

**Teorema 2.1.2** *Seja  $\pi_k(\theta)$ ,  $k = 0, 1, \dots$ , polinômios ortogonais mônicos com respeito a medida  $d\Lambda$ . Então,*

$$\pi_{k+1}(\theta) = (\theta - \alpha_k)\pi_k(\theta) - \beta_k\pi_{k-1}(\theta) \quad (2.7)$$

$$\pi_{-1}(\theta) = 0 \quad \pi_0(\theta) = 1 \quad (2.8)$$

onde,

$$\alpha_k = \frac{(\theta\pi_k, \pi_k)_{d\Lambda}}{(\pi_k, \pi_k)_{d\Lambda}} \quad k = 0, 1, \dots, n \quad (2.9)$$

$$\beta_k = \frac{(\pi_k, \pi_k)_{d\Lambda}}{(\pi_{k-1}, \pi_{k-1})_{d\Lambda}} \quad k = 0, 1, \dots, n \quad (2.10)$$

### Demonstração (GAUTSCHI [19])

Se  $\pi_{k+1} - \theta\pi_k$  é um polinômio de grau  $\leq k$ , pelo Lema 2.1.1, pode-se escrever

$$\pi_{k+1} - \theta\pi_k = -\alpha_k\pi_k - \beta_k\pi_{k-1} + \sum_{j=0}^{k-2} \gamma_{kj}\pi_j \quad (2.11)$$

Aplicando o produto interno com  $\pi_k$  em ambos os lados da equação (2.11), por ortogonalidade, tem-se que:

$$-(\theta\pi_k, \pi_k)_{d\Lambda} = -\alpha_k(\pi_k, \pi_k)_{d\Lambda} \quad (2.12)$$

Conduzindo o mesmo procedimento para demonstrar a equação (2.10), sendo neste caso o produto interno realizado com  $\pi_{k-1}$ , então,

$$-(\theta\pi_k, \pi_{k-1})_{d\Lambda} = -\beta_k(\pi_{k-1}, \pi_{k-1})_{d\Lambda} \quad (2.13)$$

Pela propriedade dada pela equação (2.6) tem-se que  $(\theta\pi_k, \pi_{k-1})_{d\Lambda} = (\pi_k, \theta\pi_{k-1})_{d\Lambda} = (\pi_k, \pi_k + \dots)_{d\Lambda}$ . Logo,  $(\theta\pi_k, \pi_{k-1})_{d\Lambda} = (\pi_k, \pi_k)_{d\Lambda}$ , demonstrando assim a relação (2.10).

Finalmente, aplicando o produto interno com  $\pi_i$  em (2.11), e com  $i < k - 1$ ,

$$-(\theta\pi_k, \pi_i)_{d\Lambda} = -\gamma_{ki}(\pi_i, \pi_i)_{d\Lambda} \quad (2.14)$$

Recorrendo à propriedade (2.6), pode-se dizer que  $(\theta\pi_k, \pi_i)_{d\Lambda} = (\pi_k, \theta\pi_i)_{d\Lambda}$  como  $\theta\pi_i \in \mathbb{P}_{k-1}$ , então  $\gamma_{ki} = 0$  para  $i < k - 1$ , demonstrando assim a equação (2.7).

Por fim, dispor dos coeficientes de recursão ( $\alpha_k$  e  $\beta_k$ ) nos permite gerar de maneira estável polinômios ortogonais clássicos, não clássicos e os seus momentos, além de possibilitar a geração dos pesos e abscissas da regra de quadratura Gaussiana. A Tabela 2.1 ilustra os polinômios ortogonais e seus respectivos coeficientes de recursão usados para conceber os momentos generalizados neste trabalho.

Tabela 2.1: Coeficientes de recursão para polinômios ortogonais clássicos, sendo  $d\Lambda(\theta) = \omega(\theta)d\theta$ .

$\omega(\theta)$	<i>Intervalo de Ortogonalidade</i>	<i>Polinômio Ortogonal</i>	$\alpha'_k$	$\beta'_0$	$\beta'_k$
1	[0,1]	Legendre Transladado	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{4(4-k^2)}$
$e^{-\theta}$	[0,∞]	Laguerre	$2k + 1$	1	$k^2$

## 2.2 Métodos Baseados em Momentos

Esta seção refere-se às formas de determinação dos coeficientes de recursão a partir dos momentos de uma certa medida  $\omega(\theta)d\theta$ . Uma das formas de obter esses coeficientes é a partir dos determinantes de *Hankel*. Todavia, esse método não é recomendado computacionalmente (GAUTSCHI [19]), pois necessita de uma série de avaliações de determinantes e não é robusta, uma vez que perde precisão significativamente.

Outra forma de determinação é pelo algoritmo de *Chebyshev*. Nesse algoritmo os termos de recursão são gerados diretamente sem a necessidade de cálculos repetitivos de determinantes. Esta abordagem é muito semelhante ao algoritmo Produto-Diferença proposto por GORDON [22].

Infelizmente, os métodos acima citados são numericamente mal-condicionados (LAMBIN e GASPARD [37]). Para superar essa dificuldade, SACK e DONOVAN [63] desenvolveram uma variação do método de *Chebyshev*, nomeado de algoritmo de *Chebyshev* modificado. Esse método utiliza momentos generalizados ao invés de momentos padrão, podendo levar a um sistema mais bem condicionado que os outros algoritmos citados.

### 2.2.1 Determinação Clássica Via Determinante de *Hankel*

O determinante de *Hankel*,  $\Delta_k$ , de ordem  $k$ , é formado com os momentos  $\{\mu_j\}_{2k-1}^0$ , sendo dado por:

$$\Delta_0 = 1, \Delta_k = \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \dots & \mu_{k-1} \\ \mu_1 & \mu_2 & \dots & \mu_k \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \mu_{k-1} & \mu_k & \dots & \mu_{2k-1} \end{vmatrix} \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

Define-se,

$$\Delta'_0 = 0, \Delta'_1 = \mu_1, \Delta'_k = \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_{k-2} & \mu_k \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_k & \mu_{k+1} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ \mu_{k-1} & \mu_k & \cdots & \mu_{2k-3} & \mu_{2k-1} \end{vmatrix} \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

Onde  $\Delta'_k$  é o determinante obtido de  $\Delta_{k+1}$  removendo a penúltima coluna e a última linha. Essas definições são o coração do método de geração de coeficientes de recursão via determinante, e no seu cálculo reside a principal dificuldade numérica do método. A seguir o teorema que traduz o método via determinante:

**Teorema 2.2.1** *Os coeficientes de recursão,  $\alpha_k = \alpha_k(d\Lambda)$  e  $\beta_k = \beta_k(d\Lambda)$ , para polinômios mônicos ortogonais  $\pi_k(\cdot; d\Lambda)$ , podem ser determinados por (GAUTSCHI [19]):*

$$\alpha_k = \frac{\Delta'_{k+1}}{\Delta_{k+1}} - \frac{\Delta'_k}{\Delta_k} \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.15)$$

$$\beta_0 = 1, \quad \beta_k = \frac{\Delta_{k+1}\Delta_{k-1}}{\Delta_k^2}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (2.16)$$

Se forem necessários polinômios de alta ordem o uso deste método se torna impraticável computacionalmente, já que quanto maior a ordem do polinômio, maior o número e a ordem dos determinantes a serem obtidos.

## 2.2.2 Algoritmo Produto Diferença

O algoritmo Produto Diferença (APD) proposto por GORDON [22] tem como finalidade determinar os pesos e abscissas da quadratura Guassiana a partir dos momentos padrão de uma medida  $d\Lambda$ . Esse método é um dos utilizados em conjunto com o QMOM e o DQMOM (MARCHISIO *et al.* [48], MCGRAW [52], MCGRAW e WRIGHT [53]). O primeiro passo para o APD é a construção dos coeficientes  $P_{i,j}$ . Os componentes da primeira coluna  $P$ , estão na equação (2.17), onde  $\delta$  é o delta de Kronecker.

$$P_{i,1} = \delta_{i,1}, \quad i = 1, \dots, 2n + 1 \quad (2.17)$$

Os componentes da segunda coluna de  $P$  são determinados por:

$$P_{i,2} = (-1)^{i-1} \mu_{i-1}, \quad i = 1, \dots, 2n + 1, \quad (2.18)$$

Os componentes restantes são gerados por:

$$P_{i,j} = P_{i,j-1}P_{i+1,j-2} - P_{1,j-2}P_{i+1,j-1} \quad (2.19)$$

$$j = 3, \dots, 2n + 1, \quad i = 1, \dots, 2n + 2 - j$$

Para os coeficientes  $I_i$ , atribui-se ao primeiro elemento  $I_1 = \mu_0$ , e os coeficientes restantes são construídos pela relação:

$$I_i = \frac{P_{1,i+1}}{P_{1,i}P_{1,i-1}}, \quad i = 2, \dots, 2n \quad (2.20)$$

Uma matriz tridiagonal simétrica é obtida de somas e produtos dos  $I_i$ . Os  $X_i$  são os termos da diagonal principal e os  $Z_i$  são os elementos da co-diagonal:

$$X_1 = I_2 \quad (2.21)$$

$$X_i = I_{2i} + I_{2i-1}, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.22)$$

$$Z_i = -\sqrt{I_{2i-2}I_{2i-1}}, \quad i = 2, \dots, n \quad (2.23)$$

As abscissas são os autovalores ( $m_\alpha$ ) da matriz tridiagonal e os pesos são definidos a partir dos seus autovetores ( $l_{i,j}$ ) através relação:

$$\omega_\alpha = I_1 l_{1,\alpha}^2 \quad \alpha = 1, \dots, n \quad (2.24)$$

O APD fornece os pesos e abscissas sem precisar de cálculo repetitivos de determinantes. No entanto, esse método pode acarretar problemas devido a propagação de erros de arredondamento, fazendo com que este falhe (descrito na seção de resultados).

### 2.2.3 Algoritmo de Chebyshev Modificado

Com o relativo insucesso dos métodos anteriores, SACK e DONOVAN [63] propuseram uma alternativa mais robusta para determinar os coeficientes de recursão. Essa alternativa, além de evitar cálculos excessivos de determinantes, evita também problemas de mal-condicionamento, como nos algoritmos de Chebyshev e no Produto-Diferença. A essência desse método está na redefinição dos momentos: ao invés de usar monômios para calcular os momentos, utiliza-se qualquer polinômio mônico ortogonal. Desta forma, modifica-se também o mapeamento dos coeficientes de recursão.

O algoritmo de Chebyshev modificado pode ser aplicado com qualquer outra base de polinômios mônicos ortogonais  $\{p_k\}$ , satisfazendo:

$$p_{k+1}(\theta) = (\theta - \alpha'_k)p_k(\theta) - \beta'_k p_{k-1}(\theta) \quad k = 0, 1, \dots \quad (2.25)$$

$$p_{-1}(\theta) = 0 \quad p_0(\theta) = 1 \quad (2.26)$$

Assim, podemos gerar os momentos generalizados em termo de  $p_k$  da seguinte forma:

$$\mu_k^\phi = \mu_k^\phi(d\Lambda(\theta)) := \int_{\mathbb{R}} p_k(\theta) d\Lambda(\theta), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad \mu_0 > 0 \quad (2.27)$$

Com  $\alpha'_k \in \mathbb{R}$  e  $\beta'_k \geq 0$ . Lembrando que se  $\alpha'_k = \beta'_k = 0$ , o algoritmo de Chebyshev modificado se reduz ao método de Chebyshev original.

Introduzindo a definição de momentos mistos:

$$\sigma_{kl} = \int_{\mathbb{R}} \pi_k(\theta) p_l(\theta) d\Lambda, \quad k, l \geq -1 \quad (2.28)$$

Por ortogonalidade,  $\sigma_{kl} = 0$  para  $k > l$ . Como  $\theta p_{k-1}(\theta) = \pi_k(\theta) + \dots$ , tem-se:

$$\int_{\mathbb{R}} \pi_k(\theta)^2 d\Lambda(\theta) = \int_{\mathbb{R}} \pi_k(\theta) \theta p_{k-1} d\Lambda(\theta) = \sigma_{kk} \quad k \geq 1. \quad (2.29)$$

A relação  $\sigma_{k+1, k-1} = 0$  junto com a equação (2.7), origina por ortogonalidade

$$0 = \int_{\mathbb{R}} [(\theta - \alpha_k) \pi_k(\theta) - \beta_k \pi_{k-1}(\theta)] p_{k-1}(\theta) d\Lambda(\theta) = \sigma_{kk} - \beta_k \sigma_{k-1, k-1} \quad (2.30)$$

sendo,

$$\beta_k = \frac{\sigma_{kk}}{\sigma_{k-1, k-1}} \quad (2.31)$$

De forma similar  $\sigma_{k+1, k} = 0$ . Logo:

$$0 = \int_{\mathbb{R}} [(\theta - \alpha_k) \pi_k(\theta) - \beta_k \pi_{k-1}(\theta)] p_k(\theta) d\Lambda(\theta) = \int_{\mathbb{R}} \pi_k(\theta) \theta p_k(\theta) d\Lambda(\theta) - \alpha_k \sigma_{kk} - \beta_k \sigma_{k-1, k} \quad (2.32)$$

Reescrevendo a equação (2.25) na forma

$$\theta p_k(\theta) = p_{k+1}(\theta) + \alpha'_k p_k(\theta) + \beta'_k p_{k-1}(\theta) \quad (2.33)$$

Então a equação (2.32) se torna

$$0 = \sigma_{k, k+1} + (\alpha'_k - \alpha_k) \sigma_{kk} - \beta_k \sigma_{k-1, k} \quad (2.34)$$

Em seguida unindo a equação (2.31) com a (2.34), e fazendo  $\sigma_{-1, l} = 0$ , obtem-se

$$\alpha_0 = \alpha'_0 + \frac{\sigma_{01}}{\sigma_{00}} \quad (2.35)$$

$$\alpha_k = \alpha'_k - \frac{\sigma_{k-1,k}}{\sigma_{k-1,k-1}} + \frac{\sigma_{k,k+1}}{\sigma_{kk}}, \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (2.36)$$

Os termos  $\sigma$  satisfazem a recursão abaixo:

$$\sigma_{kl} = \sigma_{k-1,l+1} - (\alpha_{k-1} - \alpha'_l)\sigma_{k-1,l} - \beta_{k-1}\sigma_{k-2,l} + \beta'_l\sigma_{k-1,l-1}, \quad (2.37)$$

Assim, finalmente, tem-se um algoritmo robusto e de fácil implementação capaz de determinar os  $n$  coeficientes de recursão.

### Algoritmo 2.2.1 *Algoritmo Modificado de Chebyshev*

*Inicialização do método*

$$\alpha_0 = \alpha'_0 + \frac{\mu_1^\phi}{\mu_0^\phi} \quad (2.38)$$

$$\beta_0 = \mu_0^\phi \quad (2.39)$$

$$\sigma_{-1,l} = 0 \quad l = 1, 2, \dots, 2n - 2. \quad (2.40)$$

$$\sigma_{0,l} = \mu_l^\phi \quad l = 0, 1, 2, \dots, 2n - 1. \quad (2.41)$$

Se  $n > 1$ : para  $k = 1, 2, \dots, n - 1$

$$\sigma_{kl} = \sigma_{k-1,l+1} - (\alpha_{k-1} - \alpha'_l)\sigma_{k-1,l} - \beta_{k-1}\sigma_{k-2,l} + \beta'_l\sigma_{k-1,l-1} \quad (2.42)$$

$$l = k, k + 1, \dots, 2n - k - 1.$$

$$\alpha_k = \alpha'_k - \frac{\sigma_{k-1,k}}{\sigma_{k-1,k-1}} + \frac{\sigma_{k,k+1}}{\sigma_{kk}} \quad (2.43)$$

$$\beta_k = \frac{\sigma_{kk}}{\sigma_{k-1,k-1}} \quad (2.44)$$

Como entrada, o algoritmo necessita dos  $2n - 1$  momentos generalizados e os termos de recursão,  $\{\alpha'_k, \beta'_k\}_0^{2n-2}$  (predeterminados inicialmente quando se define a base polinomial ortonormal utilizada para derivação dos momentos generalizados). Esse método será utilizado para inicialização dos métodos de solução da EBP desenvolvido nesse trabalho.

## 2.3 Regra de Quadratura de Gauss

Este último tópic torna funcional os métodos citados acima. Como a EBP se trata de uma equação integro-diferencial, a integração numérica é um tema presente nos seus métodos de solução (RAMKRISHNA [60]).

Antes de definir a quadratura gaussiana é importante apresentar o conceito de matriz de *Jacobi*. Sendo os polinômios ortonormais definidos por:

$$\pi_k(\theta) = \|\pi_k(\theta)\| \tilde{\pi}_k(\theta), \quad (2.45)$$

então a relação de recorrência se torna

$$\sqrt{\beta_{k+1}} \tilde{\pi}_{k+1}(\theta) = (\theta - \alpha_k) \tilde{\pi}_k(\theta) - \sqrt{\beta_k} \tilde{\pi}_{k-1}(\theta), \quad k = 0, 1, \dots \quad (2.46)$$

$$\tilde{\pi}_{-1}(\theta) = 0, \quad \tilde{\pi}_0(\theta) = \frac{1}{\sqrt{\beta_0}} \quad (2.47)$$

Rearranjando a equação (2.46),

$$\theta \tilde{\pi}_k(\theta) = \sqrt{\beta_{k+1}} \tilde{\pi}_{k+1}(\theta) + \alpha_k \tilde{\pi}_k(\theta) + \sqrt{\beta_k} \tilde{\pi}_{k-1}(\theta), \quad k = 0, 1, \dots, n-1 \quad (2.48)$$

Fazendo

$$\tilde{\pi}(\theta) = [\tilde{\pi}_0(\theta), \tilde{\pi}_1(\theta), \dots, \tilde{\pi}_{n-1}(\theta)]^T \quad (2.49)$$

e posteriormente, representando a equação (2.48) na forma de matriz,

$$\theta \tilde{\pi}(\theta) = \mathbf{J}_n(d\Lambda) \tilde{\pi}(\theta) + \sqrt{\beta_n} \tilde{\pi}_n(\theta) \mathbf{e}_n \quad (2.50)$$

$\mathbf{J}_n$  é definida como matriz de Jacobi e  $\mathbf{e}_n = [0, 0, \dots, 1]^T$ .

$$\mathbf{J}_n = \begin{bmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\beta_2} & \alpha_2 & \sqrt{\beta_3} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & \sqrt{\beta_n} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \sqrt{\beta_n} & \alpha_n \end{bmatrix}$$

Finalmente, depois de uma série de definições, pode-se conectar a teoria de polinômios ortonormais com a integração por quadratura Gaussiana.

- Regra de Quadratura de Gauss

Dada uma medida  $d\Lambda$ , para um número  $n \in \mathbb{N}$ , a regra de quadratura Gaussiana é escrita da forma:

$$\int_{\mathbb{R}} h(\theta) d\Lambda = \sum_{\alpha=1}^n \omega_{\alpha} h(m_{\alpha}) + \mathcal{R}_n^G(h) \quad (2.51)$$

onde  $\omega_{\alpha}$  e  $m_{\alpha}$  são, respectivamente, os pesos e abscissas da aproximação, e  $\mathcal{R}_n^G(h)$  é o erro associado à aproximação. As abscissas são os autovalores da matriz de Jacobi,  $\mathbf{J}_n$ , e  $\mathbf{V} = [\mathbf{y}_0, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_n]$  são seus os autovetores normalizados que carregam a informação dos pesos de quadratura. Conforme o teorema (2.3.1).

**Teorema 2.3.1** *Os zeros  $m_{\alpha}$ ,  $\alpha = 1, 2, \dots, n$ , são os autovalores da matriz de Jacobi, e os pesos,  $\omega_{\alpha}$  são representados por*

$$\omega_{\alpha} = \beta_0 y_{\alpha,1}^2 \quad (2.52)$$

onde  $\beta_0 = \int_{\mathbb{R}} d\Lambda$  e  $y_{\alpha,1}$  é a primeira componente do autovetor, relacionada com o autovalor  $m_{\alpha}$ .

### Definições

**Teorema 2.3.2** *Os zeros,  $m_{\alpha}$ , do polinômio  $\tilde{\pi}_n$  são os autovalores da matriz de Jacobi,  $\mathbf{J}_n(d\Lambda)$ , e  $\tilde{\pi}(m_{\alpha})$  são seus correspondentes autovetores.*

### Prova do Teorema 2.3.2

Substituindo  $\theta = m_{\alpha}$  na equação (2.50) obtem-se  $m_{\alpha} \tilde{\pi}(m_{\alpha}) = \mathbf{J}_n(d\Lambda) \tilde{\pi}(m_{\alpha})$ .

**Corolário 2.3.1** *Como consequência do teorema (2.3.2) temos que,*

$$\beta_0 y_{\alpha,1}^2 = \frac{1}{\sum_{k=0}^{n-1} [\tilde{\pi}_k(m_{\alpha})]^2}, \quad \alpha = 1, \dots, n \quad (2.53)$$

### Demonstração do Teorema 2.3.1

Seja  $\tilde{\pi}_k$  uma base de polinômios ortonormais relativo a medida  $d\Lambda$  e  $\tilde{\pi}(\theta) = [\tilde{\pi}_0(\theta), \tilde{\pi}_1(\theta), \dots, \tilde{\pi}_{n-1}(\theta)]^T$ . Então pelo teorema (2.3.2) e pelo corolário (2.3.1), tem-se:

$$\beta_0 y_{\alpha,1}^2 = \frac{1}{\sum_{k=0}^{n-1} [\tilde{\pi}_k(m_{\alpha})]^2}, \quad \alpha = 1, \dots, n \quad (2.54)$$

Fazendo  $h(\theta) = \tilde{\pi}_k(\theta)$ ,  $k \leq n - 1$ , na fórmula de Gauss (2.51), obtem-se por ortogonalidade,

$$\beta_0^{-\frac{1}{2}} \delta_{k,0} = \sum_{\alpha=1}^n \omega_{\alpha} \tilde{\pi}_k(m_{\alpha}) \quad (2.55)$$

em que  $\delta_{k,0}$  é o delta de Kronecker. Escrevendo a equação (2.55) na forma matricial, tem-se:

$$\mathbf{M}\mathbf{w} = \beta_0^{-\frac{1}{2}}\mathbf{e}_1 \quad (2.56)$$

onde  $\mathbf{M} = [\tilde{\pi}(m_1), \dots, \tilde{\pi}(m_n)]$  é a matriz de autovetores,  $\mathbf{w} = [\omega_1, \dots, \omega_n]^T$  é o vetor dos pesos da quadratura Gaussiana e  $\mathbf{e}_1 = [1, 0, \dots, 0]$ . Como as colunas de  $\mathbf{M}$  são mutualmente ortogonais,

$$\mathbf{M}^T\mathbf{M} = D_\pi, \quad D_\pi = \text{diag}(d_0, \dots, d_{n-1}), \quad d_{\alpha-1} = \sum_{k=0}^{n-1} [\tilde{\pi}_k(m_\alpha)]^2 \quad (2.57)$$

Multiplicando pela esquerda a equação (2.56) por  $\mathbf{M}^T$ ,

$$D_\pi\mathbf{w} = \beta_0^{-\frac{1}{2}}\mathbf{M}^T\mathbf{e}_1 = \beta_0^{-\frac{1}{2}}\beta_0^{\frac{1}{2}}\mathbf{e} \quad (2.58)$$

onde  $\mathbf{e} = [1, \dots, 1]^T$ . Por fim, temos que  $\mathbf{w} = D_\pi^{-1}\mathbf{e}$ , então,

$$\mathbf{w} = \frac{1}{\sum_{k=0}^{n-1} [\tilde{\pi}_k(m_\alpha)]^2}, \quad \alpha = 1, \dots, n \quad (2.59)$$

Segundo o corolário 2.3.1 e o teorema 2.3.2 podemos dizer que:

$$\omega_\alpha = \beta_0 y_{\alpha,1}^2 \quad (2.60)$$

A metodologia apresentada ao longo desse capítulo, foi utilizada para inicializar o método numérico proposto no trabalho. A inicialização deve ser feita com os momentos generalizados e seus coeficientes de recursão. Se os momentos generalizados não estiverem disponíveis, pode-se utilizar o algoritmo de *Chebyshev* com os momentos padrão e os coeficientes de recursão nulos, ou então, simplesmente converter os momentos padrões em generalizados<sup>6</sup>. Como já foi mencionado a última opção é a mais recomendada, portanto, sugere-se o uso do método de conversão disponível no apêndice A.

---

<sup>6</sup>Transformação descrita no apêndice A.

## Capítulo 3

# Teoria de Balanço Populacional

Em muitos problemas práticos, o comportamento de partículas é crucial para a análise do desempenho de equipamentos onde ocorrem escoamentos multifásicos polidispersos. Deste modo, torna-se necessário realizar estudos que caracterizem melhor o comportamento espacial e dinâmico de uma população de partículas. Para preencher essa lacuna (com custo computacional reduzido) surge em 1916 a teoria de balanço populacional (RAMKRISHNA [60]).

Balanço populacional, como o nome já diz, estuda a conservação da distribuição numérica em uma população de partículas. Matematicamente, as variáveis que afetam uma distribuição podem ser de dois tipos: variáveis externas e internas. As variáveis externas,  $\mathbf{x}$ ,  $\{\mathbf{x} \in \Omega_x\}$ , referem-se à localização espacial de cada partícula, ou seja, suas coordenadas no  $\mathfrak{R}^3$ . Enquanto que as variáveis internas,  $\mathbf{r}$ ,  $\{\mathbf{r} \in \Omega_r\}$ , referem-se às propriedades das partículas, tais como: diâmetro, área superficial, e outros (RAMKRISHNA [60]). A Figura 3.1 representa um escoamento gás-líquido e ilustra a diferenciação entre variável interna e externa.

Pode-se considerar que o desenvolvimento dessa teoria teve início no final do século XVIII, sendo a equação de Boltzmann a origem da primeira aparição da EBP (YEOH e TU [75]), embora tenha sido expressa em termos de uma distribuição de moléculas. Porém, sua formulação geral só foi desenvolvida em meados do século XIX. HULBURT e KATZ [26] foram os pioneiros a aplicar esse equacionamento a um problema de engenharia química.

A partir de então, a técnica começou a se difundir na engenharia química, sendo um marco importante para o surgimento de uma série de livros textos sobre balanço populacional aplicado a aero-colóides (PANDIS e SEINFELD [56], HIDY e BROCK [24], FRIEDLANDER [17]). Não obstante, toda a flexibilidade e capacidade da teoria só foi sedimentada como ferramenta básica a ser aplicada a processos de engenharia com o livro publicado por RAMKRISHNA [60].

Mesmo sendo uma teoria antiga, a implementação e a aplicação da mesma é recente. Ainda, existem muitas barreiras a serem ultrapassadas, como por exemplo:

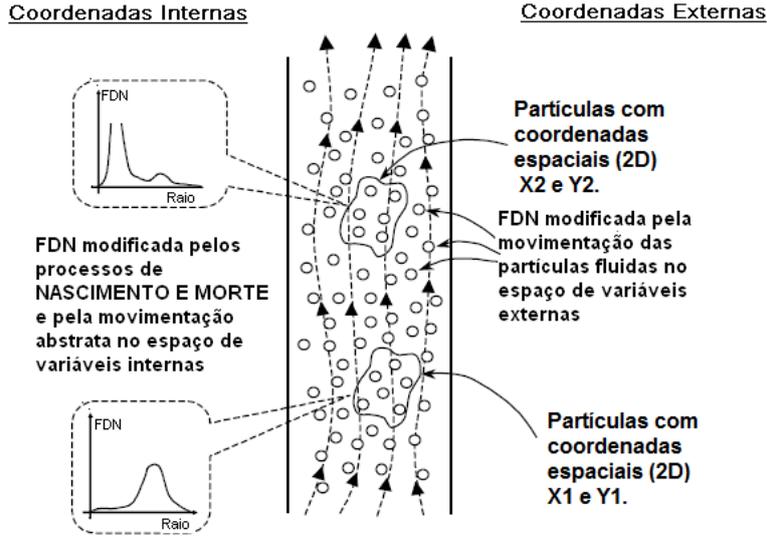


Figura 3.1: Exemplo ilustrativo dos tipos de variáveis interna, raio da partícula, e externas, coordenadas espaciais 2D (YEOH e TU [75]).

a modelagem dos fenômenos de quebra, nucleação, crescimento e agregação.

Neste capítulo serão apresentados os conceitos da teoria de balanço populacional, desde o equacionamento completo a suas principais simplificações e hipóteses, além de subseções descrevendo a modelagem dos fenômenos de quebra e agregação.

### 3.1 Equação de Balanço Populacional

Primeiramente, deve-se postular a existência da distribuição densidade numérica média de partículas,  $f(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)$ , no espaço de variáveis internas e externas, sob influência da fase contínua. Essa influência é agrupada num único vetor,  $\mathbf{Y} = \{Y_1, Y_2, \dots, Y_c\}$ , de dimensão  $c$ ,

$$E[n(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)] = f(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t), \quad (3.1)$$

$$\mathbf{x} \in \Omega_x, \quad \mathbf{r} \in \Omega_r$$

Na equação (3.1),  $f(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)$  é a expectativa de  $n$ , densidade numérica instantânea local, para o conjunto de realizações do processo, conforme o seu número de realizações tende ao infinito. Interessante frisar que essa função densidade numérica é suave, e permite ser diferenciada em qualquer variável quantas vezes for necessário, além de permitir calcular o número médio de partículas em qualquer região no espaço de variáveis de estado. Assim, o número total de partículas (médio),  $N_T$ ,

pode ser calculado pela equação (3.2).

$$N_T(t, \mathbf{Y}) = \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} d\mathbf{V}_{\mathbf{x}} \int_{\Omega_{\mathbf{r}}} f(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t) d\mathbf{V}_{\mathbf{r}} \quad (3.2)$$

onde  $d\mathbf{V}_{\mathbf{r}}$  e  $d\mathbf{V}_{\mathbf{x}}$  são volumes infinitesimais no espaço de coordenadas internas e externas, respectivamente. Da mesma forma, pode-se calcular a densidade numérica de partículas no espaço físico (número de partículas por unidade de volume físico):

$$N_x(\mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) = \int_{\Omega_{\mathbf{r}}} d\mathbf{V}_{\mathbf{r}} f(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t) \quad (3.3)$$

Outras formas de distribuição de densidade, podem ser definidas para uma população. Por exemplo, sendo  $v(\mathbf{r})$  o volume da partícula no espaço de variáveis internas  $\mathbf{r}$ , logo define-se  $v(\mathbf{r})f(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)$  como a distribuição densidade volumétrica. Desta forma, é possível escrever a fração volumétrica local e instantânea da fase dispersa por:

$$\gamma_{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) = \int_{\Omega_{\mathbf{r}}} v(\mathbf{r})f(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t) d\mathbf{V}_{\mathbf{r}} \quad (3.4)$$

Diferente da densidade numérica, as distribuições de densidade de propriedade da população são fisicamente mais relevantes para as aplicações práticas. Porém, representar a EBP baseada na densidade numérica é mais vantajoso, pois a mesma é facilmente transformada em um distribuição de densidade de propriedade a partir de propriedade extensiva da partícula como massa e volume.

