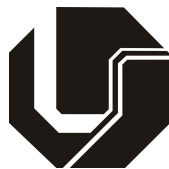


JESSICA GUARATO DE FREITAS SANTOS

**MODELAGEM MATEMÁTICA E
COMPUTACIONAL DE ESCOAMENTOS
GÁS-SÓLIDO EM MALHA ADAPTATIVA
DINÂMICA**



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA**

2019

JESSICA GUARATO DE FREITAS SANTOS

**MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL DE
ESCOAMENTOS GÁS-SÓLIDO EM MALHA ADAPTATIVA
DINÂMICA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia, como parte dos requisitos para a obtenção do título de **MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA**.

Área de concentração: Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos.

Orientador: Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto

Coorientador: Prof. Dr. João Marcelo Vedovoto

Uberlândia - MG

2019

Ficha Catalográfica Online do Sistema de Bibliotecas da UFU
com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

S237 Santos, Jessica Guarato de Freitas, 1994-
2019 Modelagem matemática e computacional de escoamentos gás-
sólido em malha adaptativa dinâmica [recurso eletrônico] / Jessica
Guarato de Freitas Santos. - 2019.

Orientador: Aristeu da Silveira Neto.
Coorientador: João Marcelo Vedovoto.
Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Uberlândia,
Pós-graduação em Engenharia Mecânica.
Modo de acesso: Internet.
Disponível em: <http://dx.doi.org/10.14393/ufu.di.2019.2218>
Inclui bibliografia.
Inclui ilustrações.

1. Engenharia mecânica. I. Silveira Neto, Aristeu da, 1955-,
(Orient.). II. Vedovoto, João Marcelo, 1981-, (Coorient.). III.
Universidade Federal de Uberlândia. Pós-graduação em
Engenharia Mecânica. IV. Título.

CDU: 621

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de acordo com o AACR2:
Gizele Cristine Nunes do Couto - CRB6/2091
Nelson Marcos Ferreira - CRB6/3074



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

ATA DE DEFESA

Programa de Pós-Graduação em:	Engenharia Mecânica				
Defesa de:	Dissertação de Mestrado Acadêmico, nº 550, COPEM				
Data:	treze de agosto de dois mil e dezenove	Hora de início:	08:00	Hora de encerramento:	09:52
Matrícula do Discente:	11722EMC005				
Nome do Discente:	Jessica Guarato de Freitas Santos				
Título do Trabalho:	Modelagem matemática e computacional de escoamentos gás-sólido em malha adaptativa dinâmica				
Área de concentração:	Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos				
Linha de pesquisa:	Dinâmica dos Fluidos e Transferência de Calor				
Projeto de Pesquisa de vinculação:					

Reuniu-se no Auditório do Bloco 5P, Campus Santa Mônica, da Universidade Federal de Uberlândia, a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, assim composta: Professores Doutores: Aldemir Aparecido Cavallini Júnior - FEMEC/UFU; Henry França Meier - FURB; Aristeu da Silveira Neto - FEMEC/UFU; orientador(a) do(a) candidato(a).

Iniciando os trabalhos o(a) presidente da mesa, Dr(a). Aristeu da Silveira Neto - FEMEC/UFU, apresentou a Comissão Examinadora e o candidato(a), agradeceu a presença do público, e concedeu ao Discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação do Discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica.

A seguir o senhor(a) presidente concedeu a palavra, pela ordem sucessivamente, aos(às) examinadores(as), que passaram a arguir o(a) candidato(a). Ultimeada a arguição, que se desenvolveu dentro dos termos regimentais, a Banca, em sessão secreta, atribuiu o resultado final, considerando o(a) candidato(a):

Aprovada.

Esta defesa faz parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre.

O competente diploma será expedido após cumprimento dos demais requisitos, conforme as normas do Programa, a legislação pertinente e a regulamentação interna da UFU.

Nada mais havendo a tratar foram encerrados os trabalhos. Foi lavrada a presente ata que após lida e achada conforme foi assinada pela Banca Examinadora.



Documento assinado eletronicamente por **Aristeu da Silveira Neto, Professor(a) do Magistério Superior**, em 13/08/2019, às 09:54, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Aldemir Aparecido Cavalini Junior, Professor(a) do Magistério Superior**, em 13/08/2019, às 09:55, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Henry França Meier, Usuário Externo**, em 20/08/2019, às 17:00, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **1460373** e o código CRC **6BE733E2**.

Aos meus pais, pelo apoio e incentivo.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, gostaria de agradecer ao Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto e ao Prof. Dr. João Marcelo Vedovoto, por terem me dado a oportunidade de fazer parte do Laboratório de Mecânica dos Fluidos (MFLab), pelo aprendizado que eu tive, pela paciência que tiveram comigo e disponibilidade em me orientar.

Agradeço à todos os meus colegas do MFLab por toda ajuda e momentos de descontração. Especialmente, ao Gabriel, pela amizade, por sempre estar disposto a me ajudar, conversar, compartilhar ideias e dar conselhos; à Abgail, pela paciência, preocupação e imensa ajuda, que foi fundamental para a conclusão deste trabalho e, por isso, serei eternamente grata; aos meus colegas Marcelo e Hélio, pela paciência, dicas, conselhos e suporte sempre que precisei; e à Millena, pela ajuda e pelos ensinamentos.

Agradeço à minha família pelo apoio e incentivo. À minha mãe Adriana, por todo amor, carinho, esforço e auxílio. Ao meu pai Marco Aurélio, por acreditar em mim. Ao meu irmão Marco Junior, pela amizade e companheirismo.

Agradeço ao Matheus, pelo apoio, carinho, cumplicidade e amor, por sempre me surpreender e me fazer feliz.

Não poderia deixar de agradecer também à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e à empresa Petróleo Brasileiro S.A. (PETROBRAS), pelo suporte financeiro; e à Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia (professores, técnicos e colaboradores), pela assistência e por todo material de estudo fornecido.

“Our greatest weakness lies in giving up. The most certain way to succeed is always to try just one more time.”

Thomas Edison

SANTOS, J. G. de F. **Modelagem matemática e computacional de escoamentos gás-sólido em malha adaptativa dinâmica.** 2019. 131 f. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.

RESUMO

Os escoamentos gás-sólido são encontrados em várias aplicações industriais, como em sistemas de transporte pneumático, processos de controle de poluição e leitos fluidizados. A modelagem dos fenômenos mais relevantes nesses escoamentos é fundamental para compreender o comportamento de cada uma das fases, como uma fase afeta o movimento da outra, e assim, como o escoamento destas influenciam processos industriais de modo geral. Portanto, os objetivos da presente dissertação são implementar, no código computacional MFSim, as forças atuantes no transporte de partículas sólidas, as condições de contorno necessárias, o acoplamento entre as fases do escoamento, um modelo de colisão entre partículas bem como entre partículas e fronteira imersa, com base em uma abordagem Euler-Lagrange. Verificar e validar essas implementações compõem uma etapa elementar deste trabalho. Para verificá-las e validá-las, quatro casos diferentes foram simulados. O primeiro consiste em avaliar a quantidade de movimento linear das duas fases do escoamento a fim de comparar com os resultados de uma solução analítica e validar o acoplamento entre fluido e partículas. O segundo está relacionado à validação da colisão entre partículas a partir da comparação dos resultados simulados com os oriundos da teoria cinética de gases. No terceiro, verifica-se a colisão das partículas com uma geometria imersa avaliando a otimização realizada no presente trabalho. Neste caso de impacto de um jato sobre uma superfície, alguns parâmetros foram variados a fim de avaliar seu comportamento. O último caso consiste em validar a dispersão de partículas devido à turbulência, comparando dados experimentais da literatura com os resultados obtidos em simulações de uma turbulência de grelha. Os resultados encontrados para todos os casos foram satisfatórios, e com isso, conclui-se que utilizando o código MFSim é possível simular escoamentos turbulentos gás-sólido, nos quais as interações entre fluido e partículas, entre duas partículas, e entre partículas e fronteira imersa são relevantes.

Palavras-chave: Escoamentos gás-sólido, Abordagem Euler-Lagrange, Colisões, Acoplamento de 4 vias, Fronteira imersa.

SANTOS, J. G. de F. **Mathematical and computational modeling of gas-solid flows in dynamic adaptive mesh.** 2019. 131 p. Master Dissertation, Federal University of Uberlândia, Uberlândia.

ABSTRACT

Gas-solid flows are found in many industrial applications, such as pneumatic conveying systems, pollution control processes and fluidized beds. The modeling of the most relevant phenomena in these flows is fundamental to understand the behavior of each one of the phases, how one phase affects the movement of the other, and thus, how their flow influence on industrial processes in general. Therefore, the objectives of this dissertation are to implement, in the MFSim computational code, the forces acting on the transport of solid particles, the necessary boundary conditions, the coupling between the phases of the flow, an interparticle collision model as well as between particles and immersed boundary, based on an Euler-Lagrange approach. Verifying and validating these implementations are a crucial step of this work. To verify and validate them, four different cases were simulated. The first one evaluates the momentum of the two phases of the flow in order to compare with the results of an analytical solution validating the coupling between fluid and particles. The second one is related to the validation of interparticle collision comparing the simulated results with the ones from the kinetic theory of gases. In the third one, the collision of particles with an immersed geometry is verified evaluating the optimization accomplished in the present work. In this case of a jet impacting on a surface, some parameters are varied to evaluate its behavior. The last case is focused on the validation of particle dispersion due to turbulence, through a comparison of experimental data provided in the literature with results obtained from simulations of a grid turbulence. The results obtained for all cases are adequate, and so, it is concluded that, using the MFSim code, it is possible to simulate gas-solid turbulent flows, in which the interactions between fluid and particles, between two particles, and between particles and immersed boundary are relevant.

Keywords: Gas-solid flows, Euler-Lagrange approach, Collisions, 4-way coupling, Immersed boundary.

LISTA DE FIGURAS

1.1	Esquema de um sistema de transporte pneumático por pressão positiva. . . .	3
1.2	Esquema de um separador ciclônico.	5
1.3	Regimes de fluidização de partículas, sendo u_0 a velocidade de entrada do gás.	5
1.4	Simulação de um jato utilizando refinamento adaptativo baseado no campo de vorticidade do escoamento.	8
2.1	Massa específica em função do volume elementar.	11
2.2	Amostra de volume de uma mistura formada por fluido e partículas.	13
2.3	Efeito do número de Stokes na dispersão de partículas em estruturas turbilhonares.	15
2.4	Regimes de um escoamento de fase dispersa em termos do transporte das partículas.	16
2.5	Diagrama esquemático dos tipos de acoplamento entre as fases contínua e dispersa.	17
2.6	Ilustração das escalas turbulentas resolvidas em cada um dos métodos de modelagem da turbulência.	19
2.7	Classificação dos métodos de rastreamento de partículas lagrangianas e suas particularidades.	23
2.8	Passos sucessivos em uma colisão instantânea entre as partículas i e j no modelo de esfera rígida. \vec{v}_i e \vec{v}_j são as velocidades lineares, $\vec{\omega}_i$ e $\vec{\omega}_j$ são as velocidades angulares, \vec{J}_n e \vec{J}_t são as forças impulsivas normal e tangencial. Os índices 0 e 1 estão relacionados às velocidades antes e depois da colisão, respectivamente.	23

2.9	Ilustração esquemática da colisão entre as partículas i e j e as forças atuantes nas partículas como resultado da colisão, onde \vec{f}_{ij}^n e \vec{f}_{ij}^t são as componentes normal e tangencial da força de colisão, \vec{n}_{ij} e \vec{t}_{ij} são os vetores unitários nas direções normal e tangencial, e δ_n representa o quanto uma partícula sobrepõe à outra (<i>overlap</i>).	25
2.10	Ilustração da força de arrasto atuando em uma partícula imersa em um fluido.	29
2.11	Coefficiente de arrasto de uma esfera lisa em função do número de Reynolds.	30
2.12	Ilustração da força de sustentação devido ao cisalhamento atuando em uma partícula imersa em um escoamento cisalhante.	32
2.13	Ilustração da força de sustentação devido à rotação de uma partícula imersa em um fluido.	33
3.1	Representação esquemática do momento em que acontece o contato entre duas partículas.	49
3.2	Representação esquemática do momento em que acontece o contato entre a partícula e a parede.	50
4.1	Exemplo de malha composta com três níveis de refinamento.	54
4.2	Exemplo da geração de blocos de malha em três níveis de refinamento diferentes.	54
4.3	Representação esquemática no cálculo das propriedades de células fantasmas.	55
4.4	Representação das malhas euleriana e lagrangiana.	57
4.5	Ilustração da linha de tempo na simulação de escoamentos utilizando abordagem Euler-Lagrange, em que $\Delta t_E > \Delta t_L$	62
4.6	Representação esquemática de uma célula computacional contendo uma partícula, cuja distância até cada vértice é expressada por d	64
4.7	Função densidade da distribuição log-normal para uma variável ϕ	66
4.8	Representação esquemática do mapa lagrangiano composto por vários níveis de refinamento da malha com células contendo partículas.	68
4.9	Representação esquemática da tabela <i>hash</i> que armazena as partículas computacionais.	69
4.10	Representação esquemática da transferência de partículas entre processos. . .	70

4.11	Algoritmo de detecção de colisão entre partículas.	77
4.12	Algoritmo de detecção de colisão entre partículas e paredes.	79
4.13	Interseção da reta \mathbf{r} com plano \mathbf{s}	80
4.14	Interseção da reta \mathbf{r} com o elemento triangular.	81
4.15	Formação dos três triângulos de áreas A_1 , A_2 e A_3 , em um elemento triangular ABC, tendo P como o ponto de interseção.	82
4.16	Interseção da reta \mathbf{r} com o elemento triangular, em uma situação que não há colisão com o elemento triangular.	83
4.17	Algoritmo de inicialização do módulo DPM mostrando a sua integração com o domínio euleriano.	84
4.18	Algoritmo do processo iterativo lagrangiano.	85
4.19	Algoritmo do processo de transporte de partículas.	86
5.1	Posicionamento das partículas no domínio computacional.	88
5.2	Comparação dos resultados obtidos para a quantidade de movimento linear em função do tempo na simulação numérica com os resultados da solução analítica.	90
5.3	Comparação dos resultados obtidos para a quantidade de movimento linear em função do tempo nas simulações numéricas utilizando processamento paralelo com os resultados do processamento serial.	91
5.4	Seção do domínio mostrando a malha com vários níveis de refinamento e as partículas inicialmente centralizadas em cada célula do nível mais grosso. . .	91
5.5	Comparação dos resultados obtidos para a quantidade de movimento linear em função do tempo na simulação numérica utilizando uma malha composta por 2 níveis de refinamento com resultados da solução analítica.	92
5.6	Comparação dos resultados obtidos para a quantidade de movimento linear em função do tempo na simulação numérica utilizando uma malha composta por 3 níveis de refinamento com resultados da solução analítica.	93

5.7	Comparação da FDP do ângulo de colisão obtida através da simulação utilizando o código MFSim com a obtida através da relação fornecida pela teoria para uma mistura de partículas monodispersas.	96
5.8	Comparação da FDP da velocidade relativa no momento da colisão obtida através da simulação utilizando o código MFSim com a obtida através da relação fornecida pela teoria para uma mistura de partículas monodispersas.	97
5.9	Comparação da FDP das velocidades relativas no momento da colisão obtidas por meio da simulação utilizando o código MFSim com as obtidas por meio da relação fornecida pela teoria para uma mistura de partículas bidispersas.	99
5.10	Comparação das razões de energia cinética específica das partículas obtidas por meio da simulação utilizando o código MFSim com as previsões da teoria de equilíbrio.	101
5.11	Domínio computacional para os casos de validação do algoritmo de detecção de colisão entre partícula e fronteira imersa.	102
5.12	Representação esquemática dos ângulos de abertura do jato e do bocal.	103
5.13	Trajetória das partículas no caso do jato granular, considerando o algoritmo antigo (esquerda) e o algoritmo otimizado (direita).	104
5.14	Ângulo de impacto médio das partículas na placa em 0,05 s, considerando o algoritmo antigo (esquerda) e o algoritmo otimizado (direita).	106
5.15	Frequência de impacto média das partículas na placa em 0,05 s, considerando o algoritmo antigo (esquerda) e o algoritmo otimizado (direita).	107
5.16	Resultados da simulação do jato granular desconsiderando os efeitos das colisões entre partículas.	108
5.17	Trajetória das partículas no caso do jato granular em 0,05 s, considerando vários ângulos de abertura.	109
5.18	Ângulo de impacto médio das partículas na placa (vista superior) no caso do jato granular em 0,05 s, considerando vários ângulos de abertura.	110
5.19	Frequência de impacto média das partículas na placa (vista superior) no caso do jato granular em 0,05 s, considerando vários ângulos de abertura.	111

5.20	Trajetória das partículas no caso do jato granular em 0,05 s, considerando vários ângulos do bocal.	112
5.21	Ângulo de impacto médio das partículas na placa (vista superior) no caso do jato granular em 0,05 s, considerando vários ângulos do bocal.	113
5.22	Frequência de impacto média das partículas na placa (vista superior) no caso do jato granular em 0,05 s, considerando vários ângulos do bocal.	114
5.23	Comparação entre os resultados experimentais e os resultados obtidos numericamente através do código MFSim avaliando a dispersão para cada tipo de partícula.	117
5.24	Comparação dos resultados de dispersão da partícula 2 obtidos numericamente através do código MFSim para diferentes coeficientes da escala de tempo integral lagrangiana com os dados experimentais.	118

LISTA DE TABELAS

2.1	Alguns processos técnicos e industriais envolvendo escoamentos bifásicos dispersos.	12
2.2	Simulações com partículas presentes na literatura que utilizaram o método da fronteira imersa.	21
5.1	Parâmetros de entrada do caso de validação da interação entre fluido e partículas.	89
5.2	Parâmetros da simulação de validação do algoritmo de detecção de colisão entre partículas.	95
5.3	Parâmetros da simulação de validação do modelo de colisão entre partículas.	98
5.4	Frequência de colisão por unidade de volume para uma mistura de partículas bidispersas.	100
5.5	Parâmetros dos casos de validação do algoritmo de detecção de colisão entre partícula e fronteira imersa.	103
5.6	Custo computacional de cada algoritmo para cinco passos de tempo diferentes.	107
5.7	Dados das partículas.	116

LISTA DE SÍMBOLOS

Siglas

CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CFL	Courant, Friedrichs, Lewy
DEM	<i>Discrete Element Method</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
DPM	<i>Discrete Particle Method</i>
DSMC	<i>Direct Simulation Monte Carlo</i>
FDP	Função Densidade de Probabilidade
IBM	<i>Immersed Boundary Method</i>
IMEX	<i>IMplicit EXplicit</i>
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
LPC	<i>Lagrangian Parcel Concept</i>
LSM	<i>Level-Set Method</i>
MPI	<i>Message Passing Interface</i>
MSD	<i>Mean Squared Displacement</i>
RANS	<i>Reynolds-Averaged Navier-Stokes</i>
TFM	<i>Two Fluid Models</i>

URANS *Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes*

V.C Volume de controle

VOF *Volume of Fluid*

Operadores

Δ Variação

$\langle \rangle$ Média em relação às partículas

$\partial()$ Derivada parcial

Σ Somatório

$\nabla \cdot ()$ Divergente

$\nabla()$ Gradiente

$(-)$ Operador de filtragem

$D()$ Derivada material

$d()$ Derivada ordinária

Subscritos

c Contínua

d Dispersa

f Fluido

i Representação indicial das três direções coordenadas ($i = 1, 2, 3$)

j Representação indicial das três direções coordenadas ($j = 1, 2, 3$)

p Partícula p

$p - p$ Par de partículas da mesma classe

$p - q$ Par de partículas de classes diferentes

$p - w$ Par partícula-parede

q Partícula q

Sobrescritos

$+$ Depois da colisão

$-$ Antes da colisão

$\mathbf{n} + 1$ Passo de tempo novo

$\mathbf{n} - 1$ Passo de tempo anterior

\mathbf{n} Passo de tempo atual

c Momento da colisão

Letras Gregas

$\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$ Coeficientes de discretização temporal [kg/m^3]

α_d Fração volumétrica da fase dispersa

α_p Fração volumétrica das partículas

Δ Passo de tempo lagrangiano [s]

ΔV_{Γ} Volume lagrangiano

Δt Passo de tempo [s]

Δt_E Passo de tempo euleriano [s]

Δt_{CFL} Restrição do passo de tempo para condição CFL [s]

Δt_{adv} Restrição do termo advectivo para o passo de tempo [s]

Δx Espaçamento da malha na direção x [m]

Δy	Espaçamento da malha na direção y [m]
Δz	Espaçamento da malha na direção z [m]
δ_{ij}	Delta de Kronecker
ϵ	Potência específica de transformação viscosa [W/m^3]
Γ	Malha lagrangiana
λ_ϵ	Função de mistura do modelo $k - \epsilon$ duas camadas
μ	Viscosidade dinâmica do fluido [$kg/(m \cdot s)$]
μ_d	Coefficiente de fricção dinâmico
μ_t	Viscosidade dinâmica turbulenta [$kg/(m \cdot s)$]
Ω	Malha euleriana
Φ	Ângulo aleatório [rad]
ϕ	Variável arbitrária
ψ	Propriedade euleriana qualquer
ρ	Massa específica de fluido [kg/m^3]
ρ_p	Massa específica da partícula [kg/m^3]
σ_k	Constante do termo difusivo da equação de transporte de k
σ_ϵ	Constante do termo difusivo da equação de transporte de ϵ
τ_c	Tempo médio entre colisões [s]
τ_f	Tempo característico do escoamento [s]
τ_p	Tempo de resposta da partícula [s]
τ_t	Escala de tempo integral da turbulência [s]

θ	Ângulo de colisão [rad]
θ_{abert}	Ângulo de abertura do jato [°]
θ_{bocal}	Ângulo do bocal [°]
$\vec{\Omega}$	Velocidade angular relativa [rad/s]
$\vec{\omega}$	Vorticidade do fluido [rad/s]
$\vec{\omega}_p$	Velocidade angular da partícula [rad/s]
$\vec{\tau}$	Tensão cisalhante [Pa]
ξ	Número aleatório conforme uma distribuição gaussiana

Letras Latinas

\bar{D}_p	Média dos diâmetros das partículas [m]
\bar{p}^*	Pressão média modificada [Pa]
\bar{p}	Pressão média [Pa]
\bar{u}	Média da componente u [m/s]
\bar{v}	Média da componente v [m/s]
\bar{w}	Média da componente w [m/s]
Δr	Deslocamento relativo entre a partícula lagrangiana e a partícula de fluido [m]
\dot{m}_f	Vazão mássica de fluido [kg/s]
\dot{m}_p	Vazão mássica de partículas [kg/s]
$\overline{u'_i u'_j}$	Tensor de Reynolds [m ² /s ²]
\vec{F}	Força [N]
\vec{F}_d	Força de arrasto [N]

\vec{F}_{gb}	Força peso-empuxo [N]
\vec{F}_{lr}	Força de sustentação devido à rotação [N]
\vec{F}_{ls}	Força de sustentação devido ao cisalhamento [N]
$\vec{f}_{u,p}$	Termo fonte do acoplamento fluido-partícula [N/m ³]
\vec{g}	Aceleração do campo gravitacional [m/s ²]
\vec{n}	Vetor normal unitário
\vec{T}	Torque [N·m]
\vec{t}	Vetor tangencial unitário
\vec{u}	Velocidade do fluido [m/s]
\vec{u}_p	Velocidade linear da partícula [m/s]
\vec{X}	Posição de um ponto qualquer na malha lagrangiana [m]
\vec{x}	Posição de um ponto qualquer na malha euleriana [m]
\vec{x}_0	Posição da origem do domínio computacional [m]
\vec{x}_c	Posição do centroide do elemento triangular [m]
\vec{x}_i	Posição do ponto de interseção [m]
\vec{x}_p	Posição da partícula [m]
\vec{x}_p^c	Posição do ponto de contato entre as partículas [m]
\vec{x}_t	Vetor diretor unitário da reta \mathbf{r}
\vec{x}_v	Posição de um vértice da malha computacional [m]
V	Volume de fluido [m ³]
V_c	Volume da fase contínua [m ³]

V_d	Volume da fase dispersa [m ³]
V_m	Volume da mistura [m ³]
V_p	Volume da partícula [m ³]
$V_{V.C}$	Volume de controle [m ³]
A	Largura da função de mistura utilizada no modelo $k-\epsilon$ duas camadas
A_p	Área da seção transversal da partícula [m ²]
A_{ABC}	Área do triângulo ABC [m ²]
C_a	Coefficiente da equação da massa adicionada
C_B	Coefficiente da força de Basset
C_d	Coefficiente de arrasto
C_r	Coefficiente de rotação
C_T	Coefficiente da escala de tempo integral da turbulência lagrangiana
$C_{\epsilon_1}, C_{\epsilon_2}$	Constantes do modelo $k-\epsilon$ padrão
C_μ	Coefficiente utilizado no cálculo da viscosidade turbulenta
C_{lr}	Coefficiente de sustentação devido à rotação
C_{ls}	Coefficiente de sustentação devido ao cisalhamento
C_l, A_ϵ, A_μ	Constantes do modelo $k-\epsilon$ duas camadas
d_c	Distância entre a partícula e o ponto de contato [m]
D_h	Função de interpolação ou distribuição
d_i	Distância entre a partícula e o ponto de interseção [m]
D_p	Diâmetro da partícula [m]

d_t	Distância percorrida pela partícula em sua trajetória [m]
d_v	Distância entre um vértice da malha computacional e uma partícula [m]
d_{bp}	Distância entre o bocal e a placa [m]
e	Coefficiente de restituição
F_i	Força lagrangiana [N/m ³]
f_i	Termo de transformação de uma informação qualquer em quantidade de movimento linear [N/m ³]
f_{col}	Frequência de colisão por unidade de volume [s ⁻¹ m ⁻³]
g_0	Função de distribuição radial
i_c, j_c, k_c	Índices das células computacionais nas três direções coordenadas
I_p	Momento de inércia da partícula [kg·m ²]
k	Energia cinética turbulenta do escoamento [m ² /s ²]
k_m	Energia cinética específica da mistura [m ² /s ²]
k_p	Energia cinética específica da partícula [m ² /s ²]
L	Comprimento do domínio [m]
l	Comprimento característico do escoamento [m]
L_E	Escala de comprimento euleriana
l_ϵ	Escala de comprimento do modelo $k - \epsilon$ duas camadas [m]
l_μ	Escala de comprimento do modelo $k - \epsilon$ duas camadas [m]
m_f	Massa de fluido [kg]
m_p	Massa da partícula [kg]

N_p	Número de partículas
n_p	Concentração de partículas [$1/m^3$]
p	Pressão [Pa]
R_E	Função de correlação euleriana
R_L	Função de correlação lagrangiana
R_p	Função de correlação para o cálculo da flutuação
Re_p	Número de Reynolds da partícula
Re_r	Número de Reynolds de rotação
Re_s	Número de Reynolds do escoamento cisalhante
Re_y	Número de Reynolds da região próxima à parede
RHS	Lado direito das equações diferenciais de transporte do fluido no domínio lagrangiano
s_{D_p}	Variância dos diâmetros das partículas [$m^{1/2}$]
S_{ij}	Tensor taxa de deformação [1/s]
t	Tempo [s]
T_L	Escala de tempo integral da turbulência lagrangiana [s]
T_p	Agitação da partícula [m^2/s^2]
t_p	Parâmetro da reta da trajetória da partícula
t_{col}	Tempo gasto para partícula chegar no ponto de colisão [s]
$t_{V.C}$	Tempo gasto pela partícula para atravessar um volume de controle [s]
U	Velocidade média do fluido em uma dada seção transversal [m/s]

u	Componente do vetor velocidade na direção x [m/s]
u'	Flutuação da componente u [m/s]
U^*	Parâmetro auxiliar de velocidade utilizado no termo temporal no domínio lagrangiano [m/s]
u^*	Parâmetro auxiliar de velocidade utilizado no termo temporal no domínio euleriano [m/s]
U_∞	Velocidade da corrente livre [m/s]
U_i	Velocidade do fluido no domínio lagrangiano [m/s]
U_p	Velocidade média da partícula em uma dada seção transversal [m/s]
v	Componente do vetor velocidade na direção y [m/s]
v'	Flutuação da componente v [m/s]
v_{rel}	Velocidade linear relativa [m/s]
w	Componente do vetor velocidade na direção z [m/s]
w'	Flutuação da componente w [m/s]
y^+	Distância adimensional de um ponto até a parede
\vec{u}_r^c	Velocidade relativa no momento da colisão [m/s]
\vec{u}_{rcn}	Componente normal da velocidade relativa no ponto de contato [m/s]
\vec{u}_{rct}	Componente tangencial da velocidade relativa no ponto de contato [m/s]
\vec{u}_{rc}	Velocidade relativa no ponto de contato [m/s]
\vec{u}_r	Velocidade relativa das partículas [m/s]

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	xv
LISTA DE TABELAS	xvi
LISTA DE SÍMBOLOS	xxvi
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Motivação pelo tema	2
1.1.1 Transporte pneumático	2
1.1.2 Processos de controle de poluição	4
1.1.3 Leitos fluidizados	5
1.2 Objetivos	6
1.3 Metodologia	7
1.4 Estrutura da dissertação	9
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	10
2.1 Hipótese do contínuo	10
2.2 Escoamentos bifásicos dispersos	12
2.2.1 Caracterização dos escoamentos	13
2.2.1.1 Número de Stokes	14
2.2.1.2 Regimes de escoamento: diluído e denso	15
2.2.1.3 Tipos de acoplamento	17
2.3 Abordagens numéricas para escoamentos bifásicos	18
2.3.1 Abordagem Euler-Euler	19
2.3.2 Abordagem Euler-Lagrange	20

2.4	Transporte de partículas lagrangianas	27
2.4.1	Peso e empuxo	28
2.4.2	Força de arrasto	28
2.4.3	Força de sustentação devido ao cisalhamento (Saffman)	31
2.4.4	Força de sustentação devido à rotação (efeito Magnus)	32
2.4.5	Gradiente de pressão, massa adicionada e força de Basset	34
2.4.6	Torque	35
2.5	Fechamento do capítulo	36
3	MODELAGEM MATEMÁTICA	37
3.1	Modelagem da fase contínua	37
3.1.1	Formulação para a fluidodinâmica	37
3.1.2	Modelo de fechamento da turbulência	40
3.1.2.1	Modelo de tratamento de parede	42
3.2	Modelagem da fase dispersa	44
3.2.1	Equações de transporte das partículas	44
3.2.2	Dispersão de partículas devido à turbulência	45
3.2.3	Termo de acoplamento das fases	47
3.2.4	Colisão partícula-partícula	47
3.2.5	Colisão partícula-parede	49
3.3	Fechamento do capítulo	51
4	MODELAGEM NUMÉRICO-COMPUTACIONAL	52
4.1	Domínio euleriano	52
4.1.1	Malha bloco-estruturada com refinamento local adaptativo	53
4.1.2	Passo de tempo euleriano	56
4.2	Domínio lagrangiano	56
4.2.1	Módulo da fronteira imersa	57
4.2.1.1	Método da forçagem direta	58
4.2.1.2	Método da multi-forçagem direta	60
4.2.2	Módulo das partículas discretas	60

4.2.2.1	Integração temporal das equações de transporte	61
4.2.2.2	Passo de tempo lagrangiano	62
4.2.2.3	Interpolação das propriedades eulerianas	63
4.2.2.4	Condições de contorno	64
4.2.2.5	Distribuição do tamanho das partículas	66
4.2.2.6	Estrutura de dados	67
4.2.2.7	Paralelização	69
4.2.2.8	Identificação de colisões entre partículas	71
4.2.2.9	Acoplamento entre partícula e fronteira imersa	78
4.2.2.10	Estrutura do módulo	82
4.3	Fechamento do capítulo	85
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	87
5.1	Validação da interação fluido-partículas	87
5.1.1	Testes com processamento paralelo	89
5.1.2	Testes com vários níveis de refinamento	90
5.2	Validação da colisão partícula-partícula	93
5.2.1	Algoritmo de detecção de colisão	94
5.2.2	Modelo de colisão	97
5.3	Validação da colisão entre partícula e fronteira imersa	101
5.3.1	Otimização do algoritmo de colisão	104
5.3.2	Efeitos das colisões entre partículas	108
5.3.3	Variação do ângulo de abertura do jato	109
5.3.4	Variação do ângulo do bocal	112
5.4	Validação da dispersão de partículas devido à turbulência	115
5.5	Fechamento do capítulo	118
6	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	120
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	124

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

O desenvolvimento de um país está diretamente relacionado à inovação, criação de novas tecnologias, ampliação e aprimoramento de sua infraestrutura. Nesse contexto, a Engenharia mostra-se indispensável, uma vez que ela engloba a ciência e os conhecimentos técnicos necessários para solucionar problemas, com o objetivo de aperfeiçoar processos e produtos destinados à sociedade.

A Engenharia Mecânica, por exemplo, é um ramo da Engenharia que lida com projetos, análises, construções e manutenções de sistemas mecânicos. Quando se trata de sistemas contendo fluidos, recorre-se à Mecânica dos Fluidos. Essa subárea consiste no estudo do comportamento e das propriedades de escoamentos envolvendo gases ou líquidos.

Ao estudar escoamentos é preciso ter em mente os significados de componente e fase. Um componente consiste em uma espécie química, como a água e o oxigênio, enquanto uma fase se refere a um estado da matéria, seja gás, líquido ou sólido. Se os escoamentos apresentam mais de uma fase, como é o caso de um escoamento formado por água e vapor d'água e de um escoamento de lama, composto por água e sedimentos, eles são denominados de multifásicos. Os escoamentos multifásicos podem ser categorizados em escoamentos gás-líquido, gás-sólido, líquido-sólido e trifásico (CROWE *et al.*, 2011). Dependendo dos fenômenos físicos associados a esses escoamentos, como turbulência, evaporação, colisão, erosão e combustão, a complexidade do problema aumenta podendo dificultar muito a compreensão e a

modelagem destes escoamentos. Por esse motivo, a pesquisa voltada para os escoamentos multifásicos ainda é muito desafiadora.

Devido ao alto poder computacional que se tem atualmente, a modelagem numérica dos escoamentos multifásicos pode ser mais viável do que a realização de experimentos materiais. Com a Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD - *Computational Fluid Dynamics*) é possível testar várias condições de operação, diversos valores para as variáveis de interesse e também avaliar diferentes modificações dos sistemas industriais. Diante desse cenário, soluções para reduzir custos e aumentar eficiência desses sistemas são encontradas com maior praticidade. Nesse sentido, as motivações que levaram à escolha do tema, os principais objetivos do presente trabalho e a metodologia empregada para o cumprimento dos mesmos são apresentados a seguir.