As mudanças temporais das variáveis externas são definidas como velocidade no espaço físico, enquanto que as variáveis internas são definidas como uma movimentação abstrata da propriedade no espaço das variáveis internas. Por exemplo, a transferência de massa de um componente da fase contínua para particulada pode ser considerada uma movimentação no espaço de concentração. Assim, diz-se que  $\dot{\mathbf{R}}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, \mathbf{t})$  é a “velocidade” no espaço de variáveis internas e  $\dot{\mathbf{X}}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, \mathbf{t})$  é a velocidade no espaço físico.

Depois de definida as velocidades em ambos os espaços, agora é possível identificar o fluxo de partículas<sup>7</sup>. Portanto,  $f(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)\dot{\mathbf{R}}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, \mathbf{t})$  representa o fluxo de partículas no espaço de variáveis internas, e  $f(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)\dot{\mathbf{X}}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, \mathbf{t})$ , o fluxo no espaço físico.

Usando as definições acima, a equação de balanço populacional pode ser escrita

---

<sup>7</sup>Número de partículas transportadas por unidade de tempo por unidade de área normal a direção da velocidade.

como (RAMKRISHNA [60]):

$$\underbrace{\frac{\partial f(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)}{\partial t}}_{\text{Transiente}} = \underbrace{-\nabla_{\mathbf{x}} [\dot{\mathbf{X}}f(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)]}_{\text{Advectivo}} + \underbrace{\nabla_{\mathbf{x}} \cdot [\mathbf{D}_{\mathbf{x}} \cdot (\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{D}_{\mathbf{x}}^T f(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t))]}_{\text{Difusivo}} + \underbrace{H(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)}_{\text{Fonte}} \quad (3.5)$$

O primeiro termo representa o acúmulo de partículas no espaço das variáveis  $\Omega_{\mathbf{x}} \times \Omega_{\mathbf{r}}$ . Os segundo e terceiro termos representam o transporte convectivo e o dispersivo de partículas no espaço físico, respectivamente.

$\dot{\mathbf{X}}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)$  é taxa de variação da variável externa (velocidade no espaço físico),  $\mathbf{D}_{\mathbf{x}}$  é o coeficiente de difusão anisotrópico.  $H(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)$  é o termo fonte, que pode ser dividido entre a taxa de nucleação,  $J(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)$ , taxa de crescimento,  $G(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)$ , e as taxas líquidas de nascimento e morte,  $B(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)$  e  $D(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)$ , respectivamente, pelo fenômeno de agregação ( $a$ ) e de quebra ( $b$ ), conforme a equação 3.6.

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t) = B_a(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t) - D_a(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t) + B_b(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t) - D_b(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t) + J(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t) + G(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t) \quad (3.6)$$

O termo de crescimento  $G(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)$  é o divergente do fluxo das variáveis internas, podendo ser interpretado com o fluxo (difusivo e/ou convectivo) desta variável em seu respectivo estado. A equação geral para o termo de crescimento é dada por:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) = \underbrace{-\nabla_{\mathbf{r}} \cdot [\dot{\mathbf{R}}f(\mathbf{r}, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t)]}_{\text{Convectivo}} + \underbrace{\nabla_{\mathbf{r}} \cdot [\mathbf{D}_{\mathbf{r}} \cdot (\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{D}_{\mathbf{r}}^T f(\mathbf{r}, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t))]}_{\text{Difusivo}} \quad (3.7)$$

$\dot{\mathbf{R}}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)$  é taxa de variação da variável interna e  $\mathbf{D}_{\mathbf{r}}$  é o coeficiente de difusão anisotrópico no espaço de variáveis internas. Geralmente, esses termos de nucleação podem ser modelados como uma condição de fluxo no contorno  $\partial\Omega_{\mathbf{r}}$ , sendo assim retiradas da EBP.

Para modelar uma polidispersão, o conhecimento dos processos físicos associados aos termos fontes são de vital importância para o sucesso da modelagem. Nas próximas seções serão expostos detalhes sobre a modelagem dos termos de quebra e agregação.

## 3.2 Fenômeno de Agregação

Esta seção se preocupa em descrever o evento de agregação de duas partículas, como por exemplo, coalescência de bolhas em uma coluna de borbulhamento, ou até mesmo agregação de células em um processo biológico. No entanto, esta revisão se focará na agregação de partículas fluidas.

Numa dispersão, as partículas se movimentam e podem colidir continuamente uma com as outras. Contudo, nem toda colisão acarretará em agregação. É necessário que ocorram mais dois fenômenos: a drenagem e ruptura do filme gerado pelo fluido que envolve a partícula. Desta forma, a coalescência só ocorre quando esse três fenômenos acontecerem sequencialmente.

Para modelagem do processo de agregação define-se a frequência de agregação, que representa a fração de pares de partículas com estado  $(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}})$  e  $(\mathbf{x}', \mathbf{r}')$ , que sob o efeito da fase contínua,  $\mathbf{Y}$ , se agrega em um período de tempo entre  $t$  e  $t + dt$ .

$$a(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{r}, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t)dt \quad (3.8)$$

Podemos reconhecer que  $a(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{r}, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t)$  também é a probabilidade de um par de partículas de estado  $(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}})$  e  $(\mathbf{x}', \mathbf{r}')$  se agregar na unidade de tempo  $t$ . A figura 3.2 descreve a possibilidade da colisão não ser efetiva, ou em outras palavras, de duas partículas colidirem e não coalescerem. Portanto, para modelar a frequência de agregação, é necessário associá-la à frequência de colisão e à eficiência de agregação,

frequência de agregação = frequência de colisão x eficiência de agregação

$$a(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{r}, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) = \bar{w}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{r}, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t)\eta(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{r}, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) \quad (3.9)$$

Após destacar a frequência de agregação, pode-se definir os termos de nascimento e morte por agregação, dado o estado  $(\mathbf{x}, \mathbf{r})$  de uma nova partícula, formada da agregação de uma partícula de estado  $(\mathbf{x}', \mathbf{r}')$  com outra de estado  $[\tilde{\mathbf{x}}(\mathbf{x}', \mathbf{r}'|\mathbf{x}, \mathbf{r}), \mathbf{r}(\mathbf{x}', \mathbf{r}'|\mathbf{x}, \mathbf{r})]$ .

É necessário especificar a distribuição de densidade numérica,  $f_2(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{x}', \mathbf{r}')$ , de pares de partículas que colidem com estado  $(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}})$  e  $(\mathbf{x}', \mathbf{r}')$  no instante  $t$  por unidade de volumes dos espaços de estados. O termo fonte de nascimento por agregação,  $B_a$ , produz uma partícula com estado  $(\mathbf{x}, \mathbf{r})$ .

$$B_a(\mathbf{r}, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) = \frac{1}{\xi} \int_{\Omega_{\mathbf{x}'}} d\mathbf{V}_{\mathbf{x}'} \int_{\Omega_{\mathbf{r}'}} d\mathbf{V}_{\mathbf{r}'} a(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{r}', \mathbf{x}', \mathbf{Y}, t) f_2(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{x}', \mathbf{r}') \frac{\partial(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}})}{\partial(\mathbf{x}, \mathbf{r})} \quad (3.10)$$

onde  $\xi$  controla o número de vezes que um par idêntico de partículas foi computado na integração, assim, o fator  $\frac{1}{\xi}$  corrige possíveis erros de redundância. Sabendo que

$f_2(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{x}', \mathbf{r}')$  é dada por unidade de volume das coordenadas  $(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{x}', \mathbf{r}')$ , deve-se fazer a transformação de coordenadas de partículas que colidem com estado  $(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}})$  para a partícula gerada com estado  $(\mathbf{x}, \mathbf{r})$ . Por isso, a existência da matriz Jacobiana  $\frac{\partial(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}})}{\partial(\mathbf{x}, \mathbf{r})}$ <sup>8</sup>, que é dada por:

$$\frac{\partial(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}})}{\partial(\mathbf{x}, \mathbf{r})} = \begin{pmatrix} \frac{\partial\tilde{x}_1}{\partial x_1} & \frac{\partial\tilde{x}_1}{\partial x_2} & \frac{\partial\tilde{x}_1}{\partial x_3} & \frac{\partial\tilde{x}_1}{\partial r_1} & \cdots & \frac{\partial\tilde{x}_1}{\partial r_n} \\ \frac{\partial\tilde{x}_2}{\partial x_1} & \frac{\partial\tilde{x}_2}{\partial x_2} & \frac{\partial\tilde{x}_2}{\partial x_3} & \frac{\partial\tilde{x}_2}{\partial r_1} & \cdots & \frac{\partial\tilde{x}_2}{\partial r_n} \\ \frac{\partial\tilde{x}_3}{\partial x_1} & \frac{\partial\tilde{x}_3}{\partial x_2} & \frac{\partial\tilde{x}_3}{\partial x_3} & \frac{\partial\tilde{x}_3}{\partial r_1} & \cdots & \frac{\partial\tilde{x}_3}{\partial r_n} \\ \frac{\partial\tilde{r}_1}{\partial x_1} & \frac{\partial\tilde{r}_1}{\partial x_2} & \frac{\partial\tilde{r}_1}{\partial x_3} & \frac{\partial\tilde{r}_1}{\partial r_1} & \cdots & \frac{\partial\tilde{r}_1}{\partial r_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \frac{\partial\tilde{r}_n}{\partial x_1} & \frac{\partial\tilde{r}_n}{\partial x_2} & \frac{\partial\tilde{r}_n}{\partial x_3} & \frac{\partial\tilde{r}_n}{\partial r_1} & \cdots & \frac{\partial\tilde{r}_n}{\partial r_n} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

O termo fonte de morte por agregação é descrito por:

$$D_a(\mathbf{r}, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) = \int_{\Omega_{\mathbf{x}'}} d\mathbf{V}_{\mathbf{x}'} \int_{\Omega_{\mathbf{r}'}} d\mathbf{V}_{\mathbf{r}'} a(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{r}', \mathbf{x}', \mathbf{Y}, t) f_2(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{x}', \mathbf{r}') \quad (3.12)$$

Infelizmente, o termo de agregação da EBP não está fechado, pois  $f_2(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{x}', \mathbf{r}', t)$  ainda é desconhecido. Geralmente, nas análises que usam balanço populacional, pode-se fazer a seguinte aproximação:

$$f_2(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{x}', \mathbf{r}', t) = f(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}}, t) f(\mathbf{x}', \mathbf{r}', t) \quad (3.13)$$

Essa suposição implica que não existe correlação estatística entre as partículas com estado  $(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{r}})$  e  $(\mathbf{x}, \mathbf{r})$  no instante  $t$ . Esta suposição é plausível quando se trata de uma ampla população de partículas (RAMKRISHNA [60]).

### 3.3 Fenômeno de Quebra

O processo de quebra é a ruptura de uma partícula dispersa em pelo menos outra duas (ARAÚJO [2]). A quebra pode ser ocasionada da colisão da partícula contra uma superfície sólida, pela interação da partícula com campos cisalhantes, ou pela ação da turbulência. O primeiro mecanismo é mais evidente em partículas sólidas, onde a partícula é lascada ou atritada com a superfície de outra partícula, parede ou impelidor. O segundo mecanismo é ocasionado pela interação da partícula com

<sup>8</sup>Importante não confundir matriz de Jacobi com matriz Jacobiana.

a fase contínua. Neste caso, o impacto não é mais com uma superfície rígida, mas sim com turbilhões (*eddies*). De fato, o contato da fase dispersa com o campo cisalhante do meio contínuo pode provocar oscilações de forma na partícula fluida pela ação das forças inerciais e coesivas, e por consequência, promover a quebra (LUO e SVENDSEN [43]). Isso só ocorre quando a energia cinética turbulenta fornece energia superficial suficiente para fragmentar a partícula. Deste modo, os modelos de quebra se apoiam em três teorias básicas: colisão entre partículas e superfície rígida, colisão entre partículas fluidas e *eddies* ou ruptura devido à deformação da partícula por influência fase contínua.

Se o processo de quebra de partículas ocorrer independentemente uma da outra, pode-se definir uma taxa específica de quebra,  $b(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)$ , interpretada como a fração de partículas com estado  $(\mathbf{x}, \mathbf{r})$  que quebram por unidade de tempo, no instante  $t$ , em um ambiente descrito por  $\mathbf{Y}$ . Então o número médio de partículas “perdidas” por unidade de tempo é dado por:

$$D_b(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t) = b(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t)f(\mathbf{x}, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, t) \quad (3.14)$$

Antes de caracterizar o termo fonte de nascimento por quebra, deve-se preocupar com as seguintes propriedades:

- $\nu(\mathbf{x}', \mathbf{r}', \mathbf{Y}, t)$  é número médio de partículas formado pela quebra da partícula com estado  $(\mathbf{x}', \mathbf{r}')$  ( $\nu \geq 2$ ).
- $P(\mathbf{x}, \mathbf{r}|\mathbf{x}', \mathbf{r}', \mathbf{Y}, t)$  é a função de densidade de probabilidade das partículas formadas pela quebra de uma partícula de estado  $(\mathbf{x}', \mathbf{r}')$  em um ambiente  $\mathbf{Y}$  no instante  $t$ , de vir a possuir estado  $(\mathbf{x}, \mathbf{r})$ .

Assim o termo de nascimento por quebra é dado por (RAMKRISHNA [60]):

$$B_b(\mathbf{r}, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) = \int_{\Omega_{\mathbf{x}'}} \int_{\Omega_{\mathbf{r}'}} \nu(\mathbf{x}', \mathbf{r}', \mathbf{Y}, t) P(\mathbf{x}, \mathbf{r}|\mathbf{x}', \mathbf{r}', \mathbf{Y}, t) b(\mathbf{x}', \mathbf{r}', \mathbf{Y}, t) f(\mathbf{x}', \mathbf{r}', \mathbf{Y}, t) d\mathbf{V}_{\mathbf{r}'} d\mathbf{V}_{\mathbf{x}'} \quad (3.15)$$

### 3.4 Simplificações e Hipóteses Usuais

Por conta da complexidade de modelar os termos da EBP é vital para sua solução considerar hipóteses que simplifiquem o seu equacionamento original sem perder as características físicas intrínsecas a cada problema. As hipóteses físicas e de modelagem apresentadas nesta seção são amplamente usadas na solução da EBP e no desenvolvimento de funções de quebra e agregação (RAMKRISHNA [60]).

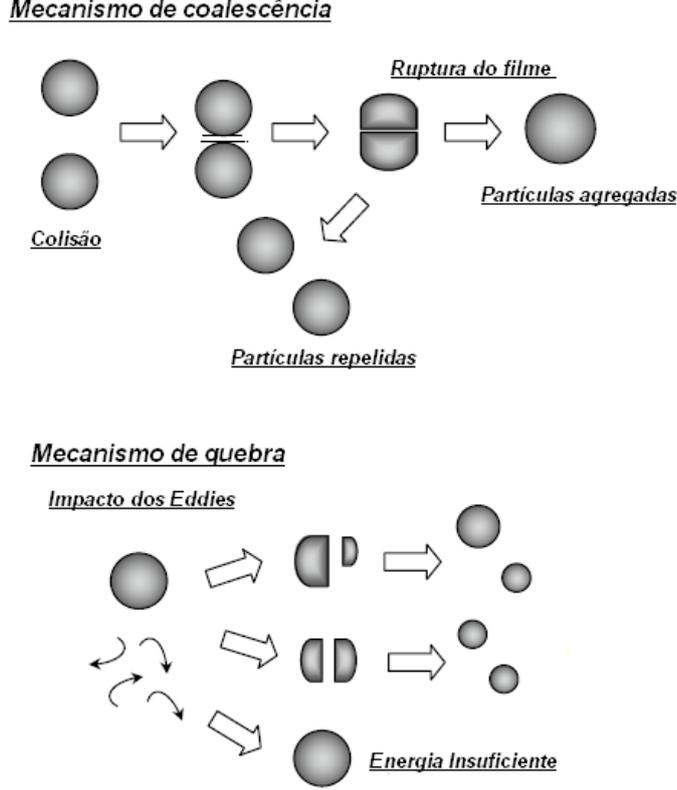


Figura 3.2: Mecanismos de quebra e agregação (YEOH e TU [75]).

A morte e o nascimento por agregação envolvem pelo menos três posições, duas partículas com posições  $\mathbf{x}'$  e  $\tilde{\mathbf{x}}$  e uma gerada com posição  $\mathbf{x}$ . Contudo, para problemas práticos de engenharia, formular a EBP levando em conta estas três posições não é necessário. Então, é comum considerar que  $\mathbf{x}' \approx \tilde{\mathbf{x}} \approx \mathbf{x}$ . Em outras palavras, a agregação é local.

Assumir que as três posições são próximas resulta nas equações 3.16 e 3.17.

$$B_a(\mathbf{r}, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) = \frac{1}{\xi} \int_{\Omega_{\mathbf{r}'}} d\mathbf{V}_{\mathbf{r}'} a(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{r}', \mathbf{Y}) f(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{r}}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{r}', t) \frac{\partial(\tilde{\mathbf{r}})}{\partial(\mathbf{r})} \quad (3.16)$$

$$D_a(\mathbf{r}, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) = \int_{\Omega_{\mathbf{r}'}} a(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{r}', \mathbf{Y}) f(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{r}}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{r}', t) d\mathbf{V}_{\mathbf{r}'} \quad (3.17)$$

Considerando o problema multivariado, a matriz jacobiana de transformação de coordenada se transforma em:

$$\frac{\partial(\tilde{\mathbf{r}})}{\partial(\mathbf{r})} = \begin{vmatrix} \frac{\partial \tilde{r}_1}{\partial r_1} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \tilde{r}_1}{\partial r_n} \\ \frac{\partial \tilde{r}_2}{\partial r_1} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \tilde{r}_2}{\partial r_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial \tilde{r}_n}{\partial r_1} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \tilde{r}_n}{\partial r_n} \end{vmatrix}$$

Se o problema for monovariado e a propriedade interna for aditiva na agregação, o jacobiano de transformação se torna unitário. O exemplo abaixo mostra o jacobiano para massa  $m$  de partícula.

$$m' + \tilde{m} = m, \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial(\tilde{m})}{\partial(m)} = 1 \quad (3.19)$$

Hipótese semelhante pode ser estendida para o fenômeno de quebra. O processo de quebra ocorre numa escala de tempo muito menor que a evolução da população. Desta forma, a posição das partículas mãe e filha podem ser consideradas iguais. Assim, o termo de nascimento por quebra se torna:

$$B_b(\mathbf{r}, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) = \int_{\omega_{\mathbf{r}'}} \nu(\mathbf{x}, \mathbf{r}', \mathbf{Y}, t) P(\mathbf{x}, \mathbf{r} | \mathbf{r}', \mathbf{Y}, t) b(\mathbf{x}, \mathbf{r}', \mathbf{Y}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{r}', \mathbf{Y}, t) d\mathbf{V}_{\mathbf{r}'} \quad (3.20)$$

A equação de balanço populacional escrita em termos de uma distribuição mássica, com quebra binária, levando em conta as simplificações citadas nessa seção, está ilustrada na equação 3.21.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f(m, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t)}{\partial t} + \nabla_x [\dot{\mathbf{X}} f(m, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t)] - \nabla_x \cdot (D_x \nabla_x [f(m, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t)]) \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{m'} a(\tilde{m}, m, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) f(m', \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) f(\tilde{m}, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) dm' \\ & \quad - \int_0^\infty a(m', m, \mathbf{x}, \mathbf{Y}) f(m, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) f(m', \mathbf{x}, \mathbf{Y}) dm' \\ & + 2 \int_m^\infty b(m', \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) P(m | m', \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) f(m', \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) dm' \\ & \quad - b(m, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) f(m, \mathbf{x}, \mathbf{Y}, t) \end{aligned} \quad (3.21)$$

# Capítulo 4

## Métodos de Solução da Equação de Balanço Populacional

A EBP é uma equação integro-diferencial com dependência temporal e espacial (coordenadas internas e externas) que quase nunca pode ser resolvida analiticamente. Sua solução analítica só é viável em casos muito simples, que geralmente não são aplicáveis a situações reais (PATIL e ANDREWS [57], LAGE [33], MCCOY e MADRAS [51], LIOU *et al.* [39]). No entanto, os métodos de solução analítica não são dispensáveis, visto que podem ser utilizados para testar e validar novas técnicas de solução numéricas.

Entre as técnicas analíticas mais comuns estão o método de aproximações sucessivas, o método das características, o método das gerações sucessivas e o método de transformada de Laplace. Já entre os métodos numéricos, os mais comuns são os métodos estocásticos (Monte Carlo), o método das classes, o método dos resíduos ponderados, o método dos momentos e os métodos híbridos (incluindo suas variantes). Contudo, o método das classes, o QMOM (MCGRAW [52]), o DQMOM (MARCHISIO e FOX [46]) e o PPDC (BOVE *et al.* [5]) são mais relevantes para o acoplamento PB-CFD, por isso tiveram mais espaço nesta revisão. Apesar do PPDC ser considerado um método híbrido, este será explicitado logo após o método das classes, já que o mesmo deu origem ao PPDC.

### 4.1 Métodos Estocásticos

Esses métodos são baseados em realizações artificiais do comportamento de um sistema particulado. Desta forma é possível simular um sistema disperso, a partir da geração de números aleatórios para o cálculo das funções de densidade de probabilidade de um dado sistema (RAMKRISHNA [60]). Portanto, o equacionamento

integro-diferencial, que é determinístico<sup>9</sup>, é substituído pela simulação estocástica do sistema.

A simulação estocástica de um sistema particulado foi introduzida por KENDALL [29] em um processo simples de quebra e agregação. Todavia, sua generalização só foi realizada em 1977 por SHAH *et al.* [66]. Neste caso, a taxas de quebra e agregação eram proporcionais ao número de partículas do sistema e função do tamanho das partículas. Posteriormente, DAS [10] criou uma metodologia considerada semi-analítica para processo de quebra utilizando o método de Monte Carlo. O autor sugere que, na ausência de solução analítica, seu método pode ser usado sem perda de generalidade para problemas de quebra pura. GOODSON e KRAFT [21] avaliaram dois algoritmos estocásticos, o *Direct Simulation Algorithm* de EIBECK e WAGNER [14] e *Mass Flow Algorithm* desenvolvido por DEBRY *et al.* [11], frente a problema com quebra e coalescência.

IMMANUEL e DOYLE [27] simularam a dinâmica de uma população utilizando o método de Monte Carlo com três variáveis internas, avaliando a influência dos diferentes termos de agregação. Concluíram que o método é eficiente para problemas multi-dimensionais (multivariado). ZHAO *et al.* [77] compararam quatro métodos mais usuais de simulação estocástica: *Constant number Monte Carlo* (CNMC), *Stepwise constant volume Monte Carlo* (SCVMC), *Direct simulation Monte Carlo* (DSMC) e *Multi-Monte Carlo* (MMC). Concluíram que os métodos CNVMC e CNMC são os mais eficientes mas a escolha de um deles depende do comportamento da distribuição de partículas. Se o número de partículas aumentar com o tempo o método CNVC é o mais indicado, mas se a concentração diminuir o DSMC é o recomendado. Apesar dos métodos estocásticos serem extremamente flexíveis, é necessário um número muito alto de realizações para simular uma população, fato que eleva muito o custo computacional. Ademais, incorporar esses métodos a simulações CFD não é uma tarefa simples (YEOH e TU [75]).

## 4.2 Método das Classes

O método das classes (MC) se fundamenta em um processo de discretização da distribuição em um número finito de classes (geralmente tamanho de partícula), sendo que se adota um valor constante de variável interna em cada uma dessas classes. Assim, a equação integro-diferencial se transforma em um sistema de equações diferenciais com solução bem estabelecida. KUMAR e RAMKRISHNA [31] propuseram o MC internamente consistente com respeito a dois momentos da distribuição. Para um método ser internamente consistente, é necessário que a discretização da EBP submetida a um operador matemático seja igual à forma discreta desse operador

---

<sup>9</sup>Cálculo da expectativa da função distribuição.

aplicado à forma integral da EBP (RAMKRISHNA [60]). Essa técnica é eficiente, rápida e acurada, fato que torna o MC apropriado para o acompanhamento PB-CFD. No MC, a variável interna, neste caso tamanho de partícula, é subdividida em  $i$  subintervalos ( $P_n = \{r_1 = 0, r_2, \dots, r_{n+1} = \infty\}$ ), sendo  $N_i$  o número de partículas no subintervalo  $i$ ,

$$N_i(\mathbf{x}, t) = \int_{r_i}^{r_{i+1}} f(\mathbf{x}, r, t) dr \quad (4.1)$$

BLECK [4] sugeriu que essa discretização na variável interna seguisse uma progressão geométrica,  $r_{i+1} = 2r_i$ . No entanto, essa abordagem ainda não era internamente consistente. HOUNSLOW *et al.* [25] estudaram a coalescência de gotas em tanques agitados usando o volume de partícula como variável interna seguindo a malha geométrica proposta por BLECK [4]. O autor desenvolveu um equacionamento conservativo em massa e número para problemas de agregação pura, como ilustra a equação (4.2), onde  $a_{i,j}$  é a frequência de agregação aplicada a partículas nos nós  $i$  e  $j$  da discretização e  $i_{max}$  é o número de classes da malha discretizada.

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_i(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = & N_{i-1} \sum_{j=1}^{i-2} 2^{j-i+1} a_{i-1,j} N_j + \frac{1}{2} a_{i-1,i-1} N_{i-1}^2 \\ & - N_i \sum_{j=1}^{i-1} 2^{j-i} a_{i,j} N_j - N_i \sum_{j=1}^{i_{max}} a_{i,j} N_j \end{aligned} \quad (4.2)$$

A técnica proposta por HOUNSLOW *et al.* [25] tem duas desvantagens: é inflexível e não é genérica. LISTER *et al.* [40] modificaram o método de HOUNSLOW *et al.* [25] dando maior flexibilidade à discretização, estendendo a progressão geométrica ( $r_{i+1} = 2^{1/q} r_i$ ) permitindo o refinamento da malha utilizando um fator  $q$ .

A partir de então, surgiu uma série de trabalhos de extensão do método HOUNSLOW *et al.* [25]. Contudo, o método de KUMAR e RAMKRISHNA [31] foi o método que realmente superou o problema de inflexibilidade de malha. Essa abordagem concentra todas as informações de um intervalo  $I_i = [r_i, r_{i+1}]$  em torno de um único ponto, denominado pivô ou abscissa ( $m_i$ ), tal que  $r_i < m_i < r_{i+1}$ . Todavia, essa técnica provoca inconsistência física, pois os termos de agregação e quebra podem gerar partículas muito diferentes dos pivôs que são fixos, criando assim problemas de acurácia. Para superar esse problema é necessário refinamento de malha, o que ocasiona aumento do custo computacional.

Representando a função densidade numérica em um número finito de funções

delta de Dirac, tem-se:

$$f(\mathbf{x}, r, t) \approx \sum_{i=1}^n N_i \delta(r - m_i) \quad (4.3)$$

As equações (4.4), (4.5) e (4.6) descrevem o MC dado por KUMAR e RAMKRISHNA [31] com pivô fixo e conservação dos momentos de ordem zero e um, onde  $\delta_{j,k}^*$  representa o delta de Kronecker,

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_i(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = & \sum_{m_{i-1} \leq m_j + m_k \leq m_{i+1}}^{j \geq k} \left[ 1 - \frac{1}{2} \delta_{j,k}^* \right] \eta_i a(m_j, m_k) N_j N_k \\ & - N_i \sum_k^{i_{max}} a(m_i, m_k) N_k + \sum_{j \geq k}^{i_{max}} \kappa_{i,k} b(m_i) N_j - b(m_i) N_i \end{aligned} \quad (4.4)$$

em que,

$$\eta_i = \begin{cases} \frac{m_{i+1} - (m_j + m_k)}{m_{i+1} - m_i} & \text{se } m_i \leq m_j + m_k \leq m_{i+1} \\ \frac{(m_j + m_k) - m_{i-1}}{m_i - m_{i-1}} & \text{se } m_{i-1} \leq m_j + m_k \leq m_i \end{cases} \quad (4.5)$$

e

$$\kappa_{i,k} = \int_{m_i}^{m_{i+1}} \frac{m_{i+1} - r}{m_{i+1} - m_i} \bar{P}(r|m_k) dm + \int_{m_{i-1}}^{m_i} \frac{r - m_{i-1}}{m_i - m_{i-1}} \bar{P}(r|m_k) dm \quad (4.6)$$

Para driblar a dificuldade de inconsistência física, KUMAR e RAMKRISHNA [32] alteraram o método do pivô fixo. Desenvolveram a técnica do pivô móvel que permite a flexibilização dos pivôs de acordo com os efeitos de quebra e agregação, ou seja, as abscissas respeitam a dinâmica da distribuição. O novo equacionamento proposto por KUMAR e RAMKRISHNA [32] está apresentado abaixo.

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_i(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = & \sum_{r_i \leq m_j + m_k \leq r_{i+1}}^{j \geq k} \left[ 1 - \frac{1}{2} \delta_{j,k}^* \right] a(m_j, m_k) N_j N_k \\ & - N_i \sum_k^{i_{max}} a(m_i, m_k) N_k + \sum_{j \geq k}^{i_{max}} b(m_i) N_j B_{i,j}^* - b(m_i) N_i \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial m_i(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = & \frac{1}{N_i} \sum_{r_i \leq m_j + m_k \leq r_{i+1}}^{j \geq k} \left[ 1 - \frac{1}{2} \delta_{j,k}^* \right] [(m_j + m_k) - m_i] a(m_j, m_k) N_j N_k \\ & - \frac{1}{N_i} \sum_{j \geq i}^{i_{max}} b(m_i) N_j [B_{i,j}^{(r)} - m_i B_{i,j}^*] \end{aligned} \quad (4.8)$$

onde,

$$B_{i,j}^{(*)} = \int_{r_i}^{r_{i+1}} \bar{P}(r|m_j) dr \quad (4.9)$$

$$B_{i,j}^{(r)} = \int_{r_i}^{r_{i+1}} r \bar{P}(r|m_j) dr \quad (4.10)$$

NOPENS *et al.* [55] testaram os métodos com pivô fixo e pivô móvel, avaliando a velocidade de processamento dos métodos. A conclusão dos autores foi que o método de pivô fixo atinge mais rapidamente o estado estacionário, enquanto que o de pivô móvel é mais lento, apresentando maior custo computacional. No entanto, os resultados obtidos não são confiáveis, visto que estes autores não confrontaram seus resultados com a solução analítica.

O MC com pivô fixo foi primeiramente desenvolvido para distribuições monovariadas. VALE e MCKENNA [71] e ALEXOPOULOS e KIPARISSIDES [1] estenderam essa metodologia de uma dimensão para  $n$  dimensões. Quando MC é expandido para  $n$  dimensões, é necessário que o método seja internamente consistente com  $2^n$  momentos. CHAKRABORTY e KUMAR [6] desenvolveram uma variação do MC usando abscissas fixas denominado *Minimal Internal Consistency MC*, que para  $n$  variáveis internas apenas  $n + 1$  momentos devem ser preservados. A estratégia proposta foi utilizar malhas triangulares para problemas 2d, ao invés de quadradas, e malhas tetraédricas ao invés de hexa-estruturadas.

Sem dúvida o método MC é promissor em aplicações de CFD. No entanto, para que o MC tenha solução precisa são necessárias um número excessivo de classes, fato que aumenta significativamente o custo computacional.

### 4.3 PPDC

O método PPDC, *Parallel Parent Daughter Classes*, desenvolvido por BOVE *et al.* [5] consiste em dividir a discretização da EBP em várias malhas para as partículas. Essa metodologia derivada do MC decompõe os operadores de discretização de acordo com os efeitos de nascimento e morte. BOVE *et al.* [5] expandiram a função densidade numérica em um número finito de funções delta como o MC. No entanto, dividiu as malhas em três tipos. O primeiro tipo representa uma única malha para classes de partículas mãe, o segundo refere-se às  $M$  malhas usadas para as partículas filhas geradas por quebra e o terceiro, às  $M(M + 1)/2$  malhas para as classes filha geradas por agregação. Essas malhas são paralelas no espaço de variáveis internas. Desta forma, é possível que cada um dos processos possa ser resolvido separadamente e posteriormente sobrepostos. Os autores discretizaram o termo transiente por Euler explícito e obtiveram as equações (4.11), (4.12) e (4.13).

$$\frac{N_i(t^{n+1}) - N_i(t^n)}{\Delta t} = -N_i(t^n) \sum_{j=0}^M a(m_i, m_j) N_j(t^n) - b(m_i) N_i(t^n),$$

$$i = 1, 2, \dots, M \quad (4.11)$$

$$\frac{A_{i,j}(t^{n+1}) - A_{i,j}(t^n)}{\Delta t} = (1 - \frac{1}{2}\delta_{i,j}) a(m_i, m_j) N_i(t^n),$$

$$i, j = 1, 2, \dots, M, \quad j \geq i \quad (4.12)$$

$$\frac{B_k^{(i)}(t^{n+1}) - B_k^{(i)}(t^n)}{\Delta t} = \nu_i b(m_i) N_i(t^n) \int_{r_k}^{r_{k+1}} P(r|m_i) dm,$$

$$i = 1, 2, \dots, M, \quad k = 1, \dots, NB(i) \quad (4.13)$$

onde  $N_i$ ,  $A_{i,j}$ ,  $B_k^{(i)}$  são respectivamente os pesos que representam as densidades numéricas das partículas mãe  $i$ , filhas  $ij$  geradas por agregação de mães  $i$  e  $j$ , e para partículas  $k$  geradas por quebra de uma partícula mãe  $i$ . Em seguida, sobrepõe-se as informações de cada uma das três decomposições.

$$f_E(r, t^n) \approx \sum_{i=1}^M N_i(t^{n+1}) \delta(r - m_i) + \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M A_{i,j}(t^{n+1}) \delta(r - y_{i,j})$$

$$+ \sum_{i=1}^M \sum_{k=1}^{NB(i)} B_k^{(i)}(t^{n+1}) \delta(r - z_k^{(i)}) \quad (4.14)$$

em que,  $m_i$ ,  $y_{ij}$  e  $z_k^{(i)}$  são os pivôs das partículas mãe, das filhas geradas por agregação e por quebra, respectivamente. Na próxima etapa, deve-se recharacterizar as novas partículas mães. BOVE *et al.* [5] recomendaram o uso dos momentos de  $f_E$  obtidos a partir da equação (4.14) para obter a quadratura Gaussiana empregando o APD proposto por GORDON [22]. Em BOVE *et al.* [5], a técnica PPDC foi validada frente a solução analítica proposta por SCOTT [64], a qual só leva em consideração os efeitos de agregação. Foi também confrontado com a solução analítica proposta por MCCOY e MADRAS [51]. Além de comparar casos com solução analítica, BOVE *et al.* [5] confrontaram seu método com o método das classes com pivôs fixos de KUMAR e RAMKRISHNA [31]. Para os casos com solução analítica, o PPDC se mostrou concordante, mesmo com um número pequeno de classes. Contudo, para o caso simulado por KUMAR e RAMKRISHNA [32], os resultados foram divergentes.

## 4.4 Método dos Resíduos Ponderados

O método dos resíduos ponderados (MRP) é uma técnica geral de solução de equações diferenciais parciais. A idéia dessa abordagem é fazer com que uma função aproxime da melhor forma possível a solução procurada, minimizando os resíduos da equação que se almeja resolver. A solução é definida pela expansão funcional da equação em coeficientes e funções base conhecidas. Os coeficientes da expansão são obtidos a partir da minimização dos resíduos, que formam sistemas de equações algébricas ou diferenciais ordinárias. Os variados MRP diferem entre si basicamente no uso de funções locais ou globais, ou pela forma com que os resíduos são minimizados (PINTO e LAGE [58]). Geralmente, técnicas de natureza local requerem um grande número de pontos de discretização. Isto leva a um número muito grande de equações algébricas, mas é um método simples e pode ser discretizado facilmente, além de ser eficiente para problemas dinâmicos. Em comparação, os métodos de natureza global tem derivação mais complexa e são geralmente aplicados a problemas estacionários. Escolhas para funções peso incluem as funções delta de Dirac, caracterizando os métodos de colocação, ou a função peso como a própria base da expansão funcional, caracterizando o método de Galerkin.

GELBARD e SEINFELD [20] utilizaram a técnica de elementos finitos para solução da EBP. Incorporaram polinômios cúbicos para o método de colocação ortogonal. Em seguida, EYRE *et al.* [15] resolveram o mesmo problema com o método de colocação, só que a função base utilizada foi *B-spline*. CHEN *et al.* [7] desenvolveram o método wavelet-Galerkin para resolver a EBP monovariada em termos de tamanhos de partículas. NICMAINS e HOUNSLOW [54] aplicaram elementos finitos para resolver a EBP estacionária e concluíram que essa metodologia é muito sensível ao refino de malha.

LIU e CAMERON [41] propuseram resolver a EBP dinamicamente utilizando como base funções wavelet para tratar um problema com crescimento, nucleação e agregação. MAHONEY e RAMKRISHNA [44] propuseram o uso do método Galerkin em elementos finitos para sistemas com precipitação e verificaram dificuldades associadas a descontinuidades no integrando de quebra e agregação. RIGOPOULOS e JONES [62] resolveram a EBP dinâmica unidimensional usando colocação ortogonal com elementos finitos.

DORAO e JAKOBSEN [12] compararam as formulações MOM-MWR (MOM-MRP) e QMOM<sup>10</sup> para um problema de quebra pura com domínio limitado ( $[0,1]$ ). O MOM-MWR consiste em utilizar monômios como função teste,  $\pi_i = m^{i-1}$ , com  $i = 1, \dots, n$ . Expressando a função densidade numérica como a combinação linear dessas funções teste, onde  $c_i$  são os coeficientes da expansão, que serão avançados

---

<sup>10</sup>Será descrito na seção (4.6).

no tempo, chega-se a:

$$f(\mathbf{x}, m, t) = \sum_{i=1}^n c_i(t) \pi_i(m) \quad (4.15)$$

DORAO e JAKOBSEN [12] desenvolveram aplicações do método dos mínimos quadrados à solução da EBP. O mesmo consiste em minimizar o quadrado do resíduo em um domínio computacional. Eles resolveram equações integro-diferenciais em um problema de quebra pura. Neste trabalho, compararam problemas transiente e estacionário frente as suas respectivas soluções analíticas, e verificaram que o método tem ótimas características, como alta taxa de convergência e controle da acurácia pelo número de coeficientes da expansão funcional. Eles não só compararam os métodos MOM-MWR e QMOM, mas também destacaram que esse métodos são idênticos, fato que é errôneo segundo LAGE [35].

ZHU *et al.* [78] testaram uma abordagem semelhante, contudo para um problema com agregação pura, e propuseram um procedimento iterativo que combina o método de Picard e Newton para reduzir a sensibilidade do chute inicial e acelerar a taxa de convergência. DORAO e JAKOBSEN [13] utilizaram o método dos mínimos quadrados com elementos finitos com malha adaptativa para modelar um reator químico cilíndrico unidimensional. O método *hp-adaptive* de adaptação de malha foi usado com sucesso para minimizar o erro associado ao refino em elementos.

## 4.5 Método dos Momentos

Esse método faz uso dos momentos de distribuição para representar propriedades de um sistema particulado. Desta maneira, as propriedades relevantes da distribuição numérica são então calculadas a partir do conjunto de momentos de baixa ordem, uma vez que são suficientes para computar as propriedades físicas de uma dispersão (FRIEDLANDER [17]). O método dos momentos (MOM) foi introduzido por HULBURT e KATZ [26] e, na época, era considerada a mais promissora técnica de solução da EBP (YEOH e TU [75]). A idéia básica do método é transformar a EBP em termos dos momentos que darão importantes informações estatísticas da distribuição. O momento de ordem zero representa a densidade numérica da população e para massa como variável interna, o momento de primeira ordem é densidade mássica da população e os momentos fracionais, como os de  $k = \frac{1}{3}$  e  $k = \frac{2}{3}$ , fornecem as informações associadas a diâmetro médio e área superficial média, respectivamente.

A principal vantagem do MOM está na sua simplicidade de implementação e baixo custo computacional, que condensa as informações da distribuição em um pequeno grupo de momentos. Além disso, o MOM não sofre influência dos erros de truncamento de aproximação da FDN. Contudo, este método não tem uma forma geral fechada pois, para muitos casos, a equação referente ao momento  $\mu_k$  envolve

momentos de ordem superior, surgindo assim um problema de fechamento (RAMKRISHNA [60]). BARRET [3] idealizaram uma forma funcional para os momentos e aplicaram para um caso de agregação com condensação de partículas. Assumiram que os momentos podiam ser expressos como a exponencial de um polinômio de ordem  $p$  em  $k$ , ou seja,  $\ln(\mu_k) = c_0 + c_1 k^1 + \dots + c_n k^n$ . Seus coeficientes ( $c_k$ ) são calculados ao resolver  $p + 1$  equações diferenciais numericamente. Uma limitação desse método está na dificuldade de determinar momentos de ordem fracionada. Alguns autores (MARKATOU *et al.* [50], FRENKLACH e WANG [16]) desenvolveram uma variação do MOM utilizando funções de interpolação (MOMIC) para obter os momentos de ordem fracionada. Infelizmente, a necessidade de fechamento é uma restrição severa deste método e é o motivo pelo qual o mesmo não ganhou força junto a comunidade acadêmica.

## 4.6 Métodos Híbridos

Partindo da idéia do método dos momentos, uma série de métodos híbridos foi desenvolvida. Baseado no conceito do MOM, MCGRAW [52] propôs o método intitulado *Quadrature Method of Moments* (QMOM), onde as equações de evolução de momentos são aproximadas por uma quadratura tipo Gaussiana. Essa metodologia soluciona o problema de fechamento para uma ampla variedade de problema, sem a necessidade de assumir formas matemáticas especiais para a densidade numérica. A idéia desse método é determinar os pesos ( $\omega_\alpha$ ) e abscissas ( $m_\alpha$ ) a cada instante, a partir dos momentos de menor ordem de uma distribuição. Assim, a função densidade numérica pode ser representada usando a distribuição delta de Dirac nas abscissas multiplicadas pelos pesos correspondentes, sendo que no QMOM as abscissas se movimentam livremente pelo domínio conforme a distribuição varia. O QMOM é considerado um método híbrido porque combina as características do método das classes e dos momentos.

A formulação proposta por MCGRAW [52] foi inicialmente desenvolvida para problemas monovariados sem dependência com o espaço físico. A aproximação por quadratura dos momentos é ilustrada na equação (4.16), onde tem-se disponível  $n$  pontos de quadratura para  $2n$  momentos.

$$\mu_k = \int_{-\infty}^{\infty} m^k f(\mathbf{x}, m, t) dm = \sum_{\alpha=1}^n m_\alpha^k \omega_\alpha \quad (4.16)$$

A representação da DN é definida por uma soma finita de funções delta de Dirac,

$$f(\mathbf{x}, m, t) \approx \sum_1^n \omega_\alpha \delta(m - m_\alpha) \quad (4.17)$$

Mesmo não eliminando os erros associados a aproximação por quadratura, esse método tem a vantagem de não depender de nenhum tipo de interpolação para determinar propriedades definidas por momentos fracionados. No QMOM, os  $2n$  primeiros momentos podem ser obtidos por  $n$  pesos e abscissas. Contudo, o desejável é obter os pesos e abscissas a partir dos momentos, já que a EBP é transformada para evoluir em função dos momentos. Se utilizarmos a equação (4.16) para determinar os pesos e abscissas, será necessário um método de solução de equações não lineares. Essa abordagem é inviável computacionalmente. A abordagem usual é o Algoritmo Produto-Diferença já discutido no capítulo 2, porém esse método é mal-condicionado para computar a quadratura de Gauss.

Em outras palavras, o método QMOM calcula os termos fonte da EBP usando quadratura, avaliando os pesos e abscissas ao longo da evolução utilizando o APD (GORDON [22]). MCGRAW [52] testou seu método com um problema monovariado de crescimento de aerossóis e comparou seus resultados com o trabalho de HULBURT e KATZ [26]. Neste trabalho, o método QMOM avançava os 6 primeiros momentos acompanhando a solução exata, diferentemente do método MOM proposto por HULBURT e KATZ [26] que só acompanhava os dois primeiros momentos.

WRIGHT *et al.* [74] foram os primeiros a aplicar o QMOM para um problema multivariado. Neste trabalho estudaram a dinâmica de uma população de nanopartículas inorgânicas, considerando apenas o efeito de agregação. Os autores utilizaram volume de partículas e área superficial como variáveis internas, e obtiveram erros menores que 1% frente a solução utilizando o método de Monte Carlo. Por se tratando de um problema bivariado o APD não tem funcionalidade. Deste modo, houve a necessidade de calculá-los a partir do método do gradiente conjugado, aumentando assim o custo computacional.

MCGRAW e WRIGHT [53] derivaram um novo método de fechamento baseado no QMOM, denominado de Transformação da Matriz Jacobiana (TMJ). Essa nova abordagem permite obter diretamente os pesos e abscissas de quadratura evitando a instabilidade do método APD.

YOON e MCGRAW [76] desenvolveram uma formulação multivariada do QMOM usando o algoritmo de análise dos principais componentes (APC) e aplicaram a um problema de agregação pura. A APC é um método estatístico com os quais os momentos mistos de baixa ordem são utilizados na caracterização e análise dos dados multivariados (JOHNSON e WICHERN [28]). Em outras palavras, o APC fornece uma técnica para extrair as combinações lineares não relacionadas que melhor caracterizam a função de distribuição, permitindo determinar a localização e a quantidade de abscissas necessárias para representar a distribuição. Confrontaram seus resultados com os de WRIGHT *et al.* [74] e obtiveram resultados concordantes.

MARCHISIO *et al.* [48] aprimoraram o método QMOM considerando efeitos de

quebra e agregação. Os autores investigaram a performance do QMOM, realizando testes com 10 simulações, combinando diferentes núcleos de quebra e agregação, função densidade probabilidade de fragmentação e condições iniciais. As predições foram comparadas com a solução da EBP fornecida por VANNI [72], que utilizou cerca 2000 classes para solucionar a EBP. Concluíram que o método QMOM necessitou de poucos momentos para obter a mesma acurácia que o método das classes.

A formulação QMOM proposta por MARCHISIO *et al.* [48] para o avanço dos  $2n$  momentos está demonstrada na equação (4.18).

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mu_k(m, \mathbf{Y}, t)}{\partial t} = & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [(m_i - m_j)^k - m_i^k] a(m_i, m_j) \omega_i \omega_j \\ & + \sum_{i=1}^n b(m_i) \omega_i [\nu(m_i) \bar{P}(m_i) - m_i^k] \end{aligned} \quad (4.18)$$

onde

$$\bar{P}(m_i) = \int_0^{m_i} m^k P(m|m_i) dm \quad (4.19)$$

MARCHISIO *et al.* [49] implementaram o método QMOM no software comercial de fluidodinâmica computacional FLUENT via UDF<sup>11</sup> usando o próprio integrador do software para avançar a equação evolutiva dos momentos. Os resultados obtidos foram confrontados com resultados experimentais e verificou-se uma concordância apenas qualitativa. WAN *et al.* [73] avaliaram o método QMOM implementado no ANSYS FLUENT, previamente implementado por MARCHISIO *et al.* [49], em um tanque de mistura 2D, e obtiveram erros menores que 1% frente a solução analítica do problema.

SU *et al.* [70] desenvolveram o método QMOM com o fator de ajuste  $p$ , redefinido assim os momentos (4.20), e por consequência, modificando também a equação de evolução dos momentos.

$$\mu_k = \int_{-\infty}^{\infty} m^{k/p} f(\mathbf{x}, m, t) dm \quad (4.20)$$

Estes autores mostraram ainda em seu trabalho que a acurácia varia em função do valor  $p$ . Contudo, esse método não parece promissor, visto que para cada caso o fator  $p$  deve ser estipulado.

LAGE [34] propôs um nova aplicação original para o método QMOM. A idéia era utilizar o método QMOM para solucionar problemas de termodinâmica do contínuo. Essa abordagem se mostrou mais adequada para caracterização de misturas,

---

<sup>11</sup> *User Define Function* são funções escritas em C executadas simultaneamente com *software ANSYS FLUENT*.

com um número reduzido de pseudo-componentes, se comparados com os métodos tradicionais de caracterização. LAURENT *et al.* [38] utilizaram a mesma abordagem para descrever a evaporação de uma mistura multicomponente, com intuito de avaliar a potencialidade do método ser aplicado à problema de evaporação em CFD. Concluíram que o método é vantajoso computacionalmente já que necessita de poucos pseudo-componentes.

Aparentemente, o método QMOM era o método mais promissor. Todavia, esse método possui dois fatores limitantes: se aplicado a distribuições multivariadas, perde a sua simplicidade e eficiência. Também, em casos com forte influência convectiva, o método não representa de forma realística sistemas polidispersos (MARCHISIO e FOX [46]).

A grande evolução do QMOM foi o surgimento do *Direct Quadrature Method of Moments* (DQMOM), desenvolvido por MARCHISIO e FOX [46]. O DQMOM se fundamenta na idéia de acompanhar as variáveis primitivas de quadratura Gaussiana. Em outras palavras, as equações de evolução avançam os pesos e abscissas presentes na aproximação de quadratura ao invés de acompanhar os momentos da distribuição. A função distribuição é representada por um número finito de funções delta de Dirac multidimensional, semelhante ao método QMOM:

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{m}, t) \approx \sum_{\alpha=1}^n \omega_{\alpha} \delta[\mathbf{m} - \mathbf{m}_{\alpha}] \quad (4.21)$$

em que,  $n$  é o número de pesos e abscissas.

$$\delta[\mathbf{m} - \mathbf{m}_{\alpha}] = \prod_{j=1}^{N_s} \delta[m_j - m_{j,\alpha}] \quad (4.22)$$

$N_s$  é o número de dimensões da variável interna  $m_j$ . Esta forma funcional pode ser interpretada como um conjunto de  $n$  fases dispersas, sendo cada fase caracterizada pelo densidade numérica ( $\omega_{\alpha}$ ). Por isso, esse método é considerado interessante em problemas de CFD. Para derivar as equações do método DQMOM, deve-se substituir a aproximação (4.21) na equação (3.21), e para caso monovariado, com  $\mathbf{D}_{\mathbf{x}} = \sqrt{D_x} \mathbf{I}$ ,

sendo  $D_x$  uma constante.

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^n \delta[m - m_\alpha] \left[ \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\mathbf{u}_\alpha \omega_\alpha) - \nabla_x \cdot [D_x \nabla_x \omega_\alpha] \right] \\
& - \sum_{\alpha=1}^n \delta'[m - m_\alpha] \left[ \frac{\partial \lambda_\alpha}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\mathbf{u}_\alpha \lambda_\alpha) - \nabla_x \cdot [D_x \nabla_x \lambda_\alpha] \right] \\
& + \sum_{\alpha=1}^n \delta'[m - m_\alpha] m_\alpha \left[ \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\mathbf{u}_\alpha \omega_\alpha) - \nabla_x \cdot [D_x \nabla_x \omega_\alpha] \right] \\
& - \sum_{\alpha=1}^n \delta''[m - m_\alpha] [D_x \omega_\alpha (\nabla_x m_\alpha) \cdot (\nabla_x m_\alpha)] = H(\mathbf{x}, m, t) \tag{4.23}
\end{aligned}$$

onde  $\lambda_\alpha = \omega_\alpha m_\alpha$  é a abscissa ponderada,  $u_\alpha$  é a velocidade da fase  $\alpha$ ,  $\delta'$  e  $\delta''$  são as derivadas primeira e segunda da função delta de Dirac e  $H(\mathbf{x}, m, t)$  é a taxa líquida de nascimento e morte. Definindo os termos fontes da equação de transporte do DQMOM:

$$S_{\omega_\alpha} \doteq \left[ \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\mathbf{u}_\alpha \omega_\alpha) - \nabla_x \cdot [D_x \nabla_x \omega_\alpha] \right] \tag{4.24}$$

$$S_{e_\alpha} \doteq \left[ \frac{\partial \lambda_\alpha}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\mathbf{u}_\alpha \lambda_\alpha) - \nabla_x \cdot [D_x \nabla_x \lambda_\alpha] \right] \tag{4.25}$$

Definindo também,

$$C_\alpha \doteq D_x \omega_\alpha (\nabla_x m_\alpha) \cdot (\nabla_x m_\alpha) \tag{4.26}$$

Aplicando-se a integral  $\int_{-\infty}^{\infty} m^k(\cdot) dm$  na equação (4.23) e usando as definições (4.24), (4.25) e (4.26), obtém-se a equação (4.27).

$$(1 - k) \sum_{\alpha=1}^n m_\alpha^k S_{\omega_\alpha} + k \sum_{\alpha=1}^n m_\alpha^{k-1} S_{e_\alpha} = \bar{H}_k(\mathbf{x}, m, t) + \bar{C}_k \tag{4.27}$$

onde,

$$\bar{C}_k = k(k - 1) \sum_{\alpha=1}^n m_\alpha^{k-2} C_\alpha \tag{4.28}$$

$$\bar{H}_k = \int_{-\infty}^{\infty} m^k H(\mathbf{x}, m, t) dm \tag{4.29}$$

MARCHISIO e FOX [46] desenvolveram e testaram sua formulação para os casos de crescimento, dispersão, nucleação e agregação homogêneos, difusão pura monovariada, além de estender os casos de agregação homogênea e de crescimento com variação espacial para casos bivariados. Os autores derivaram também o DQMOM multivariado, porém não realizaram testes com o mesmo.

Posteriormente, SILVA *et al.* [68] compararam os métodos PPDC, QMOM, DQMOM e CM quanto a acurácia e eficiência. Para avaliar essas técnicas confrontaram

seus resultados com a solução analítica proposta por MCCOY e MADRAS [51], testando três casos: um com quebra dominante, outro com agregação dominante e por último o caso invariante, onde os efeitos de nascimento e quebra são equivalentes. Os autores observaram que o método PPDC tem uma baixa taxa de convergência e para o mesmo número de pontos de quadratura, os métodos QMOM e DQMOM são mais acurados, sendo que os mesmos têm a mesma acurácia. No entanto, o método DQMOM se mostrou mais eficiente computacionalmente. Por fim, concluíram que o método DQMOM é o mais adequado para o acoplamento PB-CFD

Objetivando reduzir os erros de quadratura dos métodos QMOM e DQMOM, e aumentar a acurácia desses métodos, surge a idéia de utilizar momentos generalizados ao invés de momentos padrão na derivação desses dois métodos. Essa discussão começa com PISKUNOV e GOLUBEV [59] que utilizou momentos gerados a partir de monômios com potências fracionárias e inteiras para derivar o QMOM. Todavia, apenas concluíram que seu método era numericamente equivalente ao QMOM tradicional.

GROSCH *et al.* [23] revitalizam a idéia de utilizar formas funcionais diferentes dos monômios para derivar o método QMOM. Neste trabalho, os autores reformularam o método QMOM utilizando os polinômios de Laguerre para definir os momentos generalizados<sup>12</sup>. Para avaliar essa nova metodologia os autores comparam seu resultado com um problema de dissolução solucionado pelo método de Garlekin com malha adaptativa implementado para o *software* Parsival (*Particle Size Evolution*). Esses testes comparativos foram realizados com os métodos QMOM-DAE e LAG-QMOM-DAE, onde a equação de evolução dos momentos são avançadas juntamente com a aproximação por quadratura dos momentos, formando assim um sistema algébrico-diferencial. Também foram realizados testes comparativos com os métodos QMOM-EIG (método QMOM tradicional), LAG-QMOM-EIG, QMOM-ODE e QMOM-DODE (métodos DQMOM - o primeiro avança os pesos,  $\omega_\alpha$ , e abscissas,  $m_\alpha$ , e o segundo avança os pesos e abscissas ponderadas,  $\lambda_\alpha$ ), LAG-QMOM-ODE e LAG-QMOM-DODE.

GROSCH *et al.* [23] compararam a performance desses métodos e observaram que o método QMOM-DODE e QMOM-ODE (ambos DQMOM) são os métodos mais rápidos e mais robustos. Todavia, o QMOM-DODE perde velocidade com o aumento do número de pesos e abscissas muito rapidamente. Nesse artigo os métodos que utilizaram polinômios de Laguerre não foram eficientes, então os autores recomendam o uso do método QMOM-ODE (DQMOM) para resolver a equação de balanço populacional.

---

<sup>12</sup>O prefixo LAG na nomenclatura dos métodos simboliza o uso de polinômios de Laguerre nas suas derivações.

# Capítulo 5

## Metodologia Numérica

Neste capítulo serão abordados quatro variações do método DQMOM. As denominações para o DQMOM e para o DQMOMa serão utilizadas para os métodos cuja base polinomial ortogonal for monomial. Sendo que, para método DQMOM as equações de transporte são baseadas nos pesos e abscissas ponderadas- método tradicional- (MARCHISIO e FOX [46]).

Já para o DQMOMa, a formulação é derivada em termos dos pesos e abscissas, fato que pode ser uma vantagem para este método, lembrando-se que as abscissas são representações discretas no domínio das variáveis internas. O método tradicional pode falhar quando tal domínio discreto estiver vazio, diferentemente do método DQMOMa (GROSCH *et al.* [23]) .

As denominações para o DQMOGeM e para o DQMOGeMa serão utilizadas para os métodos cuja base polinomial ortogonal não for monomial, mas sim qualquer outro tipo de base - Legendre, Laguerre, etc. Como no parágrafo anterior, os métodos DQMOGeM e DQMOGeMa diferem apenas na forma com que as equações de transporte evoluem. O primeiro avança os pesos e as abscissas ponderadas, já o segundo, os pesos e as abscissas.

### 5.1 Discretização da Equação de Balanço Populacional

No capítulo 3, foi apresentada a Equação de Balanço Populacional (EBP), equação (3.21), de forma genérica (RAMKRISHNA [60]) e, certamente, complexa. Este capítulo se preocupa em descrever a metodologia numérica de resolução proposta no trabalho, levando em conta suas hipóteses e simplificações usuais citadas no capítulo anterior. A equação (3.21) é revisitada com fins didáticos, visto que a discretização

da EBP será apresentada neste capítulo:

$$\frac{\partial f(m, \mathbf{x}, Y, t)}{\partial t} + \nabla_x \cdot [\mathbf{u}f(m, \mathbf{x}, Y, t)] - \nabla_x \cdot (D_x \nabla_x [f(m, \mathbf{x}, Y, t)]) = S(\mathbf{x}, m, Y, t) \quad (5.1)$$

em que  $\mathbf{u}$  é a velocidade média condicionada à propriedade interna  $m$ ,  $f(m, \mathbf{x}, Y, t)$  é a distribuição de densidade numérica na variável interna  $m$  e variável externa  $\mathbf{x}$ ,  $D_x$  é o coeficiente de difusão isotrópico e  $S(\mathbf{x}, m, Y, t)$  é o termo fonte. Este último contém a informação dos termos de quebra, agregação, crescimento e nucleação.