1.1 Motivação pelo tema

A escolha do tema sobre escoamentos multifásicos dispersos foi motivada pela diversidade de aplicações industriais e acadêmicas existentes. Para ilustrar a relevância tecnológica dessa área da Mecânica dos Fluidos, alguns exemplos serão abordados nessa seção.

1.1.1 Transporte pneumático

Os escoamentos multifásicos compostos por partículas sólidas são comumente aplicados em sistemas de transportes. Para o transporte de produtos granulados ou em pó, os sistemas de transporte pneumático podem ser empregados. Nesses sistemas, os materiais são transportados através de um escoamento de gás, que geralmente é ar, em dutos vedados.

Uma instalação de transporte pneumático (ver Fig. 1.1) consiste basicamente de um gerador para movimentar o gás, um alimentador, um separador gás-sólido e uma linha de transporte. De acordo com Molerus (1996), esse tipo de transporte acaba sendo a primeira escolha para transportar uma grande variedade de materiais particulados devido às suas vantagens de:

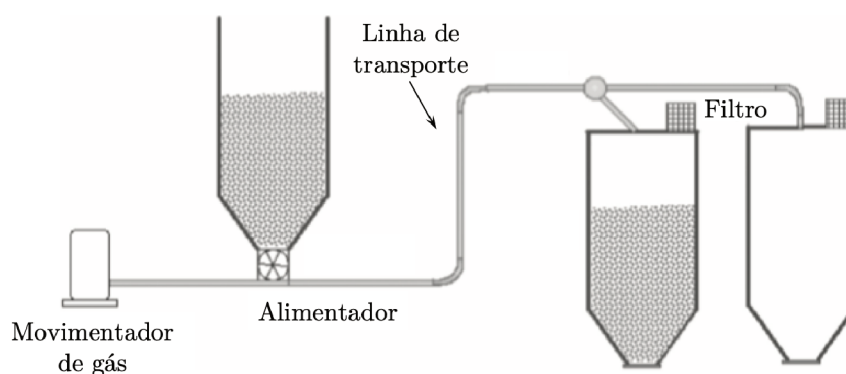
- versatilidade, uma vez que os produtos podem ser distribuídos para diversas áreas de uma indústria, e também recebidos de diversas áreas;

- flexibilidade para expansões e alterações da rota de transporte;
- transporte limpo, visto que, por tratar-se de um sistema fechado, não polui o ambiente e os produtos são transportados livres de poeiras.

Contudo, algumas desvantagens do transporte pneumático são (MICHAELIDES; CROWE; SCHWARZKOPF, 2016):

- alta taxa de desgaste dos componentes;
- degradação de partículas;
- alto consumo de energia;
- distâncias de transporte relativamente curtas, sendo normalmente menores que 3000 pés (914,4 m).

Figura 1.1: Esquema de um sistema de transporte pneumático por pressão positiva.



Fonte: Adaptado de Michaelides, Crowe e Schwarzkopf (2016).

O transporte pneumático é amplamente utilizado na indústria, principalmente, nos ramos farmacêutico, alimentício, químico e mineral. Portanto, torna-se importante estudar formas de minimizar os aspectos negativos para melhorar a eficiência desse tipo de transporte. Barbosa e Júnior (2003) propuseram uma técnica para controlar, de forma adaptativa, os regimes do escoamento gás-sólido em sistemas de transporte pneumático. Com essa técnica, os autores observaram que as reduções no consumo de energia desses sistemas podem chegar a 50% em relação aos sistemas de transporte pneumático não controlados. Duarte (2017) mostrou por meio de simulações computacionais que a erosão de um cotovelo, presente em

um sistema de transporte pneumático, é amenizada quando este é equipado com um duto de parede torcida. Para uma das configurações de parede torcida testadas, ele observou que a máxima taxa de erosão no cotovelo foi reduzida em aproximadamente 33% quando comparada com uma configuração de duto não torcido. Assim, percebe-se que é possível encontrar formas de aperfeiçoar um sistema através do melhor entendimento dos processos envolvidos.

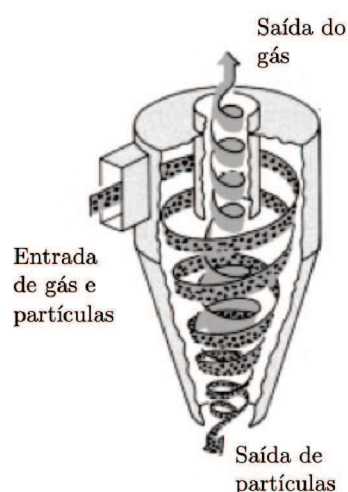
1.1.2 Processos de controle de poluição

Nos últimos tempos, a emissão de efluentes tem sido um grande problema ambiental. Por esse motivo, existe uma preocupação em encontrar meios de amenizar a poluição causada. O tratamento dos resíduos provenientes de atividades humanas ou industriais apresenta-se como uma possibilidade.

A princípio, as formas de tratamento de efluentes se diferenciam pelo tipo de resíduo em evidência, podendo ser sólido, líquido ou gasoso. A reciclagem e a compostagem, por exemplo, são tratamentos para resíduos sólidos. Para resíduos de origem líquida, existem as estações de tratamento de efluentes ou esgotos, mais conhecidas como ETEs, que utilizam processos físicos-químicos para separar o sólido do líquido, e de processos biológicos para os microrganismos consumirem a matéria orgânica poluente. Por último, o tratamento de efluentes gasosos pode ser feito através de dispositivos que separam particulados de gases, como os separadores ciclônicos.

O separador ciclônico é utilizado para separar partículas suspensas em um escoamento gasoso, sendo eficiente para tamanhos de partículas entre 5 μm a 50 μm . Nesse dispositivo, o gás contendo as partículas entra em uma direção tangencial em relação ao escoamento interno, como pode ser observado na Fig. 1.2. Em seguida, o escoamento sofre uma movimentação em espiral fazendo as partículas se deslocarem em direção às paredes devido à aceleração centrífuga gerada. Conseqüentemente, ao colidirem com as paredes, elas perdem velocidade e caem para o fundo do separador, onde são removidas. Dentre os fatores que favorecem a aplicação desse dispositivo, tem-se o baixo custo de investimento e operação, possibilidade de operar com altas cargas de sólidos e de operar a altas temperaturas (HOFFMANN *et al.*, 2001; MICHAELIDES; CROWE; SCHWARZKOPF, 2016).

Figura 1.2: Esquema de um separador ciclônico.



Fonte: Adaptado do *website* da empresa Soler & Palau.¹

1.1.3 Leitos fluidizados

Outro exemplo relevante abrangendo escoamentos multifásicos é o leito fluidizado. Este consiste em um equipamento vertical contendo partículas que é alimentado por um escoamento de fluido através de aberturas na parte inferior, de modo que quando o fluido entra no sistema, as partículas são suspensas. Dependendo da velocidade de entrada, um regime diferente de fluidização é atingido conforme representado na Fig. 1.3.

Figura 1.3: Regimes de fluidização de partículas, sendo u_0 a velocidade de entrada do gás.



Fonte: Adaptado de Utzig (2016).

¹Disponível em: <http://www.solerpalau.ch/formacion_01_37.html>. Acesso em: 8 abr. 2019.

As aplicações dos leitos fluidizados são comuns nas indústrias petroquímica e alimentícia. Na primeira, eles podem ser empregados no craqueamento catalítico para produzir gasolina, na polimerização, na combustão e gaseificação de carvão e biomassa (UTZIG, 2016). Na segunda, os leitos fluidizados estão presentes em sistemas de secagem de alimentos, torrefação de café e recobrimento de pastilhas.

Segundo Michaelides, Crowe e Schwarzkopf (2016), os sistemas de fluidização apresentam várias características que favorecem sua aplicação, dentre estas:

- uniformidade de temperatura devido à rápida troca térmica em função da mistura das partículas;
- capacidade de acomodar partículas de diversos tamanhos, dentro de uma faixa desejável que varia de 50 μm a 1,6 mm, e uma ampla gama de valores de massa específica;
- boa adaptação para operações em larga escala.

Entretanto, os leitos fluidizados apresentam alguns problemas que precisam ser tratados, como a erosão das paredes do equipamento causada pela abrasão de partículas, e a degradação dos sólidos que se quebram e são arrastados pelo fluido. Devido a complexidade dos fenômenos envolvidos, compreender totalmente o comportamento do escoamento em leitos fluidizados ainda é difícil e desafiador.

1.2 Objetivos

Como objetivos gerais da presente dissertação tem-se a implementação e a validação de uma modelagem numérico-computacional para o transporte lagrangiano de partículas, presentes em escoamentos turbulentos multifásicos dispersos. De forma mais específica, os objetivos são:

1. Realizar uma revisão bibliográfica e estudar sobre fluidodinâmica computacional, escoamentos multifásicos, abrangendo transporte de partículas sólidas e modelagem de colisões.
2. Implementar, em um código computacional,

- (a) as forças atuantes no transporte das partículas;
- (b) as condições de contorno das partículas, sendo elas: condição de entrada, condição de saída, periodicidade e interação partícula-parede;
- (c) o termo de acoplamento entre as fases do escoamento, para obter o acoplamento de 2 vias, levando em consideração a interação entre fluido e partículas;
- (d) um modelo de colisão partícula-partícula, objetivando o acoplamento de 4 vias, que além de considerar a interação entre fluido e partículas contempla a interação entre duas partículas;
- (e) uma abordagem para avaliar a interação entre partícula e fronteira imersa, utilizando um algoritmo de detecção e um modelo de colisão partícula-parede;
- (f) um modelo que considera a influência da turbulência na dispersão das partículas.

3. Verificar e validar as implementações realizadas.

1.3 Metodologia

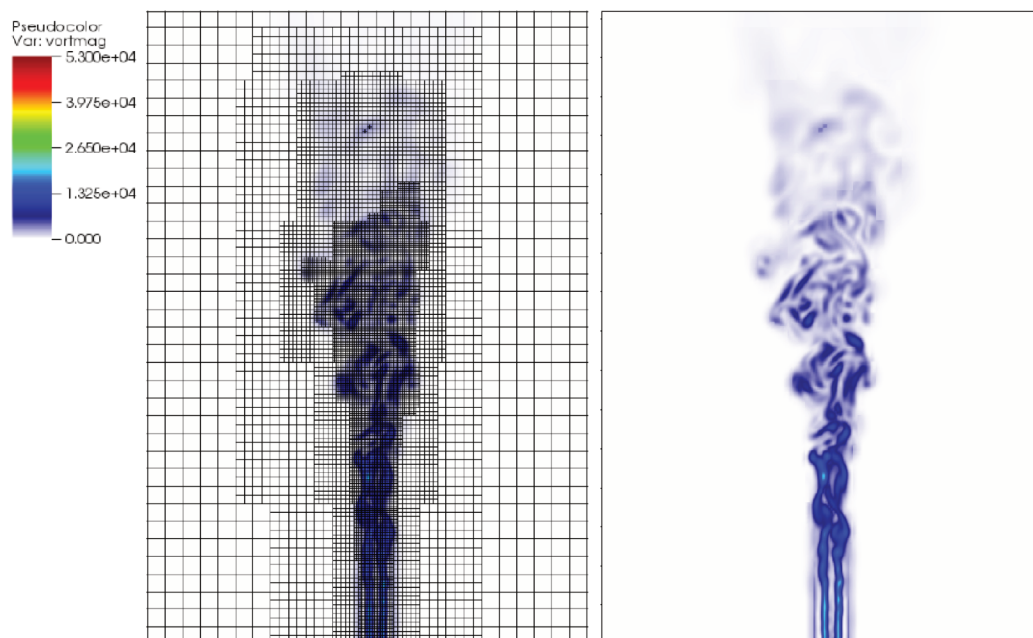
Para entender melhor os fenômenos envolvidos nos escoamentos multifásicos, uma revisão bibliográfica foi realizada. Essa revisão se estendeu sobre trabalhos científicos e acadêmicos, bem como livros sobre a temática. Para simulação de escoamentos multifásicos dispersos, modelos de transporte e colisão de partículas foram implementados e verificados. Nesse sentido, foi fundamental a utilização de um código de CFD como ferramenta de trabalho.

O código de CFD utilizado, conhecido por MFSim, surgiu com o trabalho de Villar (2007) sobre escoamentos multifásicos, e vem sendo desenvolvido no Laboratório de Mecânica dos Fluidos da Universidade Federal de Uberlândia, em parceria com a PETROBRAS. O código está escrito, predominantemente, na linguagem Fortran, contendo algumas partes escritas em linguagem C e C++.

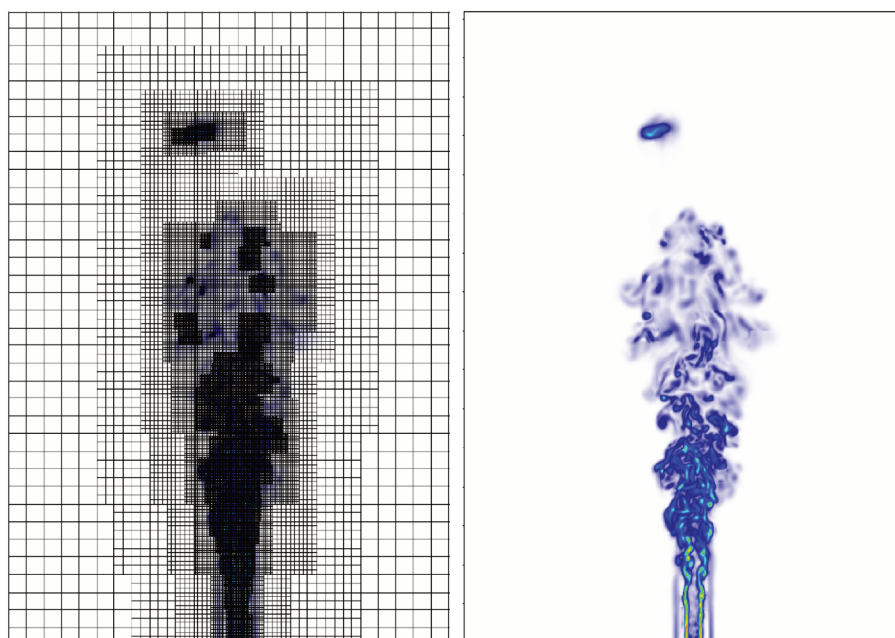
Atualmente, o código permite ao usuário simular uma diversidade de problemas tridimensionais envolvendo tanto escoamentos laminares como turbulentos, em processamento paralelo. Uma das peculiaridades dessa ferramenta está associada a possibilidade de utilizar

Figura 1.4: Simulação de um jato utilizando refinamento adaptativo baseado no campo de vorticidade do escoamento.

(a) 4 níveis de refinamento



(b) 5 níveis de refinamento



Fonte: Autoria própria.

uma malha bloco estruturada com refinamento localizado e adaptativo. Para ilustrar essa característica, a Fig. 1.4 é exibida. Nesta figura, os campos de vorticidade provenientes de duas simulações do mesmo escoamento de jato são mostrados. Na simulação referente a

Fig. 1.4a, utilizou-se uma malha base com $32 \times 64 \times 32$ células computacionais e 4 níveis de refinamento. Já, na simulação referente a Fig. 1.4b, utilizou-se a mesma malha base, porém com 5 níveis de refinamento. Mais informações a respeito do código serão apresentadas no Capítulo 4.

1.4 Estrutura da dissertação

A presente dissertação encontra-se organizada em seis capítulos, incluindo o atual que consiste em uma breve introdução ao tema. No Capítulo 2, encontra-se a revisão bibliográfica dos principais tópicos abordados no presente trabalho, como escoamentos multifásicos, mais especificamente, escoamentos multifásicos dispersos. No Capítulo 3, a modelagem matemática utilizada para tratar as fases contínua e dispersa de um escoamento gás-sólido é abordada. Neste capítulo, foram contempladas as equações de balanço de massa, balanço de quantidade de movimento linear e fechamento da turbulência, acerca da fluidodinâmica, e as equações de transporte das partículas, assim como as equações utilizadas no tratamento de possíveis colisões. No Capítulo 4, são apresentadas tanto a modelagem numérica como a modelagem computacional empregadas, com foco na representação de partículas sólidas como partículas lagrangianas. No Capítulo 5, a validação e os resultados obtidos acerca dos problemas estudados são apresentados e discutidos. Por fim, a dissertação é concluída, no Capítulo 6, por meio de uma reflexão dos resultados obtidos e dos pontos-chaves abordados no presente trabalho.

CAPÍTULO II

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

As características de um escoamento multifásico disperso definem o comportamento das partículas em relação ao fluido. Para tanto, é preciso entendê-las a fim de determinar a melhor abordagem numérica para tratar esse tipo de escoamento em uma simulação computacional.

Nessa parte da dissertação, o embasamento teórico necessário para entender os escoamentos multifásicos dispersos é apresentado. Alguns conceitos fundamentais a respeito desse tipo de escoamento, as características de um escoamento multifásico disperso, as abordagens numéricas existentes, bem como alguns fenômenos relacionados às partículas são abordados a seguir.

2.1 Hipótese do contínuo

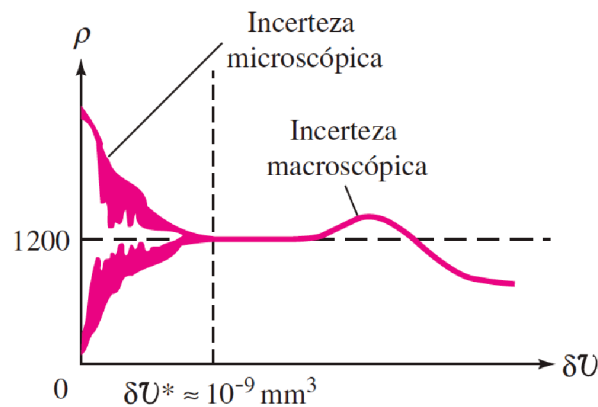
Para a modelagem de escoamentos de fluidos ser completa, esta precisaria contemplar toda estrutura molecular dos mesmos. Contudo, tal consideração tornaria o problema impraticável, visto que cada molécula precisaria ser descrita por uma equação de trajetória. Assim, para simplificar a forma como os fluidos devem ser tratados, surgiu a ideia do contínuo. Se uma quantidade de fluido é restringida por um volume maior que o livre caminho médio das moléculas, as variações moleculares deixam de ser importantes, como pode ser observado na Fig. 2.1. Nesta figura, um gráfico da massa específica em função do volume de

fluido é apresentado. A massa específica de um fluido é calculada por:

$$\rho = \lim_{\delta V \rightarrow \delta V^*} \frac{\delta m}{\delta V}, \quad (2.1)$$

onde δm é massa molecular e δV é o volume elementar que a contém. Percebe-se ainda, na Fig. 2.1, que o valor de massa específica tende a ficar constante com o aumento do volume, sendo mais evidente a partir de δV^* , o qual é conhecido por volume-limite. Assim, a massa específica passa a ser uma função pontual e as propriedades do fluido passam a variar continuamente no espaço (WHITE, 2011).

Figura 2.1: Massa específica em função do volume elementar.



Fonte: White (2011).

Tratar o fluido como um meio contínuo é bastante razoável, visto que grande parte dos problemas de engenharia trabalham com dimensões físicas muito maiores do que o espaçamento molecular. De acordo com a hipótese do contínuo tem-se que:

- Não existem vazios no interior do fluido, uma vez que a mobilidade das moléculas e os espaços intermoleculares são desprezados. Logo, a menor fração material é uma partícula de fluido.
- As propriedades, como massa específica e velocidade, variam continuamente no interior do fluido, ou até mesmo, são constantes. Portanto, o tamanho de uma partícula de fluido é suficientemente pequena para que as propriedades do cálculo diferencial sejam válidas.

Um escoamento multifásico é constituído por pelo menos duas fases, em que ambas são meios contínuos, quando formadas por fluidos diferentes, ou uma delas é um meio contínuo e a outra se encontra espalhada nesse meio. Neste último caso, o escoamento bifásico é formado por uma fase contínua e outra dispersa.

2.2 Escoamentos bifásicos dispersos

A fase dispersa corresponde à fase do escoamento que não se encontra materialmente conectada, podendo ser partículas sólidas, gotículas ou bolhas. Existem escoamentos bifásicos dispersos do tipo gás-sólido, líquido-sólido, gás-gotícula, líquido-gotícula e líquido-bolha. Para exemplificar esses escoamentos, foram colocados os principais processos técnicos e industriais de cada categoria na Tab. 2.1.

Tabela 2.1: Alguns processos técnicos e industriais envolvendo escoamentos bifásicos dispersos.

Fase contínua-dispersa	Aplicações
Gás-sólido	Transporte pneumático, separação de partículas em ciclones e filtros, leitos fluidizados
Líquido-sólido	Transporte hidráulico, separação líquido-sólido
Gás-gotícula	Secagem por atomização, resfriamento por aspersão
Líquido-gotícula	Mistura de líquidos imiscíveis, extração líquido-líquido
Líquido-bolha	Colunas de bolhas, aeração de efluentes, flotação

Fonte: Adaptado de Sommerfeld (2017).

O comportamento da fase dispersa em um escoamento bifásico depende de inúmeros fatores, como a concentração, o tamanho e a densidade das partículas, além do comportamento da fase contínua. Em função desse comportamento, outros fenômenos podem surgir, como colisões de partículas, e coalescência de gotículas e bolhas. Dessa forma, para caracterizar um escoamento com fase dispersa é preciso definir alguns parâmetros e propriedades

importantes. A palavra “partículas”, na presente dissertação, engloba particulados sólidos, gotículas e bolhas.

2.2.1 Caracterização dos escoamentos

A partir da Fig. 2.2, uma mistura contendo fluido e partículas é considerada. Ao relacionar o volume dessa mistura V_m com o volume da fase dispersa V_d , que corresponde ao volume total de partículas, obtém-se a fração volumétrica da fase dispersa:

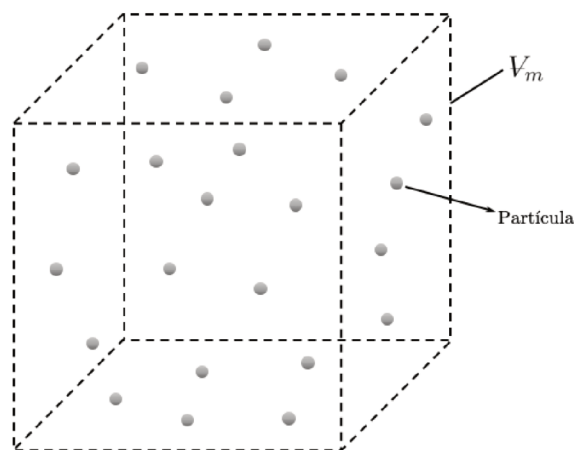
$$\alpha_d = \frac{V_d}{V_m} = \frac{1}{V_m} \sum_{n=1}^{N_p} V_{p_n}, \quad (2.2)$$

sendo N_p o número de partículas no interior de V_m e V_p o volume de uma partícula. Da mesma forma pode ser calculado a fração volumétrica da fase contínua:

$$\alpha_c = \frac{V_c}{V_m}, \quad (2.3)$$

onde V_c é o volume da fase contínua. Por definição, a soma das frações volumétricas das duas fases é igual a um.

Figura 2.2: Amostra de volume de uma mistura formada por fluido e partículas.



Fonte: Autoria própria.

Para saber a composição de uma mistura, utiliza-se o parâmetro de concentração. Este expressa a razão entre a quantidade de uma substância e o volume da mistura. Essa

quantidade referida pode ser massa, volume ou número de entidades da substância. Aqui, a concentração de partículas será dada por:

$$n_p = \frac{N_p}{V_m}. \quad (2.4)$$

Outro parâmetro importante é a carga mássica η , a qual é definida pela razão entre as vazões mássicas de partículas \dot{m}_p e de fluido \dot{m}_f (SOMMERFELD, 2017):

$$\eta = \frac{\dot{m}_p}{\dot{m}_f} = \frac{\alpha_d \rho_p U_p}{(1 - \alpha_d) \rho U_f}, \quad (2.5)$$

sendo ρ_p e ρ a massa específica das partículas e do fluido, respectivamente. As velocidades das partículas U_p e do fluido U_f são velocidades médias em uma dada seção transversal.

2.2.1.1 Número de Stokes

O número de Stokes St é um número adimensional que caracteriza o comportamento das partículas em resposta ao escoamento de fluido em que estão suspensas. Sendo assim, ele pode ser definido pela razão entre o tempo de resposta da partícula τ_p e o tempo característico associado ao escoamento do fluido τ_f (CROWE *et al.*, 2011):

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_f}. \quad (2.6)$$

O cálculo do tempo de resposta da partícula é dependente do tipo de escoamento, sobretudo o estado da matéria que compõe a fase dispersa. Dessa forma, um caso específico será apresentado mais adiante. Por outro lado, o tempo característico do escoamento pode ser resolvido como:

$$\tau_f = \frac{l}{U_\infty}, \quad (2.7)$$

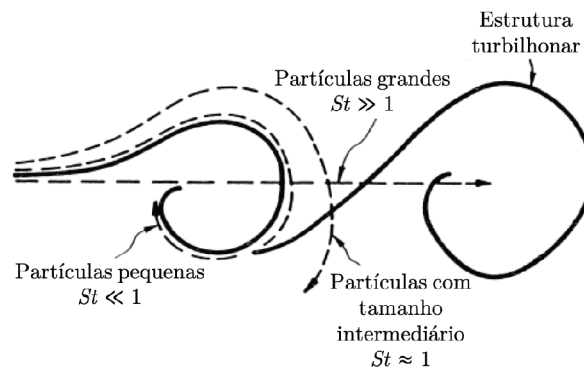
onde l é o comprimento característico do escoamento e U_∞ é a velocidade da corrente livre. Entretanto, se as partículas estiverem em um campo de escoamento turbulento, o tempo característico corresponde à escala de tempo integral da turbulência, a qual é dada em

função da energia cinética turbulenta k e da potência específica de transformação viscosa ϵ (SOMMERFELD, 2017):

$$\tau_t = \frac{k}{\epsilon}. \quad (2.8)$$

Se $St \ll 1$, sabe-se que o tempo de resposta das partículas é muito menor do que o tempo característico do escoamento. Logo, as partículas têm tempo suficiente para responder às mudanças de velocidade no escoamento. Portanto, elas seguirão as estruturas turbilhonares do escoamento. Em contrapartida, se $St \gg 1$, as partículas não conseguem responder às mudanças de velocidade no escoamento e acabam passando quase em linha reta pelas estruturas turbilhonares. Por fim, se $St \approx 1$, o movimento das partículas é ainda um pouco afetado pelo campo de velocidade do fluido, de modo que elas tendem a seguir as estruturas turbilhonares, mas não conseguem seguir completamente por causa da inércia (CROWE *et al.*, 2011; SOMMERFELD, 2017). A Fig. 2.3 é apresentada para ilustrar o efeito do número de Stokes no comportamento das partículas em escoamentos turbulentos.

Figura 2.3: Efeito do número de Stokes na dispersão de partículas em estruturas turbilhonares.



Fonte: Adaptado de Crowe, Troutt e Chung (1995).

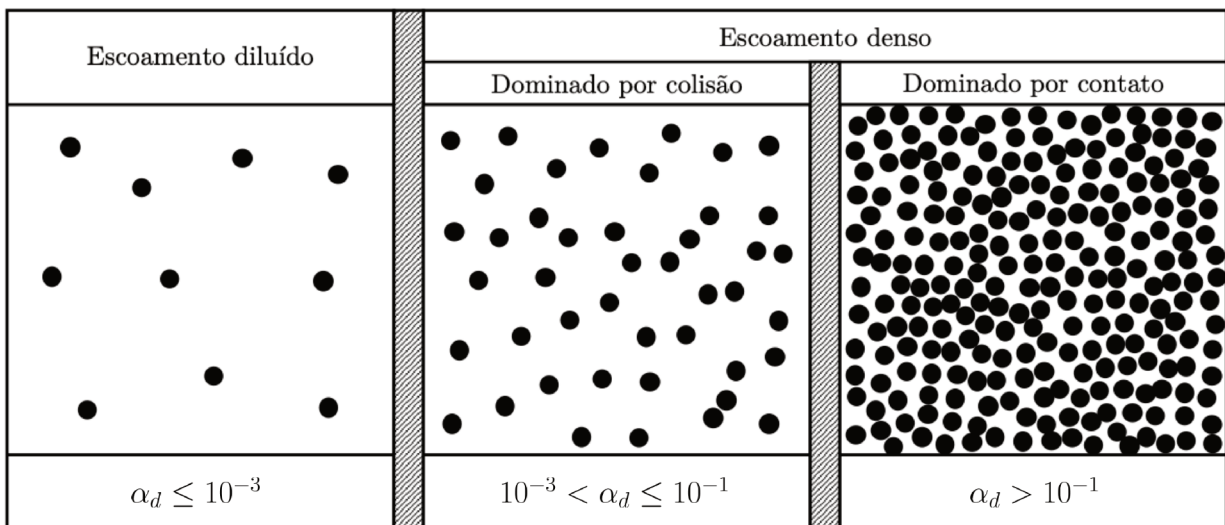
2.2.1.2 Regimes de escoamento: diluído e denso

O escoamento bifásico disperso pode ser caracterizado quanto às forças que controlam o movimento das partículas. Se as forças de interação com o fluido, como o arrasto e a sustentação, são predominantes no cálculo da trajetória das partículas, o escoamento é di-

lúido. Contudo, se o movimento das partículas é influenciado majoritariamente pelas forças de colisão ou contato entre as mesmas, o escoamento é denso.

Uma forma sugerida por Crowe *et al.* (2011) para indicar se o escoamento deve ser tratado como diluído ou denso é de acordo com a fração volumétrica da fase dispersa. Conforme apresentado na Fig. 2.4, os escoamentos são considerados diluídos para frações volumétricas menores que 0,001. Para frações volumétricas maiores do que isso, os escoamentos são densos e podem ser classificados em dois regimes diferentes: dominado por colisão e dominado por contato. Caso as partículas sofram colisões entre si, mas o tempo de contato seja menor do que o intervalo de tempo entre as colisões, o escoamento é dominado por colisão. No entanto, caso as partículas permaneçam em constante contato, o escoamento é dominado por contato e os valores de fração volumétrica da fase dispersa são maiores que 0,1.

Figura 2.4: Regimes de um escoamento de fase dispersa em termos do transporte das partículas.



Fonte: Adaptado de Crowe *et al.* (2011).

Outra forma de caracterizar os dois regimes de escoamento, conforme Sommerfeld (2017), é com base na razão entre o tempo de resposta da partícula e o tempo médio entre colisões τ_c . Para um regime diluído, o tempo médio entre colisões é maior do que o tempo de resposta da partícula. Ao contrário disso, para um regime denso, onde se tem alta frequência de colisão, o tempo de resposta da partícula é menor do que o tempo médio entre colisões:

- regime diluído: $\frac{\tau_p}{\tau_c} < 1$;

- regime denso: $\frac{\tau_p}{\tau_c} > 1$.

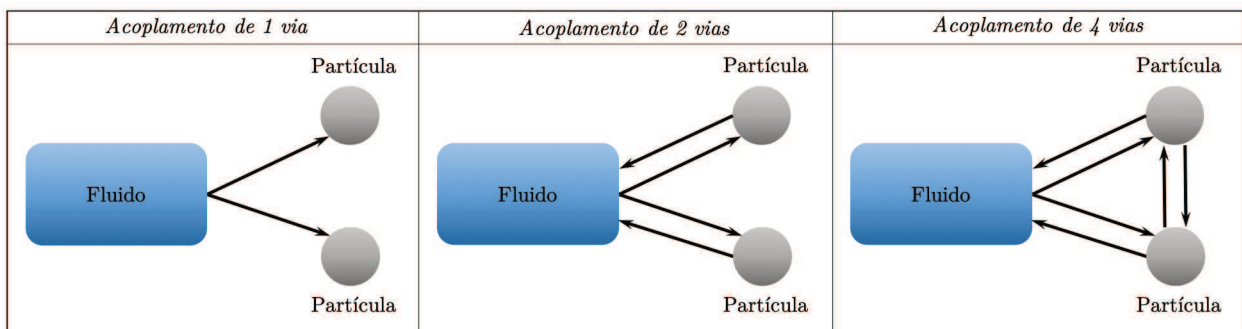
O tempo médio entre colisões é dado pelo inverso da frequência de colisões.

2.2.1.3 Tipos de acoplamento

Os tipos de acoplamento, em um escoamento bifásico, estão relacionados com os efeitos que uma fase tem sobre a outra, e se elas interagem entre si. Esses acoplamentos podem acontecer através da transferência de massa, como por exemplo na evaporação de gotículas, da transferência de quantidade de movimento linear resultante das forças fluidodinâmicas, e da transferência de energia, por meio da transferência térmica entre as fases.

Quando a fase contínua afeta a fase dispersa, sem que o contrário aconteça, diz-se que o escoamento está acoplado em 1 via. Porém, quando as fases afetam uma à outra mutuamente, diz-se que o escoamento está acoplado em 2 vias. Em escoamentos densos, as interações entre as partículas da fase dispersa são importantes. Essas interações se dão por meio de colisões ou contato contínuo, como já mencionado anteriormente. Então, quando o fluido afeta as partículas, as partículas também afetam o fluido, e além disso, as partículas afetam umas às outras de forma recíproca, diz-se que o escoamento está acoplado em 4 vias. Um diagrama esquemático mostrando as interações que acontecem em cada tipo de acoplamento pode ser visualizado na Fig. 2.5.

Figura 2.5: Diagrama esquemático dos tipos de acoplamento entre as fases contínua e dispersa.



Fonte: Autoria própria.

Elghobashi (1994) classificou os escoamentos turbulentos carregados de partículas do ponto de vista dos mecanismos de interação e da modulação da turbulência. Essa classificação

é baseada na fração volumétrica da fase dispersa, de modo que para escoamentos diluídos, o acoplamento pode ser de 1 via, se $\alpha_d \leq 10^{-6}$, ou 2 vias, se $10^{-6} < \alpha_d \leq 10^{-3}$, enquanto que para escoamentos densos, $\alpha_d > 10^{-3}$, o acoplamento é de 4 vias.

2.3 Abordagens numéricas para escoamentos bifásicos

Antes de mais nada, faz-se necessário definir as abordagens numéricas empregadas para os escoamentos monofásicos. Considerando escoamentos turbulentos, os métodos de modelagem podem ser divididos em três classes principais. A aplicação de cada uma dessas classes é dependente da resolução da malha do domínio computacional.

A primeira delas é a Simulação Numérica Direta (DNS - *Direct Numerical Simulation*), na qual as equações de balanço de massa e as equações de balanço de quantidade de movimento linear, também conhecidas por equações de Navier-Stokes, são resolvidas para todas as escalas da turbulência do escoamento. Assim, para garantir uma resolução adequada, o espaçamento da malha deve ser menor que a menor estrutura do escoamento.