A distribuição de densidade numérica pode ser representada pelo somatório de funções delta de Dirac, onde os pesos associados representam a própria densidade numérica (MARCHISIO e FOX [46]). Interessante salientar que o uso da forma funcional descrita pela equação (5.2) é equivalente a quadratura Gaussiana com  $N$  pontos (MCGRAW [52]), onde  $\omega_\alpha$  são os pesos  $\omega_\alpha$  e  $m_\alpha$  são as abscissas da quadratura (RAMKRISHNA [60]).

$$f(m, \mathbf{x}, t) \approx \sum_{\alpha=1}^N \omega_\alpha(\mathbf{x}, t) \delta(m - m_\alpha(\mathbf{x}, t)) \quad (5.2)$$

Substituindo a equação (5.2) na (5.1) e desconsiderando o termo difusivo, obtém-se:

$$\sum_{\alpha=1}^N \delta(m - m_\alpha) \left[ \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_{\alpha i} \omega_\alpha) \right] - \sum_{\alpha=1}^N \delta'(m - m_\alpha) \omega_\alpha \left[ \frac{\partial m_\alpha}{\partial t} + u_{\alpha i} \frac{\partial}{\partial x_i} m_\alpha \right] = S(m, \mathbf{x}, Y, t) \quad (5.3)$$

Seja a integral descrita em (5.4), em que  $p_k(m)$  representa uma base de polinômios ortogonais (GAUTSCHI [19]).

$$\int_D p_k(m)(\cdot) dm \quad (5.4)$$

Aplicando a operação dada pela equação (5.4) à função generalizada delta de Dirac e a sua derivada de primeira ordem (MARCHISIO e FOX [47]), tem-se que:

$$\int_D p_k(m) \delta(m - m_\alpha) dm = p_k(m_\alpha) \quad (5.5)$$

$$\int_D p_k(m) \delta'(m - m_\alpha) dm = -p'_k(m_\alpha) \quad (5.6)$$

Em seguida, definindo  $S_{\omega_\alpha}$  e  $S_{e_\alpha}$

$$S_{\omega_\alpha} \doteq \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(u_{\alpha i} \omega_\alpha) \quad (5.7)$$

$$S_{e_\alpha} \doteq \frac{\partial m_\alpha}{\partial t} + u_{\alpha i} \frac{\partial}{\partial x_i}(m_\alpha) \quad (5.8)$$

$S_k$  é o momento do termo fonte de ordem  $k$  (será discutido com mais detalhes na próxima seção desse capítulo).

$$S_k(m, \mathbf{x}, t, Y) = \int_D p_k(m) S(m, \mathbf{x}, Y, t) dm \quad (5.9)$$

Então, aplicando-se a operação (5.4) na equação (5.3) e utilizando as definições acima, chega-se ao sistema linear para o método DQMOM generalizado (DQM-GeMa).

$$\sum_{\alpha=1}^N p_k(m_\alpha) S_{\omega_\alpha} + \sum_{\alpha=1}^N \omega_\alpha p'_k(m_\alpha) S_{e_\alpha} = S_k(m, t, \mathbf{x}, Y) \quad k = 0, \dots, 2N - 1$$

- DQMOMGeM

Já para o método DQMOM generalizado tradicional a equação (5.3) deve ser transformada completando a derivada do produto do termo da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \omega_\alpha \left[ \frac{\partial m_\alpha}{\partial t} + u_{\alpha i} \frac{\partial}{\partial x_i}(m_\alpha) \right] &= \frac{\partial \overbrace{(m_\alpha \omega_\alpha)}^{\doteq \lambda_\alpha}}{\partial t} + \\ + \frac{\partial}{\partial x_i}(u_{\alpha i} \overbrace{m_\alpha \omega_\alpha}^{\doteq \lambda_\alpha}) - m_\alpha \left[ \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(u_{\alpha i} \omega_\alpha) \right] \end{aligned} \quad (5.10)$$

então,

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^N (\delta(m - m_\alpha) + m_\alpha \delta'(m - m_\alpha)) \left[ \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(u_{\alpha i} \omega_\alpha) \right] - \\ - \sum_{\alpha=1}^N \delta'(m - m_\alpha) \left[ \frac{\partial \lambda_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(u_{\alpha i} \lambda_\alpha) \right] = S(m, t) \end{aligned} \quad (5.11)$$

Definindo  $S_{\omega_\alpha}$  e  $S_{\lambda_\alpha}$

$$S_{\omega_\alpha} \doteq \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(u_{\alpha i} \omega_\alpha) \quad (5.12)$$

$$S_{\lambda_\alpha} \doteq \frac{\partial \lambda_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(u_{\alpha i} \lambda_\alpha) \quad (5.13)$$

Aplicando a operação dada pela equação (5.4) e usando as propriedades (5.5) e (5.6), vem:

$$\sum_{\alpha=1}^N [p_k(m_\alpha) - m_\alpha p'_k(m_\alpha)] S_{\omega_\alpha} + \sum_{\alpha=1}^N \omega_\alpha p'_k(m_\alpha) S_{\lambda_\alpha} = S_k(m, t, \mathbf{x}, Y) \quad k = 0, \dots, 2N-1 \quad (5.14)$$

## 5.2 Termos Fontes de Quebra e Agregação

Considerando apenas os efeitos da taxa líquida de nascimento e morte por quebra e agregação, o termo fonte é expresso por:

$$S(m, \mathbf{x}, Y, t) = B_a(m, \mathbf{x}, Y, t) - D_a(m, \mathbf{x}, Y, t) + B_b(m, \mathbf{x}, Y, t) - D_b(m, \mathbf{x}, Y, t), \quad (5.15)$$

em que os termos  $B_a(m, \mathbf{x}, Y, t)$ ,  $D_a(m, \mathbf{x}, Y, t)$ ,  $B_b(m, \mathbf{x}, Y, t)$  e  $D_b(m, \mathbf{x}, Y, t)$  representam o nascimento por agregação, a morte por agregação, o nascimento por quebra e a morte por quebra, respectivamente.

### 5.2.1 Processo de Agregação

- Nascimento por Agregação

$$\frac{1}{2} \int_0^m a(\mathbf{x}, Y, m - m', m', t) f(\mathbf{x}, m - m', Y, t) f(\mathbf{x}, m', Y, t) dm' \quad (5.16)$$

Aplicando a operação dada pela equação (5.4), vem:

$$\frac{1}{2} \int_0^\infty p_k(m) \int_0^m a(\mathbf{x}, m - m', m', Y, t) f(\mathbf{x}, m - m', Y, t) f(\mathbf{x}, m', Y, t) dm' dm \quad (5.17)$$

Na equação (5.16) o domínio de integração de  $m'$ , vai de zero até  $m$ . Para representar essa integral em termos do somatório de pesos e abscissas, é necessário transformar os limites de integração desse domínio. A figura 5.1 ilustra que o domínio de integração em  $m'$  pode ser transformado para  $m$ , indo de  $m'$  até  $\infty$ . Fazendo a seguinte mudança de variável:

$$v = m - m'$$

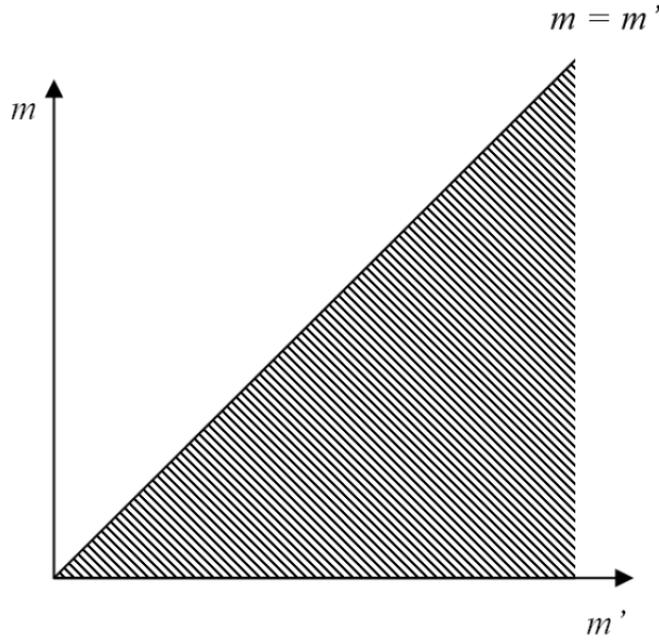


Figura 5.1: Transformação de coordenadas utilizada no termo de nascimento por agregação.

Quando  $m = m'$ , tem-se  $v = 0$ . Quando  $m \rightarrow \infty$ , tem-se  $v \rightarrow \infty$ . Assim, a integração original no domínio  $0 < m' < m$  é transformada para  $0 < v < \infty$ . Então, o termo de nascimento por agregação é dado por:

$$\frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty p_k(m' + v) a(\mathbf{x}, v, m', Y, t) f(\mathbf{x}, v, Y, t) f(\mathbf{x}, m', Y, t) dm' dv \quad (5.18)$$

Substituindo a equação 5.2 em 5.18:

$$\frac{1}{2} \sum_{\beta=1}^N \sum_{\alpha=1}^N p_k(m_\alpha + m_\beta) a_{\alpha\beta} \omega_\alpha \omega_\beta \quad (5.19)$$

- Morte por Agregação

$$f(\mathbf{x}, m, Y, t) \int_0^\infty a(\mathbf{x}, Y, m, m', t) f(\mathbf{x}, m', Y, t) dm' \quad (5.20)$$

Aplicando a operação dada pela equação (5.4), vem:

$$\int_0^\infty p_k(m) f(\mathbf{x}, m, Y, t) \int_0^\infty a(\mathbf{x}, m, m', Y, t) f(\mathbf{x}, m', Y, t) dm' dm \quad (5.21)$$

Pela substituição da equação 5.2 na equação acima, chega-se a:

$$\sum_{\beta=1}^N \sum_{\alpha=1}^N p_k(m_\alpha) a_{\alpha\beta} \omega_\alpha \omega_\beta \quad (5.22)$$

## 5.2.2 Processo de Quebra

- Morte por Quebra

$$b(x, m, Y, t) f(\mathbf{x}, m, Y, t) \quad (5.23)$$

Da operação 5.4, vem:

$$\int_0^\infty p_k(m) b(\mathbf{x}, m, Y, t) f(\mathbf{x}, m, Y, t) dm \quad (5.24)$$

Então,

$$\sum_{\alpha=1}^N b_\alpha p_k(m_\alpha) \omega_\alpha \quad (5.25)$$

- Nascimento por quebra

$$\int_m^\infty b(\mathbf{x}, m', Y, t) \nu(\mathbf{x}, m', Y, t) P(\mathbf{x}, Y, m | m', t) f(\mathbf{x}, m', Y, t) dm' \quad (5.26)$$

Novamente, aplicando a operação dada pela equação (5.4), tem-se:

$$\int_0^\infty p_k(m) \int_m^\infty b(\mathbf{x}, m', Y, t) \nu(\mathbf{x}, m', Y, t) P(\mathbf{x}, m | m', Y, t) f(\mathbf{x}, m', Y, t) dm' dm \quad (5.27)$$

Na equação (6.2) o domínio de integração de  $m'$ , vai de  $m$  até  $\infty$ . Novamente, visando representar essa integral em termos do somatório dos pesos e abscissas, é necessário transformar o domínio de integração.

De acordo com a figura 5.2 o domínio de integração em  $m'$ , que vai de  $m$  a  $\infty$ , pode ser transformada para o domínio de  $m$ , indo de 0 a  $m'$ . Já a integral de momentos que está definida no domínio completo  $D$  (0 até  $\infty$ ) em  $m'$ , pode ser transformada no domínio completo de  $m$ . Então, o termo de nascimento por quebra é dado por:

$$\int_0^\infty \int_0^{m'} p_k(m) b(\mathbf{x}, m', Y, t) \nu(\mathbf{x}, m', Y, t) P(\mathbf{x}, m | m', Y, t) f(\mathbf{x}, m', Y, t) dm dm' \quad (5.28)$$

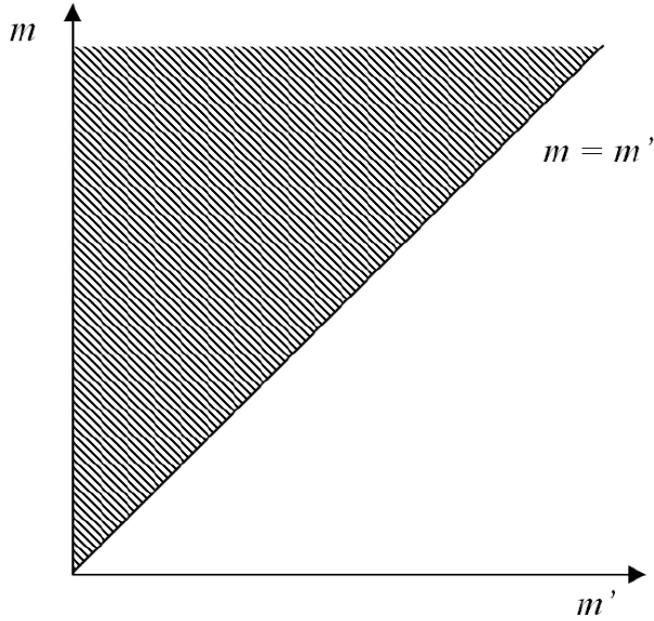


Figura 5.2: Transformação de coordenadas utilizada no termo de nascimento por quebra.

$$\int_0^\infty b(\mathbf{x}, m', Y, t) \nu(\mathbf{x}, m', Y, t) f(\mathbf{x}, m', Y, t) \left[ \int_0^{m'} p_k(m) P(\mathbf{x}, m | m', Y, t) dm \right] dm' \quad (5.29)$$

e substituindo a equação (5.2):

$$\sum_{\alpha=1}^n b_\alpha \nu_\alpha \omega_\alpha P_\alpha^k \quad (5.30)$$

onde,

$$P_\alpha^k = \int_0^{m_\alpha} p_k(m) P(m | m_\alpha) dm \quad (5.31)$$

Sendo que  $P_\alpha^k$  é calculado numericamente ou analiticamente.

### 5.3 Equacionamento Final da Formulação Tradicional

Na formulação tradicional, o sistema linear é derivado em termos dos pesos,  $\omega_\alpha$ , e das abscissas ponderadas,  $\lambda_\alpha = \omega_\alpha m_\alpha$ .

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha=1}^N (p_k(m_\alpha) - m_\alpha p'_k(m_\alpha)) S_{\omega_\alpha} + \sum_{\alpha=1}^N p'_k(m_\alpha) S_{\lambda_\alpha} &= \frac{1}{2} \sum_{\beta=1}^N \sum_{\alpha=1}^N p_k(m_\alpha + m_\beta) a_{\alpha\beta} \omega_\alpha \omega_\beta - \\
&\sum_{\beta=1}^N \sum_{\alpha=1}^N p_k(m_\alpha) a_{\alpha\beta} \omega_\alpha \omega_\beta - \sum_{\alpha=1}^N b_\alpha p_k(m_\alpha) \omega_\alpha + \sum_{\alpha=1}^n b_\alpha \nu_\alpha \omega_\alpha P_\alpha^k \\
&k = 0 \cdots 2N - 1
\end{aligned} \tag{5.32}$$

em que,  $S_{\omega_\alpha}$  e  $S_{\lambda_\alpha}$  são:

$$S_{\omega_\alpha} = \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \nabla_x \cdot (u_\alpha \omega_\alpha) \tag{5.33}$$

$$S_{\lambda_\alpha} = \frac{\partial \lambda_\alpha}{\partial t} + \nabla_x \cdot (u_\alpha \lambda_\alpha) \tag{5.34}$$

Se  $p_k$  for um monômio de ordem  $k$ , o método DQMOGeM se transforma no método DQMOM.

## 5.4 Equacionamento Final Formulação Alternativa

Na formulação alternativa, o sistema linear é derivado em termos dos pesos,  $\omega_\alpha$ , e das abscissas,  $m_\alpha$ . Neste caso, o sistema linear e as equações de transporte gerados são diferentes daqueles do método tradicional. No entanto, os momentos dos termos fonte são os mesmos para ambas as formulações.

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha=1}^N p_k(m_\alpha) S_{\omega_\alpha} + \sum_{\alpha=1}^N \omega_\alpha p'_k(m_\alpha) S_{e_\alpha} &= \frac{1}{2} \sum_{\beta=1}^N \sum_{\alpha=1}^N p_k(m_\alpha + m_\beta) a_{\alpha\beta} \omega_\alpha \omega_\beta - \\
&\sum_{\beta=1}^N \sum_{\alpha=1}^N p_k(m_\alpha) a_{\alpha\beta} \omega_\alpha \omega_\beta - \sum_{\alpha=1}^N b_\alpha p_k(m_\alpha) \omega_\alpha + \sum_{\alpha=1}^n b_\alpha \nu_\alpha \omega_\alpha P_\alpha^k \\
&k = 0 \cdots 2N - 1
\end{aligned} \tag{5.35}$$

em que,  $S_{\omega_\alpha}$  e  $S_{e_\alpha}$  são:

$$S_{\omega_\alpha} = \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + \nabla_x \cdot (u_\alpha \omega_\alpha) \tag{5.36}$$

$$S_{e_\alpha} = \frac{Dm_\alpha}{Dt} \tag{5.37}$$

Se  $p_k$  for um monômio de ordem  $k$  o método DQMOGeMa se transforma no método DQMOMa.

# Capítulo 6

## Resultados

Existem dois níveis distintos de erros presentes em uma simulação numérica. No primeiro nível, os erros são resultado do uso inadequado da EBP que representa o fenômeno físico. No segundo estão os erros propriamente ditos, resultado da falta de acurácia do método numérico utilizado na solução da EBP. Para detectá-los, os resultados devem ser comparados com outras soluções bem estabelecidas, preferencialmente, soluções analíticas. Esse processo de validação numérica testa a qualidade do método numérico empregado. Por isso, para avaliar a metodologia numérica proposta nesse trabalho, os resultados aqui obtidos foram confrontados com soluções analíticas disponíveis na literatura.

Atualmente, há alguns trabalhos focados na solução analítica da EBP. Dentre eles, o trabalho de PATIL e ANDREWS [57] ganhou notoriedade por considerar os efeitos de quebra e coalescência simultaneamente. No entanto, a solução proposta por PATIL e ANDREWS [57] não é totalmente analítica, pois necessitava de uma solução numérica para inversão da transformada de Laplace, além de não levar em conta a variação do número de partículas no domínio. Em seguida, LAGE [33] aprimorou o método proposto por PATIL e ANDREWS [57], gerando a solução da EBP totalmente analítica de forma mais simples. Contudo, a solução proposta por LAGE [33] ainda considerava o número de partículas constante no sistema. MCCOY e MADRAS [51] desenvolveram uma solução analítica mais geral para o problema proposto por PATIL e ANDREWS [57] com outra condição inicial, em que o número de partículas não é mais constante. A solução proposta por MCCOY e MADRAS [51] será descrita com mais detalhes na seção 6.1, já que será utilizada para avaliar o método sugerido neste trabalho. DORAO e JAKOBSEN [12] formularam uma solução analítica para um problema de quebra pura em domínio finito na variável interna visando avaliar o método dos resíduos ponderados. Baseado neste problema, LAGE [35] propôs um caso semelhante, visando avaliar o comportamento do método proposto neste trabalho (seção 6.2). Neste trabalho, LAGE [35] modifica o fechamento,  $R(m, t)$ , da EBP, corrigindo o fechamento proposto por DORAO e JAKOBSEN [12].

O programa para realizar as simulações 0D transientes foi escrito em linguagem C e os arquivos fonte foram compilados com o *G++-4.3* usando a *flag -O3* de otimização de código. Para integração da equação (5.31) foi utilizada a rotina, **AUTOQUAD**, em C, que utiliza em cada intervalo as quadraturas entrelaçadas de Gauss-Kronrod com 1, 3, 7, 15, 31, 63 e 127 pontos com graus 1, 5, 11, 23, 47, 95 e 191, respectivamente. A **AUTOQUAD** é adaptativa usando um critério global de erro, e divisão ternária do intervalo de busca (LAGE [36]).

Como o método proposto nesse trabalho é baseado no método DQMOM tradicional, é necessário um algoritmo para inicialização, que converte os momentos iniciais da distribuição densidade numérica em pesos e abscissas. Então, para obtê-los foi utilizado o pacote **ORTHOPOL** desenvolvido por GAUTSCHI [18]. Esse pacote contém o algoritmo de *Chebyshev* modificado, já citado no capítulo 2, e algoritmos para cálculo dos autovalores e autovetores de uma matriz tridiagonal simétrica e dos pesos e abscissas de quadratura. Além disso, há algoritmos que fornecem os termos de recorrência das séries de polinômios ortogonais clássicos mais usados. Importante destacar que esse pacote foi escrito em FORTRAN, e por isso, foi necessário utilizar programação mista, conectando o programa principal em C com esse pacote desenvolvido em FORTRAN. Em todos os casos simulados a integração temporal foi realizada com o integrador **DASSLC** versão 3.2 desenvolvido por SECCHI [65], bastante reconhecido no meio científico pela sua eficiência e precisão na solução de EADs implícitas de índice até 1, mesclando as avançadas técnicas de integração, como passo de tempo adaptativo, com critérios de convergência bastante rígidos. Para o cálculo do número de condicionamento foram usadas as rotinas **DGTRF**, que usa eliminação Gaussiana para computar a fatoração **LU** de uma matriz, e **DGECON**, que calcula o número de condicionamento de uma matriz decomposta por **DGTRF**. Ambas disponíveis no pacote numérico **LAPACK**.

De forma geral, o método proposto foi investigado frente aos seguintes aspectos: equivalência quanto aos pesos e abscissas, avaliação da evolução dos erros dos momentos padrão, tempo computacional e robustez do sistema linear gerado.

## 6.1 Caso 1

Como caso teste 1 será utilizada a formulação apresentada por PATIL e ANDREWS [57], que considera uma EBP homogênea com distribuição monovariada, envolvendo a quebra e a coalescência, considerando a frequência de agregação constante, a quebra binária uniforme e com frequência de quebra proporcional ao tamanho da partícula. PATIL e ANDREWS [57] utilizaram como condições iniciais as equações (6.1)

e (6.2).

$$f(m, 0) = \mu_0(0) \left( \frac{\mu_0(0)}{\mu_1(0)} \right) e^{-\left( \frac{\mu_0(0)}{\mu_1(0)} \right) m} \quad (6.1)$$

$$f(m, 0) = \mu_0(0) \left( 2 \frac{\mu_0(0)}{\mu_1(0)} \right)^2 e^{-2 \left( \frac{\mu_0(0)}{\mu_1(0)} \right) m} \quad (6.2)$$

As frequências de quebra e coalescência e a função distribuição de probabilidade são mostradas nas equações a seguir:

$$\nu(m) = 2, \quad b(m) = Lm, \quad L = \text{constante} \quad (6.3)$$

$$a(\tilde{m}, m) = K, \quad K = \text{constante} \quad (6.4)$$

$$P(m|m') = \frac{1}{m'} \quad (6.5)$$

Fazendo o adimensionamento da equação 3.21 e desconsiderando as variações no espaço de variáveis externas, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial \tau} = & \frac{1}{2} \int_0^\eta \phi(\eta - x, \tau) \phi(x, \tau) dx - \phi(\eta, \tau) \Phi(\tau) \\ & + [\Phi(\tau)]^2 \int_\eta^\infty \phi(x, \tau) dx - \frac{\eta}{2} [\Phi(\tau)]^2 \phi(\eta, \tau) \end{aligned} \quad (6.6)$$

com condições iniciais

$$\phi(\eta, 0) = e^{-\eta} \quad (6.7)$$

e

$$\phi(\eta, 0) = 4\eta e^{-2\eta}, \quad (6.8)$$

onde

$$\Phi = \frac{\mu_0(t)}{\mu_0(0)}, \quad \eta = \frac{m\mu_0(0)}{\mu_1(0)}, \quad \tau = \mu_0(0)Kt, \quad \phi(\eta, \tau) = \frac{f(m, t)\mu_1(0)}{[\mu_0(0)]^2} \quad (6.9)$$

### 6.1.1 Solução de McCoy e Madras [2003]

A solução analítica utilizada para a validação numérica do método proposto nesse trabalho foi desenvolvida por MCCOY e MADRAS [51]. Os autores aprimoram a solução do problema de PATIL e ANDREWS [57] para o caso com condição inicial  $\phi(\eta, 0) = e^{-\eta}$  (condição inicial utilizada para o caso testado nesse trabalho). A solução obtida por MCCOY e MADRAS [51] em termos das variáveis adimensionais

é apresentada em (6.10).

$$\phi(\eta, \tau) = \Phi^2(\tau)e^{-\eta\Phi(\tau)}, \quad (6.10)$$

em que

$$\Phi(\tau) = \Phi(\infty) \left[ \frac{1 + \Phi(\infty) \tanh(\Phi(\infty) \frac{\tau}{2})}{\Phi(\infty) + \tanh(\Phi(\infty) \frac{\tau}{2})} \right] \quad (6.11)$$

e  $\Phi(\infty)$  é o valor de  $\Phi$  no estado estacionário para EBP adimensional de PATIL e ANDREWS [57].

Os momentos analíticos obtidos por MCCOY e MADRAS [51] e suas condições iniciais são descritos abaixo (SILVA *et al.* [67]):

$$\mu_k(\tau) = \left[ \frac{\Phi(\infty) + \tanh(\Phi(\infty) \frac{\tau}{2})}{\Phi(\infty)[1 + \Phi(\infty)]} \right]^{k-1} \Gamma(1 + k) \quad (6.12)$$

$$\mu_k(0) = \Gamma(1 + k) \quad (6.13)$$

O domínio de validade da função densidade numérica é semi-infinito ( $[0, \infty]$ ), e por isso, para as metodologias DQMOGeM e DQMOGeMa foi usada a base polinômial de Laguerre, semelhante ao trabalho proposto por GROSCHE *et al.* [23], uma vez que o domínio dessa base é  $[0, \infty]$ .

## 6.1.2 Casos Teste

Nesta subseção serão definidos os casos testes com domínio semi-infinito baseados na solução proposta por MCCOY e MADRAS [51]. Reconhecendo que  $\Phi(\infty) = \frac{\mu_0(\infty)}{\mu_0(0)}$  é a solução no estado estacionário, então quando  $\Phi(\infty) = 1$  o número de partículas no domínio se torna constante, já que o momento de ordem zero representa o número de partículas, como nos casos de PATIL e ANDREWS [57] e LAGE [33]. Assim, definimos esse caso como invariante. Quando  $\Phi(\infty) > 1$  diz-se que o caso é de quebra dominante, pois o número de partículas aumenta com o tempo; por outro lado se  $\Phi(\infty) < 1$ , diz-se que o caso é de agregação dominante. A constante  $\Phi(\infty)$  pode ser definida como:

$$\Phi(\infty) = \sqrt{\frac{2L}{K} \frac{\sqrt{\mu_1(0)}}{\mu_0(0)}} \quad (6.14)$$

A equação (6.14) implica que quanto maior o valor da constante  $\Phi(\infty)$ , maiores os erros de aproximação por quadratura, visto que  $\Phi(\infty)$  é proporcional a constante  $L$ .

Foram realizados três testes com domínio semi-infinito baseados nos valores de  $\Phi(\infty)$ :

- Caso 1.1: Invariante, onde a quebra e a agregação se equivalem (parâmetro  $\Phi(\infty) = 1$ );
- Caso 1.2: Coalescência dominante com o parâmetro  $\Phi(\infty) = 0, 1$ ;
- Caso 1.3: Quebra dominante com o parâmetro  $\Phi(\infty) = 3$ .

## 6.2 Caso 2

O caso 2 foi desenvolvido por LAGE [35]. Este caso é puramente matemático, permite verificar a solução para um problema de domínio finito em que os erros de aproximação por quadratura são originados do termo fonte de quebra.

### 6.2.1 Solução de Lage [2010]

Como caso teste de problema com domínio finito, adota-se a equação 6.15, proposta por Lage.

$$\frac{\partial f(m, t)}{\partial t} = B_b(m, t) - D_b(m, t) + R(m, t) \quad (6.15)$$

O que varia em cada caso são as funções de quebra,  $b(m)$  e o termo fonte,  $R(m, t)$ , usado para o fechamento da EBP .

$$b(m) = m^\gamma \quad (6.16)$$

$$P(m|m') = H^*(m' - m)/m' \quad (6.17)$$

$P(m|m')$  é a função densidade probabilidade de quebra e  $H^*$  é a função *Heaveside*. Como solução analítica para esse tipo de problema, tem-se uma função densidade numérica que independe da variável interna. A equação 6.18 representa a solução analítica geral para a EPB .

$$f(m, t) = 2 - e^{-t}, m \in [0, 1] \quad (6.18)$$

e momentos,

$$\mu_k = \frac{2 - e^{-t}}{k + 1} \quad (6.19)$$

O domínio de validade da função densidade numérica é finito ( $[0, 1]$ ). Portanto, para as metodologias DQMOGeM e DQMOGeMa foi utilizada a base polinômio de Legendre, com o seu domínio transformado para  $[0, 1]$ .

## 6.2.2 Casos Teste

Para avaliar o método proposto no domínio finito, os casos teste variando as funções de quebra são:

- Caso 2.1:  $\gamma = 2$ ;
- Caso 2.2:  $\gamma = \frac{1}{3}$ .

Os termos fontes de fechamento são:

- Caso 2.1:  $R(m, t) = 2m^2(2 - e^{-t}) - 2(1 - e^{-t})$ ;
- Caso 2.2:  $R(m, t) = 7e^{-t} - 12 + 7(2 - e^{-t})m^{1/3}$ .

## 6.3 Comparação entre o APD e o Algoritmo de *Chebyshev* Modificado

No capítulo 2, foram apresentadas as formas de determinação dos coeficientes de recursão a partir dos momentos de uma medida  $d\Lambda$ . O objetivo desta seção é selecionar, quais dos algoritmos de mapeamento é mais adequado para inicializar os métodos de solução da EBP propostos neste trabalho. Para realizar esse comparação foi escolhida a condição inicial,  $\phi(\eta, 0) = e^{-\eta}$ , do problema de MCCOY e MADRAS [51], já que os momentos padrão,  $\mu_k(0) = \Gamma(1 + k)$ , crescem muito rapidamente com a ordem  $k$ . Essa condição é válida para domínio semi-finito, o que implica na utilização da base polinômial de Laguerre para geração dos momentos generalizados. A tabela abaixo ilustra a comparação entre o Algoritmo Produto-Diferença, o Algoritmo Produto-Diferença Otimizado (as operações com as mantissas e com os expoentes são realizadas separadamente) e o Algoritmo de *Chebyshev* Modificado (ACM):

Tabela 6.1: Comparação entre os algoritmos de determinação dos pontos de quadratura Gaussiana

Número máximo de pontos de quadratura ( $N$ )	Algoritmos
6	APD
18	APD Otimizado
17	ACM com $\mu_k$
22	ACM com $\mu_k^\phi$

Esse resultado evidencia a superioridade do ACM, uma vez que o APD gera uma matriz  $P$  mal-condicionada que provoca a falha desse algoritmo. Portanto, o ACM foi o algoritmo selecionado para inicializar os métodos aqui propostos.

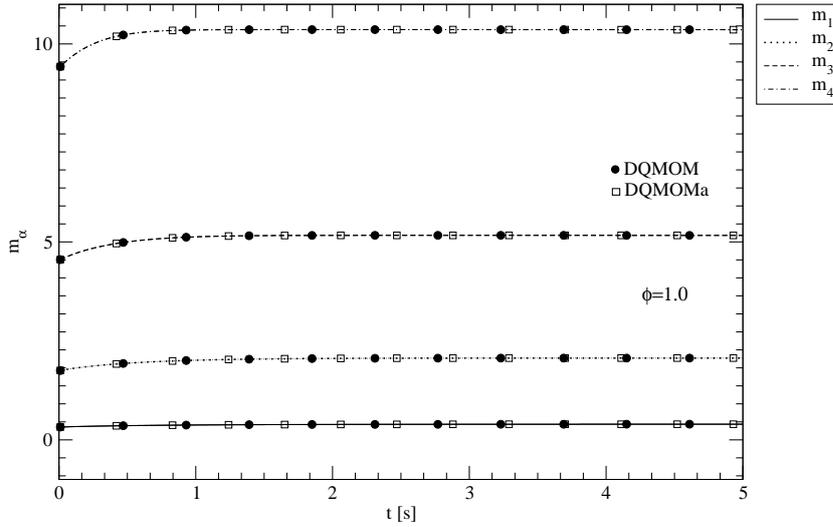


Figura 6.1: Comparação entre os perfis das abscissas para os métodos DQMOM e DQMOMa no Caso 1.1.

## 6.4 Equivalência quanto aos pesos e abscissas

As formulações derivadas nesse trabalho são baseadas na evolução temporal dos pesos e abscissas da aproximação por quadratura. Neste sentido, a verificação de equivalência destas variáveis nos métodos DQMOM, DQMOMa, DQMOGeM e DQMOGeMa é uma forma de verificação numérica, uma vez que o DQMOM já foi testado amplamente por vários autores (MARCHISIO e FOX [46], SILVA *et al.* [68] e outros). Com a intenção de comparar os resultados dos métodos foi realizada primeiro a comparação entre as metodologias alternativa e tradicional, fixando para cada caso o tipo de momento utilizado, em seguida, variando o tipo de momento utilizado e fixando o tipo de abordagem como tradicional.

### 6.4.1 Método Tradicional e Alternativo

Os primeiros resultados são destinados a comparar a evolução temporal dos pesos e abscissas. Para tal, utiliza-se o integrador **DASSLC**, com tolerâncias relativas e absolutas de  $10^{-12}$ , resultando em uma solução virtualmente livre de erros de integração temporal.

Como estratégia de avaliação, primeiro foram confrontados os métodos DQMOM e DQMOMa (figuras 6.1 a 6.4) com quatro pesos e abscissas, seguidos da comparação dos métodos DQMOGeM e DQMOGeMa (figuras 6.5 a 6.8), sendo assim verificando a equivalência entre os métodos alternativo e tradicional.

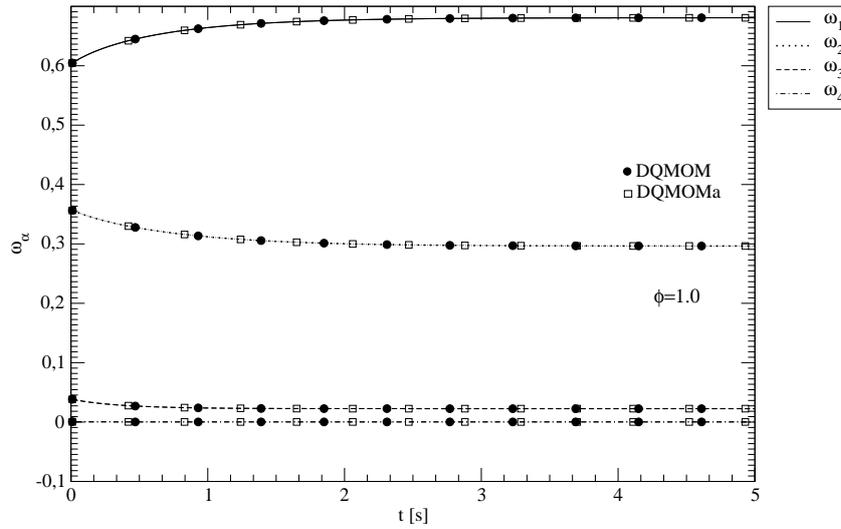


Figura 6.2: Comparação entre os perfis dos pesos para os métodos DQMOM e DQMOMa no Caso 1.1.

As figuras 6.1 e 6.3 apresentam a evolução das abscissas para os métodos DQMOM e DQMOMa com 4 pontos de quadratura. Esses gráficos ilustram a equivalência em toda evolução para todas as abscissas tanto para o domínio semi-infinito, caso 1.1, quanto para domínio finito, caso 2.1. Logo, esse comportamento deve se repetir para os pesos de quadratura para ambos os casos. Para o caso 1.1, invariante, os momentos da distribuição não variam com o tempo, e por conseqüência os pesos e abscissas, que descrevem a distribuição, também devem se manter constantes. Não obstante, nos gráficos 6.1 e 6.2 existem pequenas variações iniciais nos valores dos pesos e abscissas, decorrentes de erros associados a aproximação por quadratura. No entanto, isso não afetou os resultados no estado estacionário, visto que os erros de truncamento são da mesma ordem de grandeza. Isso se repetiu para o caso 1.1 do DQMOMGeM. Como mostram as figuras 6.9 e 6.10.

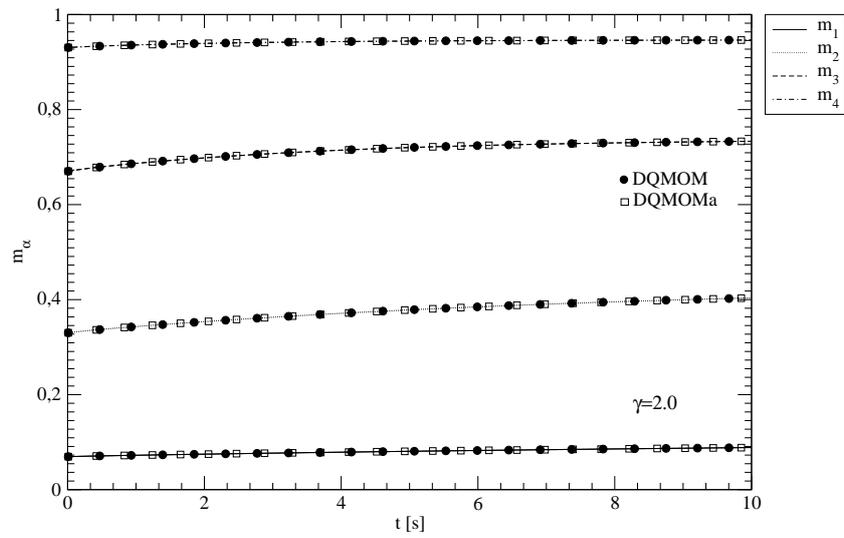


Figura 6.3: Comparação entre os perfis das abscissas para os métodos DQMOM e DQMOMa no Caso 2.1.

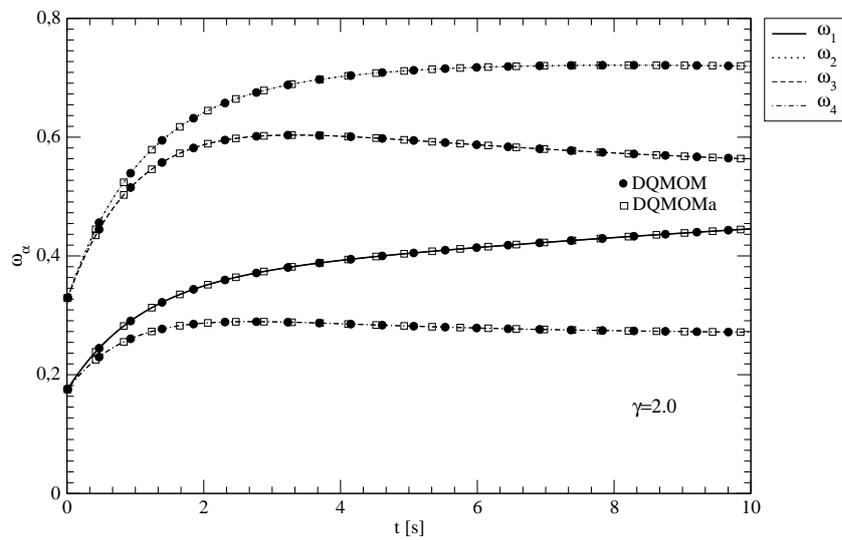


Figura 6.4: Comparação entre os perfis dos pesos para os métodos DQMOM e DQMOMa no Caso 2.1.

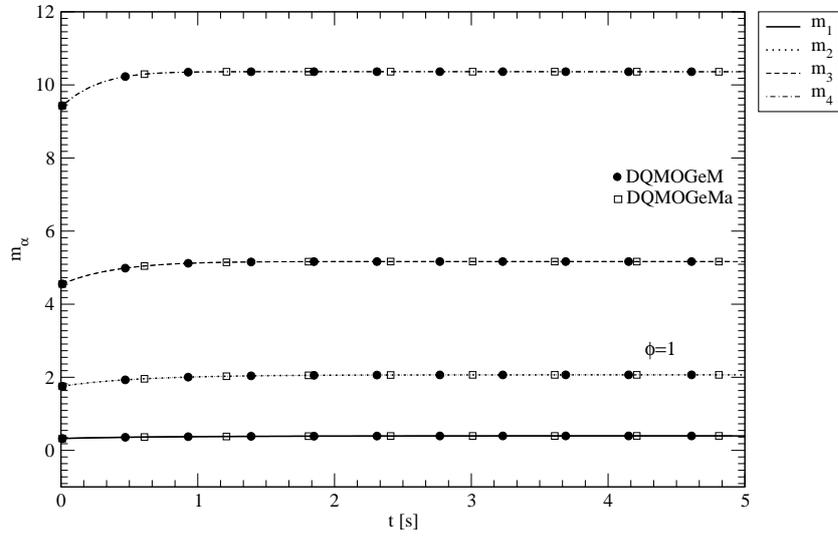


Figura 6.5: Comparação entre os perfis das abscissas para os métodos DQMOGeM e DQMOGeMa no Caso 1.1.

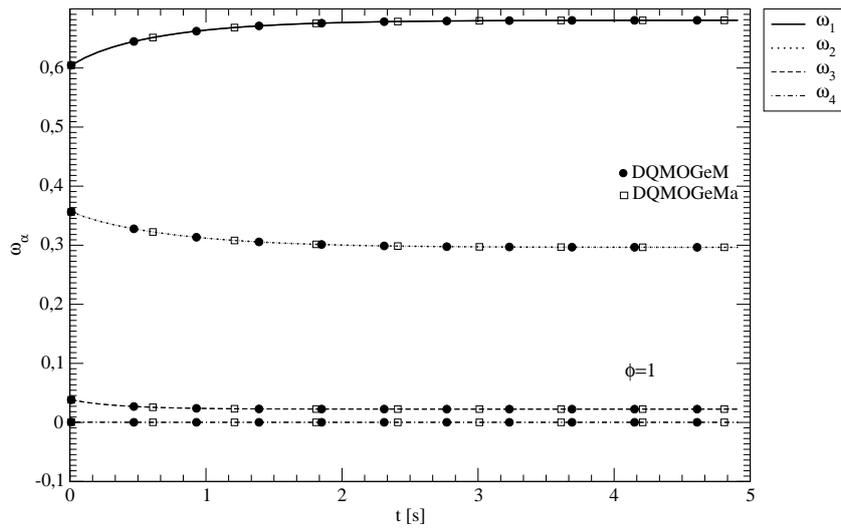


Figura 6.6: Comparação entre os perfis dos pesos para os métodos DQMOGeM e DQMOGeMa no Caso 1.1.

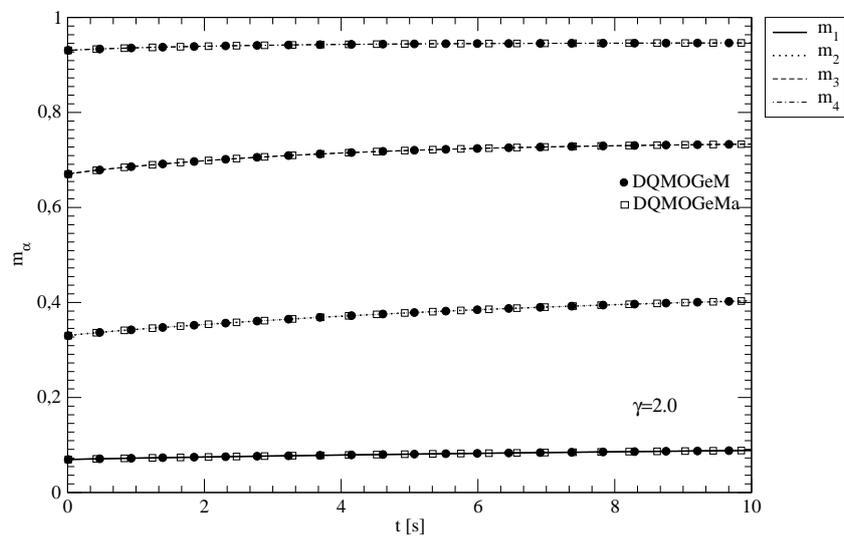


Figura 6.7: Comparação entre os perfis das abscissas para os métodos DQMOGeM e DQMOGeMa no Caso 2.1.

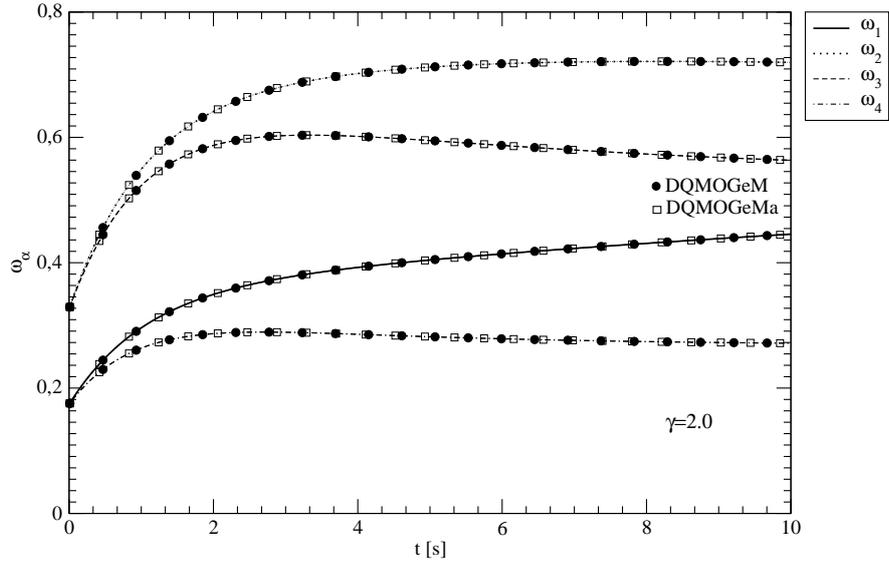


Figura 6.8: Comparação entre os perfis dos pesos para os métodos DQMOGeM e DQMOGeMa no Caso 2.1.

No problema de domínio finito a solução analítica não depende da variável interna,  $m$ , isso implica que as abscissas da distribuição não variam com o tempo e que todos os pesos devem evoluir no tempo de forma idêntica a  $f(m, t)$ . Porém, na solução numérica as abscissas variam levemente, e os pesos não seguem a curva  $f(t) = 2 - e^{-t}$ , de acordo com os gráficos 6.3 e 6.4. Isso ocorre devido aos erros de aproximação dos termos fontes de quebra por quadratura. Resultados similares são obtidos para os métodos DQMOGeM e DQMOGeMa nas figuras 6.5 a 6.8. As avaliações de equivalência para os métodos alternativo e tradicional foram verificadas tanto para os métodos generalizados quanto para os métodos que usufruem de momentos padrão.

### 6.4.2 Momentos Generalizados e Padrão

Depois de comparar os métodos alternativo e tradicional, basta confrontar os métodos que usam os momentos generalizados e os que usam momentos padrão.

As figuras 6.9 e 6.10, para o problema 1.1, e as figuras 6.11 e 6.12, para o problema 2.1, representam a evolução dos pesos e abscissas para os métodos padrão e generalizado. Novamente, as curvas de evolução se sobrepõem, demonstrando assim, a equivalência entre todos os métodos quanto a evolução dos pesos e abscissas.

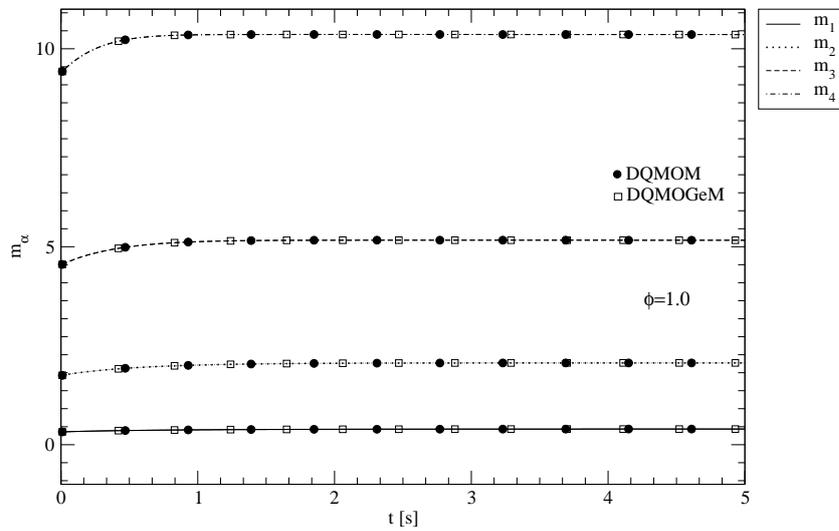


Figura 6.9: Comparação entre os perfis das abscissas para os métodos DQMOGeM e DQMOM no Caso 1.1.

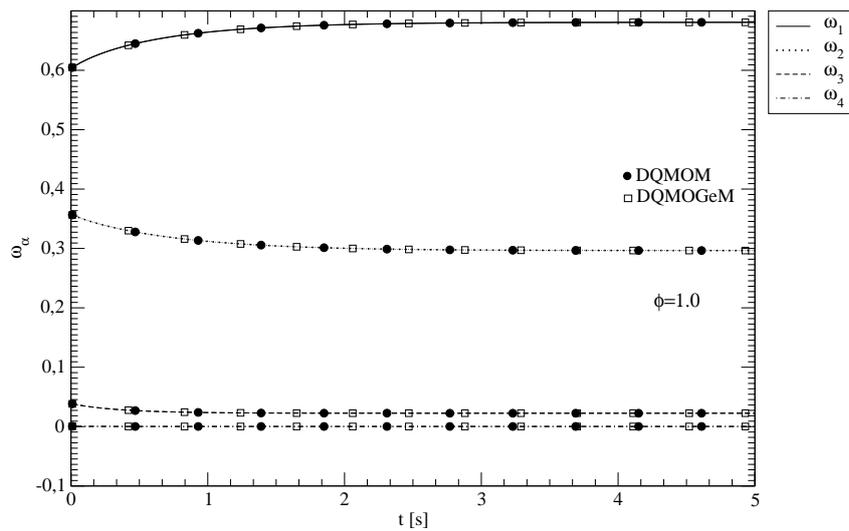


Figura 6.10: Comparação entre os perfis dos pesos para os métodos DQMOGeM e DQMOM no Caso 1.1.

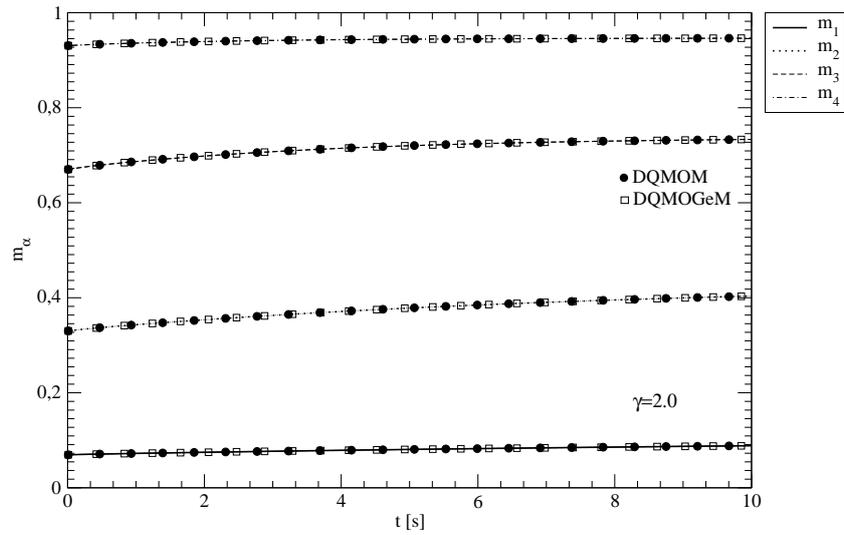


Figura 6.11: Comparação entre os perfis das abscissas para os métodos DQMOGeM e DQMOM no Caso 2.1.

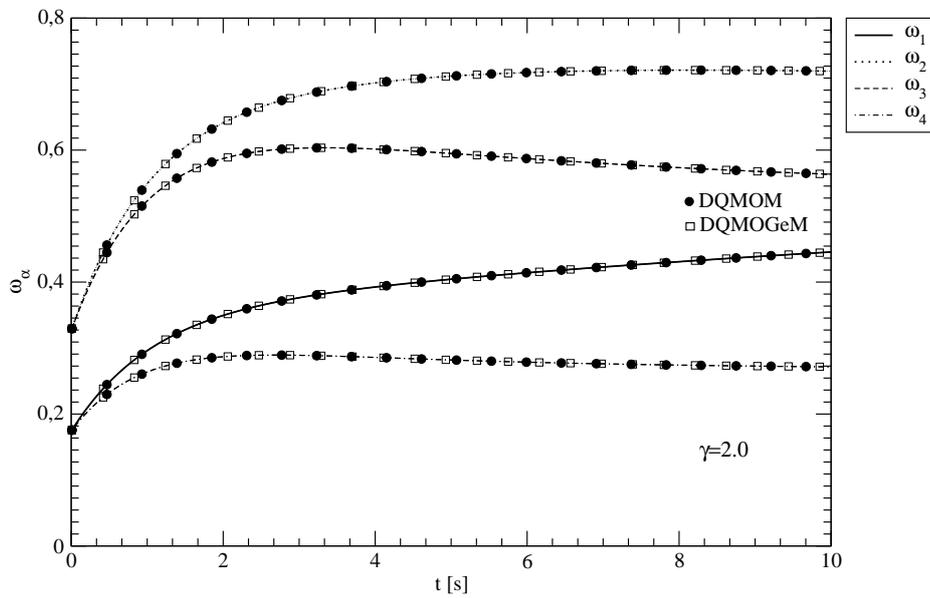


Figura 6.12: Comparação entre os perfis dos pesos para os métodos DQMOGeM e DQMOM no Caso 2.1.

## 6.5 Avaliação dos Erros na Evolução dos Momentos

Um método numérico é também qualificado pela sua capacidade de produzir menores erros na sua aproximação, em outras palavras, representar mais fielmente a solução de um problema físico. Portanto, para qualificar as abordagens aqui propostas optou-se por aferir os erros relativos percentuais,  $X_\alpha$ , de cada momento de ordem  $\alpha$  pela equação 6.20. Para verificar a dependência da evolução dos erros do momentos com o número de pesos e abscissas, cada caso teste foi plotado com  $N = 4$  e com  $N = 8$ . O erro relativo percentual de cada momento é definido por:

$$X_\alpha = \left| \frac{\mu_\alpha^{(e)} - \mu_\alpha}{\mu_\alpha^{(e)}} \right| 100(\%) \quad (6.20)$$

onde,  $\mu_\alpha^{(e)}$  é o momento padrão resultado da solução exata, e  $\mu_\alpha$  é o resultado da solução numérica. Os momentos são recalculados numericamente usando:

$$\mu_k = \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha^k \omega_\alpha \quad (6.21)$$

Em particular, os erros são introduzidos pela aproximação por quadratura das integrais associadas aos termos fonte de quebra e agregação. Esses erros são nulos se o produto entre a base polinômio ortogonal utilizado para geração dos momentos e os *kernels* de quebra e agregação pertencerem a  $\mathbb{P}_{2N-1}$ . Portanto, para que não haja erro alguns dos núcleos de quebra e agregação devem ser constantes. Então, quanto maior a ordem do polinômio usado para modelar esses núcleos, maior será o erro associado à aproximação. No caso 1, o núcleo de agregação é uma constante, e por isso, não é responsável pelo erros de aproximação. Neste mesmo caso, a frequência de quebra é uma função linear da variável interna,  $m$ , fazendo com que o erro desses termos seja proporcional ao parâmetro  $\Phi(\infty)$ . Então, quando o fenômeno de quebra é dominante ( $\Phi(\infty) = 3$ ) os erros de aproximação são acentuados. Para o caso 2, o parâmetro  $\gamma = 2$  produz erros de aproximação de quadratura proporcionais ao valor da variável independente  $m$ . Já com o parâmetro  $\gamma = \frac{1}{3}$ , os erros são superiores ao caso anterior, pois com esse parâmetro  $\gamma = \frac{1}{3}$ , a frequência de quebra não pertence a  $\mathbb{P}_{2N-1}$ .

A idéia aqui não é medir o erro associado a quadratura, visto que, para todos os métodos o erro de quadratura será da mesma ordem de grandeza para  $n$  iguais, mas sim mensurar a sensibilidade do sistema linear em propagar essa fonte de erro, além de realizar um comparativo entre dois casos com número de pontos de quadratura diferentes

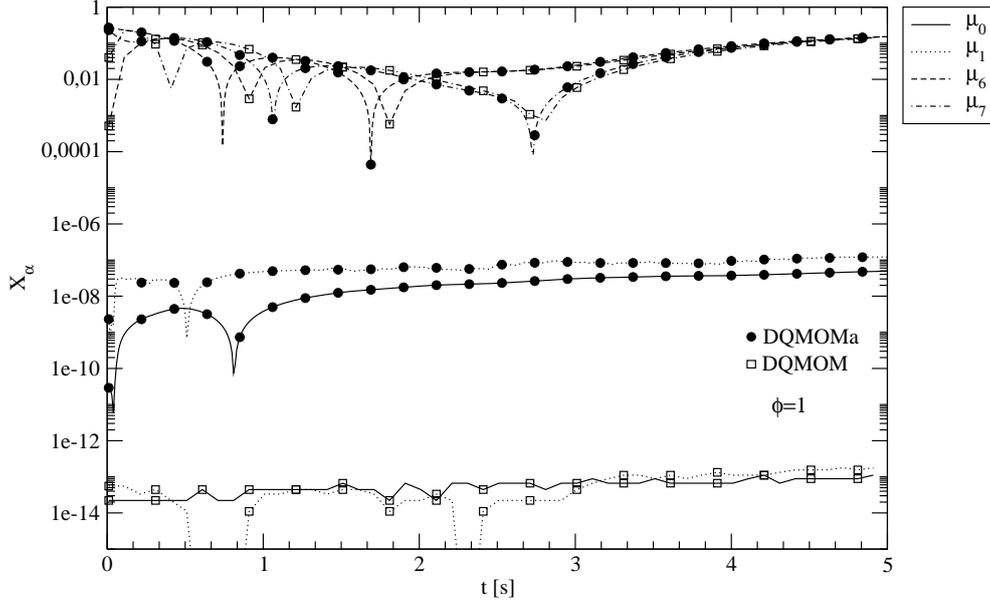


Figura 6.13: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 4$  para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 1.1.

### 6.5.1 Método Tradicional e Alternativo

Para os casos estudados foram escolhidos os momentos de menor ordem (zero e um) com  $N = 4$  e  $N = 8$ , pois ambos têm significado físico importante, representam propriedades conservativas do sistema (número e massa). Além disso, foram escolhidos para cada teste os momentos de maior ordem: os momentos de ordem 6 e 7, para  $N = 4$ , e os momentos de ordem 14 e 15, para  $N = 8$ . Isso porque, esse são os momentos que produzem maiores erros de aproximação.

Nas figuras 6.14 a 6.20 verifica-se que os erros para os métodos DQMOMa e DQMOM são da mesma ordem de grandeza, exceto pelo momentos  $\mu_0$  e  $\mu_1$ , onde a metodologia tradicional apresenta superioridade na maioria dos casos. Essa superioridade não se repete para os casos com domínio finito, uma vez que todos os casos são equivalentes quanto ao erro. Nas figuras 6.23 a 6.32 o comportamento mencionado acima se repetiu. Isso nos leva a crer que os métodos DQMOM e DQMOMeM são superiores para calcular os momentos de ordem zero em domínio semi-infinito e equivalentes para domínio finito. Cabe ressaltar que na figura 6.13 esse comportamento se inverteu: os momentos  $\mu_0$  e  $\mu_1$  foram mais bem representados pelo método alternativo.

Pode-se aferir nas figuras 6.13 e 6.17 que, com o aumento do parâmetro  $\Phi(\infty)$ , os erros dos momentos de maior ordem aumentam, pois os erros associados aos fenômenos de quebra são acentuados.