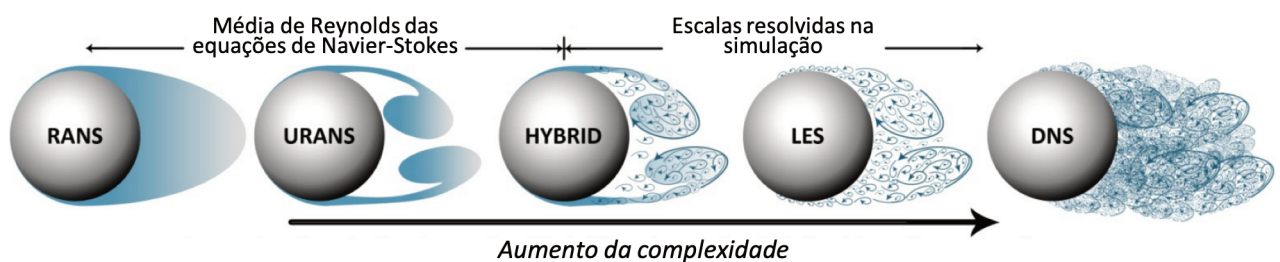
A segunda classe é a Simulação de Grandes Escalas (LES - *Large Eddy Simulation*), na qual as equações filtradas de Navier-Stokes e a equação de balanço de massa são resolvidas. Dessa forma, apenas as grandes escalas são resolvidas, necessitando de modelos submalha para modelar a interação entre as escalas menores que o tamanho do filtro e as escalas resolvidas. Por esse motivo, a utilização da metodologia LES não exige uma malha tão refinada quanto a utilizada em DNS.

A terceira classe consiste nos modelos de fechamento da turbulência baseados na média de Reynolds das equações de Navier-Stokes (RANS - *Reynolds-Averaged Navier-Stokes*). Existe uma grande diversidade de modelos na literatura, que se diferenciam, primordialmente, entre aqueles que dependem e aqueles que não dependem da viscosidade turbulenta do escoamento. Quando o termo temporal é considerado nas equações médias de Navier-Stokes, tem-se os modelos da classe URANS (*Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes*).

Em resumo, pode-se dizer que as equações para os três métodos de modelagem da turbulência podem ser derivadas das equações de Navier-Stokes filtradas, sendo utilizado em RANS um filtro passa-nada, que corresponde a média temporal, em DNS um filtro

passa-tudo, e em LES um filtro intermediário, que depende da malha utilizada. As escalas turbulentas resolvidas em cada uma das metodologias estão ilustradas na Fig. 2.6. A partir da Fig. 2.6 pode-se observar que ainda existem os métodos híbridos, os quais são resultantes de uma combinação entre modelos das classes RANS e LES. Para um maior aprofundamento no assunto, ver Pope (2000), Lesieur, Métais e Comte (2005), Wilcox *et al.* (2006).

Figura 2.6: Ilustração das escalas turbulentas resolvidas em cada um dos métodos de modelagem da turbulência.



Fonte: Adaptado de Hart (2016).

Em um contexto em que os escoamentos são bifásicos, a utilização de apenas uma das metodologias acima não é suficiente, pois duas fases precisam ser tratadas. Então, surgem duas novas preocupações: o tratamento da fase dispersa do escoamento, e a maneira de vincular as duas fases, já que uma pode influenciar na outra. Nesse sentido, duas abordagens numéricas podem ser adotadas: Euler-Euler e Euler-Lagrange.

2.3.1 Abordagem Euler-Euler

Na abordagem Euler-Euler, as duas fases do escoamento são tratadas no referencial euleriano. Para isso, supõe-se que ambas as fases se comportam como meios contínuos interpenetrantes. Dentro dessa abordagem existem as modelagens de um fluido e de dois fluidos. Os métodos VOF (*Volume of Fluid*) e LSM (*Level-Set Method*), por exemplo, correspondem a modelagem de um fluido, que se baseiam no captamento da interface deformável formada entre dois fluidos imiscíveis (RIBERA, 2015; MIRJALILI *et al.*, 2017; GIBOU *et al.*, 2018). Contudo, para escoamentos gás-sólido, foco do presente trabalho, aplica-se a modelagem de dois fluidos.

A formulação contemplada nos modelos de dois fluidos (TFM - *Two-Fluid Models*)

requer equações adicionais de balanço de massa e quantidade de movimento linear para a fase particulada (KUIPERS *et al.*, 1992). Para levar em consideração as interações entre elas, como a troca de quantidade de movimento, termos fontes são acrescentados nas equações das duas fases do escoamento. Em problemas que envolvem uma grande quantidade de partículas de mesmo tamanho, a utilização dessa modelagem é vantajosa quando comparada com uma abordagem Euler-Lagrange. Entretanto, se as partículas apresentam tamanho variado, as equações de balanço devem ser resolvidas para cada uma das classes de tamanho, tornando o tratamento desse tipo de escoamento inviável por uma modelagem TFM (ALLETTO, 2014).

Wachem *et al.* (2001) realizou uma análise comparativa entre alguns modelos de dois fluidos existentes, na literatura e em códigos comerciais, por meio de simulações de leitos fluidizados. Ele observou que comparando duas propostas diferentes para as equações de quantidade de movimento linear, os resultados foram similares em termos de características macroscópicas do escoamento. Além disso, os resultados não se apresentaram dependentes dos diferentes modelos de fechamento da turbulência para a fase sólida. Todavia, as diferentes propostas consideradas para calcular o arrasto das partículas influenciaram, consideravelmente, no comportamento do escoamento gás-sólido.

2.3.2 Abordagem Euler-Lagrange

A abordagem Euler-Lagrange é sobretudo aplicada para escoamentos bifásicos dispersos. Nessa abordagem, a fase contínua é tratada no referencial euleriano, enquanto que a fase dispersa é tratada no referencial lagrangiano.

Para os escoamentos gás-sólido, existem duas formas de modelar a estrutura lagrangiana. A primeira delas é utilizando um método de fronteira imersa (IBM - *Immersed Boundary Method*) para resolver o campo do escoamento ao redor de cada partícula (ver, por exemplo, Kajishima e Takiguchi (2002), Uhlmann (2005), Kempe e Fröhlich (2012)). Considerando uma condição de não deslizamento, para que a velocidade do fluido na superfície do sólido seja equivalente à velocidade da partícula, termos fontes são adicionados nas equações de balanço de quantidade de movimento linear da fase contínua. Nesse método, utiliza-se uma malha euleriana para representar a parte fluida, e uma lagrangiana para representar a partícula. O tamanho do espaçamento da malha euleriana é imposta pelo da malha lagrangiana,

tornando o método impraticável para partículas muito pequenas. Além disso, a simulação de escoamentos gás-sólido pelo método IBM acaba sendo limitada pelo número de partículas, uma vez que custo computacional aumenta à medida que aumenta a quantidade de partículas. Na Tab. 2.2, podem ser observados alguns exemplos de trabalhos que adotaram um método IBM para simulações de escoamentos carregados de partículas, elencando o tipo de problema, o número máximo de partículas consideradas, a fração volumétrica da fase dispersa, e a razão entre o diâmetro das partículas e o espaçamento da malha computacional.

Tabela 2.2: Simulações com partículas presentes na literatura que utilizaram o método da fronteira imersa.

Trabalho	Tipo de problema	N_p	α_d	D_p/Δ_x
Kajishima (2004)	Sedimentação de partículas por influência da gravidade	2048	0,004	10
Uhlmann (2008)	Escoamento com partículas em um canal vertical	4096	0,0042	12,8
Lucci <i>et al.</i> (2010)	Escoamento turbulento isotrópico com partículas	6400	0,1	$\sim 16,4$
Chan-Braun <i>et al.</i> (2011)	Escoamento com partículas em um canal rugoso	9216	0,022	14
Shao, Wu e Yu (2012)	Escoamento com partículas em um canal horizontal	2169	0,0708	-
Maitri <i>et al.</i> (2018)	Escoamento gás-sólido em um leito fluidizado	5000	0,11	5

Fonte: Autoria própria.

A outra forma de modelar a estrutura lagrangiana é através da aproximação ponto-partícula, na qual as partículas do escoamento bifásico disperso são modeladas como pontos materiais. Para essa aproximação ser válida, a partícula deve ser menor do que a célula computacional. O tamanho da partícula precisa ser pequeno o suficiente para que as perturbações causadas na fase contínua fiquem contidas dentro da faixa de espaçamento da malha

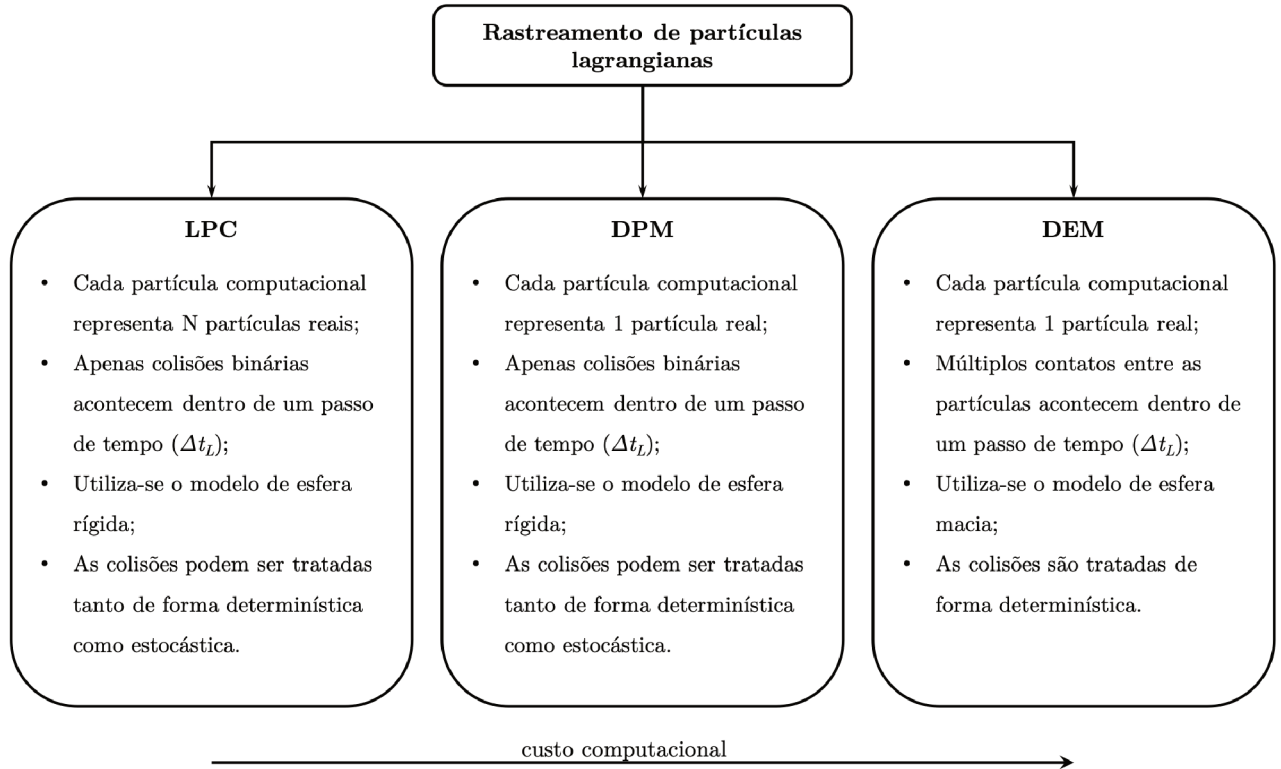
computacional (ALLETTO, 2014). Diferentemente do que acontece nos métodos IBM, na abordagem ponto-partícula, o escoamento não é resolvido ao redor das partículas. Ao invés disso, essas partículas são rastreadas, no campo de escoamento previamente resolvido, mediante suas equações de movimento que são descritas pela segunda lei de Newton. Assim, comparando o custo computacional referente ao número de partículas presentes no escoamento, a abordagem ponto-partícula é mais barata. Fisicamente, essa abordagem não tem limitação no que diz respeito à máxima fração volumétrica da fase dispersa, pois os mecanismos mais relevantes que interferem no movimento das partículas podem ser modelados. Dentre esses mecanismos estão: as forças de corpo e fluidodinâmicas atuantes nas partículas, o acoplamento de 2 vias, colisões entre partículas, colisões entre partículas e paredes.

Sommerfeld (2017) sugeriu uma classificação para a abordagem ponto-partícula, uma vez que existem métodos de rastreamento de partículas lagrangianas com algumas distinções, conforme apresentado na Fig. 2.7. No conceito de parcela lagrangiana (*LPC - Lagrangian Parcel Concept*), as partículas consideradas nas simulações representam um certo número de partículas reais, sendo assim chamadas de parcelas. Essa representação é vantajosa para os casos em que as partículas são ínfimas e o rastreamento de todas elas tornar-se inviável computacionalmente.

Já, no método da partícula discreta (*DPM - Discrete Particle Method*), todas as partículas reais do sistema são rastreadas. Tanto no LPC quanto no DPM, o modelo de esfera rígida é adotado, no qual apenas colisões instantâneas entre pares de partículas acontecem. Esse modelo é efetivamente aplicado em situações com baixa frequência de colisão, e onde o contato entre partículas se mantém por pouco tempo, ou seja, em escoamentos não muito densos ($\alpha_d \leq 0,1$). Uma ilustração dos passos sucessivos que acontecem em uma colisão instantânea entre duas partículas a partir da modelagem de esfera rígida é mostrada na Fig. 2.8.

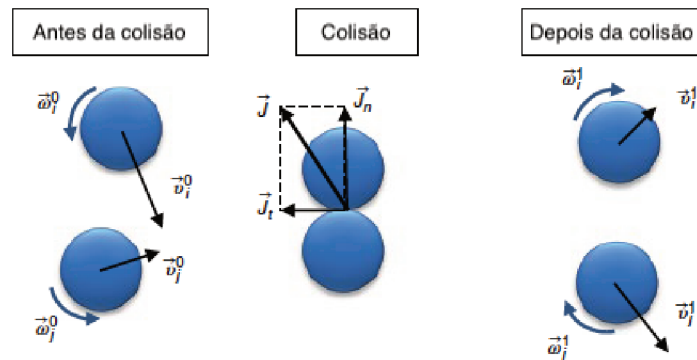
No método do elemento discreto (*DEM - Discrete Element Method*), assim como no DPM, todas as partículas reais são rastreadas no domínio computacional. No entanto, o modelo de esfera macia é adotado, considerando a possibilidade de haver mais de um contato para uma mesma partícula. Diante disso, é possível simular escoamentos muito mais densos com o DEM do que no DPM. No modelo de esfera macia, as partículas são tratadas

Figura 2.7: Classificação dos métodos de rastreamento de partículas lagrangianas e suas particularidades.



Fonte: Adaptado de Sommerfeld (2017).

Figura 2.8: Passos sucessivos em uma colisão instantânea entre as partículas i e j no modelo de esfera rígida. \vec{v}_i e \vec{v}_j são as velocidades lineares, $\vec{\omega}_i$ e $\vec{\omega}_j$ são as velocidades angulares, \vec{J}_n e \vec{J}_t são as forças impulsivas normal e tangencial. Os índices 0 e 1 estão relacionados às velocidades antes e depois da colisão, respectivamente.



Fonte: Adaptado de Norouzi *et al.* (2016).

como corpos deformáveis, que retornam suas formas originais depois que o contato é liberado (NOROUZI *et al.*, 2016). Além do movimento das partículas ser decorrente de forças fluidodinâmicas e forças externas, no DEM, tem-se também a atuação das forças de contato,

como a força originada pela colisão entre duas partículas. Essa força de colisão pode ser obtida conforme demonstrado por Cundall e Strack (1979), Tsuji, Tanaka e Ishida (1992).

Quanto à forma de identificar possíveis colisões, existem basicamente os modelos estocásticos e determinísticos. Os modelos estocásticos são fundamentados no cálculo da probabilidade de colisão. Na literatura, podem ser encontrados os modelos baseados na simulação direta de Monte Carlo (DSMC - *Direct Simulation Monte Carlo*), como nos trabalhos de Bird (1994), Du *et al.* (2011), Pawar *et al.* (2014), e também o modelo introduzido por Sommerfeld (2001). Neste último trabalho, Sommerfeld (2001) propôs um modelo estocástico, no qual um parceiro fictício de colisão é gerado para cada partícula computacional após o cálculo de sua trajetória, em um determinado passo de tempo. As propriedades desse parceiro são amostradas por funções de distribuição normal das propriedades locais. A partir disso, a probabilidade de colisão P entre as partículas computacional i e fictícia j é obtida multiplicando o passo de tempo Δt_L considerado no rastreamento das partículas pela frequência de colisão f_c dada pela teoria cinética de gases:

$$P = f_c \Delta t_L = \frac{\pi}{4} (D_{p_i} + D_{p_j})^2 \|\vec{u}_{p_i} + \vec{u}_{p_j}\| n_p \Delta t_L, \quad (2.9)$$

onde \vec{u}_p é o vetor velocidade da partícula e n_p é a concentração local de partículas. Se a probabilidade de colisão for maior que um número aleatório gerado no intervalo $[0,1]$, supõe-se que houve colisão.

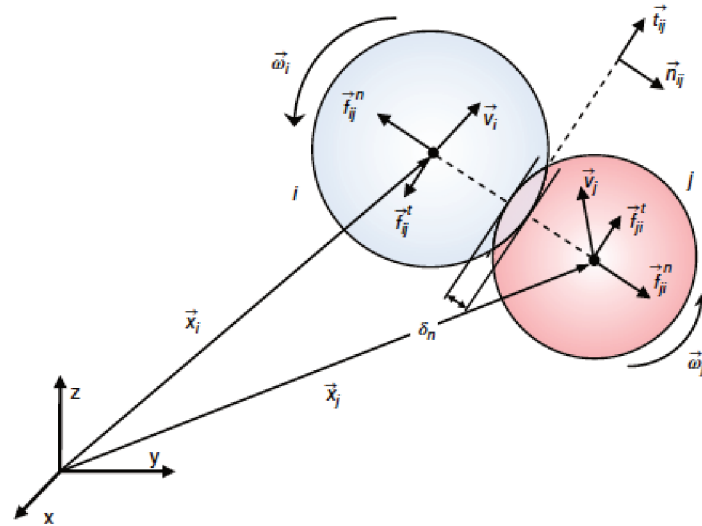
Nos modelos determinísticos, as trajetórias de todas as partículas ou parcelas do sistema são comparadas, para verificar se elas interceptam em um dado momento dentro do passo de tempo analisado. No caso do DEM, a colisão só é considerada se ocorrer a sobreposição das partículas i e j (CUNDALL; STRACK, 1979), como ilustrado na Fig. 2.9, ou seja, quando

$$\|\vec{x}_{p_i} - \vec{x}_{p_j}\| < \frac{(D_{p_i} + D_{p_j})}{2}, \quad (2.10)$$

sendo \vec{x}_p o vetor posição da partícula.

Huber e Sommerfeld (1998) e Laín e Sommerfeld (2013) avaliaram numericamente os

Figura 2.9: Ilustração esquemática da colisão entre as partículas i e j e as forças atuantes nas partículas como resultado da colisão, onde \vec{f}_{ij}^n e \vec{f}_{ij}^t são as componentes normal e tangencial da força de colisão, \vec{n}_{ij} e \vec{t}_{ij} são os vetores unitários nas direções normal e tangencial, e δ_n representa o quanto uma partícula sobrepõe à outra (*overlap*).



Fonte: Norouzi *et al.* (2016).

efeitos das colisões entre partículas no transporte pneumático de sólidos. Para isso, Huber e Sommerfeld (1998) utilizaram uma modelagem da classe RANS para a fase contínua, e adotaram o LPC com um método determinístico para rastrear em torno de 210 000 parcelas no domínio computacional. Já, Laín e Sommerfeld (2013) adotaram o LPC com um método estocástico. As avaliações foram feitas considerando partículas com diâmetro igual a 40 μm e valores de carga mássica iguais a 0,3 e 0,7. Os autores observaram que mesmo para um valor baixo de carga mássica, as colisões entre partículas são importantes em dutos horizontais e curvas.

Pawar *et al.* (2014), através de um método DSMC modificado, simularam dois jatos granulares saindo de bocais posicionados um de frente para o outro formando um ângulo de 60°, em relação ao eixo horizontal. Nesse estudo, foi investigado qual o máximo número de partículas reais que podem ser representadas por uma parcela sem que o método DSMC perca eficiência. Os autores mostraram que é preciso garantir um número de partículas representativas maior que um dentro da região de busca de uma possível colisão.

Mezhericher, Brosh e Levy (2011) compararam o DPM e o DEM através dos resultados obtidos nas simulações de um escoamento gás-sólido em um duto horizontal. Os resultados

obtidos com o DPM, adotando um método estocástico de colisão, se mostraram satisfatórios para uma fração volumétrica da fase dispersa menor do que 0,1 quando comparados com os resultados obtidos com DEM. Entretanto, os resultados encontrados utilizando o DEM foram razoáveis para todas as frações volumétricas simuladas, que variaram entre 0,014 e 0,504.

Mallouppas e Wachem (2013) utilizaram a abordagem LES para simular um escoamento turbulento gás-sólido em um canal. Neste trabalho, foram consideradas 24 500 partículas e uma carga mássica igual a 1. Os autores mostraram que mesmo para um escoamento diluído, a consideração do acoplamento de 4 vias é importante pelo fato das colisões aumentarem a redistribuição das partículas no escoamento. As partículas foram modeladas tanto como esferas rígidas como esferas macias.

Alletto e Breuer (2012) realizaram simulações LES para avaliar os tipos de acoplamento em um escoamento turbulento com partículas confinado. Neste trabalho, as partículas foram rastreadas através do DPM e um método determinístico foi aplicado para identificar as colisões entre elas. Os autores apresentaram resultados para dois valores de carga mássica, 0,022 e 0,11. Comparando com resultados experimentais, eles observaram que nesses dois casos, os efeitos das colisões entre partículas não foram tão relevantes quanto as interações entre as fases do escoamento.

Zhong *et al.* (2006) simularam um escoamento gás-sólido em um leito fluidizado utilizando uma modelagem a duas equações acoplada com DEM para rastrear 62 000 partículas. Os autores observaram que o número de colisões aumentaram com o aumento no diâmetro das partículas porém diminuíram com o aumento na velocidade de entrada do gás.

Diferentemente do trabalho anterior, Zhang *et al.* (2015) fizeram simulações numéricas diretas acopladas com DEM. Neste trabalho, foram avaliados os efeitos das colisões no comportamento das partículas presentes em um escoamento turbulento no interior de um duto horizontal. Primeiramente, os autores avaliaram o transporte das partículas desprezando a aceleração gravitacional. Assim, eles verificaram que as colisões entre partículas desempenham um papel importante na distribuição das partículas, especialmente nas regiões próximas da parede, uma vez que as colisões tendem a aumentar a difusão de partículas na direção perpendicular do escoamento. Em seguida, os autores estudaram a deposição das

partículas considerando a aceleração gravitacional. A partir dos resultados, as colisões se mostraram mais relevantes na ressuspensão das partículas próximas do chão do duto, do que no comportamento das partículas presentes no centro do duto.

2.4 Transporte de partículas lagrangianas

Na abordagem lagrangiana ponto-partícula, a trajetória de cada partícula, que se move no campo de escoamento, precisa ser resolvida. Essa trajetória é definida pela modificação da posição da partícula provocada pela sua velocidade. A alteração das componentes de velocidade linear da partícula é, então, causada pelas forças atuantes na mesma. Devido às interações viscosas com o fluido, a partícula sofre a atuação de um torque, que causa alterações nas componentes de velocidade angular. A partir da segunda lei de Newton, o cálculo da trajetória de uma partícula é determinado por uma série de equações diferenciais ordinárias, que na forma vetorial são dadas por:

$$\frac{d\vec{x}_p}{dt} = \vec{u}_p, \quad (2.11a)$$

$$m_p \frac{d\vec{u}_p}{dt} = \sum \vec{F}, \quad (2.11b)$$

$$I_p \frac{d\vec{\omega}_p}{dt} = \vec{T}, \quad (2.11c)$$

onde m_p e I_p são a massa e o momento de inércia da partícula, \vec{x}_p é a posição da partícula, e \vec{u}_p e $\vec{\omega}_p$ são as velocidades linear e angular da partícula. \vec{F} representa as diferentes forças que podem estar atuando na partícula e \vec{T} corresponde ao torque.

As forças podem ser divididas em forças externas e forças fluidodinâmicas. As forças peso e empuxo, por exemplo, são forças externas comumente presentes nos casos de escoamentos bifásicos dispersos. Dependendo da aplicação, a partícula pode sofrer influência de outras forças externas como as forças elétricas. Quanto as forças fluidodinâmicas, as mais relevantes, para essa categoria de escoamento, são: força de arrasto, forças de sustentação

devido ao cisalhamento e devido à rotação da partícula, massa adicionada ou massa virtual, força de Basset, e gradiente de pressão.

Como pode-se perceber, o movimento de rotação da partícula não é desprezado. Casos que apresentam grandes mudanças na vorticidade do fluido, ou em que o escoamento é interferido pela presença de paredes são exemplos de que a velocidade angular da partícula precisa ser avaliada. Na primeira situação, grandes mudanças na vorticidade do fluido geram um torque sobre a partícula induzindo um deslizamento angular. Na segunda, a presença de paredes no escoamento possibilita que uma partícula se choque com esse tipo de obstáculo e tenha sua velocidade angular modificada após a colisão (SOMMERFELD, 2017).

A maioria dos estudos presentes na literatura assumem que as partículas têm um formato esférico, simplificando a obtenção das expressões relacionadas às variáveis das Eqs. (2.11). Nas próximas seções, as formulações que complementam as equações da trajetória de uma partícula são evidenciadas. Vale pontuar que as expressões correspondentes às diferentes forças e ao torque incluem as propriedades e a velocidade instantânea do fluido. Para tanto, a referência dos valores dessas variáveis do fluido é admitida como a posição da própria partícula.

2.4.1 *Peso e empuxo*

A força peso, também conhecida como força gravitacional, consiste em uma força de atração entre dois corpos, que atua na direção da aceleração do campo gravitacional \vec{g} . A força de empuxo, pelo contrário, atua na direção oposta dessa aceleração, e está associada à diferença de pressão entre a parte inferior e superior de um corpo imerso em um fluido. Somando as duas forças, tem-se que:

$$\vec{F}_{gb} = m_p \vec{g} \left(1 - \frac{\rho}{\rho_p} \right). \quad (2.12)$$

2.4.2 *Força de arrasto*

A força de arrasto é, provavelmente, a força mais importante a ser considerada. Ela é gerada pela interação e contato de um corpo com um fluido, devido à diferença de velocidades entre eles. A atuação dessa força acontece no sentido contrário ao movimento relativo do

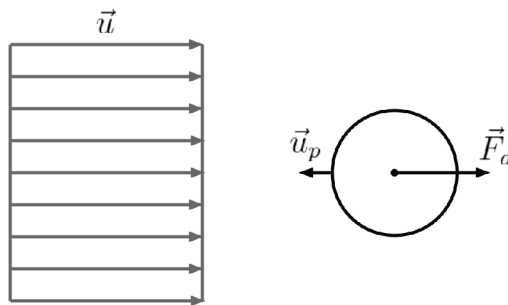
corpo em relação ao fluido circundante (ver Fig. 2.10). Ela pode ser calculada por:

$$F_d = \frac{\rho}{2} v_{rel}^2 A_p C_d, \quad (2.13)$$

sendo $A_p = \frac{\pi}{4} D_p^2$ a área da seção transversal da partícula, v_{rel} a velocidade relativa entre o fluido e a partícula, e C_d o coeficiente de arrasto. Substituindo algumas variáveis da Eq. (2.13), obtém-se que a força de arrasto na sua forma vetorial é dada por:

$$\vec{F}_d = \frac{\rho}{2} \frac{\pi}{4} D_p^2 C_d \|\vec{u} - \vec{u}_p\| (\vec{u} - \vec{u}_p). \quad (2.14)$$

Figura 2.10: Ilustração da força de arrasto atuando em uma partícula imersa em um fluido.



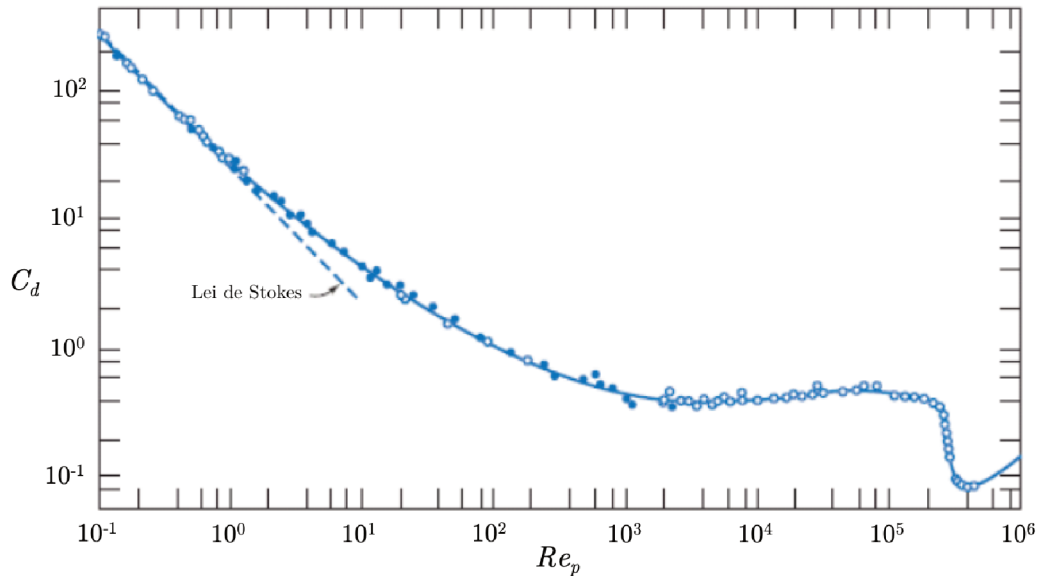
Fonte: Autoria própria.

Na literatura, é possível encontrar vários estudos que relacionam o coeficiente de arrasto com o número de Reynolds de uma esfera (GOOSSENS, 2019). Na Fig. 2.11 é apresentada a curva de arrasto para partículas esféricas e rígidas proposta por Schlichting. O número de Reynolds da esfera, ou seja, o número de Reynolds da partícula é calculado por:

$$Re_p = \frac{\rho D_p \|\vec{u} - \vec{u}_p\|}{\mu}. \quad (2.15)$$

Em escoamentos a baixos números de Reynolds, $Re_p \ll 1$, os efeitos viscosos são predominantes e nenhuma separação é observada. Esse regime de escoamento é conhecido como *creeping flow* e foi estudado por Stokes, o qual resolveu as equações de Navier-Stokes desconsiderando os termos inerciais. A partir disso, uma relação entre o coeficiente de arrasto

Figura 2.11: Coeficiente de arrasto de uma esfera lisa em função do número de Reynolds.



Fonte: Adaptado de Fox, McDonald e Pritchard (2014).

e o número de Reynolds foi estabelecida e denominada por lei de Stokes:

$$C_d = \frac{24}{Re_p}. \quad (2.16)$$

Considerando ainda o regime de Stokes, é possível obter o tempo de resposta da partícula sólida como sendo (CROWE *et al.*, 2011):

$$\tau_p = \frac{\rho_p D_p^2}{18 \mu}. \quad (2.17)$$

Na região de transição, $0,5 < Re_p < 10^3$, os efeitos inerciais se tornam gradativamente mais importantes. O escoamento começa a separar a partir de $Re_p \approx 24$ de forma simétrica, no entanto, quando o número de Reynolds ultrapassa $Re_p \approx 130$, essa separação se torna instável e periódica (SOMMERFELD, 2000). Para esse regime, caracterizado pela não linearidade, o coeficiente de arrasto é normalmente obtido através de correlações empíricas. Diversas correlações existentes na literatura foram elencadas por Goossens (2019). Uma correlação bastante utilizada nas simulações de partículas lagrangianas é a de Schiller e Naumann (1933), a qual se ajusta bem para números de Reynolds até 10^3 (SOMMERFELD,

2000):

$$C_d = \frac{24}{Re_p} (1 + 0,15 Re_p^{0,687}). \quad (2.18)$$

Para a faixa de $10^3 < Re_p < 2 \times 10^5$, constatou-se que o coeficiente de arrasto é aproximadamente constante. Esse regime de escoamento ficou conhecido como regime de Newton e o coeficiente de arrasto é:

$$C_d \approx 0,44. \quad (2.19)$$

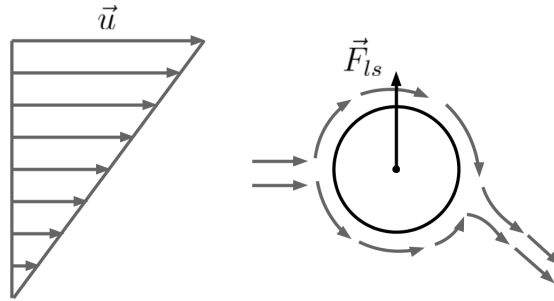
Em escoamentos a números de Reynolds altos, $Re_p \approx 2,5 \times 10^5$, tem-se a crise do arrasto, que pode ser observada na Fig. 2.11 pela queda brusca do gráfico do coeficiente de arrasto. O regime crítico acontece devido a transição de uma camada limite laminar para uma turbulenta ao redor da partícula. Como no estudo da presente dissertação limitou-se a $Re_p < 10^5$, as relações entre coeficiente de arrasto e número de Reynolds não serão abordadas para o regime supercrítico, o qual corresponde a $Re_p > 4 \times 10^5$.

2.4.3 Força de sustentação devido ao cisalhamento (Saffman)

Quando uma partícula se encontra imersa em um escoamento cisalhante, uma maior velocidade no hemisfério superior da partícula dá origem a uma região de baixa pressão, enquanto que uma menor velocidade no hemisfério inferior dá origem a uma região de alta pressão. Essa distribuição de pressão formada na partícula gera uma força de sustentação. Essa força é sempre normal à direção do escoamento, como está ilustrada na Fig. 2.12.

Saffman (1965 e 1968) foi o primeiro a analisar essa força de sustentação gerada sobre partículas em um escoamento cisalhante, porém para números de Reynolds baixos. Mei (1992), a partir de resultados numéricos da literatura, propôs um ajuste para a força de

Figura 2.12: Ilustração da força de sustentação devido ao cisalhamento atuando em uma partícula imersa em um escoamento cisalhante.



Fonte: Autoria própria.