Nas figuras 6.21, 6.22, 6.31 e 6.32 nota-se com clareza que o momento de ordem zero não é conservado, isso porque a frequência de quebra não pertence a  $\mathbb{P}_{2N-1}$ ,

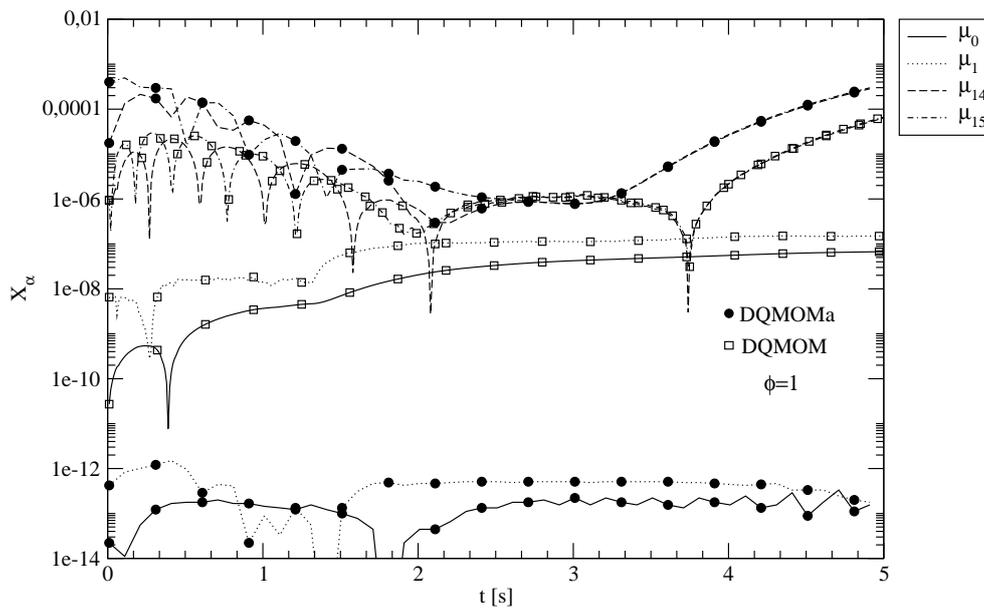


Figura 6.14: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 8$  para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 1.1.

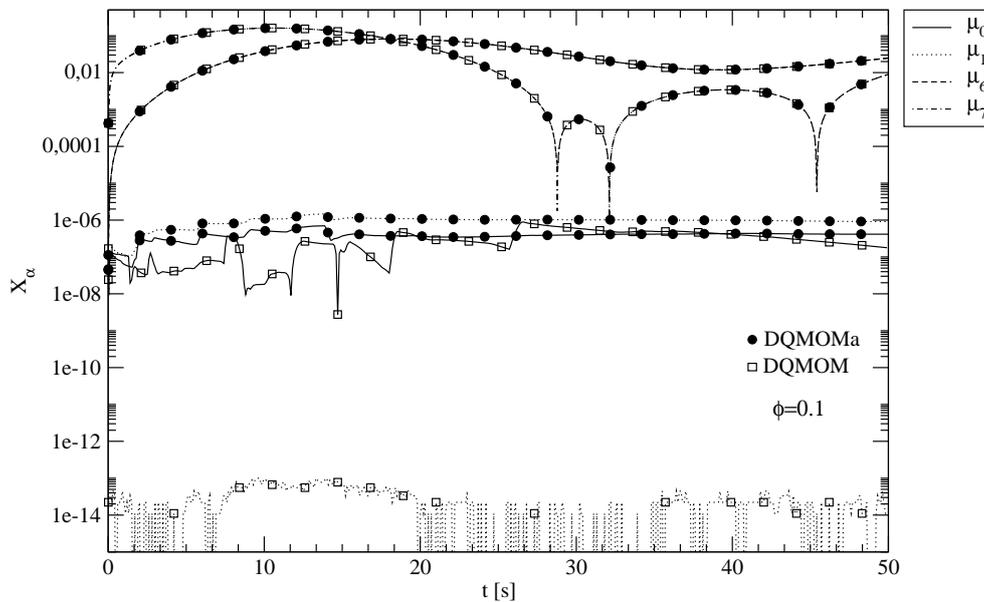


Figura 6.15: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 4$  para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 1.2.

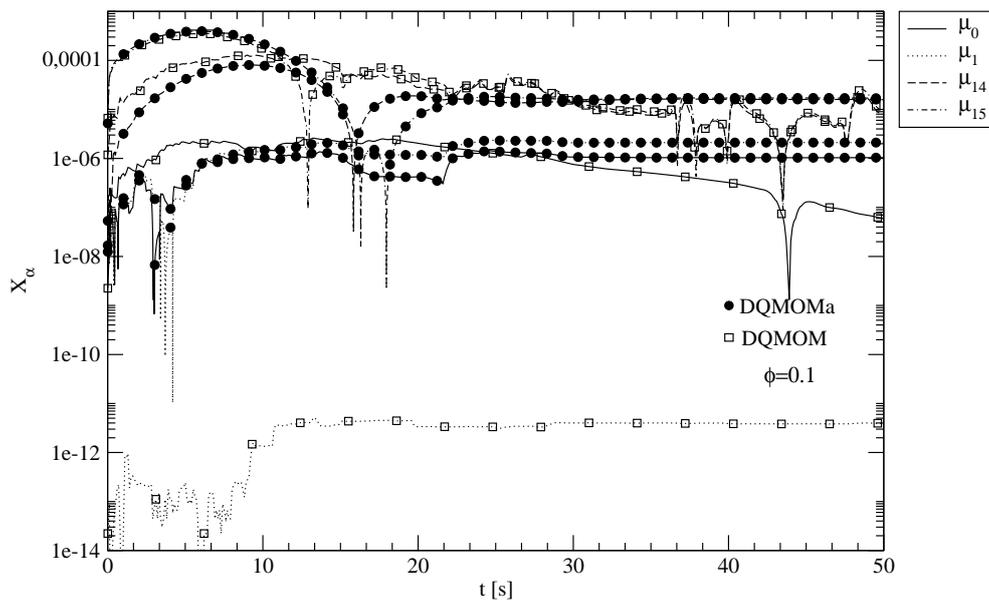


Figura 6.16: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 8$  para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 1.2.

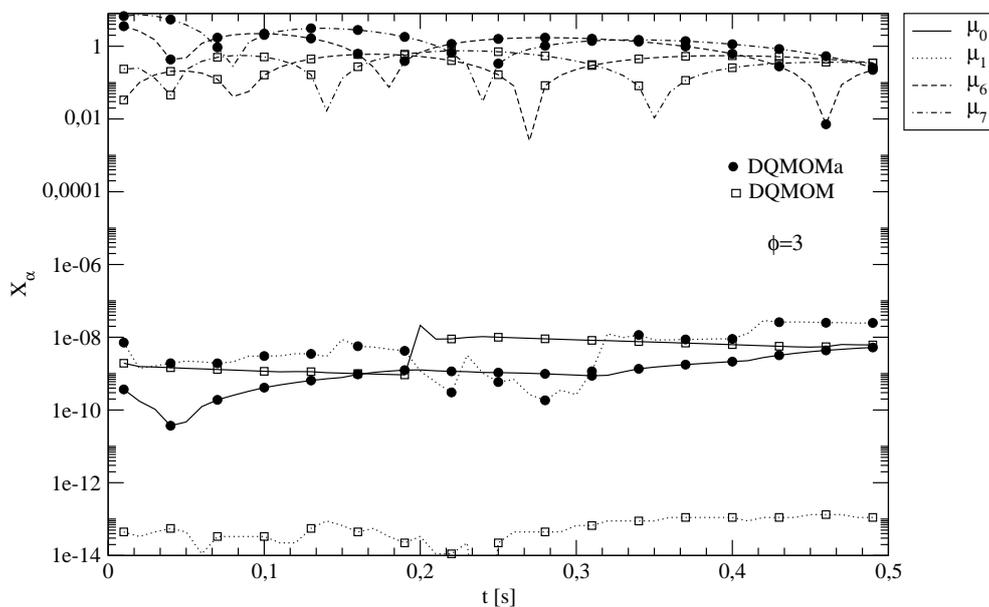


Figura 6.17: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 4$  para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 1.3.

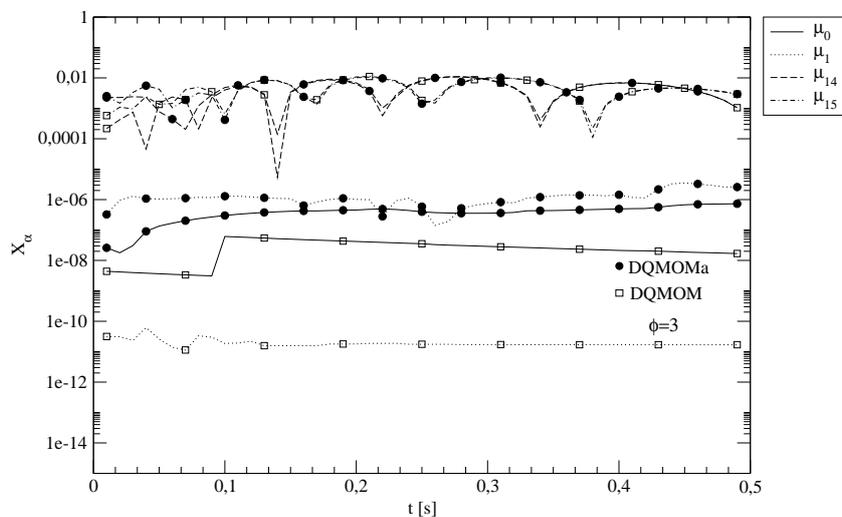


Figura 6.18: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 8$  para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 1.3.

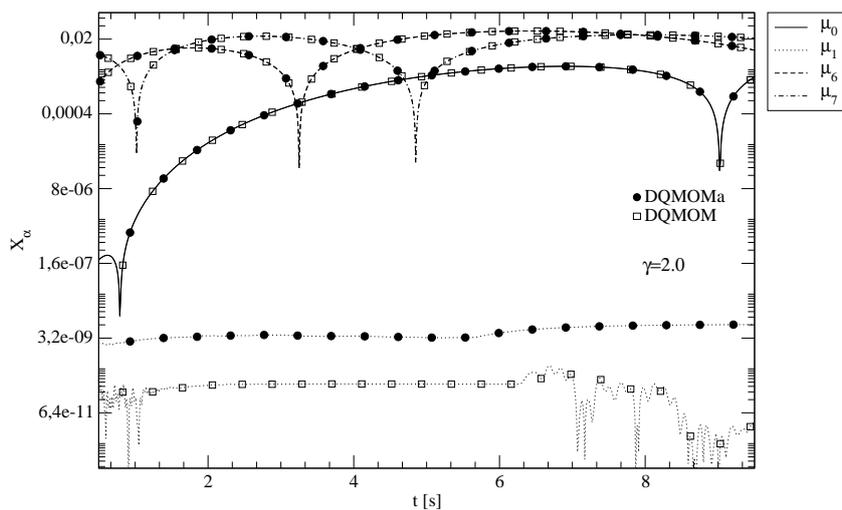


Figura 6.19: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 4$  para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 2.1.

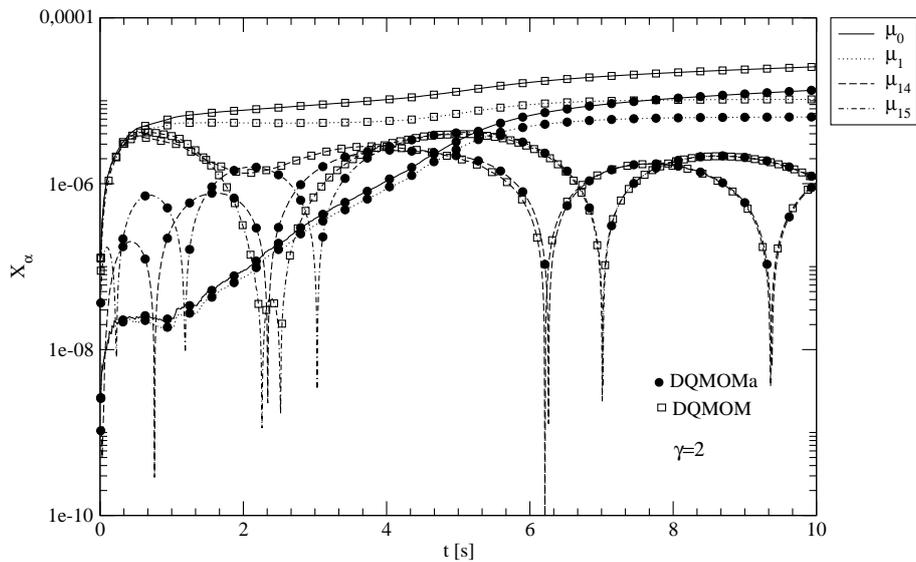


Figura 6.20: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 8$  para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 2.1.

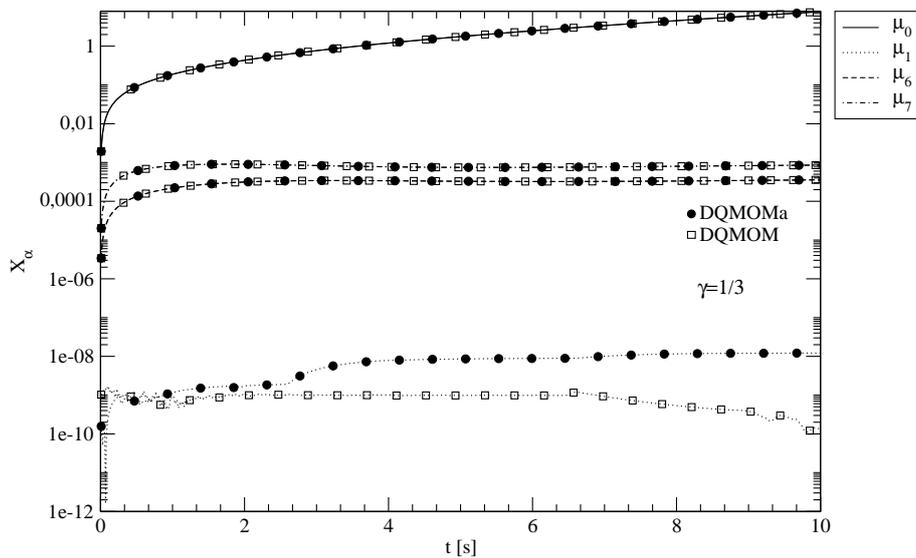


Figura 6.21: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 4$  para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 2.2.

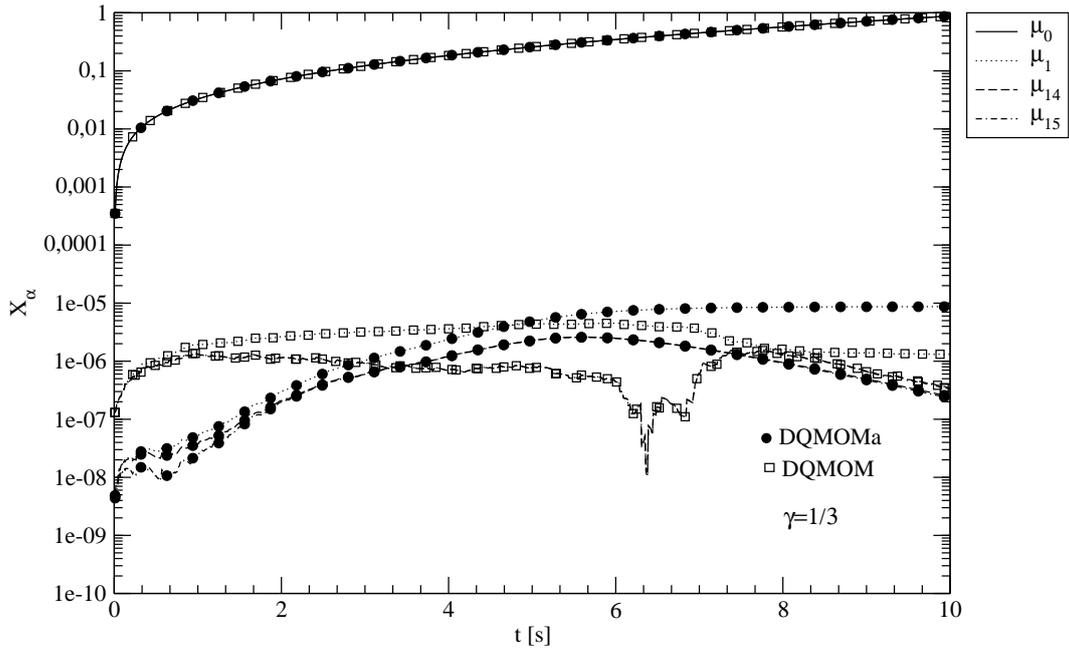


Figura 6.22: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 8$  para os métodos DQMOMa e DQMOM no Caso 2.2.

impossibilitando uma aproximação mais precisa do termo fonte de quebra, e consequentemente, dificultando a aproximação do momento de ordem zero.

Em suma, para o domínio semi-infinito os métodos tradicionais se mostraram mais eficientes em conservar os momentos  $\mu_0$  e  $\mu_1$ . Porém, de maneira geral os métodos são equivalentes quanto os momentos de ordem superior. Já para os casos de domínio semi-infinito os métodos se mostraram equivalentes.

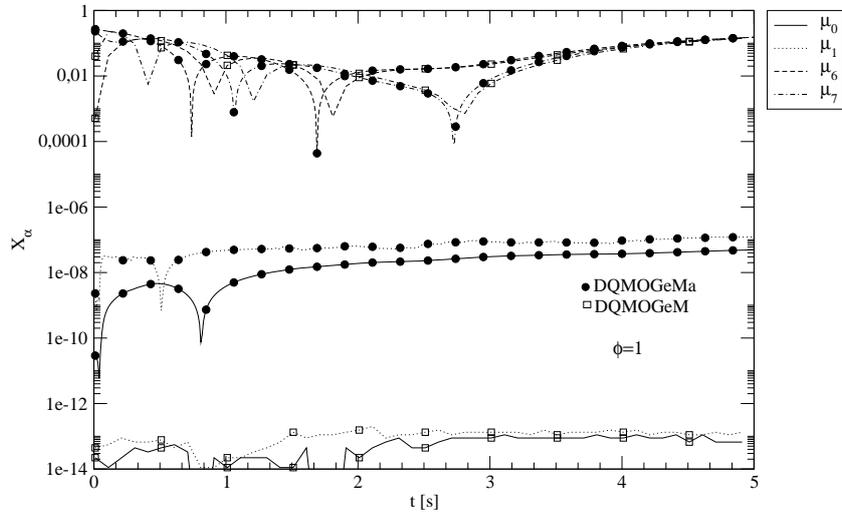


Figura 6.23: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 4$  para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 1.1.

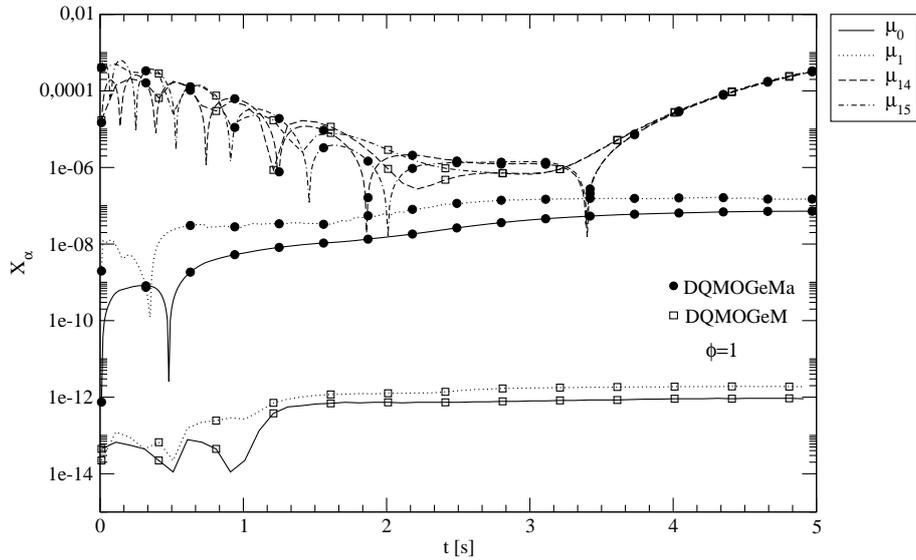


Figura 6.24: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 8$  para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 1.1.

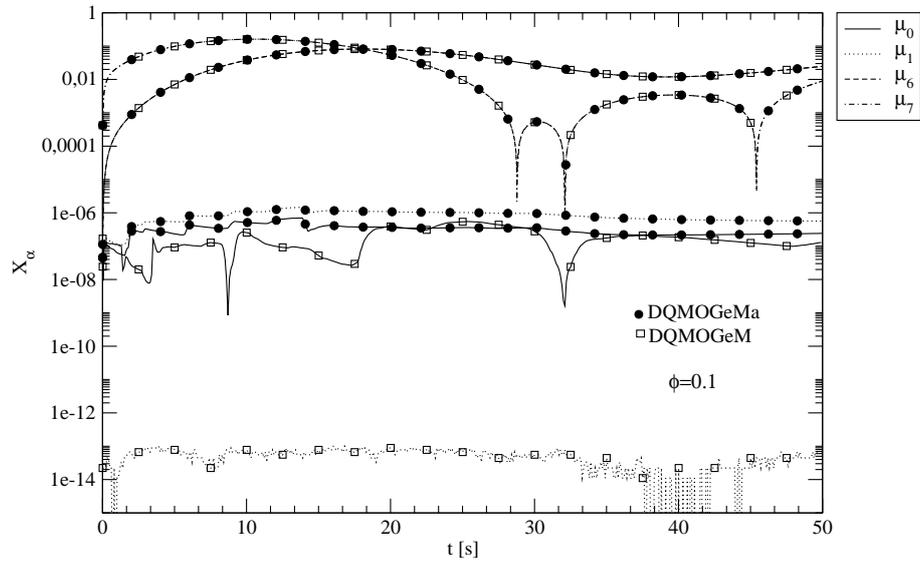


Figura 6.25: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 4$  para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 1.2.

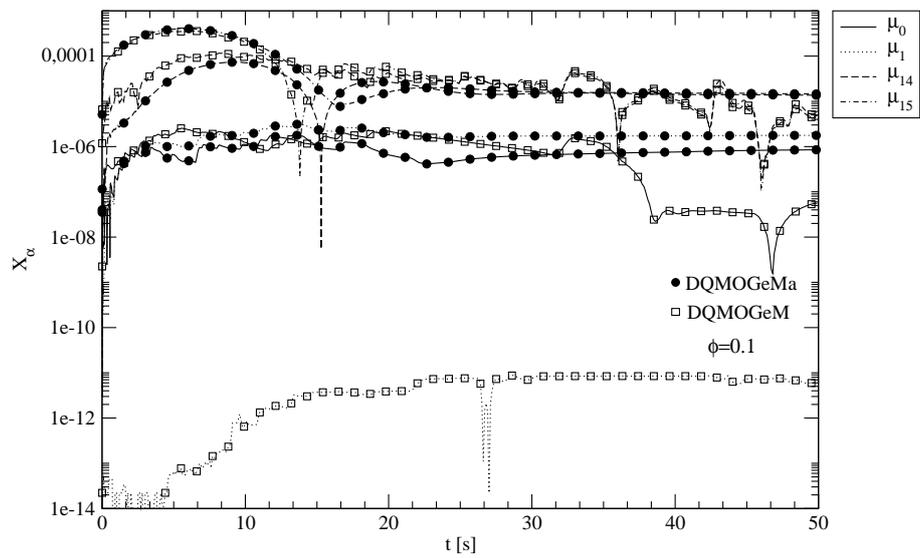


Figura 6.26: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 8$  para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 1.2.

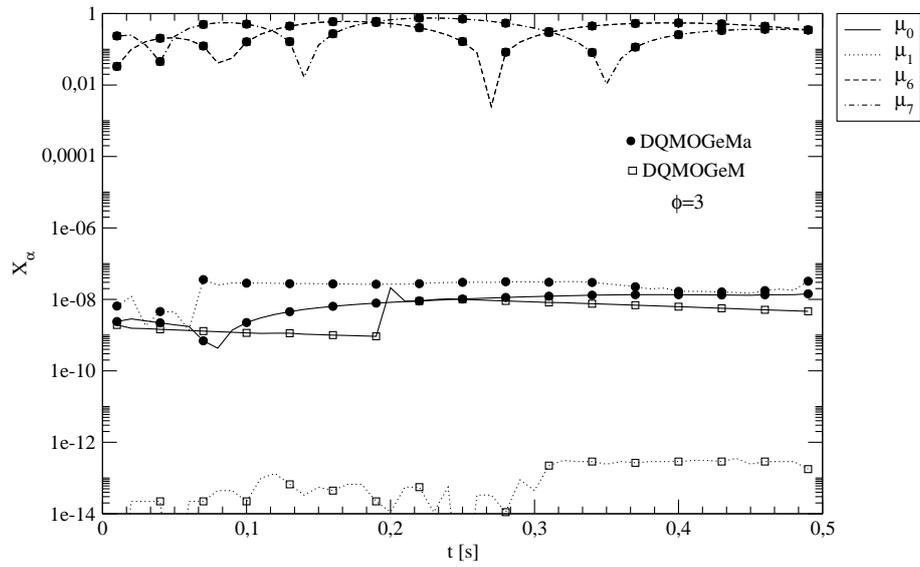


Figura 6.27: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 4$  para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 1.3.

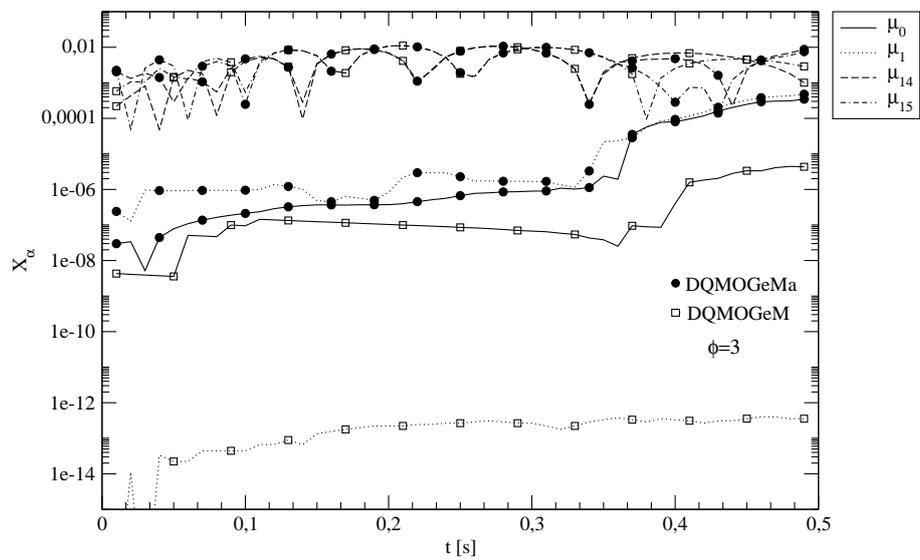


Figura 6.28: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 8$  para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 1.3.

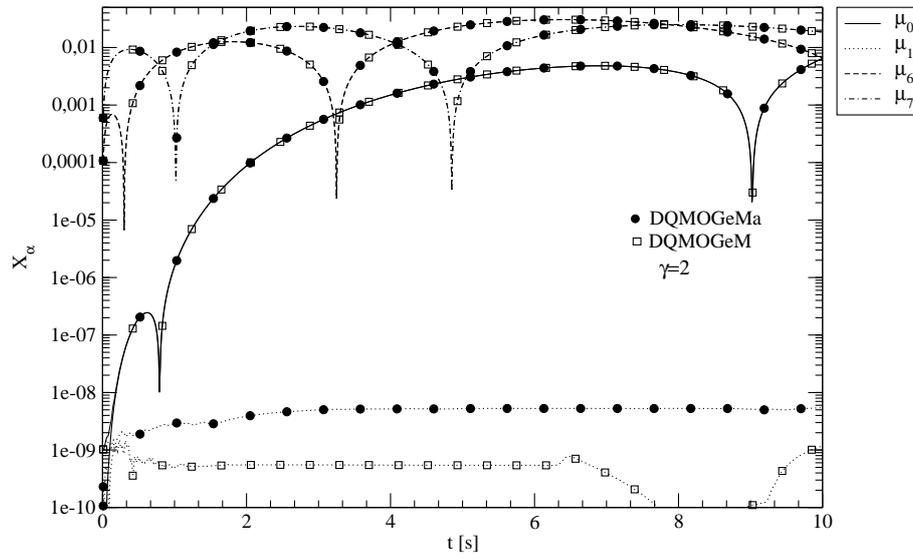


Figura 6.29: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 4$  para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 2.1.

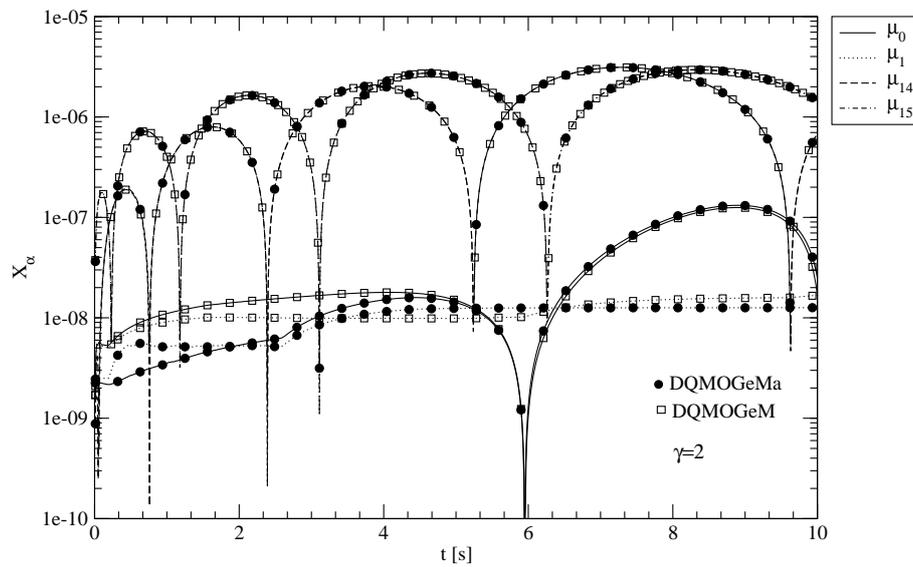


Figura 6.30: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 8$  para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 2.1.