Saffman através da consideração de um coeficiente:

$$C_{ls} = \begin{cases} \frac{4,1126}{\sqrt{Re_s}} [(1 - 0,3314 \beta^{0,5}) \exp(-0,1 Re_p) + 0,3314 \beta^{0,5}] & \text{para } Re_p \leq 40 \\ \frac{4,1126}{\sqrt{Re_s}} [0,0524 (\beta Re_p)^{0,5}] & \text{para } Re_p > 40 \end{cases}, \quad (2.20)$$

sendo $\beta = 0,5 \frac{Re_s}{Re_p}$ para $0,005 < \beta < 0,4$, e o número de Reynolds do escoamento cisalhante:

$$Re_s = \frac{\rho D_p^2 \|\vec{\omega}\|}{\mu}. \quad (2.21)$$

Assim, a força de sustentação pode ser resolvida da seguinte forma (SOMMERFELD, 2000):

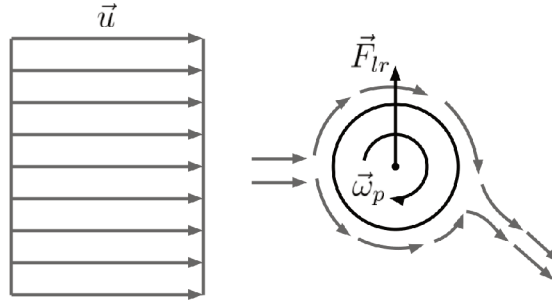
$$\vec{F}_{ls} = \frac{\rho \pi}{24} D_p^3 C_{ls} [(\vec{u} - \vec{u}_p) \times \vec{\omega}], \quad (2.22)$$

onde $\vec{\omega} = \nabla \times \vec{u}$ é a vorticidade do fluido.

2.4.4 Força de sustentação devido à rotação (efeito Magnus)

Quando uma partícula em rotação $\vec{\omega}_p$ está imersa em um escoamento, uma força de sustentação é gerada conforme mostrada na Fig. 2.13. Essa força de sustentação é causada devido a uma distribuição de pressão formada nos dois hemisférios da partícula, assim como acontece para uma partícula em um escoamento cisalhante.

Figura 2.13: Ilustração da força de sustentação devido à rotação de uma partícula imersa em um fluido.



Fonte: Autoria própria.

De acordo com Rubinow e Keller (1961), a força de sustentação devido à rotação, para $Re_p \ll 1$, é calculada por:

$$\vec{F}_{lr} = \rho \frac{\pi}{8} D_p^3 (\vec{\omega}_p \times \vec{u}_p). \quad (2.23)$$

Entretanto, Oesterle e Dinh (1998) obtiveram através de estudos experimentais uma correlação empírica para o coeficiente de sustentação, considerando uma faixa maior de número de Reynolds da partícula, $10 < Re_p < 140$. Para isso, a força de sustentação é obtida por:

$$\vec{F}_{lr} = \frac{\rho \pi}{24} D_p^2 C_{lr} \|\vec{u} - \vec{u}_p\| \frac{\vec{\Omega} \times (\vec{u} - \vec{u}_p)}{\|\vec{\Omega}\|}, \quad (2.24)$$

onde $\vec{\Omega} = \frac{1}{2} \nabla \times \vec{u} - \vec{\omega}_p$ é a velocidade de rotação da partícula em relação ao fluido. O coeficiente de sustentação C_{lr} é estimado por (OESTERLE; DINH, 1998):

$$C_{lr} = 0,45 + (2\gamma - 0,45) \exp(-0,075 \gamma^{0,4} Re_p^{0,7}), \quad (2.25)$$

sendo $\gamma = 0,5 \frac{Re_r}{Re_p}$, e o número de Reynolds de rotação:

$$Re_r = \frac{\rho D_p^2 \|\vec{\Omega}\|}{\mu}. \quad (2.26)$$

2.4.5 Gradiente de pressão, massa adicionada e força de Basset

O gradiente de pressão local no escoamento gera uma força na mesma direção que o gradiente de pressão. A combinação dessa força com a força decorrente da tensão cisalhante no escoamento é dada por (SOMMERFELD, 2000):

$$\vec{F}_{pt} = \frac{m_p}{\rho_p} (-\nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau}), \quad (2.27)$$

onde ∇p é o gradiente de pressão local e $\nabla \cdot \vec{\tau}$ é o divergente da tensão cisalhante. A partir das equações de Navier-Stokes, sabe-se que:

$$-\nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau} = \rho \left(\frac{D\vec{u}}{Dt} - \vec{g} \right). \quad (2.28)$$

Portanto, a força de pressão total é determinada por:

$$\vec{F}_{pt} = \rho \frac{\pi}{6} D_p^3 \left(\frac{D\vec{u}}{Dt} - \vec{g} \right), \quad (2.29)$$

na qual o primeiro termo representa a aceleração do fluido e o segundo termo é a força de empuxo, previamente apresentada na Eq. (2.12).

Quando uma partícula acelera ou desacelera através de um volume de fluido, a mesma deve mover esse volume de fluido. Para que isso aconteça, é necessário uma força para acelerar ou desacelerar o fluido ao redor da partícula, a qual é conhecida por massa adicionada e pode ser obtida por (SOMMERFELD, 2000):

$$\vec{F}_a = \frac{\rho \pi}{2} D_p^3 C_a \left(\frac{D\vec{u}}{Dt} - \frac{d\vec{u}_p}{dt} \right). \quad (2.30)$$

A força de Basset corresponde a força decorrente do atraso do desenvolvimento da camada limite na partícula com a aceleração ou desaceleração da mesma. Essa força é também chamada de histórico da partícula, uma vez que ela precisa ser integrada ao longo

de toda trajetória da partícula, sendo calculada por (SOMMERFELD, 2000):

$$\vec{F}_B = \frac{3}{2} D_p^2 \sqrt{\pi \rho \mu} C_B \int_0^t \frac{\frac{D\vec{u}}{Dt} - \frac{d\vec{u}_p}{dt}}{\sqrt{t-t'}} dt'. \quad (2.31)$$

Os coeficientes C_a e C_B presentes nas Eqs. (2.30) e (2.31) são considerados para estender a aplicação das forças a números de Reynolds altos. Mediante os resultados experimentais de Odar e Hamilton (1964), os valores desses coeficientes podem ser obtidos.

Conforme Hjelmfelt e Mockros (1966), a massa adicionada, a força de Basset e a força de pressão devido às acelerações do fluido não são relevantes em escoamentos que apresentam uma alta razão entre as massas específicas das partículas e do fluido, ou seja, $\frac{\rho_p}{\rho} \gg 1$. Um estudo numérico que reforça essa ideia é encontrado em Armenio e Fiorotto (2001).

Armenio e Fiorotto (2001), por meio de DNS, simularam partículas suspensas em um escoamento turbulento no interior de um canal, adotando o acoplamento de 1 via. Nesse estudo, os autores avaliaram a importância da força de arrasto em relação à força de Basset, massa adicionada e gradiente de pressão para vários casos com razões de massa específica distintas. Vale destacar a diferença entre os resultados da dispersão das partículas considerando apenas a força de arrasto, e considerando todas as forças mencionadas. Para o caso com $\frac{\rho_p}{\rho} = 2,65$ a diferença dos resultados foi de 1,6%, e para o caso com $\frac{\rho_p}{\rho} = 265$ foi de 0,97%.

2.4.6 Torque

Rubinow e Keller (1961) apresentaram uma solução analítica para o torque agindo sobre uma partícula como sendo:

$$\vec{T} = -\pi \mu D_p^3 \vec{\omega}_p. \quad (2.32)$$

Todavia, essa solução é aplicada apenas para números de Reynolds da partícula baixos, e não contabiliza a vorticidade do fluido. Logo, para considerar valores maiores de número de Reynolds da partícula, necessita-se de correlações, e para considerar a influência do fluido, a velocidade de rotação relativa deve ser incorporada à equação do torque da seguinte maneira

(SOMMERFELD, 2000):

$$\vec{T} = \frac{\rho}{2} \left(\frac{D_p}{2} \right)^5 C_r \left\| \vec{\Omega} \right\| \vec{\Omega}, \quad (2.33)$$

onde o coeficiente de rotação C_r , para $32 < Re_r < 1000$, pode ser calculado através de uma correlação obtida numericamente por Dennis, Singh e Ingham (1980):

$$C_r = \frac{12,9}{\sqrt{Re_r}} + \frac{128,4}{Re_r}. \quad (2.34)$$

2.5 Fechamento do capítulo

No presente capítulo, alguns conceitos relacionados aos escoamentos bifásicos dispersos foram apresentados, junto às abordagens numéricas existentes na literatura para o tratamento desse tipo de escoamento. Dentre as abordagens mencionadas, a abordagem Euler-Lagrange através da aproximação ponto-partícula é considerada no presente trabalho, sendo possível rastrear um grande número de partículas de forma individual e independente. Na modelagem da fase contínua, um modelo URANS é considerado, enquanto que na fase dispersa, o DPM é adotado. A fim de incluir as interações entre partículas, a detecção de possíveis colisões é realizada de forma determinística. Como o foco da presente dissertação são os escoamentos gás-sólido com valores de fração volumétrica não tão elevados, as colisões entre partículas são tratadas pelo modelo de esfera rígida, que consiste em um modelo de colisão inelástica, abordado na Seção 3.2.4. No transporte das partículas sólidas, tanto o movimento linear como o movimento angular das partículas são avaliados, de modo que as forças mais importantes atuando sobre cada uma delas são as forças peso-empuxo, de arrasto, de sustentação devido ao cisalhamento e de sustentação devido à rotação.

CAPÍTULO III

MODELAGEM MATEMÁTICA

Neste capítulo, a modelagem matemática considerada no desenvolvimento do presente trabalho é abordada. Para a fase contínua, as equações médias transientes de Reynolds com o modelo $k - \epsilon$ duas camadas foram empregados. Para a fase dispersa, as equações envolvidas no movimento das partículas foram baseadas na segunda lei de Newton.

3.1 Modelagem da fase contínua

A modelagem utilizada para tratar a fase contínua do escoamento é apresentada começando pelas equações da continuidade e de Navier-Stokes. Em seguida, o problema de fechamento da turbulência é introduzido, detalhando o modelo de fechamento adotado no presente trabalho.

3.1.1 *Formulação para a fluidodinâmica*

As equações de Navier-Stokes juntamente à equação da continuidade são suficientes para modelar escoamentos isotérmicos de fluidos, tanto em regime laminar quanto em regime turbulento. Todavia, a Simulação Numérica Direta de escoamentos turbulentos requer o uso de malhas muito finas para que seja possível resolver todas as estruturas turbilhonares formadas. Como consequência disso tem-se o alto custo computacional, limitando a aplicação da prática de DNS na simulação de escoamentos com número de Reynolds elevado.

A equação da continuidade e as equações de Navier-Stokes em notação indicial para escoamentos incompressíveis, respectivamente, são dadas por:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + f_i, \quad (3.2)$$

onde i e $j = 1, 2, 3$ correspondem às componentes das três direções coordenadas (x, y, z) , u é a velocidade instantânea do fluido, ρ é a massa específica do fluido e f_i pode ser interpretado como um termo de transformação de alguma informação em quantidade de movimento linear.

Mesmo com a evolução de *hardwares* nos últimos tempos, os valores de número de Reynolds para os quais a prática de DNS é factível ainda são modestos em relação aos valores que caracterizam escoamentos presentes em aplicações industriais. Para isso, existem outras metodologias de simulação de escoamentos turbulentos. Uma delas consiste na decomposição do espectro de escalas do escoamento em duas bandas, empregando o conceito de filtragem. Reynolds e Boussinesq propuseram aplicar o operador média temporal $(\bar{\quad})$ às Eqs. (3.1) e (3.2). A partir disso, deduz-se que (MAGALHÃES, 2018):

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \overline{u_i u_j}}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] + \bar{f}_i. \quad (3.4)$$

As equações acima não podem ser resolvidas diretamente por causa do termo não linear $\overline{u_i u_j}$ que aparece na Eq. (3.4). Dessa maneira, a decomposição dos campos totais de velocidade proposta por Reynolds e Boussinesq é aplicada:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i, \quad (3.5)$$

sendo \bar{u}_i a média e u'_i a flutuação no campo de velocidade. Substituindo a Eq. (3.5) na

Eq. (3.4) e realizando as devidas manipulações matemáticas, obtém-se que:

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \overline{\rho u'_i u'_j} \right] + \bar{f}_i, \quad (3.6)$$

onde o termo $\overline{u'_i u'_j}$ é conhecido por tensor de Reynolds.

As Equações (3.6) consistem nas equações médias transientes de Reynolds, as quais em conjunto à Eq. (3.3) constituem o modelo do comportamento médio de um escoamento turbulento isotérmico. No entanto, este é um modelo matemático aberto, visto que além das velocidades médias e da pressão média existem seis outras incógnitas associadas ao tensor de Reynolds que são decorrentes das correlações entre as flutuações de velocidades nas três direções coordenadas. Diante disso, tem-se o problema de fechamento da turbulência, que pode ser contornado adotando modelos adicionais de fechamento.

Uma proposta de fechamento para o tensor de Reynolds foi desenvolvida por Boussinesq, que através de uma analogia com o modelo de Stokes para as tensões viscosas moleculares mostrou que:

$$-\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij}, \quad (3.7)$$

sendo μ_t a viscosidade dinâmica turbulenta, δ_{ij} o delta de Kronecker e k a energia cinética turbulenta, que é definida como:

$$k \equiv -\frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i} = \frac{1}{2} (\overline{u' u'} + \overline{v' v'} + \overline{w' w'}). \quad (3.8)$$

A viscosidade dinâmica turbulenta é uma propriedade que depende da natureza do escoamento propriamente dito, e não do fluido como no caso da viscosidade dinâmica molecular.

Substituindo a Eq. (3.7) nas Eqs. (3.6), obtém-se as equações de Navier-Stokes filtradas:

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \right] + \bar{f}_i, \quad (3.9)$$

Como a energia cinética turbulenta depende apenas do traço do tensor de Reynolds, o divergente do termo que a envolve resulta no gradiente da mesma:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \right) = \frac{2}{3} \frac{\partial \rho k}{\partial x_i}. \quad (3.10)$$

Dessa forma, ela pode ser incorporada no termo do gradiente de pressão da Eq. (3.9) gerando uma pressão modificada \bar{p}^* :

$$\bar{p}^* = \bar{p} + \frac{2}{3} \rho k. \quad (3.11)$$

Finalmente, as equações modeladas, fazendo as alterações mencionadas, são dadas por:

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}^*}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] + \bar{f}_i. \quad (3.12)$$

Contudo, as Eqs. (3.12) ainda não estão fechadas, pois o cálculo da viscosidade turbulenta não foi definido. Sendo assim, é necessário uma modelagem para obter essa propriedade do escoamento. Existem vários modelos de fechamento das equações filtradas que dependem dos conceitos de viscosidade turbulenta, entre eles estão os modelos a zero, uma e duas equações de transporte. Além desses, existem também modelos para o fechamento alternativo das equações filtradas, como os modelos algébricos e o modelo de transporte das componentes do tensor de Reynolds.

3.1.2 Modelo de fechamento da turbulência

Para o fechamento da turbulência optou-se pelo modelo $k - \epsilon$, no qual duas equações de transporte são utilizadas. Esse modelo foi proposto inicialmente por Chou (1945) sendo a energia cinética turbulenta $k \left[\frac{\text{m}^2}{\text{s}^2} \right]$ e a potência específica de transformação viscosa $\epsilon \left[\frac{\text{W}}{\text{m}^3} \right]$ correspondentes às duas variáveis transportadas. Depois de Chou (1945), algumas melhorias foram proporcionadas ao modelo, como por exemplo em Harlow e Nakayama (1968). Entretanto, a versão mais consolidada do modelo $k - \epsilon$ na literatura foi proposta por Jones e Launder (1972), a qual é comumente referenciada por modelo $k - \epsilon$ padrão. Com o decorrer do tempo, surgiram propostas de modificação para o modelo $k - \epsilon$ padrão, mas como, de um

modo geral, essas propostas não sugeriram alterações significativas nos processos de dedução das equações de transporte, elas mantiveram a mesma nomenclatura.

O modelo $k - \epsilon$ padrão é bastante popular na simulação de problemas industriais devido ao seu baixo custo computacional juntamente ao fato de apresentar previsões razoáveis para diversos escoamentos turbulentos, principalmente escoamentos desenvolvidos e cisalhantes livres. Além do mais, a implementação desse modelo é relativamente simples. No entanto, ele não é tão adequado para escoamentos rotativos e escoamentos parietais (MAGALHÃES, 2018).

Para os escoamentos analisados no presente trabalho, o emprego do modelo $k - \epsilon$ padrão é adequado fazendo as devidas considerações, que serão pontuadas na próxima seção. Assim, as duas equações de transporte associadas a esse modelo são:

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_j k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \mu_t S^2 - \rho \epsilon, \quad (3.13)$$

e

$$\frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_j \epsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\epsilon_1} \frac{\epsilon}{k} \mu_t S^2 - \rho C_{\epsilon_2} \frac{\epsilon^2}{k}, \quad (3.14)$$

sendo

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}, \quad (3.15)$$

onde S_{ij} é o tensor taxa de deformação, que é dado por:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad (3.16)$$

O cálculo da viscosidade dinâmica turbulenta é obtido em função da energia cinética turbulenta e da potência específica de transformação viscosa, como segue abaixo:

$$\mu_t = \rho \frac{C_\mu k^2}{\epsilon}. \quad (3.17)$$

Os coeficientes presentes nas Eqs. (3.13) e (3.14), bem como na Eq. (3.17) foram utilizados conforme Launder e Sharma (1974): $\sigma_k = 1,0$, $\sigma_\epsilon = 1,3$, $C_{\epsilon_1} = 1,44$, $C_{\epsilon_2} = 1,92$ e $C_\mu = 0,09$.

3.1.2.1 Modelo de tratamento de parede

O modelo $k - \epsilon$ por si só não é adequado para escoamentos parietais, é necessário um modelo adicional para o tratamento do escoamento em regiões próximas às paredes. Para isso, o modelo $k - \epsilon$ duas camadas é aplicado. Basicamente, esse modelo consiste que a região turbulenta do escoamento seja resolvida pelo modelo padrão e a região próxima à parede, afetada pela viscosidade, seja resolvida por um modelo a uma equação. No modelo a uma equação, k é calculado pela a sua própria equação de balanço, Eq. (3.13), enquanto que ϵ é calculado por:

$$\epsilon = \frac{k^{3/2}}{l_\epsilon}, \quad (3.18)$$

onde a escala de comprimento l_ϵ é obtida por:

$$l_\epsilon = yC_l [1 - \exp(-Re_y/A_\epsilon)], \quad (3.19)$$

sendo Re_y o número de Reynolds da região próxima à parede:

$$Re_y = \frac{\rho y \sqrt{k}}{\mu}, \quad (3.20)$$

que depende da distância da parede até o centro de cada célula computacional, y . A partir desse número de Reynolds, a demarcação das duas regiões do escoamento é efetivada: a completamente turbulenta para $Re_y > Re_y^*$, e a afetada pela viscosidade para $Re_y < Re_y^*$, com $Re_y^* = 200$.

Considerando ainda o modelo a uma equação, a viscosidade turbulenta é calculada por:

$$\mu_{t,2camadas} = \rho C_\mu l_\mu \sqrt{k}, \quad (3.21)$$

onde a escala de comprimento l_μ é dada por:

$$l_\mu = y C_l [1 - \exp(-Re_y/A_\mu)]. \quad (3.22)$$

As constantes presentes nas Eqs. (3.19) e (3.22) são: $C_l = 0,4187 C_\mu^{-3/4}$, $A_\mu = 70$ e $A_\epsilon = 2 C_l$.

A combinação dos modelos padrão e a uma equação é feita pela soma das viscosidades turbulentas:

$$\mu_t = \lambda_\epsilon \mu_{t, \text{padrão}} + (1 - \lambda_\epsilon) \mu_{t, 2 \text{camadas}}, \quad (3.23)$$

que é suavizada por uma função de mistura λ_ϵ :

$$\lambda_\epsilon = \frac{1}{2} \left[1 + \tanh \left(\frac{Re_y - Re_y^*}{A} \right) \right], \quad (3.24)$$

onde A é a largura da função de mistura:

$$A = \frac{0,2 Re_y^*}{\text{arctanh}(0,98)}. \quad (3.25)$$

A função de mistura, exposta na Eq. (3.24), tende a zero à medida que se aproxima da parede e tende a unidade à medida que se distancia da parede. O objetivo dessa função é prevenir que ocorra a divergência dos resultados quando a solução de ambos os modelos não for igual.

Para garantir predições acuradas da fase contínua utilizando o modelo $k - \epsilon$ duas camadas, o refinamento da malha computacional próxima à parede é fundamental. Sendo assim, a malha deve ser construída de forma que o centroide das células adjacentes à parede fiquem dentro da subcamada viscosa. Para isso, a distância adimensional do centroide até a parede, calculada como:

$$y^+ = \frac{\rho y u_\tau}{\mu}, \quad (3.26)$$

deve ser $y^+ \approx 1$, na qual a velocidade u_τ é obtida em função da tensão cisalhante na parede

τ_w :

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}. \quad (3.27)$$

3.2 Modelagem da fase dispersa

As equações de transporte das partículas utilizadas para o desenvolvimento do presente trabalho serão apresentadas. Juntamente a essas equações são apresentadas as modelagens adotadas para o tratamento dos acoplamentos de 2 e 4 vias e das colisões entre partícula e parede.

3.2.1 Equações de transporte das partículas

Uma vez que a fase dispersa é tratada de forma lagrangiana utilizando o método da partícula discreta, conforme apresentado no Capítulo 2, cada partícula presente no escoamento gás-sólido tem seu movimento descrito pela segunda lei de Newton:

$$\frac{d\vec{x}_p}{dt} = \vec{u}_p, \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{u}_p}{dt} = \vec{g} \left(1 - \frac{\rho}{\rho_p} \right) &+ \frac{\pi \rho D_p^2}{8 m_p} C_d \|\vec{u} - \vec{u}_p\| (\vec{u} - \vec{u}_p) \\ &+ \frac{\pi \rho D_p^3}{8 m_p} C_{ls} [(\vec{u} - \vec{u}_p) \times \vec{\omega}] \\ &+ \frac{\pi \rho D_p^2}{8 m_p} C_{lr} \|\vec{u} - \vec{u}_p\| \frac{\vec{\Omega} \times (\vec{u} - \vec{u}_p)}{\|\vec{\Omega}\|}, \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\frac{d\vec{\omega}_p}{dt} = \frac{\rho D_p^5}{64 I_p} C_r \|\vec{\Omega}\| \vec{\Omega}. \quad (3.30)$$

onde a massa é $m_p = \frac{\pi}{6} \rho_p D_p^3$ e o momento de inércia é $I_p = 0,1 m_p D_p^2$, assumindo partículas esféricas.

Evidentemente, em escoamentos gás-sólido, a massa específica das partículas ρ_p é cerca de 1000 vezes a massa específica do gás ρ . Pelos motivos apresentados na Seção 2.4, para

esse tipo de escoamento, a força de Basset, a massa adicionada e o gradiente de pressão devido às acelerações do fluido podem ser negligenciados. Conseqüentemente, na Eq. (3.29) foram consideradas apenas a força combinada peso-empuxo, a força de arrasto e as forças de sustentação, devido ao cisalhamento e à rotação, atuando sobre as partículas. Com base no número de Reynolds da partícula, os coeficientes presentes no cálculo dessas forças e também do torque são obtidos por:

$$C_d = \begin{cases} 24/Re_p (1 + 0,15 Re_p^{0,687}) & \text{se } Re_p \leq 1000 \\ 0,44 & \text{se } Re_p > 1000 \end{cases}, \quad (3.31)$$

$$C_{ls} = \begin{cases} 4,1126/Re_s^{0,5} [(1 - 0,3314 \beta^{0,5}) \exp(-0,1 Re_p) + 0,3314 \beta^{0,5}] & \text{se } Re_p \leq 40 \\ 4,1126/Re_s^{0,5} [0,0524 (\beta Re_p)^{0,5}] & \text{se } Re_p > 40 \end{cases}, \quad (3.32)$$

$$C_{lr} = 0,45 + (2\gamma - 0,45) \exp(-0,075 \gamma^{0,4} Re_p^{0,7}) \quad \text{se } Re_p < 140, \quad (3.33)$$

$$C_r = \begin{cases} 64\pi/Re_r & \text{se } Re_r \leq 32 \\ 12,9/Re_r^{0,5} + 128,4/Re_r & \text{se } 32 < Re_r \leq 1000 \end{cases}, \quad (3.34)$$

sendo $\beta = 0,5 Re_s/Re_p$ válido para $0,005 < \beta < 0,4$, e $\gamma = 0,5 Re_r/Re_p$.

3.2.2 Dispersão de partículas devido à turbulência

Como os valores interpolados do campo de velocidade do escoamento resolvido correspondem às médias das componentes da velocidade do fluido, e \vec{u} presente na Eq. (3.29) é a velocidade instantânea do fluido (ver Eq. (3.5)), o cálculo da flutuação da velocidade do fluido na posição da partícula é baseado no modelo de dispersão de Langevin apresentado por Sommerfeld (2001). Nessa modelagem, a flutuação da velocidade do fluido em uma

dada posição da partícula do novo passo de tempo, $\mathbf{n} + \mathbf{1}$, é relacionada àquela do passo de tempo anterior, \mathbf{n} , utilizando uma função de correlação $R_{p_i}(\Delta t, \Delta r)$, que na forma indicial é definida como:

$$u'_i{}^{\mathbf{n}+1} = R_{p_i}(\Delta t, \Delta r) u'_i{}^{\mathbf{n}} + \sqrt{\frac{2}{3}k [1 - R_{p_i}^2(\Delta t, \Delta r)]} \xi_i, \quad (3.35)$$

em que o primeiro termo do lado direito representa a parte correlacionada e o segundo termo representa a contribuição aleatória na flutuação da velocidade do fluido, sendo ξ_i números aleatórios obtidos a partir de uma distribuição Gaussiana. A função de correlação é composta de uma parte lagrangiana e outra euleriana:

$$R_{p_i}(\Delta t, \Delta r) = R_L(\Delta t) R_{E_i}(\Delta r), \quad (3.36)$$

de modo que $\Delta r = \|\vec{u}^{\mathbf{n}} - \vec{u}_p^{\mathbf{n}}\| \Delta t$ é o deslocamento relativo entre a partícula lagrangiana e a partícula de fluido, e Δt é o passo de tempo adotado.

A função de correlação lagrangiana é dependente da escala de tempo integral lagrangiana T_L (SOMMERFELD, 2001):

$$R_L(\Delta t) = \exp\left(-\frac{\Delta t}{T_L}\right), \quad (3.37)$$

que por sua vez é determinada por:

$$T_L = C_T \frac{k}{\epsilon}, \quad (3.38)$$

onde C_T é um coeficiente que pode ser encontrado na literatura de diferentes formas (MILOJEVIĆ, 1990), sendo considerado no presente trabalho como $C_T = 2/9 \approx 0,22$.

A função de correlação euleriana é dada por (LAIN; GRILLO, 2007):

$$R_{E_i}(\Delta r) = [f(\Delta r) - g(\Delta r)] \frac{\Delta r_i^2}{\Delta r^2} + g(\Delta r), \quad (3.39)$$

com

$$f(\Delta r) = \exp\left(-\frac{\Delta r}{L_E}\right), \quad (3.40)$$

e

$$g(\Delta r) = \left(1 - \frac{\Delta r}{2L_E}\right) \exp\left(-\frac{\Delta r}{L_E}\right), \quad (3.41)$$

considerando a escala de comprimento L_E como sendo:

$$L_E = 3T_L \sqrt{\frac{2}{3}k}. \quad (3.42)$$

3.2.3 Termo de acoplamento das fases

Considerando um acoplamento de 2 ou 4 vias entre as fases do escoamento, faz-se necessário calcular o termo que avalia a influência do transporte das partículas no escoamento do fluido. Esse termo é adicionado às equações de quantidade de movimento linear da fase contínua e é calculado por:

$$\vec{f}_{u,p} = -\frac{1}{V_{V.C}} \sum_{n=1}^{N_p} m_{p_n} \left[\frac{d\vec{u}_{p_n}}{dt} - \vec{g} \left(1 - \frac{\rho}{\rho_{p_n}}\right) \right], \quad (3.43)$$

onde o somatório em n está relacionado ao número de partículas computacionais passando por um determinado volume de controle com volume $V_{V.C}$.

3.2.4 Colisão partícula-partícula

Quando partículas sólidas colidem, suas velocidades de translação e rotação sofrem alterações, modificando a trajetória das mesmas. Para quantificar as novas velocidades após a colisão é utilizado o modelo de colisão inelástica de esfera rígida. Tal modelo considera colisões binárias de modo que ambas as partículas são adotadas como esferas homogêneas e não deformáveis. Tratando-se de uma colisão inelástica, as partículas podem se deslizar durante todo o processo da colisão, ou podem se deslizar e parar depois de um certo tempo. O primeiro caso é conhecido como uma condição de deslizamento e o segundo como uma

condição de não deslizamento. Segundo Crowe *et al.* (2011), as componentes das velocidades linear e angular da partícula p após a colisão com a partícula q podem ser calculadas para cada caso conforme mostrado a seguir:

- Para a condição de deslizamento, $\|\vec{u}_{rc_t}^-\| > -\frac{7}{2}\mu_d(1+e)(\vec{u}_r^-\cdot\vec{n})$:

$$\vec{u}_p^+ = \vec{u}_p^- - \left(\frac{m_q}{m_p+m_q}\right)(1+e)(\vec{u}_r^-\cdot\vec{n})(\mu_d\vec{t}+\vec{n}), \quad (3.44a)$$

$$\vec{\omega}_p^+ = \vec{\omega}_p^- - \frac{5\mu_d}{D_p}\left(\frac{m_q}{m_p+m_q}\right)(1+e)(\vec{u}_r^-\cdot\vec{n})(\vec{n}\times\vec{t}). \quad (3.44b)$$

- Para a condição de não deslizamento:

$$\vec{u}_p^+ = \vec{u}_p^- - \left(\frac{m_q}{m_p+m_q}\right)\left[\frac{2}{7}\vec{u}_{rc_t}^- + (1+e)\vec{u}_{rc_n}^-\right], \quad (3.45a)$$

$$\vec{\omega}_p^+ = \vec{\omega}_p^- - \frac{10}{7}\frac{1}{D_p}\left(\frac{m_q}{m_p+m_q}\right)(\vec{n}\times\vec{u}_{rc_t}^-). \quad (3.45b)$$

Nas Eqs. (3.44) e (3.45), os sobrescritos $-$ e $+$ correspondem às propriedades antes e depois da colisão, respectivamente. e e μ_d são os coeficientes de restituição e de fricção dinâmico, os quais estão associados às propriedades materiais das partículas. \vec{u}_r^- é a velocidade relativa das partículas antes da colisão:

$$\vec{u}_r^- = \vec{u}_p^- - \vec{u}_q^-, \quad (3.46)$$

\vec{u}_{rc}^- é a velocidade relativa no ponto de contato antes da colisão:

$$\vec{u}_{rc}^- = \vec{u}_r^- + \frac{D_p}{2}\vec{\omega}_p^- \times \vec{n} + \frac{D_q}{2}\vec{\omega}_q^- \times \vec{n}, \quad (3.47)$$

cujas componentes normal e tangencial são dadas, respectivamente, por:

$$\vec{u}_{rc_n}^- = (\vec{u}_{rc}^- \cdot \vec{n})\vec{n}, \quad (3.48a)$$

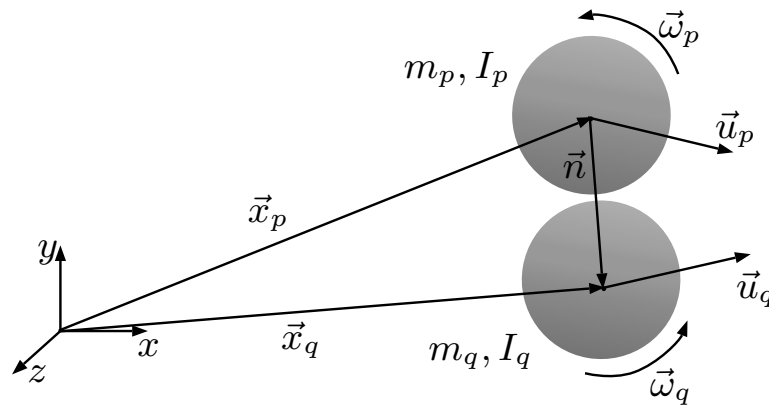
e

$$\vec{u}_{rc_t}^- = \vec{u}_{rc}^- - \vec{u}_{rc_n}^-, \quad (3.48b)$$

sendo \vec{n} o vetor normal unitário cujo sentido está indicado na Fig. 3.1, e \vec{t} o vetor tangencial unitário obtido por:

$$\vec{t} = \frac{\vec{u}_{rc_t}^-}{\|\vec{u}_{rc_t}^-\|}. \quad (3.49)$$

Figura 3.1: Representação esquemática do momento em que acontece o contato entre duas partículas.



Fonte: Autoria própria.

3.2.5 Colisão partícula-parede

Em escoamentos gás-sólido no interior de dutos e canais, por exemplo, as partículas sólidas estão sujeitas a colisões com as paredes circundantes. Caso isso aconteça, sabe-se que as partículas tem suas velocidades alteradas.

O cálculo das velocidades linear e angular da partícula é obtido com base no modelo de colisão inelástica de esfera rígida, assim como para colisões entre duas partículas. Neste modelo, a partícula é assumida como uma esfera homogênea e não deformável e a parede é também considerada não deformável. As componentes das velocidades da partícula após a colisão com uma parede podem ser calculadas conforme as equações abaixo:

- Para a condição de deslizamento, $\|\vec{u}_{rc_t}^-\| > -\frac{7}{2}\mu_d(1+e)(\vec{u}_p^- \cdot \vec{n})$:

$$\vec{u}_p^+ = \vec{u}_p^- - (1+e)(\vec{u}_p^- \cdot \vec{n})(\mu_d \vec{t} + \vec{n}), \quad (3.50a)$$

$$\vec{\omega}_p^+ = \vec{\omega}_p^- - \frac{5\mu_d}{D_p}(1+e)(\vec{u}_p^- \cdot \vec{n})(\vec{n} \times \vec{t}). \quad (3.50b)$$

- Para a condição de não deslizamento:

$$\vec{u}_p^+ = \vec{u}_p^- - \frac{2}{7}\vec{u}_{rc_t}^- - (1+e)\vec{u}_{rc_n}^-, \quad (3.51a)$$

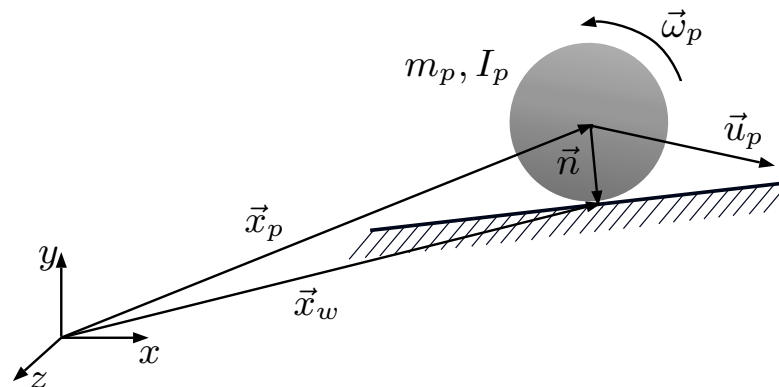
$$\vec{\omega}_p^+ = \vec{\omega}_p^- - \frac{10}{7}\frac{1}{D_p}(\vec{n} \times \vec{u}_{rc_t}^-). \quad (3.51b)$$

Nas Eqs. (3.50) e (3.51), os coeficientes e e μ_d estão associados às propriedades materiais do par partícula-parede. \vec{u}_{rc}^- é o vetor relativo no ponto de contato antes da colisão:

$$\vec{u}_{rc}^- = \vec{u}_p^- + \frac{D_p}{2}\vec{\omega}_p^- \times \vec{n}, \quad (3.52)$$

cujas componentes normal e tangencial são dadas da mesma forma como apresentadas nas Eqs. (3.48), sendo \vec{n} o vetor normal unitário cujo sentido está indicado na Fig. 3.2.

Figura 3.2: Representação esquemática do momento em que acontece o contato entre a partícula e a parede.



Fonte: Autoria própria.

3.3 Fechamento do capítulo

A modelagem matemática adotada para modelar a fluidodinâmica e a dinâmica das partículas em escoamentos gás-sólido foram apresentadas neste capítulo. Assim como as equações de transporte da fase fluida, essa modelagem engloba também as equações de transporte da fase sólida. Para escoamentos turbulentos, o modelo de fechamento da turbulência empregado foi o modelo $k - \epsilon$ padrão, que consiste em um modelo da classe URANS. Por utilizar esse modelo, a aplicação de um modelo de dispersão de partículas foi necessária. Para o acoplamento de 2 vias, a influência das partículas sobre o fluido foi considerada através do cálculo de um termo de acoplamento, que precisa ser adicionado às equações de Navier-Stokes. Para o acoplamento de 4 vias, as interações entre partículas foram tratadas por um modelo de colisão conhecido por modelo de esfera rígida. Para o tratamento de colisões entre partículas e parede, o modelo de esfera rígida foi também aplicado.

CAPÍTULO IV

MODELAGEM NUMÉRICO-COMPUTACIONAL

O código de CFD conhecido por MFSim vem sendo desenvolvido no Laboratório de Mecânica dos Fluidos da Universidade Federal de Uberlândia com a cooperação de um grande grupo de pesquisa. Iniciou-se com o trabalho de Villar (2007) e, atualmente, problemas tridimensionais envolvendo escoamentos turbulentos (DAMASCENO; VEDOVOTO; Silveira Neto, 2015), multifásicos (PIVELLO *et al.*, 2014; BARBI *et al.*, 2018), não isotérmicos (DUARTE *et al.*, 2018), reativos (DAMASCENO; SANTOS; VEDOVOTO, 2018), com mudança de fase (PINHEIRO; VEDOVOTO, 2018) ou com interação fluido-estrutura (NETO *et al.*, 2019) podem ser simulados com o uso dessa ferramenta computacional.

O enfoque deste capítulo é abordar as metodologias empregadas no código, dando destaque para o módulo das partículas discretas, no qual as contribuições do presente trabalho foram realizadas. Para discutir sobre esse assunto, o mesmo foi dividido em domínio euleriano, que corresponde à parte responsável por tratar a fase contínua do escoamento, e em domínio lagrangiano, composto pelas partes responsáveis por tratar tanto a fase dispersa como as geometrias imersas.

4.1 Domínio euleriano

A discretização espacial das equações de transporte relativas ao domínio euleriano é feita pelo método dos volumes finitos com um arranjo deslocado para as componentes da

velocidade. Para isso, uma malha bloco-estruturada é utilizada. A discretização temporal dessas equações é feita através de métodos semi-implícitos de segunda ordem. Nesse sentido, o passo de tempo varia ao decorrer das simulações para atender a restrição temporal desses métodos. As equações de quantidade de movimento linear estão discretizadas tanto na forma divergente como na forma não divergente, de modo que a escolha por uma dessas formas fica a critério do usuário do código. O acoplamento pressão-velocidade é feito utilizando um método de projeção baseado na técnica de passos fracionados proposto por Chorin (1968). Por fim, os sistemas lineares resultantes correspondentes às equações de transporte podem ser solucionados através do método multigrid-multinível (VILLAR, 2007; LIMA, 2012) ou utilizando a biblioteca PETSc (ABHYANKAR *et al.*, 2018; BALAY *et al.*, 2019).

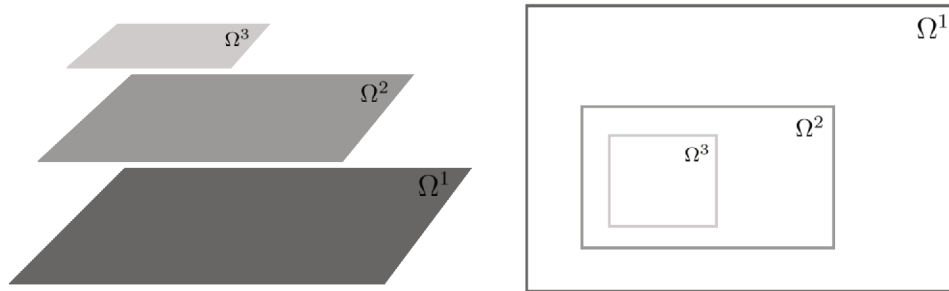
4.1.1 Malha bloco-estruturada com refinamento local adaptativo

No código MFSim, a malha euleriana é bloco-estruturada com refinamento local adaptativo. Sendo assim, as equações de Navier-Stokes discretizadas são resolvidas por meio de uma hierarquia de malhas cartesianas devidamente refinadas. Os níveis de refinamento são formados pela união de blocos de malhas orientadas com espaçamentos sequencialmente menores (VILLAR, 2007).

A malha de um nível mais fino é gerada sobrepondo a de um nível mais grosso (Fig. 4.1), em regiões pré-definidas ou em regiões que variam com o tempo conforme o critério de refinamento adotado. Tem-se um certo interesse em refinar localmente regiões de instabilidades no escoamento, regiões de grande intensidade turbulenta, regiões próximas a paredes, regiões onde se tem a interface entre dois fluidos e até mesmo regiões com a presença de partículas. Um exemplo pode ser observado na Fig. 1.4 mencionado na Seção 1.3, em que o critério baseado no campo de vorticidade do escoamento foi aplicado. Como o refinamento pode ser posicionado somente onde é necessário, consegue-se reduzir o custo computacional e garantir uma maior acurácia numérica.

Na Fig. 4.2 é apresentado um exemplo de malha composta com razão de refinamento igual a 2. Essa malha é constituída por três níveis de refinamento, onde o nível mais grosso, também chamado de nível base, cobre todo o domínio. O segundo nível é formado por dois blocos de malhas, e o terceiro nível por três. Percebe-se que as malhas são geradas de modo

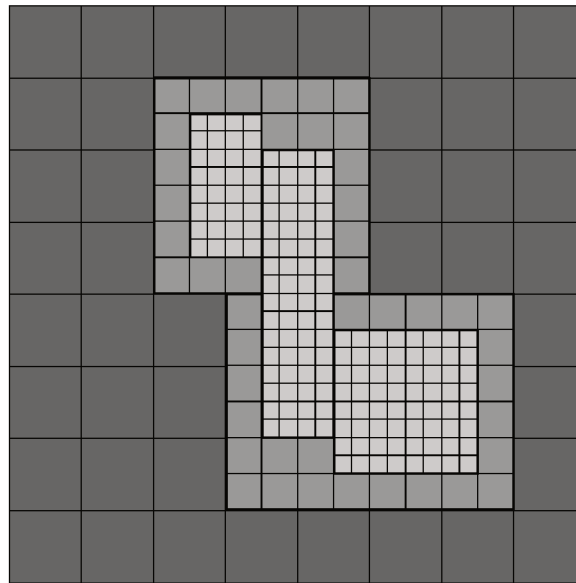
Figura 4.1: Exemplo de malha composta com três níveis de refinamento.



Fonte: Autoria própria.

que as células de um nível mais fino podem estar em contato apenas com as células do nível que está imediatamente abaixo. Além disso, os cantos de uma malha mais fina são coincidentes com os cantos das células pertencentes ao nível abaixo.

Figura 4.2: Exemplo da geração de blocos de malha em três níveis de refinamento diferentes.

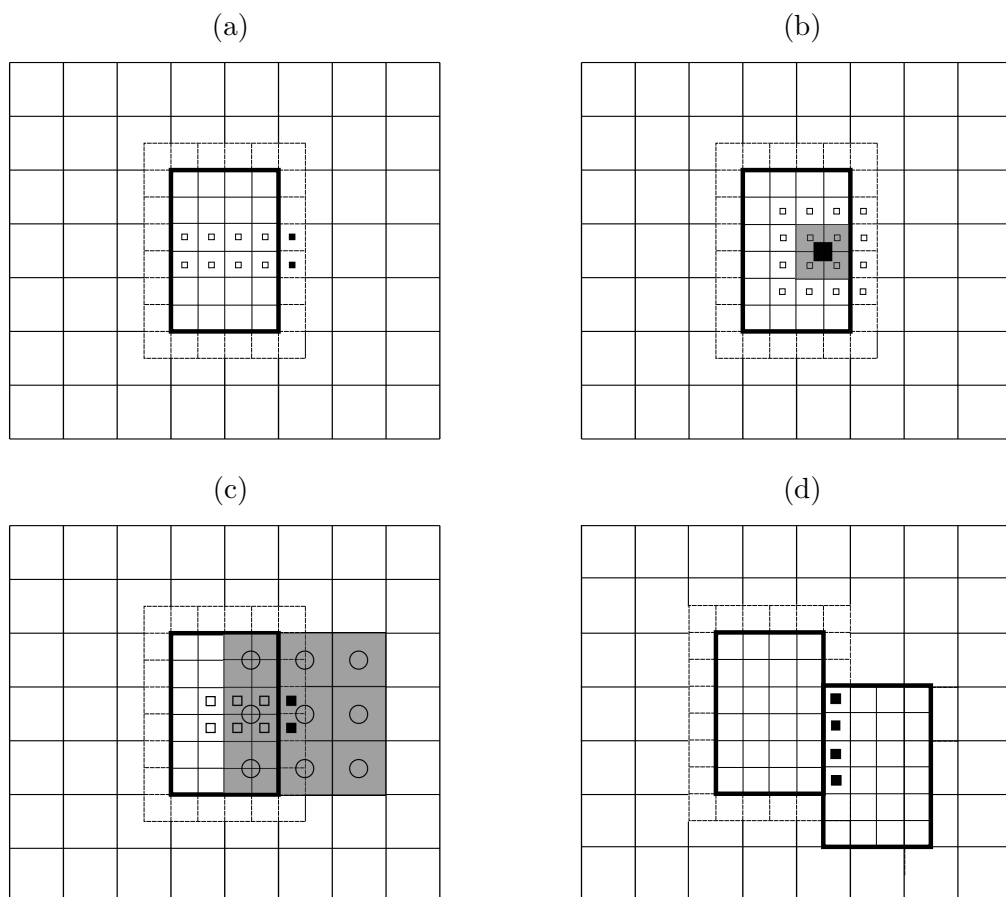


Fonte: Autoria própria.

O cálculo das propriedades do escoamento em uma determinada célula, em certos casos, requer valores de propriedades das células vizinhas. Quando uma célula de um nível mais fino está em contato com uma célula do nível logo abaixo, células fantasmas são criadas e as propriedades são calculadas em um procedimento composto por três passos: (i) extrapolação cúbica utilizando as propriedades das células do próprio bloco da malha mais fina (Fig. 4.3a); (ii) interpolação cúbica utilizando as propriedades da malha mais fina para as células do nível

abaixo que estão no contorno do bloco da malha mais fina (Fig. 4.3b); e (iii) interpolação quadrática entre as propriedades das células da malha mais fina e da malha logo abaixo (Fig. 4.3c). Se duas células de um mesmo nível, porém de blocos diferentes estiverem em contato, células fantasmas também são criadas. A diferença neste caso é que as propriedades não precisam ser extrapoladas ou interpoladas, basta que elas sejam transferidas da célula real para a célula fantasma (processo de injeção), assim como mostrado na Fig. 4.3d (LIMA, 2012).

Figura 4.3: Representação esquemática no cálculo das propriedades de células fantasmas: (a) primeiro passo; (b) segundo passo; e (c) terceiro passo para o cálculo das propriedades das células fantasmas criadas no contorno do bloco de um nível fino; (d) processo de injeção para o preenchimento das células fantasmas entre blocos do mesmo nível de malha.



Fonte: Lima (2012).

Quanto à aplicação das condições de contorno, células fantasmas criadas nas fronteiras físicas do domínio são preenchidas para cada propriedade respeitando a condição escolhida. O usuário do código MFSim pode optar pelas condições de contorno do tipo Dirichlet,

Neumann, advectiva (somente para velocidade) e periódica.

4.1.2 Passo de tempo euleriano

Para o tratamento dos termos advectivo e difusivo, no código MFSim, utilizam-se os esquemas temporais propostos por Ascher, Ruuth e Wetton (1995) e Wang e Ruuth (2008), denominados de IMEX (*IMplicit EXplicit*). Estes consistem em métodos implícitos-explicitos (semi-implícitos), cujo principal fundamento é tratar o termo advectivo de forma explícita possibilitando contornar a solução de um sistema não linear, e tratar o termo difusivo de forma implícita evitando a necessidade de escolher um passo de tempo muito restritivo da ordem $\mathcal{O}(\Delta x^2)$. Assim, a seguinte condição de estabilidade é utilizada nas simulações (DAMASCENO, 2018):

$$\Delta t_E < C_{\text{CFL}} \Delta t_{adv}, \quad (4.1)$$

onde Δt_E é o passo de tempo euleriano, C_{CFL} é a condição CFL (COURANT; FRIEDRICHS; LEWY, 1967) que pode assumir valores entre 0 e 1, tipicamente, e Δt_{adv} é o tamanho máximo permitido para o passo de tempo advectivo, que é definido por:

$$\Delta t_{adv} = \frac{\Delta x}{|u|_{\text{máx}}} + \frac{\Delta y}{|v|_{\text{máx}}} + \frac{\Delta z}{|w|_{\text{máx}}}, \quad (4.2)$$

no qual Δx , Δy , Δz correspondem ao tamanho do elemento da malha nas direções x , y e z . $|u|_{\text{máx}}$, $|v|_{\text{máx}}$ e $|w|_{\text{máx}}$ são os valores máximos absolutos das três componentes de velocidade.

Na Eq. (4.1), o menor valor de Δt_{adv} é escolhido, uma vez que ele é avaliado em todos os níveis da malha euleriana. Como a velocidade do campo de escoamento muda a cada iteração, o passo de tempo euleriano é variável.

4.2 Domínio lagrangiano

No presente trabalho, dois métodos foram empregados no domínio lagrangiano: o método da fronteira imersa e o método da partícula discreta. O primeiro deles foi adotado para representar geometrias imersas no escoamento que não podem ser construídas utilizando

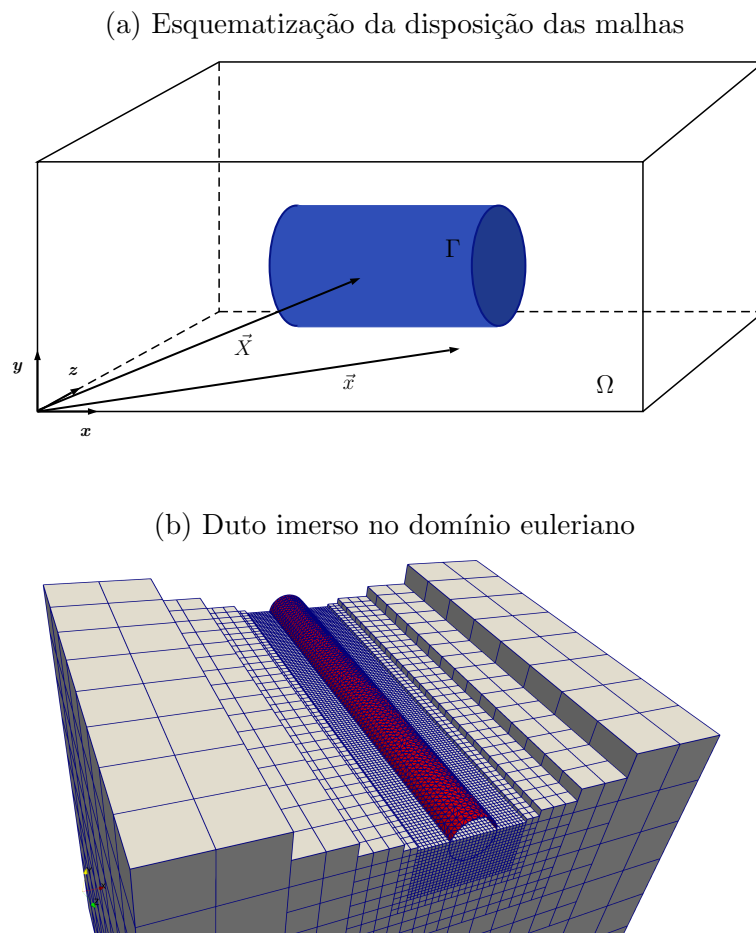
uma malha computacional bloco estruturada. Enquanto o segundo método foi adotado para tratar a fase dispersa do escoamento.

4.2.1 Módulo da fronteira imersa

As geometrias imersas no escoamento são tratadas no domínio lagrangiano pelo módulo IB do código MFSim. Este módulo foi inicialmente desenvolvido através da implementação de um dos métodos de fronteira imersa.

O método da fronteira imersa, de uma forma geral, consiste em trabalhar com duas malhas independentes, conforme ilustrado na Fig. 4.4, com o objetivo de representar uma estrutura sólida imersa em um fluido. Uma delas é denominada de euleriana (indicada por Ω) e corresponde a uma malha fixa e cartesiana, na qual as equações de transporte do fluido são resolvidas. A outra é denominada de lagrangiana (indicada por Γ) e representa uma

Figura 4.4: Representação das malhas euleriana e lagrangiana.



Fonte: Autoria própria.

geometria imersa no escoamento. No código MFSim, a fronteira imersa é discretizada por uma malha superficial de elementos triangulares. Na Fig. 4.4a, um esquema para ilustrar a disposição das malhas é apresentado, no qual \vec{x} é o vetor posição de um ponto qualquer na malha euleriana, e \vec{X} é o vetor posição de um ponto qualquer na malha lagrangiana. Na Fig. 4.4b, pode-se observar a malha euleriana com 5 níveis de refinamento e a malha lagrangiana (duto) posicionada na região mais refinada.

Existem várias abordagens na literatura para o acoplamento da fronteira imersa com o domínio euleriano. A abordagem implementada no código MFSim é conhecida como método da multi-forçagem direta baseada no trabalho de Wang, Fan e Luo (2008). Essa metodologia consiste em um processo iterativo do método da forçagem direta, o qual é comentado a seguir. Ainda assim, uma descrição mais detalhada sobre esse método pode ser encontrada nos trabalhos de Vedovoto, Serfaty e Silveira Neto (2015) e Melo (2017).

4.2.1.1 Método da forçagem direta

O método da forçagem direta proposto por Uhlmann (2005) baseia-se na imposição de forças no domínio euleriano provenientes da velocidade da fronteira imersa. A partir das equações de Navier-Stokes, Eqs. (3.2), avaliadas em pontos lagrangianos, determinam-se as forças calculadas nestes pontos:

$$F_i = \frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + RHS_i, \quad (4.3)$$

onde

$$RHS_i = \frac{\partial \rho U_i U_j}{\partial X_j} + \frac{\partial p}{\partial X_i} - \frac{\partial}{\partial X_j} \left[\mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial X_j} + \frac{\partial U_j}{\partial X_i} \right) \right]. \quad (4.4)$$

Nas equações acima, as propriedades definidas por letras maiúsculas F_i , U_i e X_i , correspondem às componentes da força, velocidade do campo de escoamento e posição avaliadas nos elementos da malha lagrangiana, respectivamente. Elas se diferem de f_i , u_i e x_i que correspondem às componentes da força, velocidade do campo de escoamento e posição avaliadas nas células da malha euleriana.

Discretizando a derivada temporal da Eq. (4.3) por meio de um esquema de segunda ordem, obtém-se que:

$$F_i(\vec{X}, t) = \frac{\alpha_2(\rho U_i)^{n+1} - \alpha_1(\rho U_i)^n + \alpha_0(\rho U_i)^{n-1}}{\Delta t} + RHS_i^n, \quad (4.5)$$

sendo α_0 , α_1 e α_2 coeficientes da discretização temporal (VEDOVOTO; SERFATY; SILVEIRA NETO, 2015). Os sobrescritos n , $n - 1$ e $n + 1$ correspondem às iterações do passo de tempo atual, do passo de anterior e do novo passo de tempo, respectivamente.

Para o referido método, um parâmetro auxiliar U_i^* , que consiste nas componentes da velocidade estimada do campo de escoamento, deve ser somado e subtraído no termo temporal, de forma que:

$$F_i(\vec{X}, t) = \frac{\alpha_2(\rho U_i)^{n+1} - \alpha_1(\rho U_i)^n + \alpha_0(\rho U_i)^{n-1} + \alpha_2 \rho U_i^* - \alpha_2 \rho U_i^*}{\Delta t} + RHS_i^n. \quad (4.6)$$

Utilizando o princípio da superposição, a Eq. (4.6) é resolvida separadamente como:

$$\frac{\alpha_2 \rho U_i^* - \alpha_1(\rho U_i)^n + \alpha_0(\rho U_i)^{n-1}}{\Delta t} + RHS_i^n = 0, \quad (4.7)$$

e

$$F_i(\vec{X}, t) = \frac{\alpha_2(\rho U_i)^{n+1} - \alpha_2 \rho U_i^*}{\Delta t}. \quad (4.8)$$

Para calcular as componentes de U_i^* avaliadas nos pontos lagrangianos, uma interpolação das componentes de u_i^* avaliadas nas células eulerianas mais próximas de cada ponto lagrangiano é realizada:

$$U_i^*(\vec{X}) = \sum_{\Omega} D_h(\vec{x} - \vec{X}) u_i^*(\vec{x}) \Delta x \Delta y \Delta z, \quad (4.9)$$

sendo D_h a função de interpolação. No presente trabalho, tanto para a interpolação quanto para a distribuição utilizou-se a função chapéu (VEDOVOTO; SERFATY; SILVEIRA NETO, 2015). Além disso, as componentes de u_i^* são obtidas pela solução dos sistemas lineares atra-

vés do método multigrid-multinível ou dos solucionadores de sistemas lineares da biblioteca PETSc (ver Seção 4.1).

Posto isso, a Eq. (4.8) pode ser resolvida, uma vez que o termo $U_i^{\mathbf{n}+1}$ corresponde à velocidade da fronteira imersa. Caso a fronteira não se movimente, este termo é anulado. Depois de obter os valores da força em cada ponto lagrangiano, a distribuição dos mesmos é feita nas células eulerianas mais próximas:

$$f_i(\vec{x}) = \sum_{\Gamma} D_h(\vec{x} - \vec{X}) F_i(\vec{X}) \Delta V_{\Gamma}, \quad (4.10)$$

onde ΔV_{Γ} é o volume lagrangiano.

Com base na Eq. (4.8) avaliada nas células eulerianas, as componentes da nova velocidade para as células eulerianas mais próximas da fronteira imersa podem ser determinadas:

$$f_i = \frac{\alpha_2(\rho u_i)^{\mathbf{n}+1} - \alpha_2 \rho u_i^*}{\Delta t} \Rightarrow u_i^{\mathbf{n}+1} = u_i^* + \frac{f_i \Delta t}{\alpha_2 \rho}. \quad (4.11)$$

4.2.1.2 Método da multi-forçagem direta

No método da multi-forçagem direta, todo o procedimento citado anteriormente é realizado de maneira iterativa, sendo necessário empregar um critério de parada. No código MFSim, esse critério baseia-se na convergência da nova velocidade para um valor de resíduo mínimo desejado, e a todo passo de tempo a convergência é avaliada. O objetivo de empregar um procedimento iterativo consiste nas melhorias de precisão de cálculo que se pode conseguir.

4.2.2 Módulo das partículas discretas

Silva (2016), em sua tese de doutorado, desenvolveu o módulo das partículas discretas no código computacional MFSim para o tratamento da fase dispersa de um escoamento bifásico. Este módulo, então denominado DPM, consiste basicamente no rastreamento da trajetória de cada partícula, que pode ser uma gotícula, pequena bolha, ou um particulado sólido. Porém, o foco do trabalho de Silva (2016) foi a modelagem de *breakup* de gotículas, as quais estão presentes em escoamentos gás-líquido. Buscando dar continuidade ao módulo

DPM e aprimorar o código computacional MFSim, as contribuições realizadas na presente dissertação possibilitam a simulação de escoamentos gás-sólido.

4.2.2.1 Integração temporal das equações de transporte

A dinâmica da partícula é determinada por uma série de equações diferenciais ordinárias, as quais descrevem o avanço temporal da posição, Eq. (3.28), velocidade linear, Eq. (3.29), e velocidade angular, Eq. (3.30), da partícula. Através de esquemas de integração numérica, essas equações são transformadas em equações algébricas. Para isso, na presente dissertação, empregou-se o método de Runge-Kutta de quarta ordem.

Considerando a forma geral de uma equação ordinária diferencial de primeira ordem, tem-se que:

$$\frac{d\phi}{dt} = f(\phi, t), \quad (4.12)$$

sendo ϕ uma variável arbitrária associada à partícula que está sendo transportada, como \vec{x}_p , \vec{u}_p ou $\vec{\omega}_p$, e $f(\phi, t)$ uma dada função dependente da própria variável e do tempo.

Aplicando o método de Runge-Kutta de quarta ordem, de maneira explícita, na Eq. (4.12), a expressão de ϕ para o novo passo de tempo é obtida por:

$$\phi^{\mathbf{n}+1} = \phi^{\mathbf{n}} + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) |^{\mathbf{n}} \Delta t, \quad (4.13)$$

onde os coeficientes da equação são:

$$k_1 = f(\phi, t), \quad (4.14a)$$

$$k_2 = f\left(\phi + \frac{\Delta t}{2} k_1, t + \frac{\Delta t}{2}\right), \quad (4.14b)$$

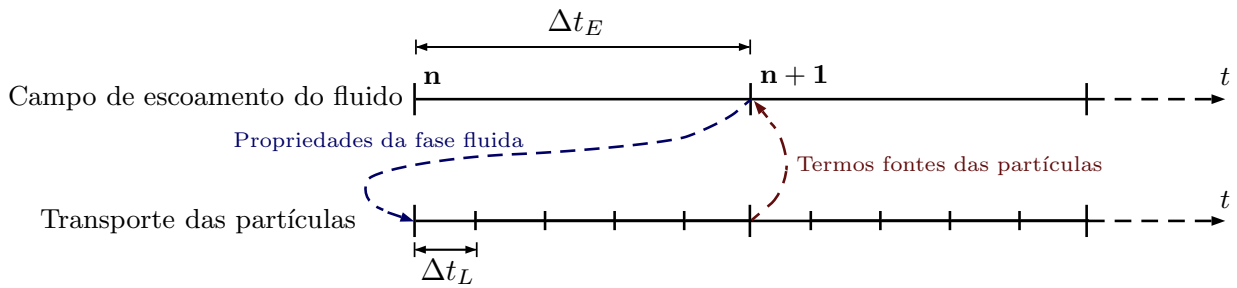
$$k_3 = f\left(\phi + \frac{\Delta t}{2} k_2, t + \frac{\Delta t}{2}\right), \quad (4.14c)$$

$$k_4 = f(\phi + \Delta t k_3, t + \Delta t). \quad (4.14d)$$

4.2.2.2 Passo de tempo lagrangiano

Escoamentos em regime transiente, considerando uma abordagem Euler-Lagrange, podem ser resolvidos de duas formas diferentes. Se o passo de tempo lagrangiano Δt_L for da mesma ordem do passo de tempo euleriano Δt_E , a resolução das equações de transporte da fase dispersa acontece posteriormente a resolução do campo de escoamento da fase contínua, na mesma iteração considerando o mesmo passo de tempo. No entanto, se o passo de tempo lagrangiano for muito menor do que o passo de tempo euleriano, subiterações devem ser realizadas para os cálculos lagrangianos. Isso acontece principalmente em situações onde as partículas são muito pequenas e o tempo de resposta das mesmas torna-se um limitante do passo de tempo lagrangiano (SOMMERFELD, 2017). Assim, enquanto o esquema numérico da fase particulada é resolvido em vários passos de tempo, a fase fluida é previamente resolvida, permanecendo em um estado “congelado” até o final do processo iterativo lagrangiano, como representado na Fig. 4.5.

Figura 4.5: Ilustração da linha de tempo na simulação de escoamentos utilizando abordagem Euler-Lagrange, em que $\Delta t_E > \Delta t_L$.



Fonte: Autoria própria.

O passo de tempo lagrangiano é ajustado de acordo com algumas escalas de tempo locais mais relevantes. No caso de escoamentos gás-sólido, as principais escalas de tempo são: (i) o tempo requerido para uma partícula atravessar um volume de controle $t_{V,C}$; (ii) o tempo de resposta da partícula τ_p ; (iii) escala de tempo integral da turbulência lagrangiana T_L ; e (iv) o tempo médio entre colisões de partículas τ_c . Faz-se necessário considerar o tempo médio entre colisões para garantir que no intervalo de um passo de tempo ocorra somente

colisões binárias, uma vez que utilizou-se o método DPM no presente trabalho (ver Fig. 2.7).

O cálculo do passo de tempo lagrangiano é, então, obtido em função do menor valor das escalas de tempo mencionadas acima. Conforme sugerido por Sommerfeld (2017), esse passo de tempo pode ser calculado por uma fração, em torno de 20 %, do menor valor:

$$\Delta t_L = 0,2 \cdot \min(t_{V.C}, \tau_p, T_L, \tau_c). \quad (4.15)$$

Após transportar as partículas e atualizar as suas velocidades, o termo de acoplamento, que contabiliza a influência das partículas no fluido (acoplamento 2 vias), é calculado a partir da Eq. (3.43) para cada célula computacional. Se $\Delta t_L < \Delta t_E$, uma média desse termo é feita ao longo das subiterações. Se $\Delta t_L \approx \Delta t_E$, esse termo de acoplamento é diretamente acrescentado como termo fonte na equação de balanço de quantidade de movimento linear do fluido, na iteração seguinte (novo passo de tempo euleriano).

4.2.2.3 Interpolação das propriedades eulerianas

Conforme mencionado na Seção 2.4, as propriedades do fluido incluídas nas equações de transporte da partícula são avaliadas com base nos valores correspondentes à posição da própria partícula. A localização de uma partícula nem sempre coincide com o ponto da malha computacional onde as propriedades eulerianas são definidas, ou seja, uma face ou o centro de uma célula. Por causa disso, essas propriedades, como \vec{u} , $\vec{\omega}$, ρ e μ , precisam ser interpoladas para o ponto do domínio computacional em que a partícula se encontra.

Inicialmente, as propriedades eulerianas, generalizadas aqui por ψ , devem ser interpoladas para os vértices dos volumes de controle da malha euleriana. Conhecendo os valores em cada um dos vértices do volume de controle que contém a partícula, um método de interpolação deve ser aplicado para obter o valor dessas propriedades a partir dos vértices para a posição da partícula, $\vec{x}_p = (x_p, y_p, z_p)$. No código MFSim, utiliza-se o método de interpolação trilinear, o qual baseia-se na ponderação por distância em um espaço tridimensional.

Seja uma malha estruturada, a célula de dimensões $\Delta x \times \Delta y \times \Delta z$, formado por 8 vértices, contendo uma partícula é representada na Fig. 4.6. Através do método de interpolação trilinear, os valores das propriedades eulerianas em cada um dos vértices são ponderados

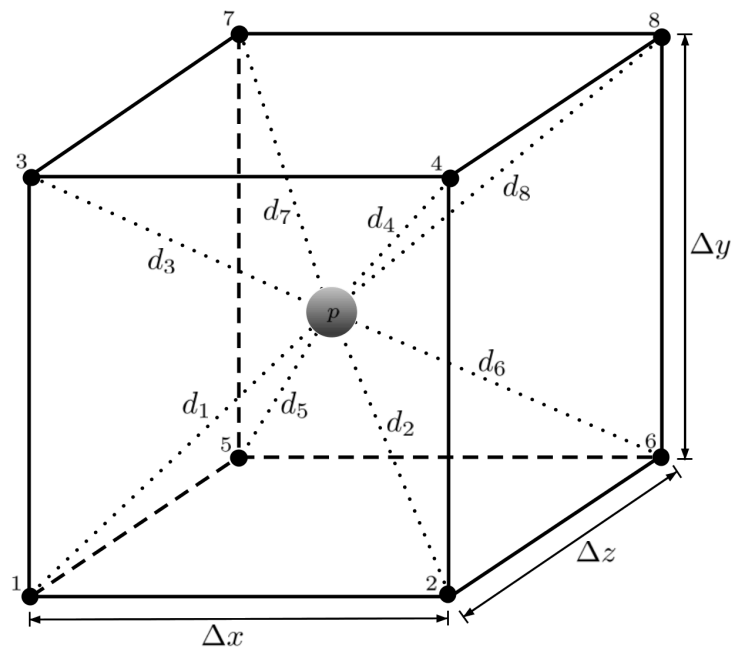
em função da distância da partícula até cada vértice, determinando assim os valores das propriedades na posição dessa partícula:

$$\psi_{\vec{x}_p} = \frac{\sum_{v=1}^8 (\psi_{\vec{x}_v} / d_v^2)}{\sum_{v=1}^8 (1/d_v^2)}, \quad (4.16)$$

onde v representa o número do vértice, e

$$d_v = \sqrt{(x_p - x_v)^2 + (y_p - y_v)^2 + (z_p - z_v)^2}. \quad (4.17)$$

Figura 4.6: Representação esquemática de uma célula computacional contendo uma partícula, cuja distância até cada vértice é expressada por d .