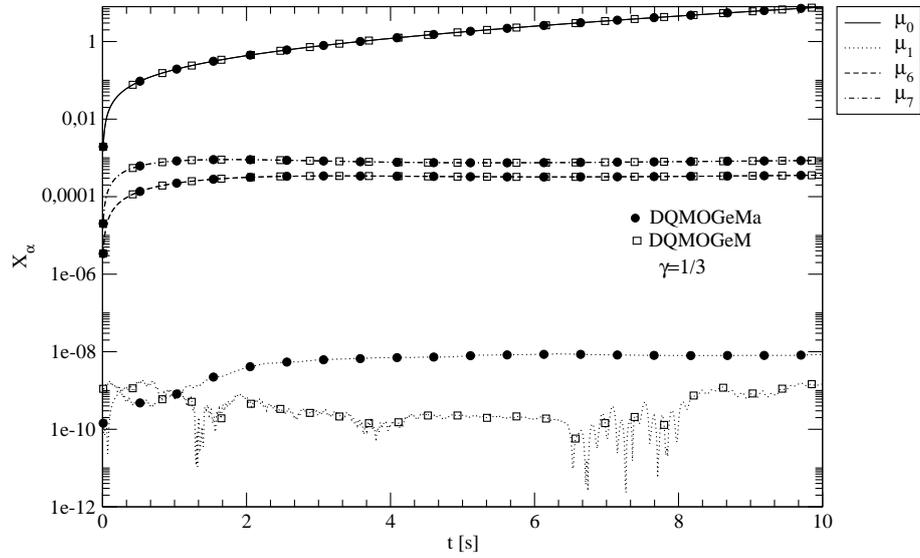


Figura 6.31: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 4$  para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 2.2.

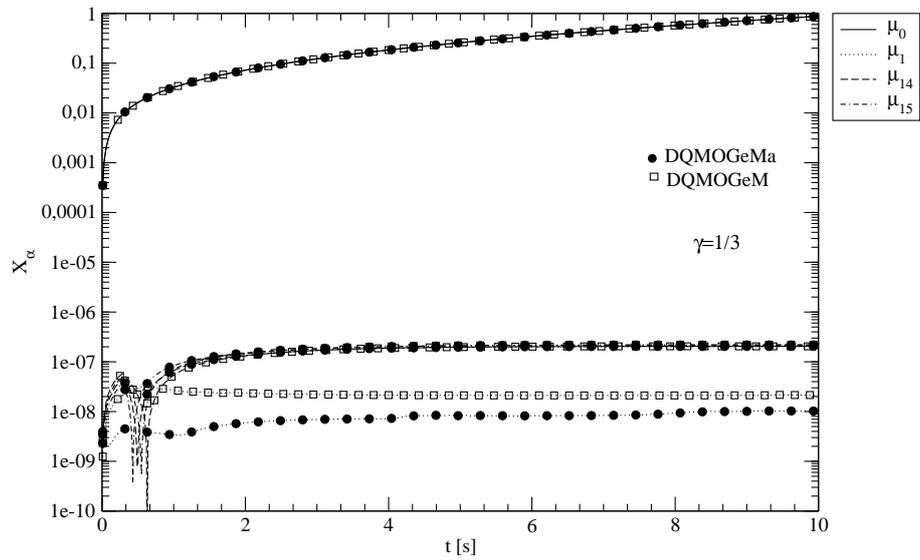


Figura 6.32: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 8$  para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 2.2.

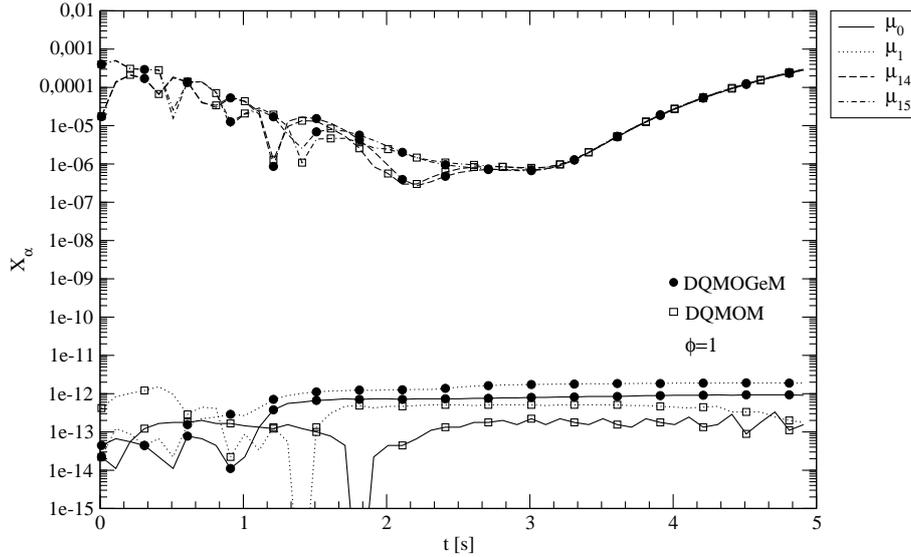


Figura 6.33: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 8$  para os métodos DQMOGeMa e DQMOGeM no Caso 1.1.

## 6.5.2 Momentos Generalizados e Padrão

Cabe agora comparar os métodos que utilizam momentos padrão e generalizados. No caso de domínio semi-finito os métodos se mostram semelhantes (figuras 6.33 a 6.36), exceto para o caso de quebra dominante que o método gerado com polinômios de Laguerre se mostrou levemente superior para  $\mu_1$ , como ilustrado na figura 6.36.

Por outro lado, para casos de domínio finito os DQMOGeM e DQMOGeMa são levemente superiores. No caso 2.1 a superioridade está no momentos  $\mu_0$  e  $\mu_1$ , neste caso os erros chegam a ser 1000 vezes menores que os métodos padrão. Já para o caso 2.2 a superioridade é observada em todos os momentos, excetuando-se o  $\mu_0$ , visto que sua aproximação é prejudicada por conta do *Kernel* de quebra com potência fracionada. Desta forma, considerando apenas o fator erro, recomenda-se o uso dos métodos DQMOGeMa para domínio semi-infinito e DQMOGeMa ou DQMOGeM para domínio finito.

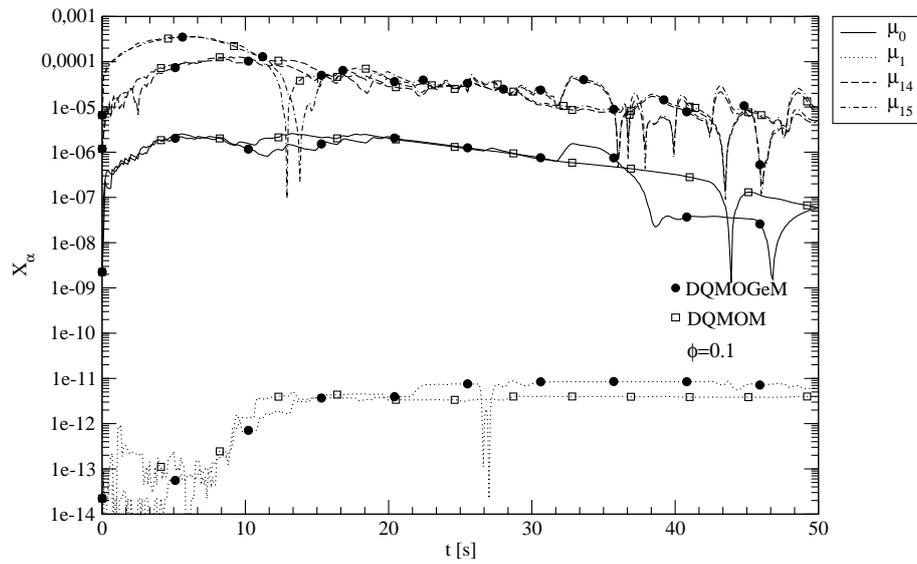


Figura 6.34: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 8$  para os métodos DQMOGeM e DQMOM no Caso 1.2.

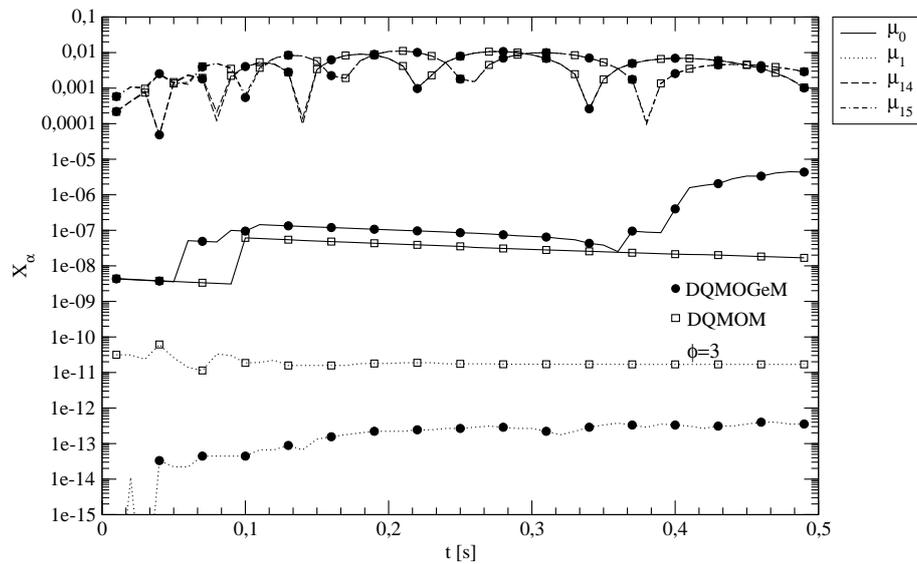


Figura 6.35: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 8$  para os métodos DQMOGeM e DQMOM no Caso 1.3.

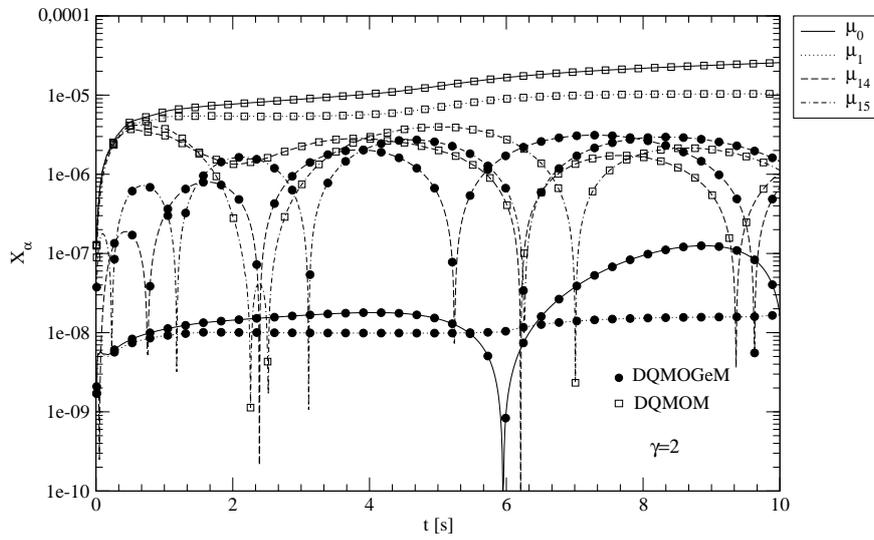


Figura 6.36: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 8$  para os métodos DQMOGeM e DQMOM no Caso 2.1.

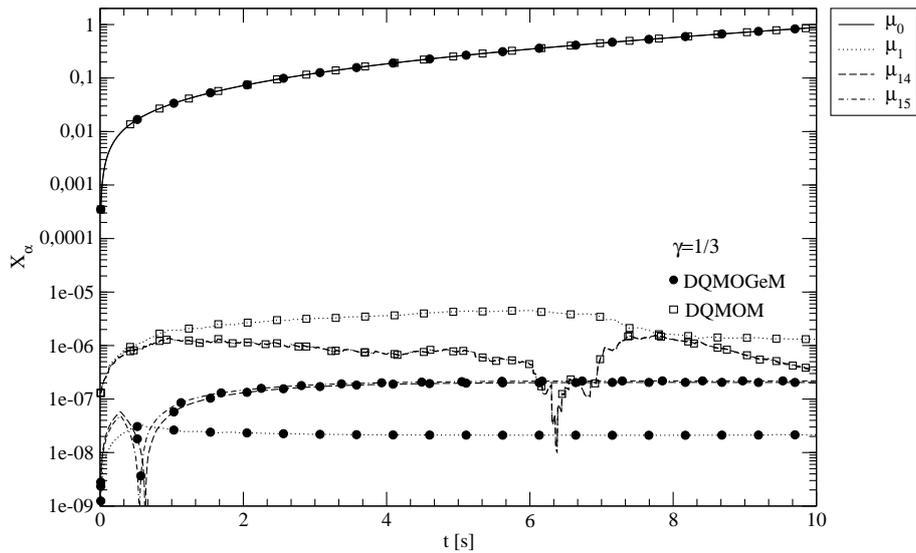


Figura 6.37: Comparação entre as evoluções dos erros dos momentos com  $N = 8$  para os métodos DQMOGeM e DQMOM no Caso 2.2.

## 6.6 Robustez

As simulações foram realizadas até o número máximo de pontos de quadratura possível para todos os métodos. Com o aumento do número de pontos de quadratura, fica cada vez mais difícil atingir valores elevados de critérios de convergência da **DASSLC**, então quando um método não converge para um determinado critério de convergência e um dado  $N$ , reduz-se o critério de convergência até o mesmo convergir. Se a metodologia testada não convergir com o critério de convergência de  $10^{-4}$ , assume-se que  $N$  atingiu o seu valor máximo.

Uma maneira de aferir e justificar o número máximo de pesos e abscissas para cada método, é avaliando o número de condicionamento do sistema linear de cada método. Seja o sistema linear  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ . O número de condicionamento mede a sensibilidade da solução do sistema,  $\mathbf{x}$ , à perturbações em  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{b}$ . Se o número de condicionamento for grande, pequenos erros nos termos fonte de quebra amplificam os erros na solução do sistema linear. Nos gráficos abaixo,  $NC$  representa o número de condicionamento, e quando  $NC$  deixar de variar no gráfico, indica que o método falhou. Cabe ressaltar que a avaliação realizada nessa seção é qualitativa. Para uma análise mais detalhada deve-se utilizar o número de condicionamento mínimo, com o qual é possível reduzir o problema de escala do sistema linear gerado pelos métodos.

Na figura 6.38 os métodos DQMOM e DQMOGeM divergem com  $n = 10$ , já os métodos DQMOMa e DQMOGeMa divergem com  $n = 13$ . Isso sugere que os métodos alternativos são mais robustos. Outro fato observado é que o número de condicionamento para o método DQMOGeMa é levemente inferior, isso significa que o mesmo é menos sensível aos erros de associados a aproximação por quadratura. Para os outros casos, o resultado quanto ao número de condicionamento é o mesmo, visto que o sistema linear é o mesmo, o que muda é a amplitude dos erros de quadratura. No caso onde a quebra é dominante o único que difere do gráfico acima é o método DQMOM, onde o número máximo de pontos de aproximação é 8.

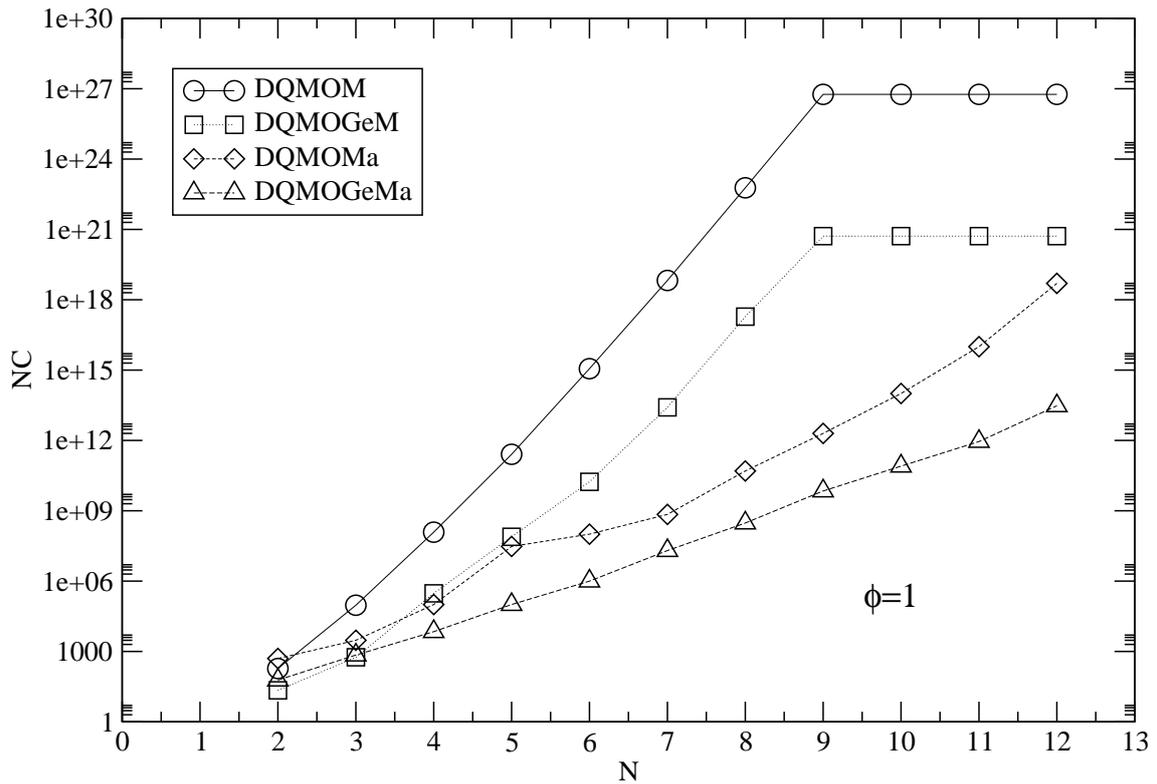


Figura 6.38: Número de condicionamento por número de pontos de quadratura para o caso 1.1.

As figuras 6.39 e 6.40 descrevem comportamento semelhante, visto que o sistema linear é o mesmo. Nesses gráficos pode-se aferir que as metodologias DQMOGeM e DQMOGeMa são muito superiores quanto a robustez, pois tanto para o caso 2.1 quanto para o caso 2.2, atingindo  $N = 18$ . Já nos métodos que usam momentos padrão, o número máximo de pontos de quadratura é 11 para o método DQMOM e 12 para o método DQMOMa no caso 2.1, e 11 pontos no caso 2.2 para ambos os métodos.

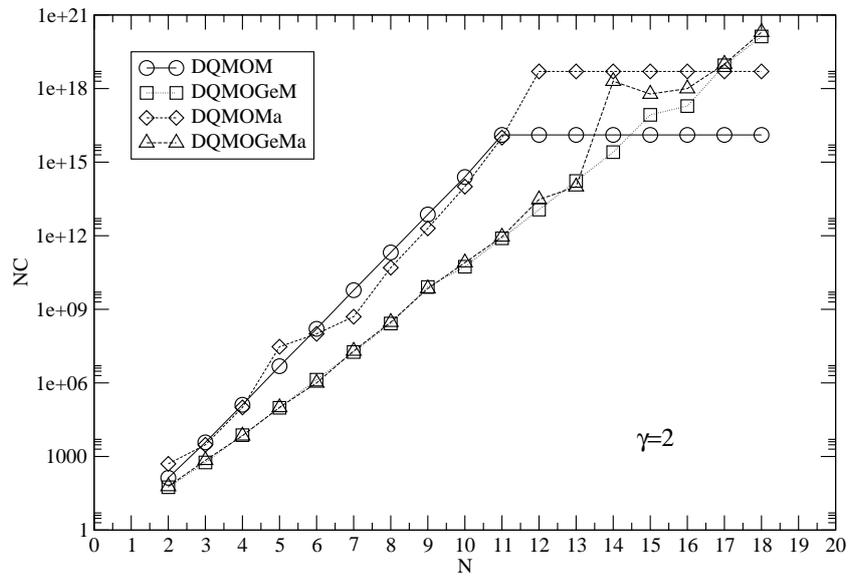


Figura 6.39: Número de condicionamento por número de pontos de quadratura para o caso 2.1.

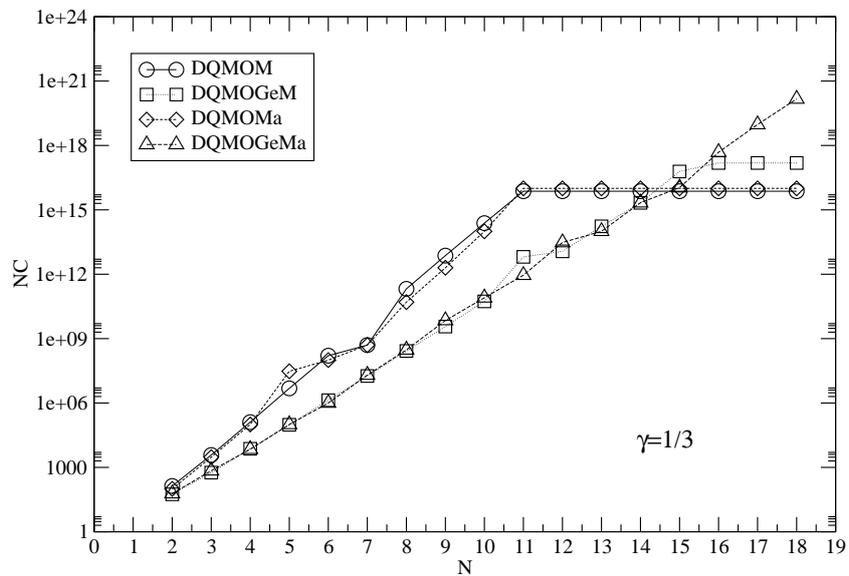


Figura 6.40: Número de condicionamento por número de pontos de quadratura para o caso 2.2.

## 6.7 Tempo Computacional

Uma avaliação do tempo de computacional foi realizada para os métodos DQMOM, DQMOMa, DQMOGeM e DQMOGeMa para os casos 2.1 e 2.2 de domínio finito e para os casos 1.1 e 1.3. A rotina intrínseca do *G++*, `clock()`, foi utilizada para obter o tempo de *CPU* em segundos com acurácia de 0,01 s. As simulações foram realizadas em um notebook com precisão de 32 bits, e com processador Intel Core 2 Duo T7250 de 2GHZ com 2GB de RAM em sistema operacional Linux, Ubuntu 9.04. O tempo computacional foi avaliado com o número de pontos de quadratura,  $N$  entre 2 e 9 para o caso 1.3, e entre 2 e 11 para os casos 1.1, 2.1 e 2.2. Visando comparar todos os métodos, a tolerância da **DASSLC** foi de  $10^{-6}$ , pois nem todos os métodos convergem com a mesma tolerância, então optou-se escolher um critério em que todos convergissem.

A figura 6.41 apresenta que todos os métodos tiveram o tempo de computação semelhante, mas o método DQMOMa se destacou frente aos outros métodos. Os métodos que usam momentos generalizados necessitam de um número maior de operações para o cálculo recursivo das bases de polinômios ortogonais. Esse é o motivo pelo qual estes métodos são ligeiramente mais lentos. Efeito semelhante pode ser observado na figura 6.42. Existe um aumento muito rápido do  $tc$  (tempo computacional) para  $N = 9$  para o método DQMOM, que ocorre pela falta de robustez desse método, que diverge para  $N > 9$ .

Na figura 6.43 pode-se observar o tempo computacional foi o maior dos três, uma vez que os erros de quadratura são maiores nesse caso. Além disso, nos métodos DQMOM e DQMOGeM não geraram solução para  $N = 9$  no caso 1.3 por perda de precisão.

Nos casos de domínio finito, inicialmente, os quatro métodos são praticamente equivalentes quanto ao  $tc$ , até que com  $N = 6$ , no caso 2.1, e  $N = 7$  no caso 2.2, os métodos DQMOGeM e DQMOGeMa se tornam 10 vezes mais rápidos. Na realidade os outros métodos se tornam 10 vezes mais lentos. Deste modo, enquanto o erro numérico não desqualifica a solução, os métodos com momentos padrão são mais rápidos. Porém, estes acumulam erros mais rapidamente e, portanto, são menos robustos que os usam momentos generalizados. Nas figuras 6.41, 6.42, 6.44 e 6.45 o aumento repentino do  $tc$  caracteriza o início da perda de robustez.

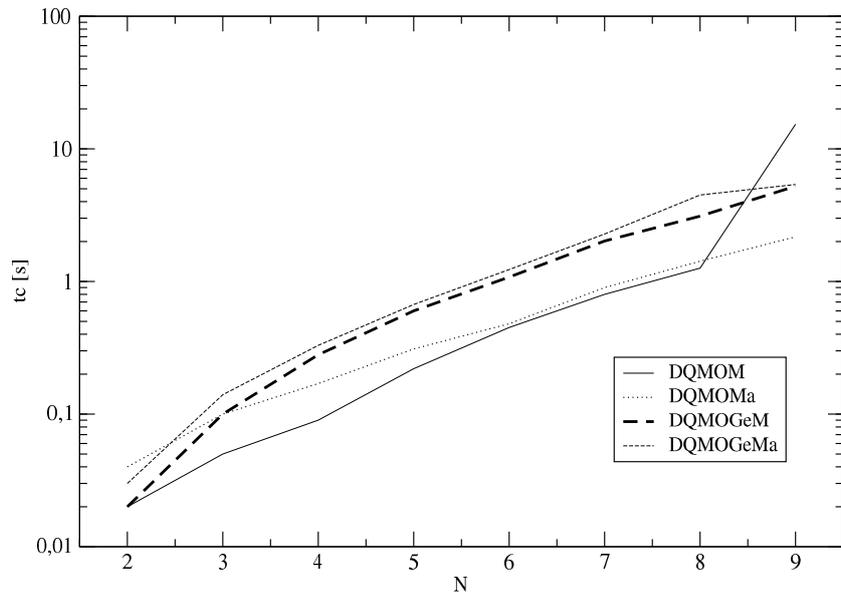


Figura 6.41: Tempo computacional para o Caso 1.1 em todos os métodos, onde  $N$  é o número de pontos de quadratura.

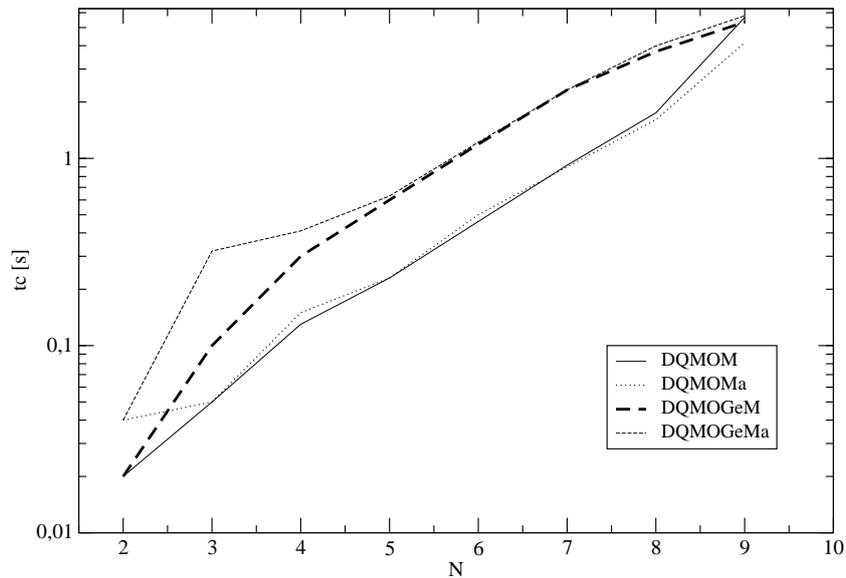


Figura 6.42: Tempo computacional para o Caso 1.2 em todos os métodos, onde  $N$  é o número de pontos de quadratura.

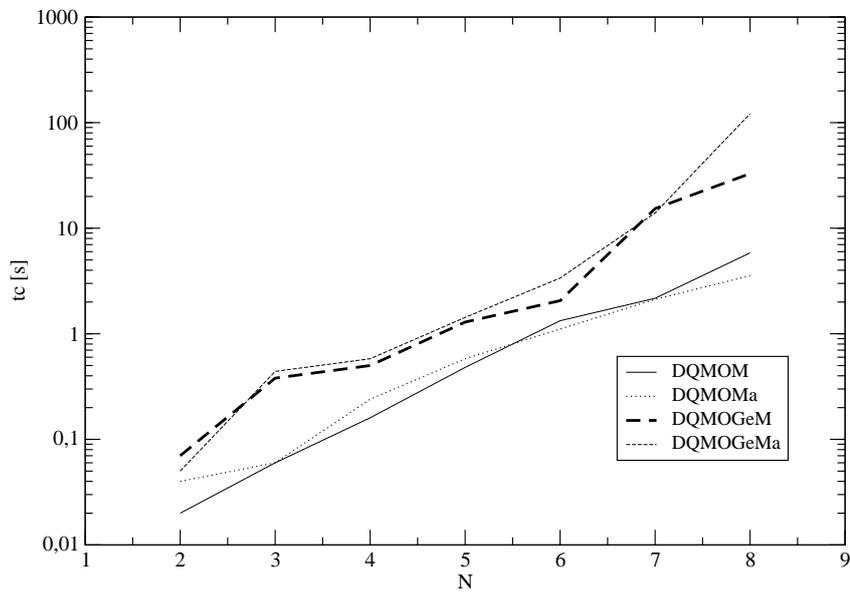


Figura 6.43: Tempo computacional para o Caso 1.3 em todos os métodos, onde  $N$  é o número de pontos de quadratura.

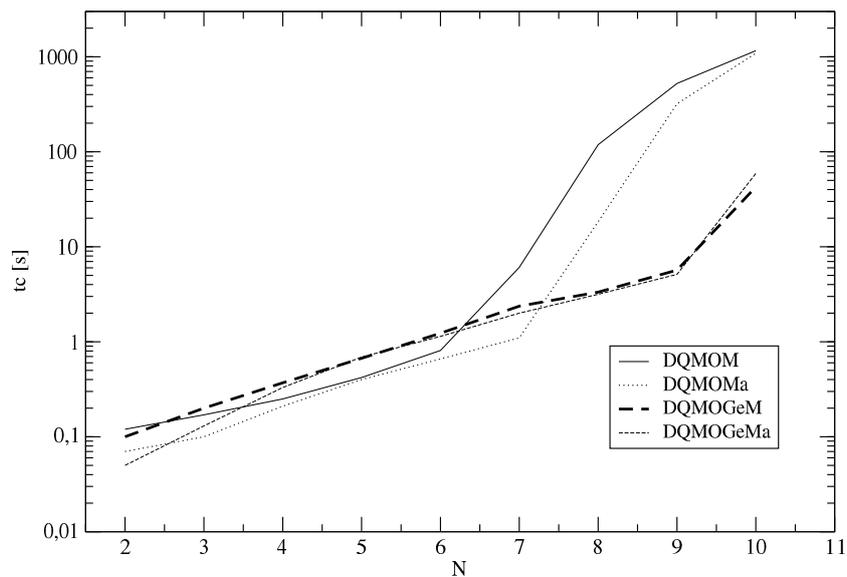


Figura 6.44: Tempo computacional para o Caso 2.1 em todos os métodos, onde  $N$  é o número de pontos de quadratura.

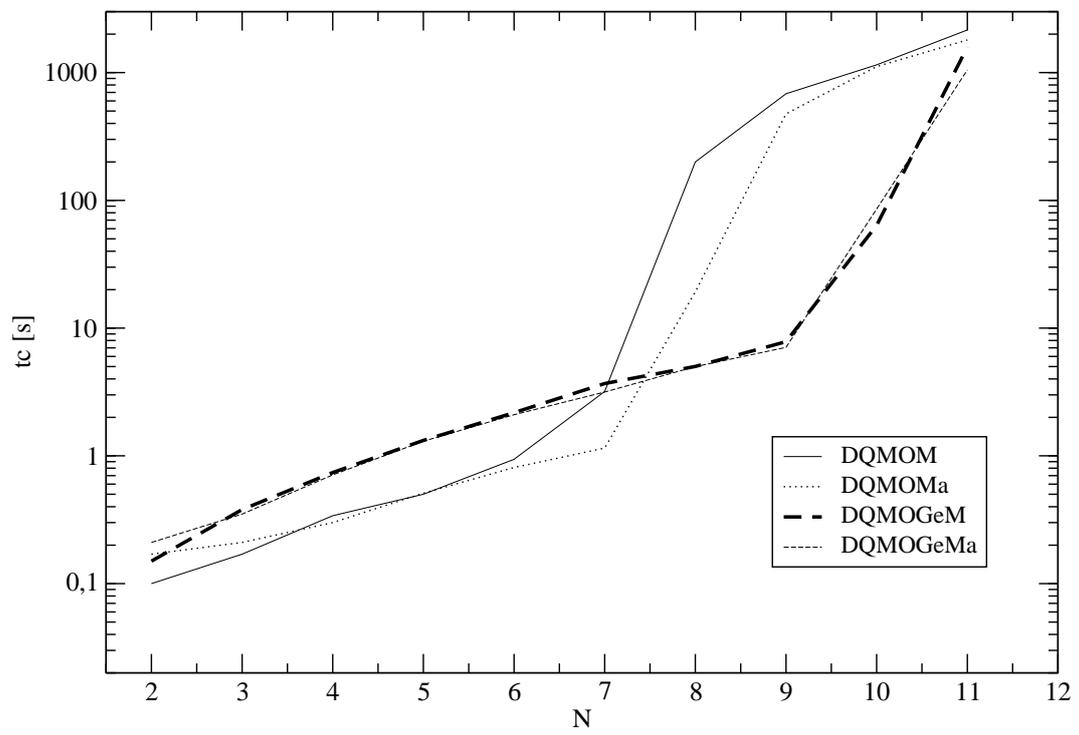


Figura 6.45: Tempo computacional para o Caso 2.2 em todos os métodos, onde  $N$  é o número de pontos de quadratura.

# Capítulo 7

## Conclusões e Sugestões

Como já era esperado, a análise dos resultados mostrou, que as acurácias dos métodos são semelhantes, uma vez que a fonte de erro é originada da aproximação por quadratura. Não obstante, as novas formulações podem caracterizar sistemas lineares mais bem-condicionados que os métodos tradicionais.

Então, para qualificar os métodos foi avaliada a robustez, a equivalência entre os resultados dos pesos e abscissas, o tempo de computação e o erro relativo percentual. Observou-se que todos os métodos são equivalentes entre si quanto à determinação dos pesos e abscissas. Ao confrontar os erros relativos percentuais, verificou-se que o método alternativo conserva os momentos  $\mu_0$  e  $\mu_1$  para o problema com domínio semi-infinito, sendo que o método tradicional é ligeiramente superior em conservar esses momentos. Já com domínio finito, os métodos alternativos são mais vantajosos, pois os erros gerados são menores. Ademais, constatou-se que os métodos DQMOGeM e DQMOGeMa são mais acurados quando comparados aos métodos que são derivados de momentos padrão.

Enquanto os erros de truncamento na solução do sistema linear são inferiores a tolerância especificada na **DASSLC**, os métodos que usam  $\mu_k$  são mais velozes. Contudo, acumulam erros mais rapidamente e, portanto, os métodos que usam  $\mu_k^\phi$  são mais robustos, isto é, os seus erros de truncamento são inferiores (menores números de condicionamento)

Por fim, aliando as características de acurácia e performance, recomenda-se o uso do método DQMOMa para domínio semi-infinito. Os resultados aqui obtidos estão de acordo com o trabalho de GROSCH *et al.* [23]: os autores verificaram que o método DQMOM-ODE (DQMOMa) é superior; entretanto GROSCH *et al.* [23] só estudaram casos em domínio semi-infinito, diferente do trabalho aqui proposto, que aplica a metodologia para domínio finito, usando polinômios ortogonais de Legendre para gerar os momentos generalizados. A escolha do DQMOMa é justificada pelo fato desse método combinar velocidade de computação, acurácia e robustez, já discutidos no capítulo anterior. Para problemas com domínio finito, os métodos

que usufruem de momentos generalizados de Legendre são, sem dúvida, os mais eficientes. É recomendável para domínio finito (que engloba a maioria dos problemas de engenharia) o método DQMOGeMa, que além de rápido e acurado, é o método mais robusto. Contudo, o ponto fraco de todos os métodos é a acurácia da aproximação por quadratura. Como sugestão de desenvolvimento futuro, implementar uma nova metodologia já desenvolvida por LAGE [35], formulada em termos dos resíduos ponderados dos métodos de momentos generalizados fechados por quadratura. o DuQMoGeM (*Dual-Quadrature Method of Generalized Moments*) é capaz de resolver o problema de acurácia dos métodos existentes LAGE [35]. A essência dessa nova formulação é mesclar dois tipos de quadraturas: a quadratura ótimo adaptativa, para evolução do sistema particulado, e outro tipo de quadratura que garante uma acurácia especificada para os termos fonte. Essa formulação é suficientemente geral para ser expandida para  $n$  dimensões. Infelizmente, esse método é extremamente custoso. Para superar essa limitação, a idéia inicial é implementar esse novo método utilizando o poder da computação em paralelo, em específico, na nova tecnologia de paralelização que utiliza os processadores da *GPU* (*Graphics Processing Unit*), programação paralela em uma placa gráfica.

# Referências Bibliográficas

- [1] ALEXOPOULOS, A., KIPARISSIDES, C., 2007, “Solution of the bivariate dynamic population balance equation in batch particulate systems: Combined aggregation and breakage”, *Chemical Engineering Science*, v. 62, n. 18-20, pp. 5048 – 5053. ISSN: 0009-2509. doi: DOI:10.1016/j.ces.2007.01.039. 19th International Symposium on Chemical Reaction Engineering - From Science to Innovative Engineering - ISCRE-19.
- [2] ARAUJO, J. M., 2006, *Estudo dos modelos de quebra e coalescência para escoamentos polidispersos*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, Brasil, RJ.
- [3] BARRET, J. E. JHEETA, J., 1996, “Improving the accuracy of the moments method for solving the aerosol dynamic equation”, *Aerosol Science*, v. 27, pp. 1135 – 1142.
- [4] BLECK, R., 1970, “A Fast Approximate Method for Integrating the Stochastic Coalescence Equation”, *Geophysical Research Oceans*, v. 49, pp. 77–80.
- [5] BOVE, S., SOLBERG, T., HJERTAGER, B. H., 2005, “A novel algorithm for solving population balance equations: the parallel parent and daughter classes. Derivation, analysis and testing”, *Chemical Engineering Science*, v. 60, n. 5, pp. 1449 – 1464. ISSN: 0009-2509. doi: DOI:10.1016/j.ces.2004.10.021.
- [6] CHAKRABORTY, J., KUMAR, S., 2007, “A new framework for solution of multidimensional population balance equations”, *Chemical Engineering Science*, v. 62, n. 15, pp. 4112 – 4125. ISSN: 0009-2509. doi: DOI: 10.1016/j.ces.2007.04.049.
- [7] CHEN, M.-Q., HWANG, C., SHIH, Y.-P., 1996, “A wavelet-Galerkin method for solving population balance equations”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 20, n. 2, pp. 131 – 145. ISSN: 0098-1354. doi: DOI: 10.1016/0098-1354(94)00010-L.

- [8] CROWE, C., SOMMERFELD, M., TSUJI, Y., 1998, *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. CRC Press.
- [9] DAMIAN, R., 2007, *Acomplamento de Balanço Populacional à simulação computacional de escoamentos polidispersos*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE/UFRJ, Brasil, RJ,.
- [10] DAS, P. K., 1996, “Monte Carlo simulation of drop breakage on the basis of drop volume”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 20, n. 3, pp. 307 – 313. ISSN: 0098-1354. doi: DOI:10.1016/0098-1354(95)00017-8.
- [11] DEBRY, E., SPORTISSE, B., JOURDAIN, B., 2003, “A stochastic approach for the numerical simulation of the general dynamics equation for aerosols”, *Journal of Computational Physics*, v. 184, n. 2, pp. 649 – 669. ISSN: 0021-9991. doi: DOI:10.1016/S0021-9991(02)00041-4.
- [12] DORAO, C., JAKOBSEN, H., 2006, “The quadrature method of moments and its relationship with the method of weighted residuals”, *Chemical Engineering Science*, v. 61, n. 23, pp. 7795 – 7804. ISSN: 0009-2509. doi: DOI:10.1016/j.ces.2006.09.014.
- [13] DORAO, C., JAKOBSEN, H., 2008, “hp-adaptive least squares spectral element method for population balance equations”, *Applied Numerical Mathematics*, v. 58, n. 5, pp. 563 – 576. ISSN: 0168-9274. doi: DOI: 10.1016/j.apnum.2006.12.005.
- [14] EIBECK, A., WAGNER, W., 2001, “Stochastic Particle Approximations for Smoluchoski’s Coagulation Equation”, *Annals of Applied Probability*, v. 11, pp. 1137 – 1165.
- [15] EYRE, D., WRIGHT, C., REUTER, G., 1988, “Spline-Collocation with adaptive mesh grading for solving the stochastic coagulation equation”, *Computational Physics*, v. 78, pp. 288 – 304.
- [16] FRENKLACH, M., WANG, H., 1991, “Detailed modeling of soot particle nucleation and growth”, *Symposium (International) on Combustion*, v. 23, n. 1, pp. 1559 – 1566. ISSN: 0082-0784. doi: DOI:10.1016/S0082-0784(06)80426-1. Twenty-Third Symposium (International) on Combustion.
- [17] FRIEDLANDER, S. K., 2000, *Smoke, dust and haze: Fundamentals of aerosol dynamics (2 ed.)*. Oxford University Press.

- [18] GAUTSCHI, W., 1994, “Algorithm 726: ORTHPOL a package of routines for generating orthogonal polynomials and Gauss-type quadrature rules”, *ACM Transactions on Mathematical Software*, v. 20, pp. 21–62.
- [19] GAUTSCHI, W., 2004, *Orthogonal Polynomials - Computation and Approximation*. Oxford Science.
- [20] GELBARD, F., SEINFELD, J. H., 1978, “Numerical solution of the dynamic equation for particulate systems”, *Computational Physics*, v. 28, pp. 357 – 375.
- [21] GOODSON, M., KRAFT, M., 2004, “Simulation of coalescence and breakage: an assessment of two stochastic methods suitable for simulating liquid-liquid extraction”, *Chemical Engineering Science*, v. 59, n. 18, pp. 3865 – 3881. ISSN: 0009-2509. doi: DOI:10.1016/j.ces.2004.05.029.
- [22] GORDON, R., 1968, “Error Bounds in Equilibrium Statistical Mechanics”, *Journal of Mathematical Physics*, v. 9, pp. 655 – 663.
- [23] GROSCH, R., MARQUARDT, W., BRIESEN, H., WULKOW, M., 2006, “Generalization and Numerical Investigation of QMOM”, *A.I.C.H.E.*, v. 53, pp. 207 – 227.
- [24] HIDY, G. M., BROCK, J. R., 1970, *the dynamics of aerocolloidal systems*. Oxford: Pergamon.
- [25] HOUNSLOW, M., RYALL, R., MARSHALL, V., 1988, “A Discretized Population Balance for Nucleation, Growth and Aggregation”, *A.I.C.H.E.*, v. 34, pp. 1821 – 1832.
- [26] HULBURT, H., KATZ, S., 1964, “Some problems in particle technology: A statistical mechanical formulation”, *Chemical Engineering Science*, v. 19, n. 8, pp. 555 – 574. ISSN: 0009-2509. doi: DOI:10.1016/0009-2509(64)85047-8.
- [27] IMMANUEL, C. D., DOYLE, F. J., 2005, “Solution technique for a multi-dimensional population balance model describing granulation processes”, *Powder Technology*, v. 156, n. 2-3, pp. 213 – 225. ISSN: 0032-5910. doi: DOI:10.1016/j.powtec.2005.04.013. Particle Technology Forum Special Issue - Papers presented in the Particle Technology Forum sessions at the 2003 Annual AIChE meeting in San Francisco (November, 2003).
- [28] JOHNSON, R., WICHERN, D., 1992, *Applied multivariate statistical analysis*. Prentice-Hall.

- [29] KENDALL, D., 1950, “An Artificial Realization of a Simple Birth-and-Death Process”, *Royal Statistical Society, Serie B*, v. 12, pp. 116 – 119.
- [30] KREPPER, E., LUCAS, D., PRASSER, H.-M., 2005, “On the modelling of bubbly flow in vertical pipes”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 235, n. 5, pp. 597 – 611. ISSN: 0029-5493. doi: DOI:10.1016/j.nucengdes.2004.09.006.
- [31] KUMAR, S., RAMKRISHNA, D., 1996, “On the solution of population balance equations by discretization–I. A fixed pivot technique”, *Chemical Engineering Science*, v. 51, n. 8, pp. 1311 – 1332. ISSN: 0009-2509. doi: DOI:10.1016/0009-2509(96)88489-2.
- [32] KUMAR, S., RAMKRISHNA, D., 1996, “On the solution of population balance equations by discretization–II. A moving pivot technique”, *Chemical Engineering Science*, v. 51, n. 8, pp. 1333 – 1342. ISSN: 0009-2509. doi: DOI:10.1016/0009-2509(95)00355-X.
- [33] LAGE, P. L. C., 2002, “Comments on the by D.P. Patil and J.R.G. Andrews [Chemical Engineering Science 53(3) 599-601]”, *Chemical Engineering Science*, v. 57, n. 19, pp. 4253 – 4254. ISSN: 0009-2509. doi: DOI:10.1016/S0009-2509(02)00369-X.
- [34] LAGE, P. L., 2007, “The quadrature method of moments for continuous thermodynamics”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 31, n. 7, pp. 782 – 799. ISSN: 0098-1354. doi: DOI:10.1016/j.compchemeng.2006.08.005.
- [35] LAGE, P., 2010, “On the Representation of QMOM as a Weighted-Residual Method - The Dual-Quadrature Method of Generalized Moments”, (*submetido para publicação*).
- [36] LAGE, P., 1992, *Vaporização de Gotas Multicomponentes em Campos Convec-tivos e Radiantes*. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, Brasil, RJ.
- [37] LAMBIN, P., GASPARD, J. P., 1982, “Continued-fraction technique for tight-binding systems. A generalized-moments method”, *Physical Review*, v. 26, pp. 4356 – 4368.
- [38] LAURENT, C., LAVERGNE, G., VILLEDIEU, P., 2010, “Quadrature method of moments for modeling multi-component spray vaporization”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 36, n. 1, pp. 51 – 59. ISSN: 0301-9322. doi: DOI:10.1016/j.ijmultiphaseflow.2009.08.005.

- [39] LIOU, J.-J., SRIENC, F., FREDRICKSON, A. G., 1997, “Solutions of population balance models based on a successive generations approach”, *Chemical Engineering Science*, v. 52, n. 9, pp. 1529 – 1540. ISSN: 0009-2509. doi: DOI:10.1016/S0009-2509(96)00510-6.
- [40] LISTER, J., SMIT, D., HOUNSLOW, M., 1995, “Adjustable discretized population balance for growth and aggregation”, *A.I.Ch.E.*, v. 41, pp. 591 – 603.
- [41] LIU, Y., CAMERON, I., 2001, “A new wavelet method for the solution of the population balance equation”, *Chemical Engineering Science*, v. 56, pp. 131 – 145.
- [42] LO, S., 1996, “Applications of population balance to CFD modelling of bubbly flow via the MUSIG model”, *Rel. Tec. AEAT-1096, AEA Technology*.
- [43] LUO, H., SVENDSEN, H., 1996, “Theoretical model for drop and bubble breakup in turbulent dispersion”, *A.I.Ch.E.*, v. 42, pp. 1225â1233.
- [44] MAHONEY, A. W., RAMKRISHNA, D., 2002, “Efficient solution of population balance equations with discontinuities by finite elements”, *Chemical Engineering Science*, v. 57, n. 7, pp. 1107 – 1119. ISSN: 0009-2509. doi: DOI:10.1016/S0009-2509(01)00427-4.
- [45] MANNINEN, M., TAIVASSALO, V., KALLIO, S., 1996, “On the mixture model for multiphase flow”, *VTT Publications*.
- [46] MARCHISIO, D. L., FOX, R. O., 2005, “Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments”, *Journal of Aerosol Science*, v. 36, n. 1, pp. 43 – 73. ISSN: 0021-8502. doi: DOI:10.1016/j.jaerosci.2004.07.009.
- [47] MARCHISIO, D. L., FOX, R. O., 2005, “Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments”, *Journal of Aerosol Science*, v. 36, n. 1, pp. 43 – 73. ISSN: 0021-8502. doi: DOI:10.1016/j.jaerosci.2004.07.009.
- [48] MARCHISIO, D. L., VIGIL, R. D., FOX, R. O., 2003, “Quadrature method of moments for aggregation-breakage processes”, *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 258, n. 2, pp. 322 – 334. ISSN: 0021-9797. doi: DOI:10.1016/S0021-9797(02)00054-1.
- [49] MARCHISIO, D. L., VIGIL, R. D., FOX, R. O., 2003, “Implementation of the quadrature method of moments in CFD codes for aggregation-breakage

- problems”, *Chemical Engineering Science*, v. 58, n. 15, pp. 3337 – 3351. ISSN: 0009-2509. doi: DOI:10.1016/S0009-2509(03)00211-2.
- [50] MARKATOU, P., WANG, H., FRENKLACH, M., 1993, “A computational study of sooting limits in laminar premixed flames of ethane, ethylene, and acetylene”, *Combustion and Flame*, v. 93, n. 4, pp. 467 – 482. ISSN: 0010-2180. doi: DOI:10.1016/0010-2180(93)90146-T.
- [51] MCCOY, B. J., MADRAS, G., 2003, “Analytical solution for a population balance equation with aggregation and fragmentation”, *Chemical Engineering Science*, v. 58, n. 13, pp. 3049 – 3051. ISSN: 0009-2509. doi: DOI:10.1016/S0009-2509(03)00159-3.
- [52] MCGRAW, R., 1997, “Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments”, *Aerosol Science and Technology*, v. 27, pp. 255 – 265.
- [53] MCGRAW, R., WRIGHT, D. L., 2003, “Chemically resolved aerosol dynamics for internal mixtures by the quadrature method of moments”, *Journal of Aerosol Science*, v. 34, n. 2, pp. 189 – 209. ISSN: 0021-8502. doi: DOI:10.1016/S0021-8502(02)00157-X.
- [54] NICMAINS, M., HOUNSLOW, M., 1998, “Finite element method for steady-state population balance equation”, *A.I.C.H.E.*, v. 44, pp. 2258 – 2272.
- [55] NOPENS, I., BEHEYDT, D., VANROLLEGHEM, P. A., 2005, “Comparison and pitfalls of different discretised solution methods for population balance models: a simulation study”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 29, n. 2, pp. 367 – 377. ISSN: 0098-1354. doi: DOI: 10.1016/j.compchemeng.2004.10.007.
- [56] PANDIS, S. N., SEINFELD, J. H., 1998, *Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change*. New York: John Wiley and Sons.
- [57] PATIL, D. P., ANDREWS, J. R. G., 1998, “An analytical solution to continuous population balance model describing floc coalescence and breakage – A special case”, *Chemical Engineering Science*, v. 53, n. 3, pp. 599 – 601. ISSN: 0009-2509. doi: DOI:10.1016/S0009-2509(97)00314-X.
- [58] PINTO, J., LAGE, P., 2001, *Métodos Numéricos em Problemas de Engenharia Química*. E-papers.

- [59] PISKUNOV, V. N., GOLUBEV, A. I., 2002, “The generalized approximation method for modeling coagulation kinetics—Part 1: justification and implementation of the method”, *Journal of Aerosol Science*, v. 33, n. 1, pp. 51 – 63. ISSN: 0021-8502. doi: DOI:10.1016/S0021-8502(01)00073-8.
- [60] RAMKRISHNA, D., 2000, *Population Balance - Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering*. Academic Press, San Diego.
- [61] RIGOPOULOS, S., 2010, “Population balance modelling of polydispersed particles in reactive flows”, *Progress in Energy and Combustion Science*, v. In Press, Corrected Proof, pp. –. ISSN: 0360-1285. doi: DOI: 10.1016/j.pecs.2009.12.001.
- [62] RIGOPOULOS, S., JONES, A., 2003, “Finite-element scheme for solution of dynamics populaion balance equation”, *A.I.Ch.E*, v. 49, pp. 1127–1139.
- [63] SACK, R. A., DONOVAN, A., 1972, “An algorithm for Gaussian quadrature given modified moments.” *Numer. Math.*, v. 10, pp. 465â478.
- [64] SCOTT, W., 1968, “Analytic studies of cloud droplet coalescence”, *Atmosphere Science*, v. 25, pp. 54–65.
- [65] SECCHI, A., 2007, *DASSLC: User’s Manual, a Differential-Algebraic System Solver*, technical report ed. UFRGS, Porto Alegre, RS/Brazil. <http://www.enq.ufrgs.br/enqlib/numeric/DASSLC>.
- [66] SHAH, B., RAMKRISHNA, D., D., B. J., 1977, “Simulation of Particulate Systems Using teh Concepts of the Interval of Quiescence”, *A.I.C.H.E*, v. 53, pp. 897 – 904.
- [67] SILVA, L., DAMIAN, R., LAGE, P., 2008, “Implementation and analysis of numerical solution of the population balance equation in CFD packages”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 32, n. 12, pp. 2933 – 2945. ISSN: 0098-1354. doi: DOI:10.1016/j.compchemeng.2008.03.007.
- [68] SILVA, L., RODRIGUES, R., MITRE, J., LAGE, P., 2009, “Comparison of the accuracy and performance of quadrature-based methods for population balance problems with simultaneous breakage and aggregation”, *Computers & Chemical Engineering*, v. In Press, Corrected Proof, pp. –. ISSN: 0098-1354. doi: DOI:10.1016/j.compchemeng.2009.11.005.
- [69] SILVA, L. F. L. R., 2008, *Desenvolvimento de Metodologias para Simulação de Escoamentos Polidispersos usando Código Livre*. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, PEQ/COPPE, Brasil, RJ.

- [70] SU, J., GU, Z., LI, Y., et al., 2007, “Solution of population balance equation using quadrature method of moments with an adjustable factor”, *Chemical Engineering Science*, v. 62, n. 21, pp. 5897 – 5911. ISSN: 0009-2509. doi: DOI:10.1016/j.ces.2007.06.016.
- [71] VALE, H., MCKENNA, T., 2005, “Modeling particle size distribution in emulsion polymerization reactors”, *Progress in Polymer Science*, v. 30, n. 10, pp. 1019 – 1048. ISSN: 0079-6700. doi: DOI:10.1016/j.progpolymsci.2005.06.006.
- [72] VANNI, M., 2000, “Approximate Population Balance Equations for Aggregation-Breakage Processes”, *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 221, n. 2, pp. 143 – 160. ISSN: 0021-9797. doi: DOI:10.1006/jcis.1999.6571.
- [73] WAN, B., RING, T. A., DHANASEKHARAN, K. M., SANYAL, J., 2005, “Comparison of analytical solutions for cmsmpr crystallizer with QMOM population balance modeling in fluent”, *China Particuology*, v. 3, n. 4, pp. 213 – 218. ISSN: 1672-2515. doi: DOI:10.1016/S1672-2515(07)60189-4.
- [74] WRIGHT, MCGRAW, R., ROSNER, D. E., 2001, “Bivariate Extension of the Quadrature Method of Moments for Modeling Simultaneous Coagulation and Sintering of Particle Populations”, *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 236, n. 2, pp. 242 – 251. ISSN: 0021-9797. doi: DOI:10.1006/jcis.2000.7409.
- [75] YEOH, G. H., TU, J., 2010, “Gas-Liquid Flows”. In: *Computational Techniques for Multiphase Flows*, Butterworth-Heinemann, pp. 351 – 456, Oxford. ISBN: 978-0-08-046733-7. doi: DOI:10.1016/B978-0-08-046733-7.00006-0.
- [76] YOON, C., MCGRAW, R., 2004, “Representation of generally mixed multivariate aerosols by the quadrature method of moments: I. Statistical foundation”, *Journal of Aerosol Science*, v. 35, n. 5, pp. 561 – 576. ISSN: 0021-8502. doi: DOI:10.1016/j.jaerosci.2003.11.003.
- [77] ZHAO, H., MAISELS, A., MATSOUKAS, T., ZHENG, C., 2007, “Analysis of four Monte Carlo methods for the solution of population balances in dispersed systems”, *Powder Technology*, v. 173, n. 1, pp. 38 – 50. ISSN: 0032-5910. doi: DOI:10.1016/j.powtec.2006.12.010.
- [78] ZHU, Z., DORAO, C., JAKOBSEN, H., 2008, “A least-squares method with direct minimization for the solution of the breakage-coalescence population

balance equation”, *Mathematics and Computers in Simulation*, v. 79, n. 3, pp. 716 – 727. ISSN: 0378-4754. doi: DOI:10.1016/j.matcom.2008.05.001.

# Apêndice A

## Transformação de Momentos Padrão em Momentos Generalizados

Muitas vezes não dispomos analiticamente dos momentos generalizados, mas sim dos momentos padrão de uma distribuição. Nesse sentido, deve-se converter os momentos padrão em momentos generalizados. Esta subseção se preocupa em derivar uma metodologia capaz de realizar tal conversão. Como já mencionado no capítulo 2, é possível expandir qualquer base de polinômios ortogonais em função dos seus respectivos termos de recursão. Então:

$$\pi_{n+1}(m) = (m - \alpha_n)\pi_n(m) - \beta_n\pi_{n-1}(m) \quad (\text{A.1})$$

$$\pi_{-1}(m) = 0$$

$$\pi_0(m) = 1$$

Segundo o Lema 2.1.1, pode-se definir

$$\pi_n(m) = \sum_{k=0}^n c_{k,n} m^k \quad (\text{A.2})$$

Seja a operação (A.3). Aplicando esta operação na equação (A.2), obtem-se

$$\int_0^\infty (\cdot) d\Lambda \quad (\text{A.3})$$

$$\mu_n^\phi(m) = \sum_{k=0}^n c_{k,n} \mu_k \quad (\text{A.4})$$

Substituindo (A.2) na equação (A.1).

$$\sum_{k=0}^{n+1} c_{k,n+1} m^k = (m - \alpha_n) \sum_{k=0}^n c_{k,n} m^k - \beta_n \sum_{k=0}^{n-1} c_{k,n-1} m^k \quad (\text{A.5})$$

Desenvolvendo a equação (A.5), tem-se

$$c_{n+1,n+1} - c_{n,n} = 0 \quad (\text{A.6})$$

$$c_{n,n+1} + \alpha_n c_{n,n} - c_{n-1,n} = 0 \quad (\text{A.7})$$

$$c_{k,n+1} - c_{k-1,n} + \alpha_n c_{k,n} + \beta_n c_{k,n-1} = 0 \quad k = 1, \dots, n-1 \quad (\text{A.8})$$

$$c_{0,n+1} + \alpha_n c_{0,n} + \beta_n c_{0,n-1} = 0 \quad (\text{A.9})$$

Para inicializar a recursão:

- $\pi_{-1} = 0$  e  $\pi_0 = 1 \rightarrow c_{0,0} = 1$
- $\pi_1 = m - \alpha_0 \rightarrow c_{1,1} = 1$  e  $c_{0,1} = -\alpha_0$

Com os coeficientes de  $n-1$  e  $n$  conhecidos, para  $n \geq 1$ , determina-se  $c_{k,n+1}$  para os valores de  $k$  crescentes. Desta forma, pode-se determinar todos os coeficientes  $c_{k,k}$ . Portanto, agora é possível obter os momentos generalizados,  $\mu_n^\phi(m)$ , a partir dos momentos padrões,  $\mu_n(m)$ , e dos coeficientes  $c_{k,n}$ .