Fonte: Autoria própria.

Mais detalhes a respeito do método de interpolação utilizado podem ser encontrados no trabalho de Silva (2016).

4.2.2.4 Condições de contorno

Dependendo do problema estudado, diferentes condições de contorno podem ser requeridas. No código MFSim, as partículas que passam pela face de saída do domínio computacional são simplesmente excluídas da estrutura de dados. No entanto, quando a física ou uma geometria específica requer que as condições de simetria, periodicidade e interação

partícula-parede sejam tratadas, a posição das partículas e as componentes das velocidades são modificadas para levar em consideração tais condições.

Quando a condição de simetria é imposta em uma das fronteiras físicas do domínio, a componente normal da velocidade linear em relação a essa fronteira tem seu sentido alterado para o sentido contrário. Se a condição de periodicidade é considerada em uma das direções coordenadas, ao passar por uma das faces do domínio correspondente a essa direção, a partícula é reinjetada no lado oposto. A interação entre partícula-parede já foi previamente mencionada na Seção 3.2.5, caso a parede seja representada por uma fronteira imersa, mais detalhes estão apresentados na Seção 4.2.2.9.

Ao iniciar uma simulação, tem-se duas opções: preencher todo domínio computacional com um determinado número de partículas ou aplicar em uma das faces do domínio a condição de entrada. Essa condição foi implementada para modelar a injeção de partículas, sendo necessário definir alguns parâmetros de entrada:

- vazão mássica de partículas $\dot{m}_{p,inj}$, para determinar o número de partículas N_p a serem injetadas por passo de tempo;
- geometria de injeção de partículas, de modo que a posição das partículas é distribuída uniformemente no interior de uma face, podendo ser circular ou retangular;
- distribuição do tamanho das partículas.

Na prática, o número de partículas injetadas pode ser determinado com base na massa de partículas injetadas:

$$\dot{m}_{p,inj} \Delta t_L = \sum_{n=1}^{N_p} \rho_{p_n} \frac{\pi}{6} D_{p_n}^3. \quad (4.18)$$

Em casos monodispersos, nos quais o diâmetro das partículas é constante, o número de partículas a serem injetadas é obtido diretamente por:

$$N_p = \text{int} \left(\frac{\dot{m}_{p,inj} \Delta t_L}{\frac{\pi}{6} \rho_p D_p^3} \right), \quad (4.19)$$

onde a função **int** faz a truncagem do argumento da função para a parte inteira, e D_p é o

valor do diâmetro da partícula introduzido como parâmetro de entrada da simulação. Em casos polidispersos, no quais as partículas têm tamanhos diferentes, o número de partículas a serem injetadas é dado em função da distribuição do tamanho das partículas escolhida.

4.2.2.5 Distribuição do tamanho das partículas

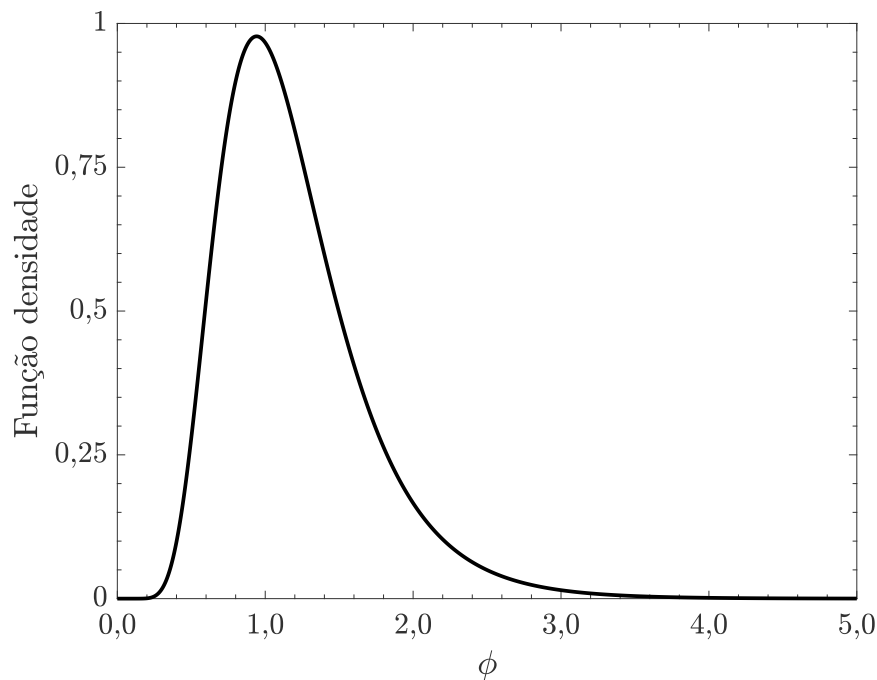
Para definir o tamanho das partículas nas simulações, utilizou-se a distribuição log-normal. Segundo Crowe *et al.* (2011), essa é uma distribuição frequentemente empregada na representação do tamanho de partículas sólidas.

Uma variável aleatória ϕ tem a distribuição log-normal, quando o seu logaritmo $\ln \phi$ tem a distribuição normal. Sendo assim, sua função de densidade é dada por:

$$f(\phi; \mu, \sigma) = \frac{1}{\phi \sigma \sqrt{2\pi}} \exp \left[\frac{-(\ln \phi - \mu)^2}{2\sigma^2} \right], \quad (4.20)$$

em que μ e σ são a média e o desvio padrão da distribuição. Um gráfico representativo da função densidade da distribuição log-normal pode ser observado na Fig. 4.7. Percebe-se que para essa distribuição, a variável ϕ varia de zero a infinito.

Figura 4.7: Função densidade da distribuição log-normal para uma variável ϕ .



Fonte: Autoria própria.

Considerando a distribuição do tamanho das partículas, tem-se como variável o diâmetro das mesmas, ou seja, $\phi = D_p$. Neste caso, a média e o desvio padrão da distribuição são obtidos a partir da média \bar{D}_p e da variância s_{D_p} dos diâmetros das partículas:

$$\mu = \ln \left(\frac{\bar{D}_p^2}{\sqrt{s_{D_p} + \bar{D}_p^2}} \right), \quad (4.21a)$$

$$\sigma = \sqrt{\ln \left(\frac{s_{D_p}}{\bar{D}_p^2 + 1} \right)}. \quad (4.21b)$$

4.2.2.6 Estrutura de dados

Tratando-se do transporte de partículas em um domínio computacional, surgem duas questões que precisam ser resolvidas: quais partículas estão localizadas em uma determinada célula, e qual é a célula em que se encontra uma determinada partícula. Uma possível solução para ambas as questões é a construção de um mapa lagrangiano. No código MFSim, esse mapa é composto por uma tabela *hash* multi-nível, que fornece acesso direto ao conjunto de partículas contidas em cada célula da malha euleriana. Juntamente ao mapa, tem-se a possibilidade de usar uma ferramenta de busca por nível de refinamento, a qual é baseada na Eq. (4.22), para encontrar a célula em que a partícula reside (FERREIRA, 2015):

$$i_c = \text{int} \left(\frac{x_p - x_0}{\Delta x} \right), \quad j_c = \text{int} \left(\frac{y_p - y_0}{\Delta y} \right) \quad \text{e} \quad k_c = \text{int} \left(\frac{z_p - z_0}{\Delta z} \right), \quad (4.22)$$

onde i_c , j_c e k_c são os índices da célula, as coordenadas x_0 , y_0 e z_0 correspondem a origem do domínio computacional, Δx , Δy e Δz dependem do nível da célula na malha.

A Fig. 4.8 consiste em uma representação esquemática da estrutura de dados do domínio lagrangiano. Como pode ser observado, a tabela *hash* multi-nível corresponde à malha euleriana e cada célula dessa malha é formada por uma outra tabela *hash* identificada pelos índices i_c , j_c , k_c . Uma vez que a tabela *hash* multi-nível é dependente da malha euleriana, sua estrutura deve ser reconstruída toda vez que uma remalhagem acontecer durante a simulação.

Figura 4.8: Representação esquemática do mapa lagrangiano composto por vários níveis de refinamento da malha com células contendo partículas.

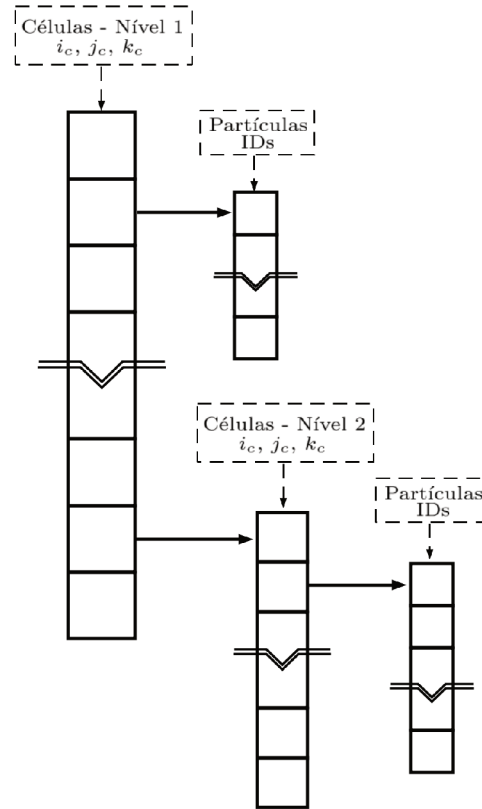


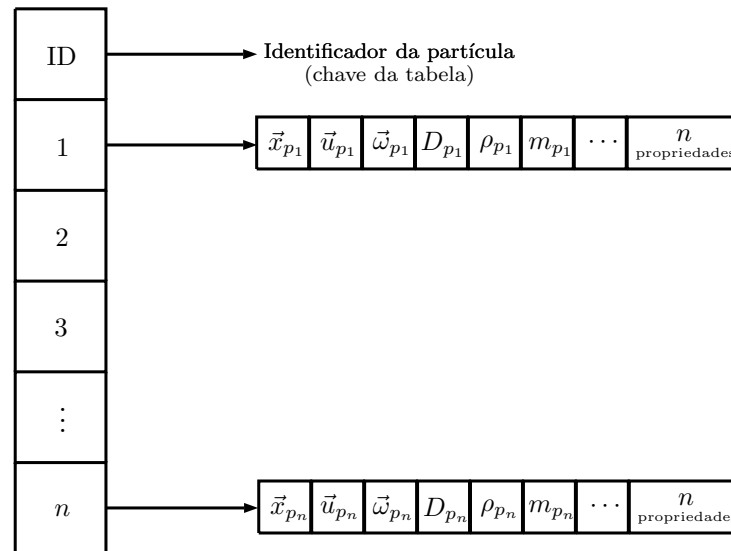
Tabela hash multi-nível

Fonte: Autoria própria.

As partículas computacionais precisam ser representadas no código de alguma forma. Para tanto, utiliza-se a tabela *hash*, assim como para o mapa lagrangiano. Neste caso, a tabela *hash* é do tipo ID, ou seja, ela consiste em uma lista de índices que são os identificadores (IDs) das partículas e também as chaves da tabela. A partir de um ID é possível acessar, através de uma função *hash*, todas as outras informações que acompanham este mesmo ID sem ter que percorrer por toda a tabela. Desse modo, a tabela pode comportar n partículas e suas respectivas n variáveis, como mostrado na Fig. 4.9.

Toda a estrutura das tabelas *hash*, aplicada tanto na construção do mapa lagrangiano, como na adição de partículas e suas propriedades, foi empregada no código MFSim por meio do pacote UTHASH desenvolvido por Hanson (2013) em linguagem C. Por esse motivo, grande parte do módulo DPM foi também desenvolvido nessa mesma linguagem. O pacote UTHASH fornece ferramentas para criar e manipular as tabelas *hash*, no sentido de adicionar,

Figura 4.9: Representação esquemática da tabela *hash* que armazena as partículas computacionais.



Fonte: Autoria própria.

deletar e buscar informações contidas nelas.

4.2.2.7 Paralelização

No código MFSim, a comunicação de dados em computação paralela é feita pelo padrão MPI (*Message Passing Interface*). Nesse padrão, uma simulação é constituída por um ou mais processos que se comunicam através de funções. O acionamento dessas funções consiste no envio e recebimento de mensagens entre os processos. No início da simulação, um conjunto fixo de processos é criado.

Para cada processo é atribuído um grupo de comunicação e um *rank*, o qual corresponde a um tipo de identificador de processo definido por um número inteiro. Além do *rank*, cada processo é também associado a um comunicador, o qual especifica o domínio de comunicação de um grupo de processos. Desse modo, os processos que apresentam o mesmo comunicador estão no mesmo grupo de comunicação. No caso do código MFSim, associa-se apenas um comunicador a todos os processos considerados.

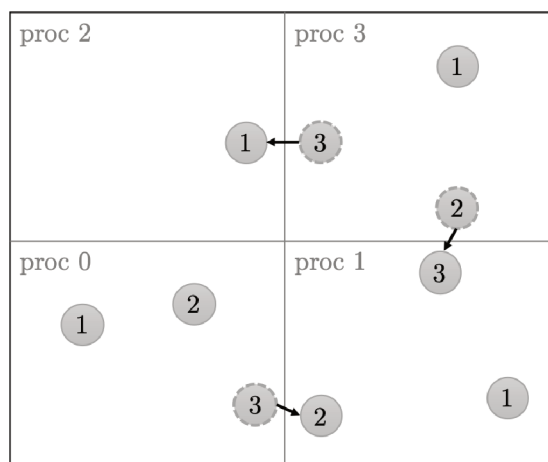
Os processos podem usar mecanismos de comunicação ponto a ponto, que consistem em operações para enviar mensagens de um determinado processo a outro. Entretanto, um grupo de processos pode também invocar operações coletivas de comunicação para executar operações globais, exigindo que todos esses processos estejam sincronizados. A comunica-

ção coletiva é utilizada, como por exemplo, para informar a todos os processos o número de partículas que cada um deles deve enviar e receber de cada processo vizinho. Já um exemplo de aplicação da comunicação ponto a ponto é a troca de informações das partículas transportadas que ultrapassaram os limites entre dois processos.

A codificação do método dos volumes finitos, utilizado para discretização das equações de transporte do fluido no domínio euleriano do código MFSim, foi desenvolvido em Fortran. Sendo assim, o comunicador é inicializado a partir de funções escritas nessa linguagem e depois é transferido para o ambiente escrito em C, onde está implementada toda a parte relacionada ao transporte de partículas. Para mais detalhes sobre o MPI e o processamento paralelo no domínio lagrangiano consultar Ferreira (2015).

As partículas seguem a mesma regra de particionamento do domínio que a malha euleriana. Portanto, a posição delas determina a qual processo elas pertencem. Cada partícula tem um identificador único, no entanto, este é conhecido apenas no processo local. Consequentemente, cada processo tem um controlador de ID independente. Quando uma partícula sai de um processo, seu ID juntamente com as suas informações são deletados da tabela *hash* local. Ao entrar no processo vizinho, um novo ID é providenciado para a partícula seguindo a lista de IDs local. Na Fig. 4.10, pode-se observar como ocorre a transferência de partículas entre processos. A identificação dessa transferência acontece com base na nova posição das partículas depois de serem transportadas. Se a nova posição não corresponder ao pro-

Figura 4.10: Representação esquemática da transferência de partículas entre processos.



Fonte: Autoria própria.

cesso atual da partícula em questão, a mesma precisa ser enviada para o processo vizinho correspondente.

4.2.2.8 Identificação de colisões entre partículas

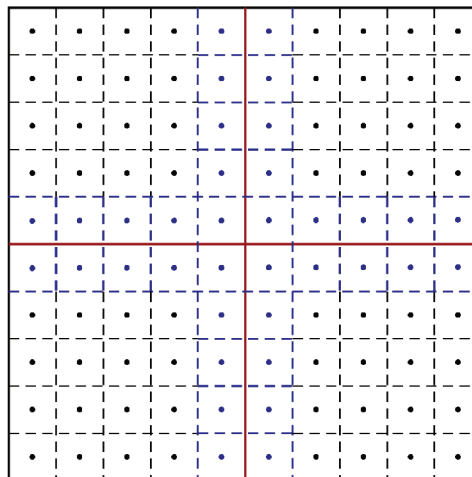
A identificação das colisões entre partículas foi realizada a partir de uma modelagem determinística. Nessa modelagem, a possibilidade de uma partícula colidir com outra é determinada analisando a trajetória das partículas que estão ao redor. Uma forma simples de detectar colisões é checando todos os possíveis pares de partículas no domínio computacional. Porém, essa não é uma forma eficiente, visto que o custo computacional para uma checagem desse nível é da ordem de $\mathcal{O}(N_p^2)$.

No presente trabalho, visando diminuir o custo computacional, restringiu-se a busca pelas partículas em algumas células do mapa lagrangiano, de modo que apenas as partículas mais próximas são possíveis pares de colisão. Para tanto, o algoritmo apresentado na Fig. 4.11 foi utilizado, seguindo as etapas apresentadas abaixo:

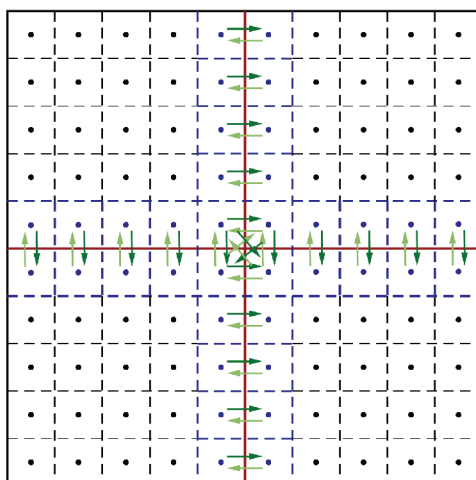
Algoritmo 1 Colisão partícula-partícula

1: Primeiramente, faz-se a comunicação das partículas contidas nas células que fazem fronteira com outros processos.

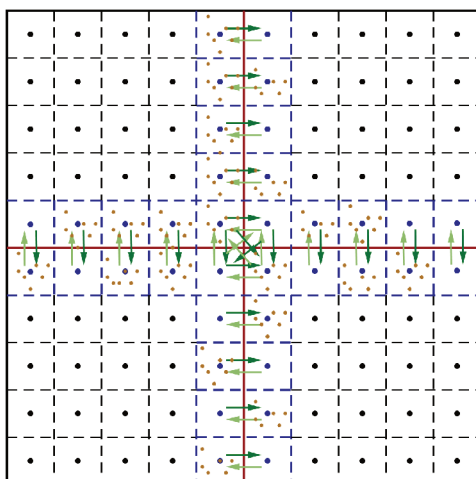
a: As células pertencentes a um processo e que fazem fronteira com outros processos são identificadas.



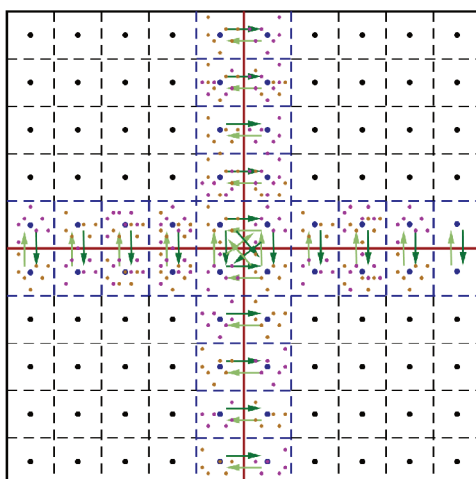
b: Esses outros processos também são identificados, a fim de salvar o *rank* dos processos entre os quais devem ser feitas as comunicações.



c: A busca pelas partículas que estão nessas células é realizada, comunicando-as para os processos vizinhos com todas as suas informações.



d: Uma nova tabela *hash* é criada nos processos vizinhos, para salvar as informações dessas partículas.



e: Os IDs dessas partículas são armazenados nas tabelas *hash* multi-nível desses outros processos.

- 2: A reta que contém a trajetória da partícula, bem como a distância d_t percorrida por ela dentro do passo de tempo são determinadas:

$$\vec{x}_p = \vec{x}_p^{\mathbf{n}} + \vec{u}_p^{\mathbf{n}+1} t_p, \quad (4.23)$$

e

$$d_t = \|\vec{x}_p^{\mathbf{n}+1} - \vec{x}_p^{\mathbf{n}}\|, \quad (4.24)$$

onde $t_p \in \mathbb{R}$ é o parâmetro da reta da trajetória, que nesse caso coincide com tempo gasto pela partícula para sair de $\vec{x}_p^{\mathbf{n}}$ e chegar em uma posição qualquer \vec{x}_p . Os sobrescritos \mathbf{n} e $\mathbf{n} + 1$ correspondem às propriedades da partícula obtidas antes e depois da integração temporal, respectivamente.

- 3: Faz-se uma busca pelas células que estão mais próximas da partícula.

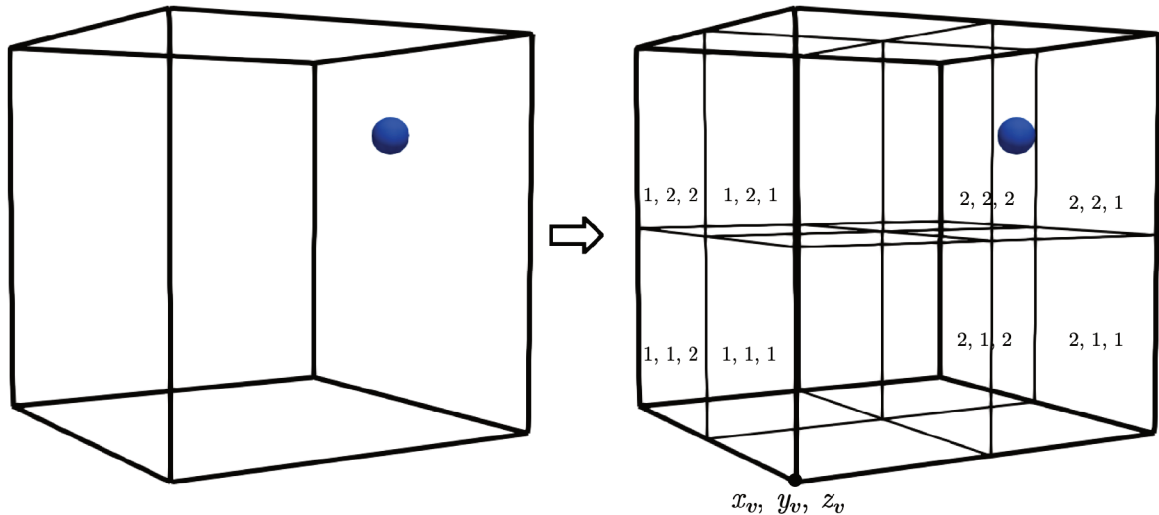
a: Inicialmente, a ideia era utilizar todas as 27 células ao redor da partícula. No entanto, como o custo disso é alto, restringiu-se a busca a uma quantidade menor de células.

b: A célula em que a partícula se encontra é dividida em 8 partes. Para a identificação dessas 8 partes, atribui-se à cada uma delas um conjunto de índices, os quais são obtidos por:

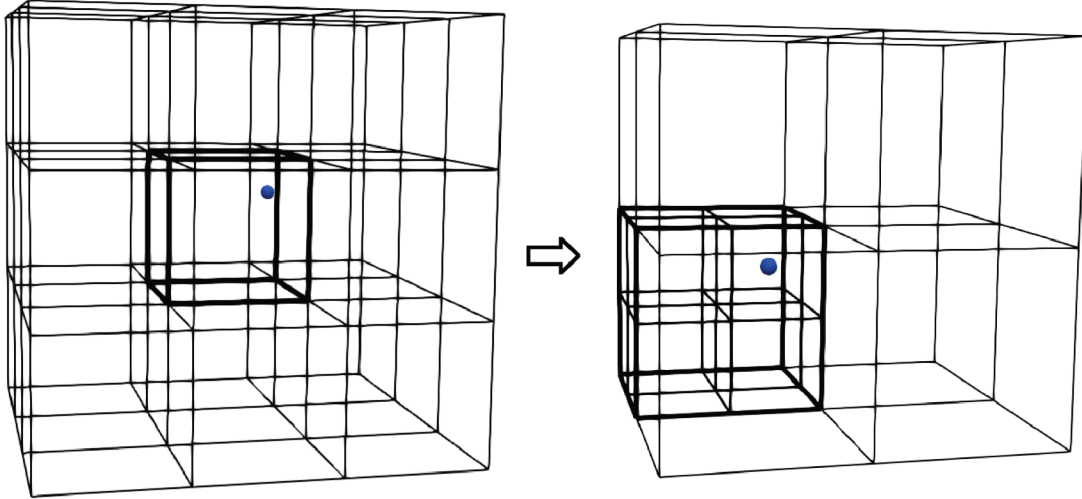
$$i_{parte} = \text{int} \left(\frac{x_p - x_v}{0,5\Delta x} \right), \quad j_{parte} = \text{int} \left(\frac{y_p - y_v}{0,5\Delta y} \right) \quad \text{e} \quad k_{parte} = \text{int} \left(\frac{z_p - z_v}{0,5\Delta z} \right), \quad (4.25)$$

sendo x_v, y_v e z_v as coordenadas da posição do vértice de referência da célula analisada.

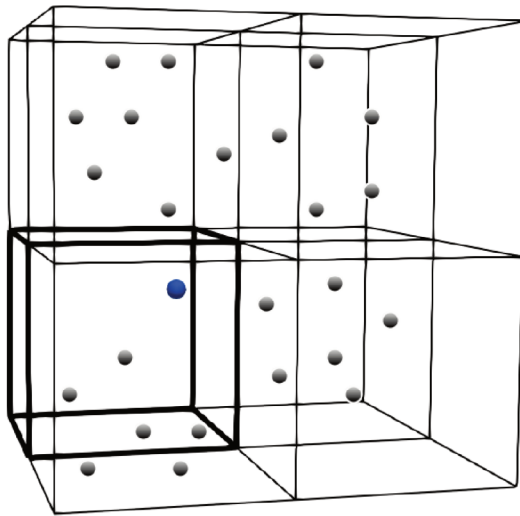
c: A partir da posição da partícula é possível determinar em qual dessas partes ela está localizada segundo a Eq. (4.25).



d: Assim, a busca é feita apenas para as células que fazem fronteira com a parte determinada com base nos índices i_c, j_c, k_c da célula em que a partícula está e nos índices $i_{parte}, j_{parte}, k_{parte}$ de cada uma das 8 partes. Com isso, reduz-se a busca de 27 células para 8 células.



4: A partir dos IDs que estão armazenados nas células encontradas, identificam-se as partículas mais próximas, ou seja, as mais prováveis de ter contato.



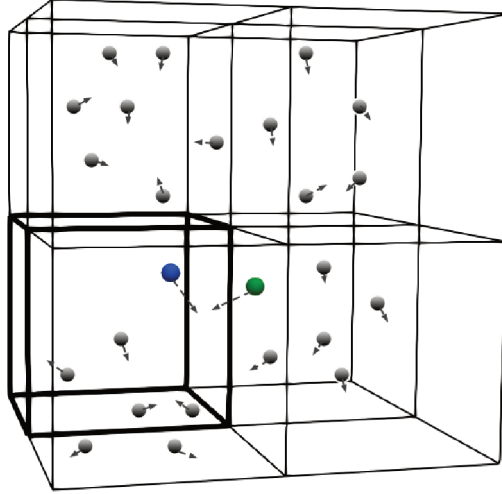
5: Para cada partícula vizinha, a reta da trajetória dentro do passo de tempo é determinada:

$$\vec{x}_q = \vec{x}_q^{\mathbf{n}} + \vec{v}_q^{\mathbf{n}+1} t_q. \quad (4.26)$$

6: A distância entre as retas que contém as trajetórias das partículas vizinhas e a reta que contém a trajetória da partícula em análise é calculada. Se essa distância for igual a soma dos raios

das duas partículas comparadas, possivelmente haverá uma colisão:

$$\|\vec{x}_p - \vec{x}_q\| = 0,5(D_p + D_q). \quad (4.27)$$



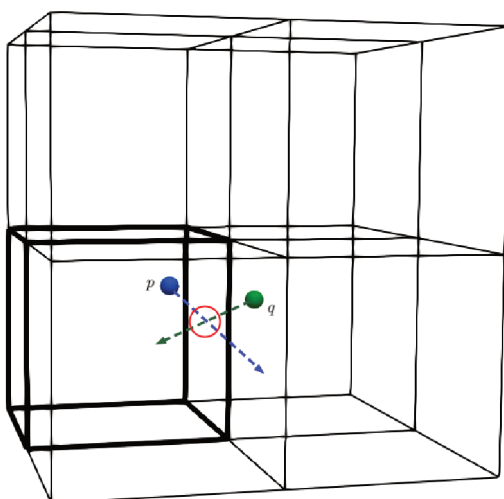
- 7: Para obter as posições de ambas as partículas no momento do possível contato, \vec{x}_p^c e \vec{x}_q^c , encontra-se o valor do tempo gasto pelas partículas até o contato substituindo as Eqs. (4.23) e (4.26) na Eq. (4.27), uma vez que $t_p = t_q = t_{col}$:

$$\|(\vec{x}_p^{\mathbf{n}} - \vec{x}_q^{\mathbf{n}}) + (\vec{u}_p^{\mathbf{n}+1} - \vec{u}_q^{\mathbf{n}+1}) t_{col}\| = 0,5(D_p + D_q). \quad (4.28)$$

- 8: A distância entre a posição anterior da partícula e a posição no momento do contato é calculada:

$$d_c = \|\vec{x}_p^c - \vec{x}_p^{\mathbf{n}}\|. \quad (4.29)$$

- 9: Para que a colisão aconteça, o tempo gasto para a partícula percorrer essa distância tem que ser menor que o passo de tempo.
- 10: Caso mais de uma partícula atenda à condição da oitava etapa, aquela para a qual a menor distância até a posição no momento contato tiver sido calculada é a escolhida.



- 11: Se a colisão acontecer, as novas velocidades são atualizadas com base no modelo de esfera rígida (ver Seção 3.2.4), e as novas posições das partículas são obtidas por:

$$\vec{x}_p^{\mathbf{n}+1} = \vec{x}_p^c + \vec{u}_p^{\mathbf{n}+1} (\Delta t_L - t_{col}), \quad (4.30)$$

e

$$\vec{x}_q^{\mathbf{n}+1} = \vec{x}_q^c + \vec{u}_q^{\mathbf{n}+1} (\Delta t_L - t_{col}). \quad (4.31)$$

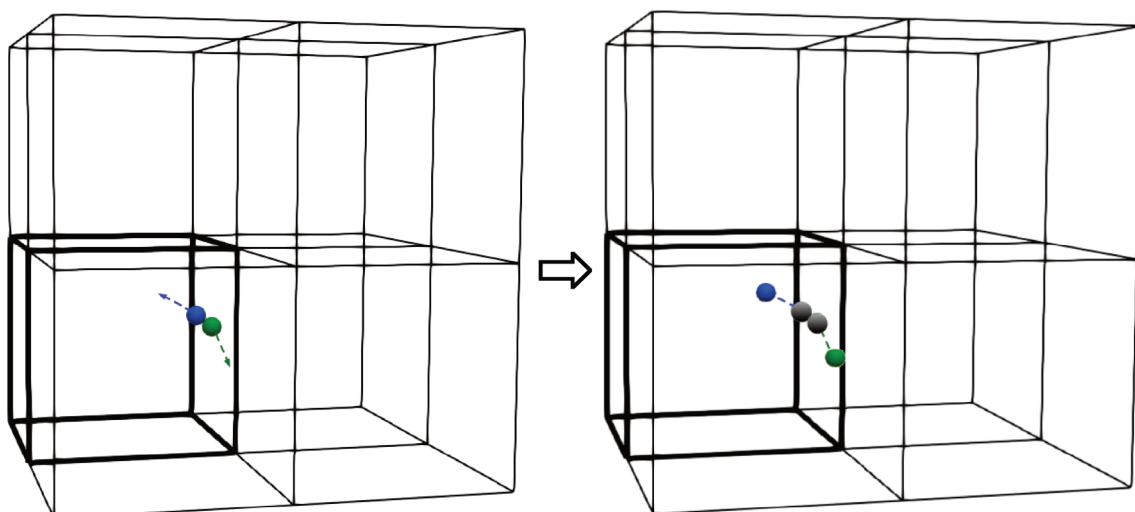
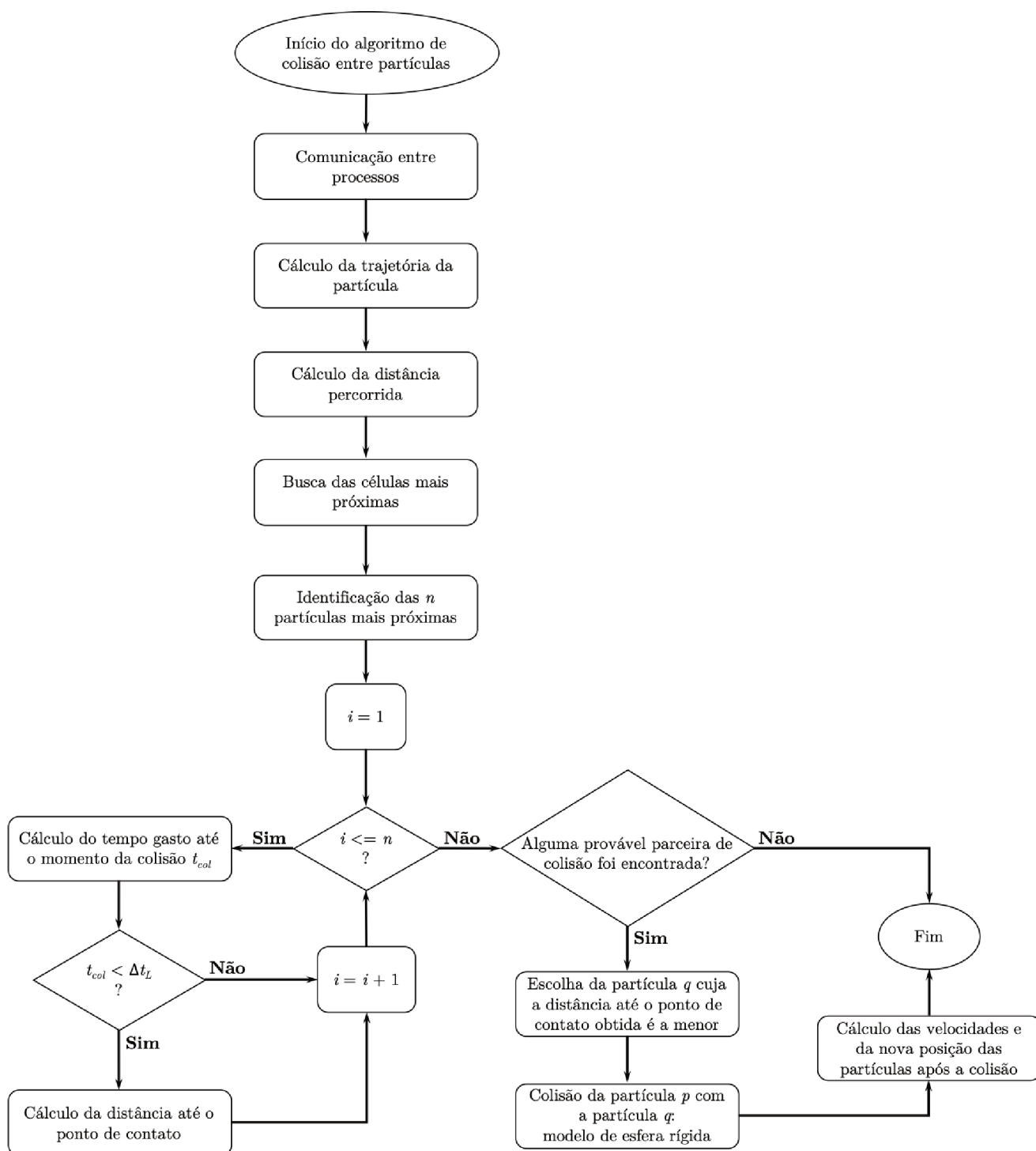


Figura 4.11: Algoritmo de detecção de colisão entre partículas.



Fonte: Autoria própria.

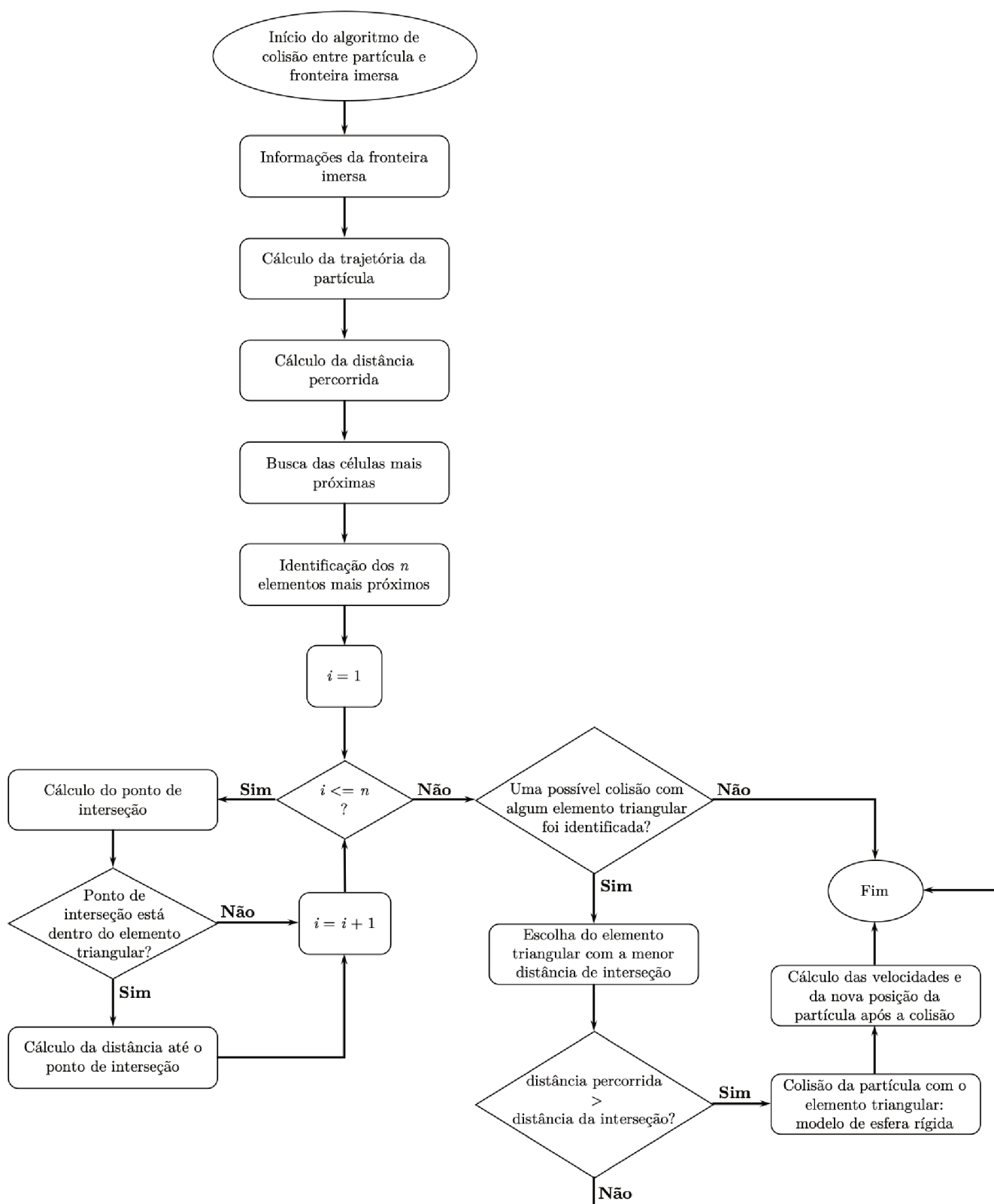
4.2.2.9 Acoplamento entre partícula e fronteira imersa

O acoplamento entre os módulos DPM e IB está associado às interações entre partículas e paredes envolvidas em escoamentos com particulados sólidos. A existência de um corpo imerso no escoamento faz com que as partículas, dependendo de suas trajetórias, colidam com os elementos triangulares (pontos lagrangianos) que formam esse corpo. Desse modo, para detectar se houve uma colisão, o algoritmo apresentado na Fig. 4.12 foi utilizado seguindo as etapas apresentadas abaixo:

Algoritmo 2 Colisão entre partícula e fronteira imersa

- 1: Primeiramente, as informações da geometria imersa são armazenadas em uma tabela *hash*, assim como é feito para as partículas (ver Seção 4.2.2.6).
 - 2: Os IDs dos pontos lagrangianos são armazenados nas células do mapa lagrangiano que os contém.
 - 3: A trajetória da partícula, bem como a distância percorrida por ela dentro do passo de tempo são determinadas.
 - 4: Faz-se uma busca pelas células que estão mais próximas da partícula.
 - 5: Os pontos lagrangianos mais próximos da partícula, que estão contidos nas células encontradas, ou seja, os que têm a maior chance de colisão são identificados.
 - 6: Para cada ponto lagrangiano, o ponto de interseção entre a reta que contém a trajetória da partícula e o plano que contém o elemento triangular é determinado.
 - 7: Verifica-se a localização do ponto de interseção. Se ele estiver dentro do elemento triangular, possivelmente haverá uma colisão.
 - 8: A distância entre a posição anterior da partícula e o ponto de interseção é calculada.
 - 9: Caso mais de um ponto lagrangiano atenda a condição da sétima etapa, aquele para o qual a menor distância até o ponto de interseção tiver sido obtida é o escolhido.
 - 10: Verifica-se a distância percorrida pela partícula antes de detectar a colisão. Se ela for maior que a distância até o ponto de interseção, a condição de colisão é verdadeira.
 - 11: Caso ocorra colisão, as novas velocidades são atualizadas com base no modelo de esfera rígida (ver Seção 3.2.5), e assim a nova posição da partícula é calculada.
-

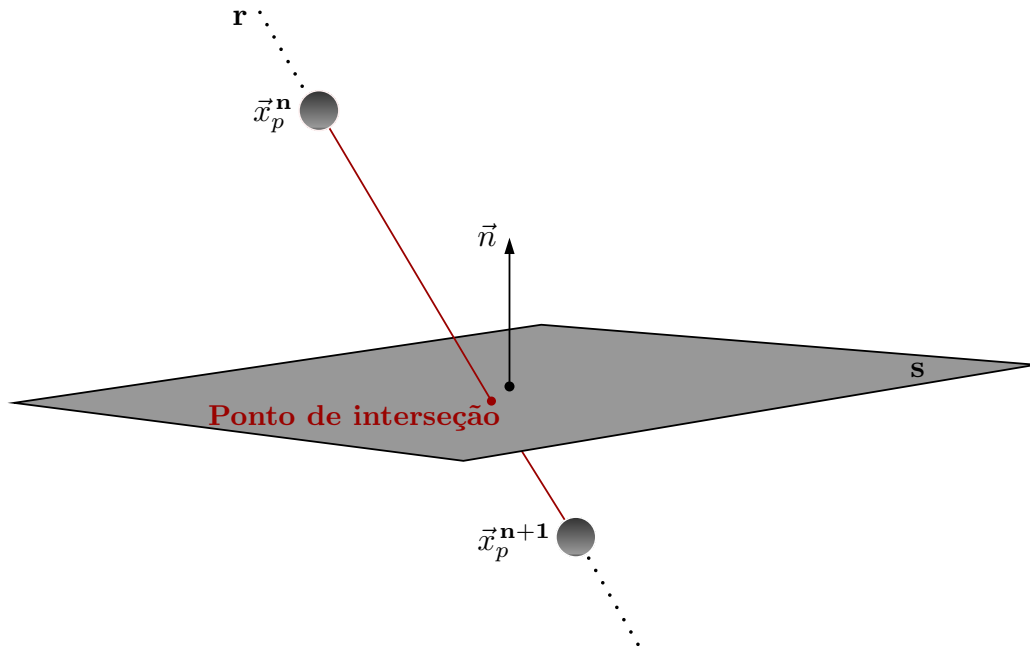
Figura 4.12: Algoritmo de detecção de colisão entre partículas e paredes.



Fonte: Autoria própria.

Percebe-se que a chave do algoritmo é a identificação do ponto de interseção. Conforme comentado, faz-se necessário encontrar a reta \mathbf{r} que contém a trajetória da partícula, e o plano \mathbf{s} que contém o elemento triangular, os quais estão ilustrados na Fig. 4.13.

Figura 4.13: Interseção da reta \mathbf{r} com plano \mathbf{s} .



Fonte: Autoria própria.

A equação paramétrica de uma reta é dada em função do vetor diretor e um ponto qualquer pertencente à ela. Sendo assim, a equação paramétrica da reta \mathbf{r} é definida como:

$$\vec{x}_p = \vec{x}_p^n + \vec{x}_t t_p, \quad (4.32)$$

onde $t_p \in \mathbb{R}$ é o parâmetro da reta, \vec{x}_p^n é a posição da partícula antes da integração temporal, e \vec{x}_t é o vetor unitário que fornece a direção da trajetória percorrida pela partícula e é calculado por:

$$\vec{x}_t = \frac{\vec{x}_p^{n+1} - \vec{x}_p^n}{\|\vec{x}_p^{n+1} - \vec{x}_p^n\|}, \quad (4.33)$$

sendo \vec{x}_p^{n+1} a posição da partícula depois da integração temporal.

A equação de um plano é dada em função do vetor normal \vec{n} e um ponto qualquer

pertencente à ele. Com isso, o plano \mathbf{s} é definido como:

$$\vec{n} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_c) = 0, \quad (4.34)$$

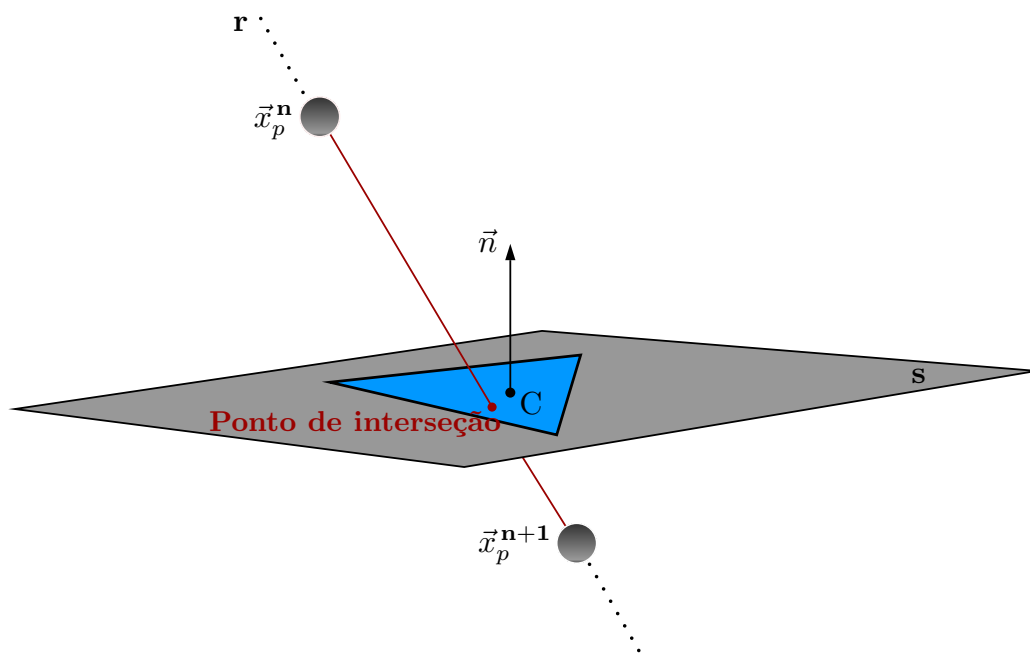
onde \vec{x}_c é a posição do centroide do elemento triangular.

Substituindo a Eq. (4.32) na Eq. (4.34), o valor de t_p no ponto de interseção é obtido por:

$$t_p = \frac{(\vec{x}_c - \vec{x}_p) \cdot \vec{n}}{\vec{x}_t \cdot \vec{n}}. \quad (4.35)$$

Conseqüentemente, o ponto de interseção é encontrado substituindo a Eq. (4.35) na Eq. (4.32). No entanto, a obtenção desse ponto não garante que a partícula colide com o elemento triangular. Assim, é necessário verificar se o mesmo está dentro da região do triângulo, conforme mostrado na Fig. 4.14. O método utilizado, para essa verificação, consiste em somar as áreas de três triângulos, formados a partir do ponto de interseção e de dois vértices do elemento triangular, e ainda avaliar se o resultado dessa soma corresponde a própria área do elemento triangular. Se o ponto de interseção estiver fora do elemento, as áreas não são equivalentes,

Figura 4.14: Interseção da reta \mathbf{r} com o elemento triangular.

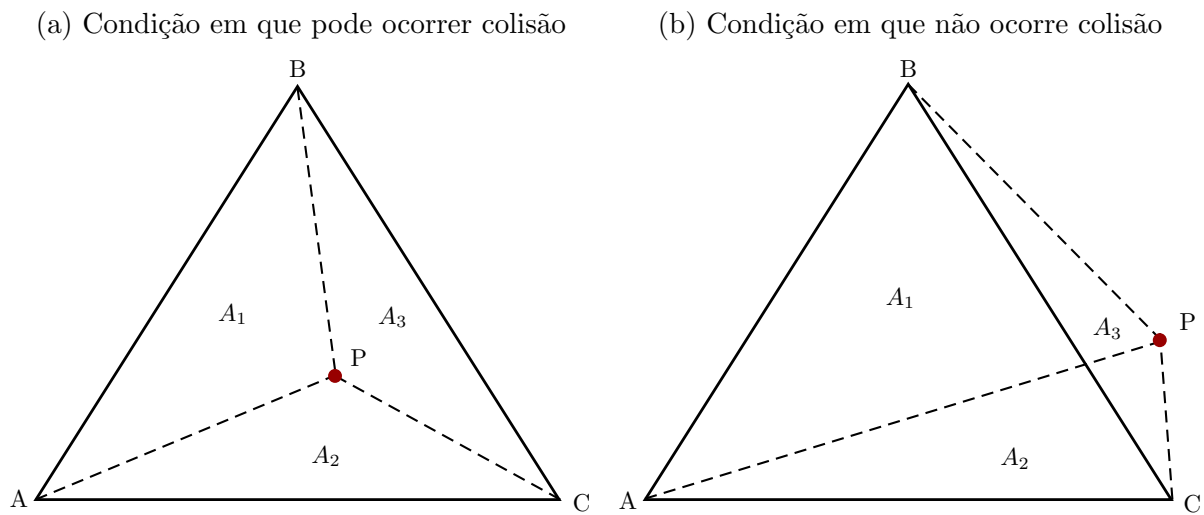


Fonte: Autoria própria.

como pode ser observado na Fig. 4.15. A área de um triângulo ABC qualquer é definida por:

$$A_{ABC} = \frac{1}{2} \left\| \overrightarrow{AB} \times \overrightarrow{AC} \right\|. \quad (4.36)$$

Figura 4.15: Formação dos três triângulos de áreas A_1 , A_2 e A_3 , em um elemento triangular ABC, tendo P como o ponto de interseção.



Fonte: Autoria própria.

Mesmo tendo identificado o ponto de interseção e a posição dele em relação ao elemento triangular, a colisão só ocorrerá se a distância percorrida pela partícula for maior que a distância até o ponto de interseção. Caso contrário, a colisão não ocorrerá naquele passo de tempo analisado, conforme exemplificado na Fig. 4.16. Por esse motivo essas duas distâncias devem ser comparadas a fim de garantir a ocorrência da colisão. A distância percorrida pela partícula é obtida pela Eq. (4.24), e a distância até o ponto de interseção é calculada por:

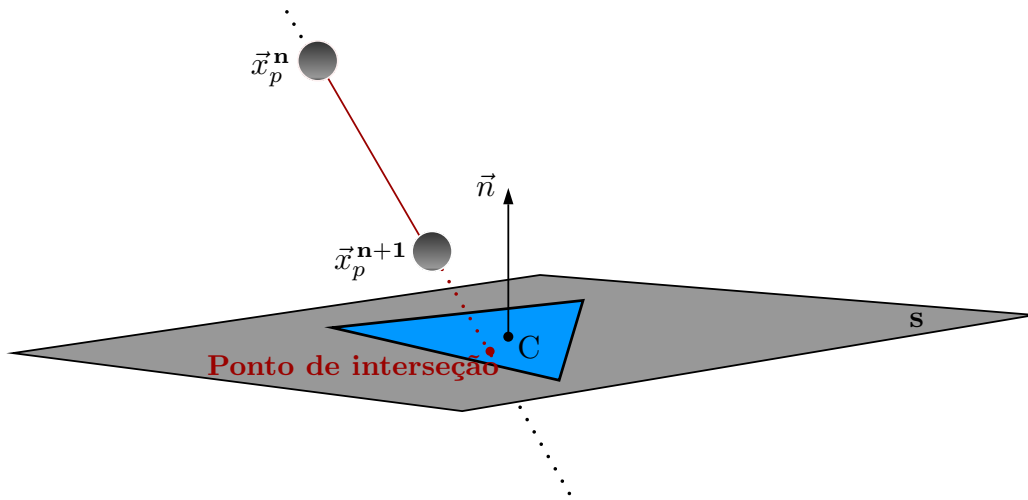
$$d_i = \left\| \vec{x}_i - \vec{x}_p \right\|, \quad (4.37)$$

sendo \vec{x}_i a posição do ponto de interseção.

4.2.2.10 Estrutura do módulo

O módulo DPM pode ser dividido em três partes principais. A primeira parte, representada pelo algoritmo da Fig. 4.17, é composta pela inicialização do código, as chamadas de funções relacionadas ao DPM, que estão integradas no domínio euleriano, bem como a

Figura 4.16: Interseção da reta \mathbf{r} com o elemento triangular, em uma situação que não há colisão com o elemento triangular.



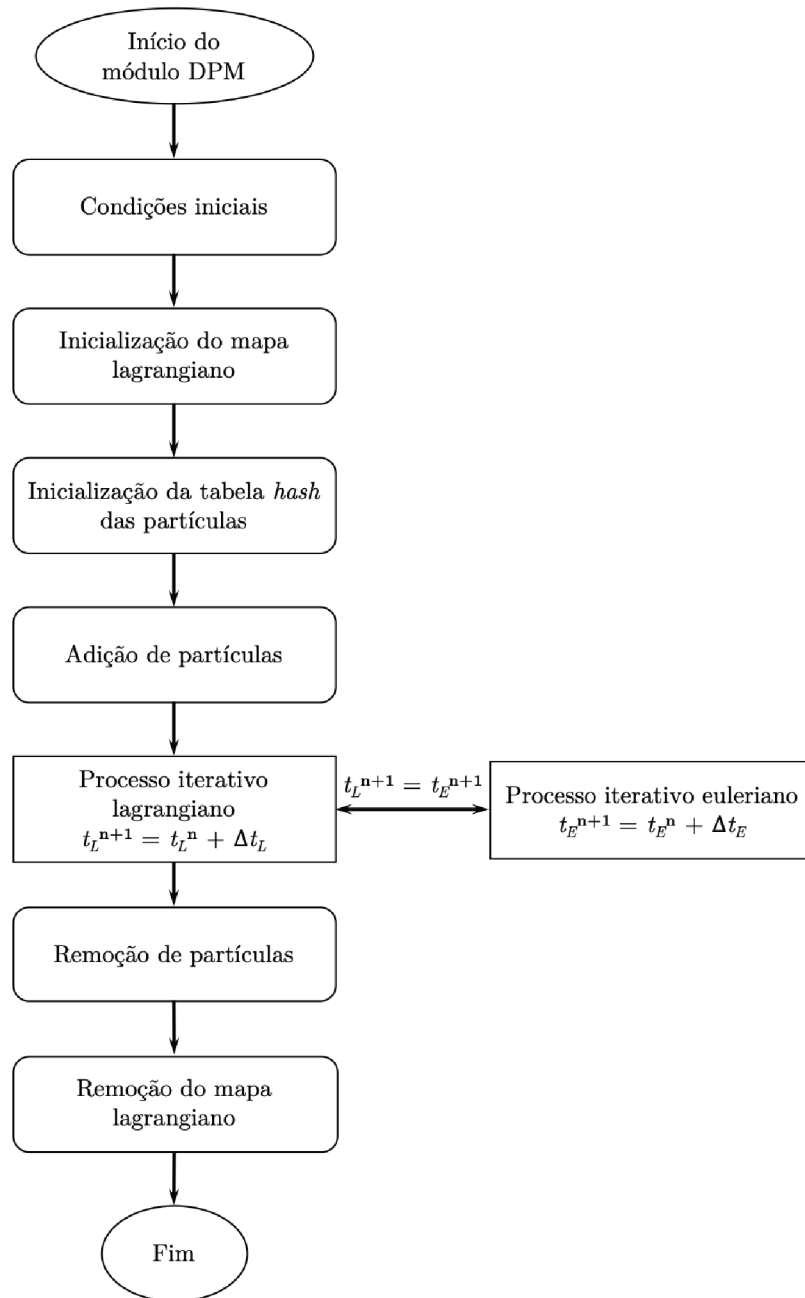
Fonte: Autoria própria.

deleção das estruturas de dados das partículas e do mapa lagrangiano, que acontece ao final das simulações.

A segunda parte corresponde ao processo iterativo lagrangiano, o qual é incorporado ao processo iterativo euleriano. O algoritmo do processo iterativo lagrangiano está apresentado na Fig. 4.18. Com base no cálculo do passo de tempo lagrangiano, determina-se a necessidade de realizar subiterações no transporte das partículas. Novas partículas são inseridas no domínio computacional dependendo do número de partículas por iteração ou da vazão mássica de partículas definidos como parâmetros de entrada do código. O pós-processamento é feito a partir dos arquivos de saída, que contém os resultados, gerados durante as simulações, sendo a frequência de escrita desses arquivos definida também como parâmetro de entrada.

Finalmente, a terceira parte envolve todas as funções utilizadas no rastreamento das partículas, como mostrada na Fig. 4.19. Para cada uma das partículas é realizada a integração temporal das suas equações de transporte. Se houver o acoplamento de 4 vias, o algoritmo de colisão entre partículas é acionado. Se uma geometria imersa estiver presente na simulação, o algoritmo de colisão entre partícula e fronteira imersa é acionado. Se a partícula ultrapassar os limites do domínio computacional, a verificação das condições de contorno é feita. Dependendo do tipo de condição de contorno escolhido para cada face do domínio, uma ação diferente é atribuída à partícula. Depois de determinar as novas velocidades e posição da partícula, verifica-se o processo em que ela se encontra. Caso a partícula tenha

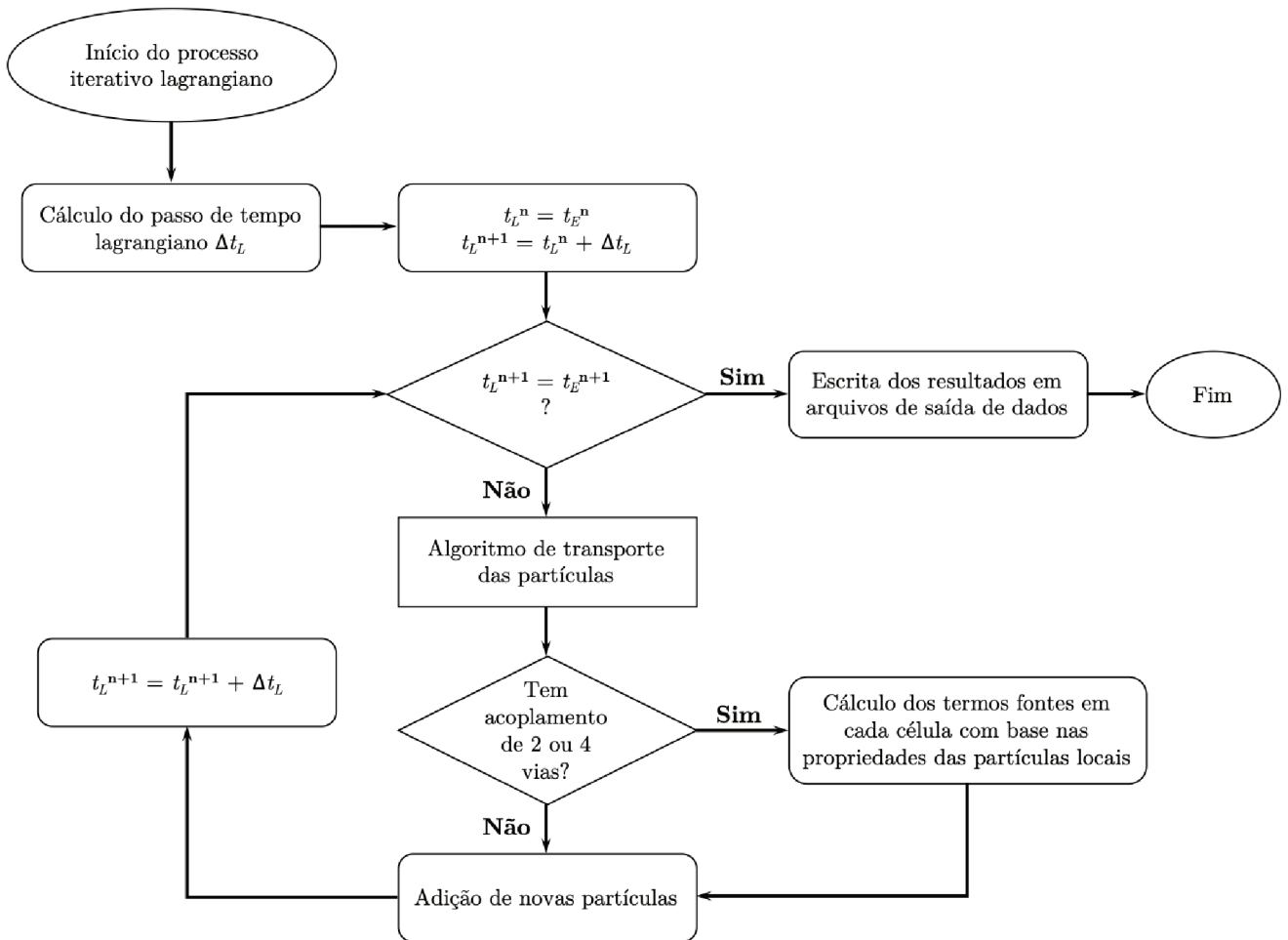
Figura 4.17: Algoritmo de inicialização do módulo DPM mostrando a sua integração com o domínio euleriano.



Fonte: Autoria própria.

mudado de processo, suas informações precisam ser comunicadas para o novo processo. Por outro lado, se isso não tiver ocorrido, verifica-se a célula em que a partícula está. Caso ela esteja em uma nova célula, seu ID é deletado da lista de partículas da antiga e adicionada na lista de partículas da nova.

Figura 4.18: Algoritmo do processo iterativo lagrangiano.

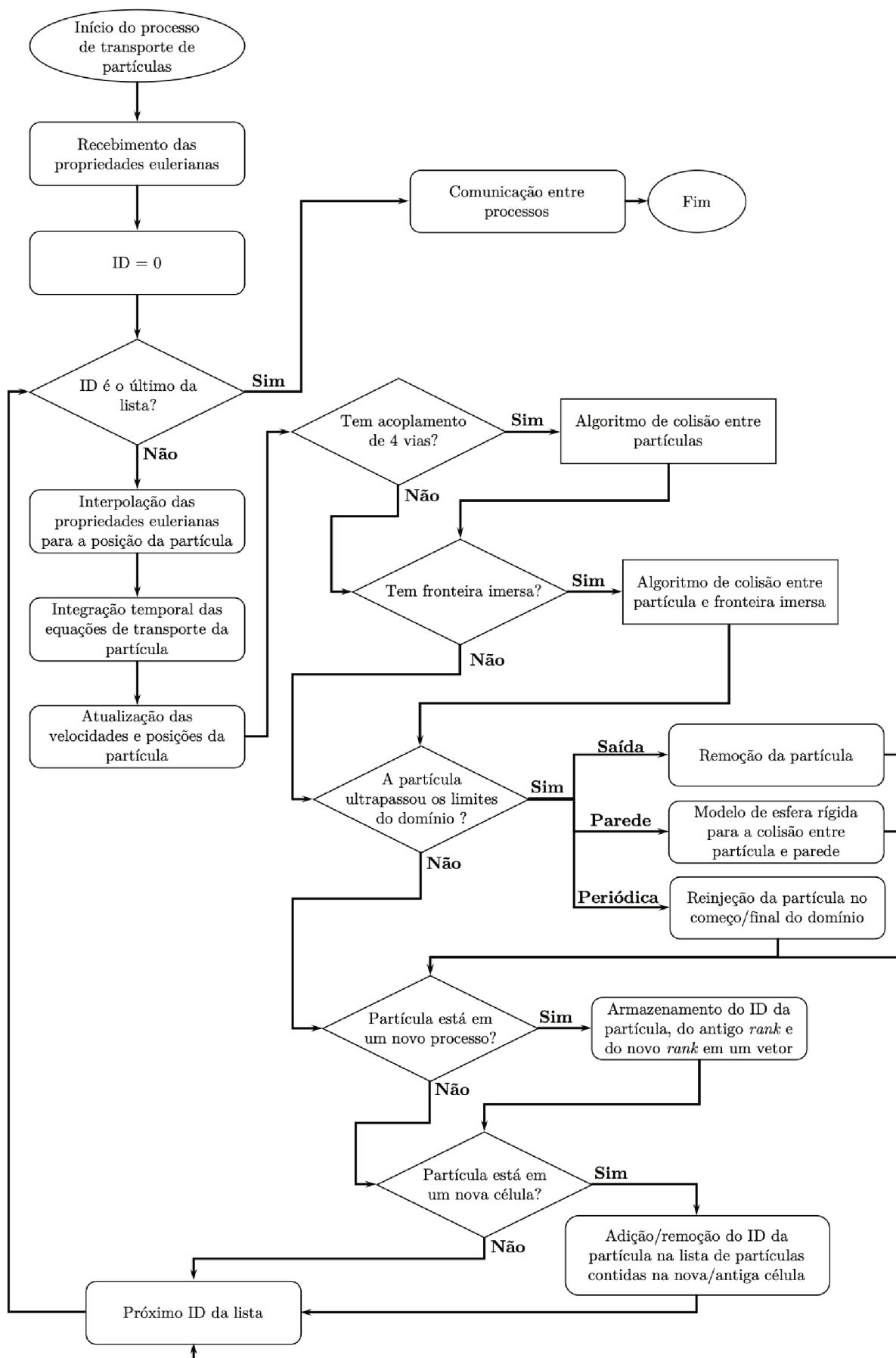


Fonte: Autoria própria.

4.3 Fechamento do capítulo

No presente capítulo, toda a estrutura numérico-computacional utilizada para a solução dos modelos elencados no capítulo anterior foi apresentada. A base dessa estrutura consiste no código MFSim, que foi dividido em domínio euleriano e domínio lagrangiano. No domínio euleriano, as equações relacionadas à fase contínua do escoamento estão discretizadas. O módulo da fronteira imersa e o módulo DPM estão contidos no domínio lagrangiano. O método da multi-forçagem direta foi empregado para representar uma fronteira imersa no escoamento, e o método DPM foi considerado para representar as partículas da fase dispersa. Os algoritmos de detecção desenvolvidos, tanto para as colisões entre partículas, quanto para as colisões entre partículas e fronteira imersa, foram detalhados na Seção 4.2.2.

Figura 4.19: Algoritmo do processo de transporte de partículas.



CAPÍTULO V

RESULTADOS E DISCUSSÕES

No presente capítulo, os resultados e as discussões das simulações numéricas utilizando o código MFSim são apresentados. Na Seção 5.1, a implementação do termo de acoplamento para avaliar a influência das partículas sobre o fluido é validada comparando os resultados obtidos numericamente com soluções analíticas. Na Seção 5.2, tanto a implementação do modelo de colisão partícula-partícula como o algoritmo de detecção da colisão são validados comparando os resultados encontrados nas simulações numéricas com resultados provenientes da teoria cinética de gases. Na Seção 5.3, o algoritmo de detecção da colisão entre partícula e fronteira imersa é validado analisando os resultados das simulações numéricas com o comportamento físico esperado. Finalmente, na Seção 5.4, a modelagem empregada no código para tratar a dispersão de partículas devido à turbulência é validada para um caso de turbulência de grelha com base em dados experimentais presentes na literatura.

5.1 Validação da interação fluido-partículas

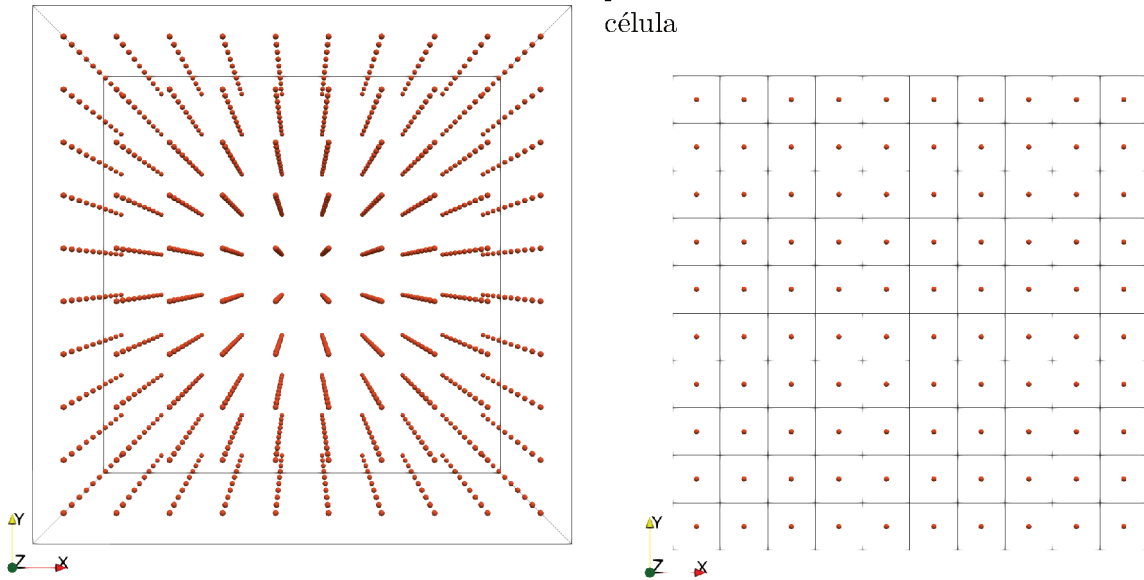
Para validar a influência das partículas no transporte do fluido contemplada no acoplamento de 2 vias, 1000 partículas foram inseridas com uma velocidade inicial de $u_p(0) = 1$ m/s, em um fluido estacionário. O domínio computacional corresponde a um cubo de lado $L = 1$ m com uma malha base constituída por 10 células computacionais em cada uma das direções. Posto isso, cada uma das partículas foi posicionada no centro de uma cé-

lula, conforme representado na Fig. 5.1. Para esse caso em questão, o cálculo do termo de acoplamento em cada uma das células é simplificado a partir da Eq. (3.43):

$$f_{u,p} = -\frac{m_p}{(\Delta x)^3} \frac{du_p}{dt}. \quad (5.1)$$

Figura 5.1: Posicionamento das partículas no domínio computacional.

- (a) 1000 partículas posicionadas no domínio (b) Seção do domínio mostrando a malha e as partículas inicialmente centralizadas em cada célula



As equações de transporte que precisam ser resolvidas para o fluido e para as partículas, considerando um problema sem gravidade, são:

$$\frac{du_p}{dt} = \frac{C_d Re_p}{24\tau_p} (u - u_p), \quad (5.2)$$

e

$$\frac{du}{dt} = \frac{1}{\rho} f_{u,p} = -\frac{1}{\rho} \frac{m_p}{(\Delta x)^3} \frac{C_d Re_p}{24\tau_p} (u - u_p). \quad (5.3)$$

Resolvendo o sistema formado pelas Eqs. (5.2) e (5.3), obtém-se (GARCIA, 2009):

$$u(t) = u_p(0) \frac{m_p}{m_p + \rho (\Delta x)^3} \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{C_d Re_p}{24\tau_p} \left(\frac{m_p + \rho (\Delta x)^3}{\rho (\Delta x)^3} \right) t \right] \right\}, \quad (5.4)$$

$$u_p(t) = u_p(0) \frac{1}{m_p + \rho (\Delta x)^3} \left\{ m_p + \rho (\Delta x)^3 \exp \left[-\frac{C_d Re_p}{24\tau_p} \left(\frac{m_p + \rho (\Delta x)^3}{\rho (\Delta x)^3} \right) t \right] \right\}. \quad (5.5)$$

Sendo assim, o objetivo final desta análise é verificar a conservação da quantidade de movimento linear total do sistema fluido-partículas:

$$N_p m_p u_p(t) + \rho V u(t) = \text{constante} = N_p m_p u_p(0), \quad (5.6)$$

onde N_p é o número total de partículas e $V = L^3$ é o volume total de fluido, que nesse caso corresponde ao volume do próprio domínio.

Os parâmetros de entrada utilizados na validação para cada uma das fases estão apresentados na Tab. 5.1. Em um primeiro momento, os resultados foram obtidos considerando uma simulação numérica com processamento serial, os quais estão apresentados na Fig. 5.2. Comparando esses resultados com as soluções analíticas representadas pelas Eqs. (5.4) e (5.5), observou-se que a conservação da quantidade de movimento linear total foi garantida. Com isso, tem-se a verificação da Eq. (5.6) para cada tempo e, assim, do acoplamento de 2 vias. Ainda, a partir dos resultados, foi possível confirmar, como era esperado, a desaceleração das partículas causado pelo fluido e, conseqüentemente, a aceleração do fluido devido ao movimento das partículas, resultado da transferência de quantidade de movimento linear entre as fases contínua e dispersa.

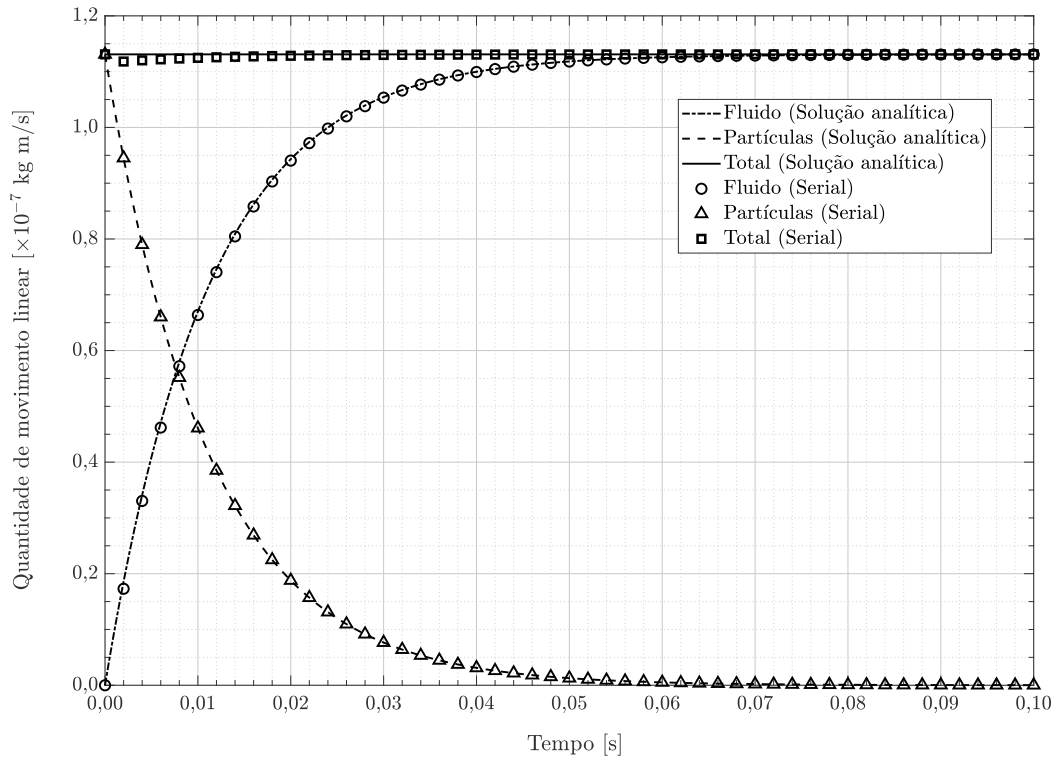
5.1.1 Testes com processamento paralelo

A fim de garantir que a validação da interação entre fluido e partículas se estende para simulações com processamento paralelo, o mesmo caso apresentado anteriormente foi

Tabela 5.1: Parâmetros de entrada do caso de validação da interação entre fluido e partículas.

Fluido	Partículas
Massa específica, $\rho = 1,1984 \text{ kg/m}^3$	Massa específica, $\rho_p = 1000 \text{ kg/m}^3$
Viscosidade dinâmica, $\mu = 1,795 \times 10^{-5} \text{ kg/(m}\cdot\text{s)}$	Diâmetro, $D_p = 60 \text{ }\mu\text{m}$
Velocidade inicial, $u(0) = 0 \text{ m/s}$	Velocidade inicial, $u_p(0) = 1 \text{ m/s}$

Figura 5.2: Comparação dos resultados obtidos para a quantidade de movimento linear em função do tempo na simulação numérica com os resultados da solução analítica.



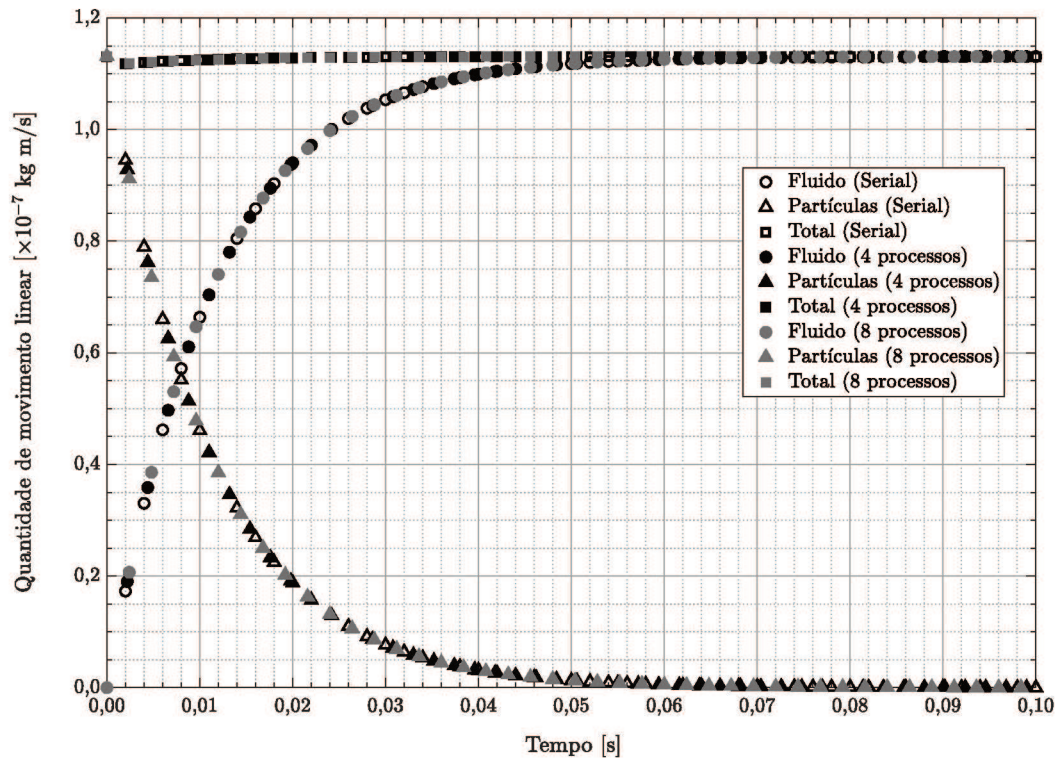
simulado particionando o domínio computacional tanto em 4 como 8 processos. Os resultados obtidos nestas simulações podem ser observados na Fig. 5.3. Percebe-se que independente da quantidade de processos utilizados, as simulações apresentaram os mesmos resultados, verificando assim a paralelização das implementações.

5.1.2 Testes com vários níveis de refinamento

Como no código MFSim utiliza-se uma malha bloco-estruturada que pode ser formada por mais de um nível de refinamento, faz-se necessário validar a interação entre fluido e partículas considerando um domínio computacional com uma malha de múltiplos níveis. Para isso, dois testes foram realizados através de simulações com malhas diferentes do caso abordado na presente seção.

No primeiro teste utilizou-se uma malha com 2 níveis de refinamento e no segundo utilizou-se uma malha com 3 níveis, sendo a razão de refinamento igual a dois nas direções x , y e z para ambas as malhas. Nos dois testes, a malha construída inicialmente foi mantida fixa ao longo de toda a simulação sem que houvesse refinamento dinâmico. O primeiro nível

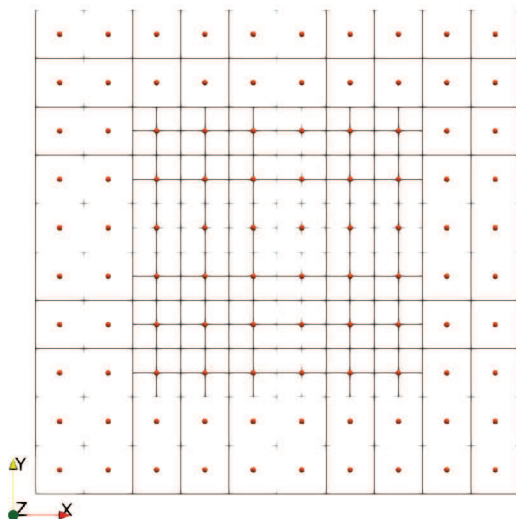
Figura 5.3: Comparação dos resultados obtidos para a quantidade de movimento linear em função do tempo nas simulações numéricas utilizando processamento paralelo com os resultados do processamento serial.



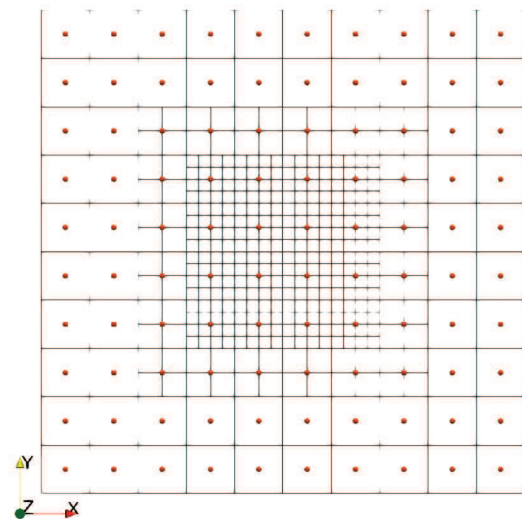
foi baseado na malha mostrada na Fig. 5.1a. O segundo nível foi definido entre 0, 2 m e 0, 8 m para todas as direções coordenadas. Já o terceiro nível, presente apenas no segundo teste,

Figura 5.4: Seção do domínio mostrando a malha com vários níveis de refinamento e as partículas inicialmente centralizadas em cada célula do nível mais grosso.

(a) Malha com 2 níveis de refinamento



(b) Malha com 3 níveis de refinamento



foi construído a partir de 0,3 m até 0,7 m também para todas as direções. Cada uma das 1000 partículas foi posicionada no centro de uma célula correspondente ao nível mais grosso, como pode ser visto na Fig. 5.4.

Para comparar os resultados das simulações com os resultados da solução analítica, a quantidade de movimento linear tanto para o fluido como para as partículas foi extraída separadamente para cada um dos níveis da malha. Somando os resultados obtidos em cada um dos níveis, os resultados finais das simulações foram calculados. Nas Figs. 5.5 e 5.6, é possível observar que utilizando tanto uma malha composta por 2 níveis como 3 níveis de refinamento, as simulações forneceram resultados que se aproximaram da solução analítica, da forma que era esperada.

Figura 5.5: Comparação dos resultados obtidos para a quantidade de movimento linear em função do tempo na simulação numérica utilizando uma malha composta por 2 níveis de refinamento com resultados da solução analítica.

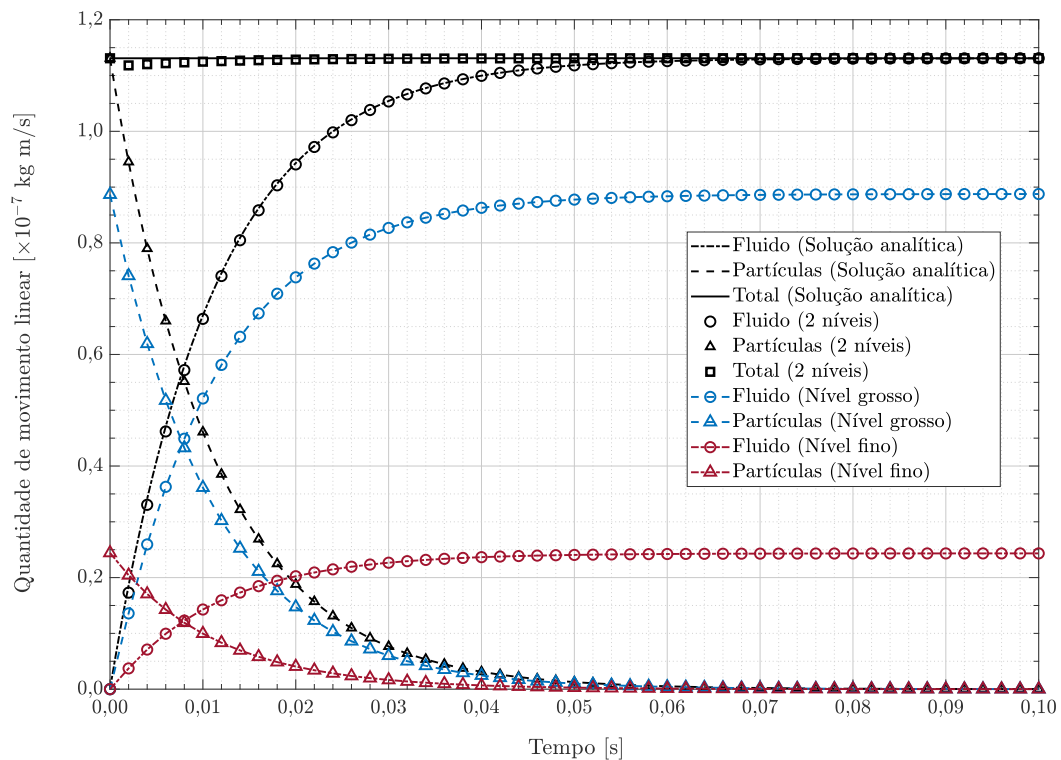
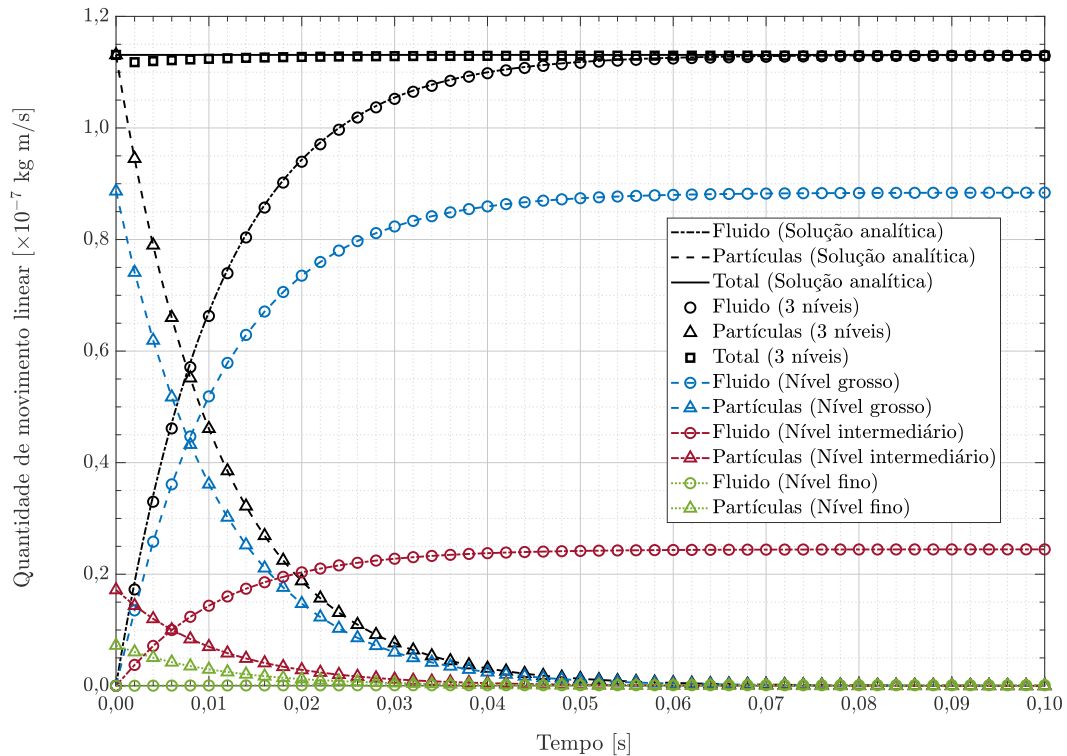


Figura 5.6: Comparação dos resultados obtidos para a quantidade de movimento linear em função do tempo na simulação numérica utilizando uma malha composta por 3 níveis de refinamento com resultados da solução analítica.



5.2 Validação da colisão partícula-partícula

Antes de considerar as colisões entre partículas na simulação de escoamentos gás-sólido no código MFSim, faz-se necessário validar o algoritmo de colisão em duas partes. Uma vez que o algoritmo de detecção e o modelo de colisão são independentes, ambos devem ser validados separadamente.

No presente trabalho, o algoritmo de colisão de modo geral foi validado através de simulações de um escoamento granular seco formado por uma mistura de partículas mono e bidispersas seguindo a metodologia apresentada por Wunsch, Fede e Simonin (2010). A validação é então efetivada comparando os resultados estatísticos obtidos nas simulações com as previsões provenientes da teoria cinética de gases. Como a influência perturbadora de uma fase fluida não está presente em escoamentos granulares secos, todas as mudanças na trajetória das partículas são tão somente causadas pelas colisões entre elas. Assim, a partir desse tipo de escoamento, tem-se as condições ideais para a validação do algoritmo de

colisão. Nesta seção, os critérios utilizados para validar o algoritmo de detecção e o modelo de colisão são apresentados, respectivamente.

5.2.1 Algoritmo de detecção de colisão

Para quantificar a eficiência do algoritmo de colisão, as distribuições do ângulo de colisão θ e da magnitude da velocidade relativa das partículas no momento da colisão $\|\vec{u}_r^c\|$ foram avaliadas. A partir da teoria cinética de gases, as funções densidade de probabilidade (FDP) dessas distribuições para uma mistura de partículas monodispersas são obtidas por (SAKIZ, 1999):

$$f(\theta) = \begin{cases} -\sin(2\theta) & \text{se } \theta \in \left[\frac{\pi}{2}; \pi\right], \\ 0 & \text{se } \theta \notin \left[\frac{\pi}{2}; \pi\right], \end{cases} \quad (5.7)$$

e

$$f\left(\|\vec{u}_{r_{p-p}}^c\|\right) = \frac{1}{8T_p^2} \|\vec{u}_{r_{p-p}}^c\|^3 \exp\left(-\frac{\|\vec{u}_{r_{p-p}}^c\|^2}{4T_p}\right), \quad (5.8)$$

onde $T_p = \frac{1}{3} (\langle u'_p u'_p \rangle + \langle v'_p v'_p \rangle + \langle w'_p w'_p \rangle)$ é a agitação da partícula, e u'_p , v'_p e w'_p são as flutuações das componentes de velocidade da partícula.

Os parâmetros de entrada utilizados na simulação numérica para avaliação do algoritmo de detecção estão apresentados na Tab. 5.2. As partículas foram inicialmente posicionadas de maneira aleatória no domínio computacional. Para a construção do domínio, um cubo de lado $L = 0,128$ m foi determinado por meio da concentração de partículas $n_p = \rho_p \alpha_p / m_p = N_p / L^3$, e uma malha uniforme foi definida com 10 células em cada direção coordenada. Utilizou-se o processamento paralelo particionando o domínio computacional em 8 processos ($2 \times 2 \times 2$). As componentes da velocidade linear inicial das partículas seguiram uma distribuição normal com média igual a 0 e desvio padrão igual a 0,236 m/s e as componentes da velocidade angular inicial foram nulas. Quanto às condições de contorno, aplicou-se a condição periódica em todas as faces do domínio. Além disso, considerou-se que as partículas fossem completamente elásticas.

Tabela 5.2: Parâmetros da simulação de validação do algoritmo de detecção de colisão entre partículas.

Parâmetros
Número total, $N_p = 100\,000$
Fração volumétrica, $\alpha_p = 0,001$
Diâmetro, $D_p = 342,1\ \mu\text{m}$
Massa específica, $\rho_p = 1000\ \text{kg/m}^3$
Coefficiente de restituição, $e = 1$
Coefficiente de fricção, $\mu_d = 0$
Passo de tempo, $\Delta t_L = 5 \times 10^{-5}\ \text{s}$

Durante a simulação utilizando o código MFSim, os valores do ângulo de colisão e da velocidade relativa das partículas no momento da colisão foram salvos para cada par de partículas que colidiram. A partir do momento em que o sistema atingiu o estado de equilíbrio até o final da simulação, todos os pares de colisão foram amostrados e os gráficos das funções densidade de probabilidade para cada uma das variáveis salvas foram obtidos.

Nas Figs. 5.7 e 5.8, as comparações dos resultados extraídos da simulação numérica com os resultados das Eqs. (5.7) e (5.8), que estão relacionados à teoria cinética de gases, podem ser observados. Percebe-se que as funções densidade de probabilidade tanto para o ângulo como para a velocidade relativa apresentaram estatisticamente o comportamento esperado pela teoria.

No entanto, representar corretamente as distribuições do ângulo de colisão e da velocidade relativa não é suficiente para a validação do algoritmo de detecção. Sendo assim, um outro parâmetro estatístico importante neste caso que também deve ser analisado é a frequência de colisão. Considerando uma mistura de partículas monodispersas, a teoria cinética de gases fornece a seguinte relação para a frequência de colisão por unidade de volume:

$$f_{col_{p-p}} = g_0 \left(2 n_p^2 D_p^2 \sqrt{\pi T_p} \right), \quad (5.9)$$

sendo g_0 a função de distribuição radial introduzida na equação para levar em consideração

o aumento da frequência de colisão devido ao empacotamento de partículas. No caso de escoamentos granulares diluídos, g_0 se aproxima de 1, mas no caso de escoamentos densos, essa função depende da fração volumétrica da partícula. No presente trabalho, o modelo proposto por Lun e Savage (1986) para a função de distribuição radial foi adotado:

$$g_0(\alpha_p) = \left(1 - \frac{\alpha_p}{\alpha_{p_{máx}}}\right)^{-2,5 \alpha_{p_{máx}}}, \quad (5.10)$$

onde a fração volumétrica máxima da partícula é $\alpha_{p_{máx}} = 0,64$.

A fim de comparar com as previsões da frequência de colisão por unidade de volume teórica, o número de colisões foi salvo para cada passo de tempo. Dividindo o número de colisões pelo passo de tempo foi possível obter a frequência de colisão em função do tempo. Então, calculou-se a média das frequências de colisão obtidas, e o valor final encontrado foi dividido pelo volume do domínio computacional. Para a simulação numérica obteve-se $2,223591 \times 10^8 \text{ s}^{-1}\text{m}^{-3}$, enquanto que resolvendo a Eq. (5.9) calculou-se

Figura 5.7: Comparação da FDP do ângulo de colisão obtida através da simulação utilizando o código MFSim com a obtida através da relação fornecida pela teoria para uma mistura de partículas monodispersas.

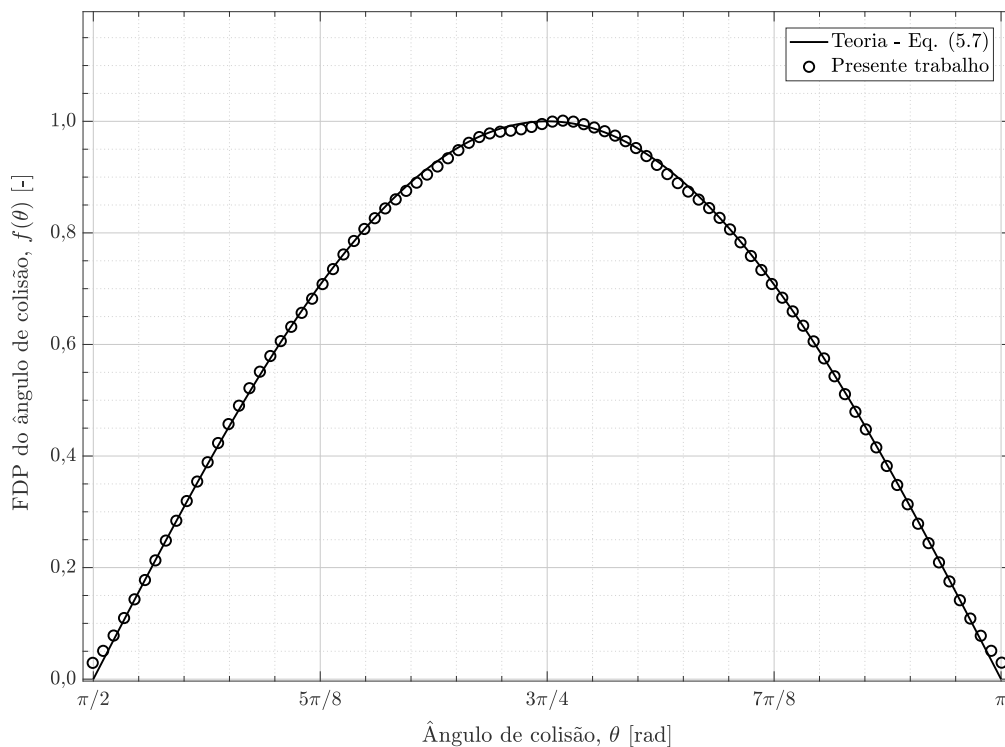
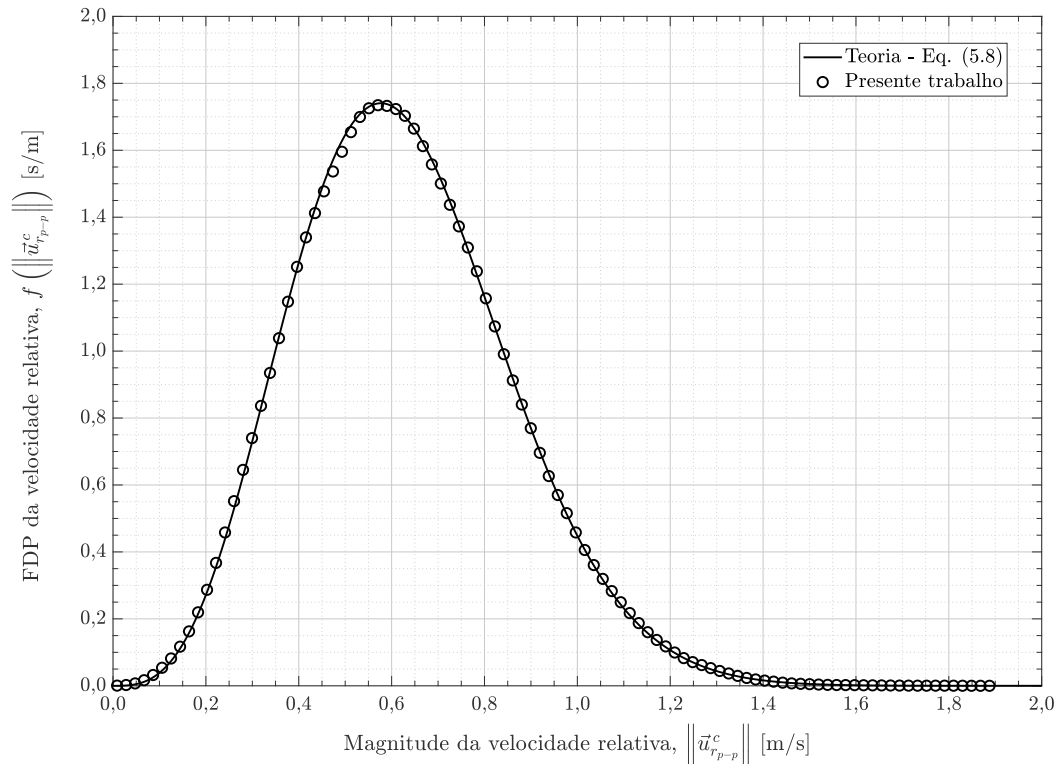


Figura 5.8: Comparação da FDP da velocidade relativa no momento da colisão obtida através da simulação utilizando o código MFSim com a obtida através da relação fornecida pela teoria para uma mistura de partículas monodispersas.



$2,228938 \times 10^8 \text{ s}^{-1}\text{m}^{-3}$. Portanto, o erro estimado para o resultado da simulação feita no código MFSim em relação ao resultado da teoria foi de 0,24%, confirmando a validação do algoritmo de detecção.

5.2.2 Modelo de colisão

Para validar o modelo de colisão, considerou-se a mesma configuração utilizada na simulação numérica para validação do algoritmo de detecção. Entretanto, além da classe partículas p , acrescentou-se uma classe de partículas q , cujas propriedades estão apresentadas na Tab. 5.3. As componentes da velocidade linear inicial de ambas as classes de partículas seguiram uma distribuição normal com média igual a 0 e desvio padrão igual a 0,236 m/s.

Primeiramente, a validação do algoritmo de detecção para uma mistura bidispersa deve ser feita. Considerando uma mistura de partículas bidispersas, a função densidade de probabilidade da velocidade relativa no momento da colisão entre partículas da classe p e q

Tabela 5.3: Parâmetros da simulação de validação do modelo de colisão entre partículas.

Classe de partículas p	Classe de partículas q
Número total, $N_p = 100\,000$	Número total, $N_q = 12\,500$
Fração volumétrica, $\alpha_p = 0,001$	Fração volumétrica, $\alpha_q = 0,001$
Diâmetro, $D_p = 342,1\ \mu\text{m}$	Diâmetro, $D_q = 684,2\ \mu\text{m}$
Massa específica, $\rho_p = 1000\ \text{kg/m}^3$	Massa específica, $\rho_q = 1000\ \text{kg/m}^3$
Coeficiente de restituição, $e = 1$	
Coeficiente de fricção, $\mu_d = 0$	
Passo de tempo, $\Delta t_L = 5 \times 10^{-5}\ \text{s}$	

é dada por:

$$f\left(\|\vec{u}_{r_{p-q}}^c\|\right) = \frac{1}{8\left(\frac{T_p + T_q}{2}\right)^2} \|\vec{u}_{r_{p-q}}^c\|^3 \exp\left(-\frac{\|\vec{u}_{r_{p-q}}^c\|^2}{2(T_p + T_q)}\right). \quad (5.11)$$

Já a frequência de colisão por unidade de volume pode ser determinada por:

$$f_{col_{p-q}} = g_0 \left[2 n_p n_q \left(\frac{D_p + D_q}{2}\right)^2 \sqrt{\pi \left(\frac{T_p + T_q}{2}\right)} \right]. \quad (5.12)$$

No caso em questão, três frequências de colisão diferentes podem ser determinadas em consequência dos possíveis pares de colisão a serem formados: $f_{col_{p-p}}$, $f_{col_{p-q}}$ e $f_{col_{q-q}}$. Para a função de distribuição radial, utilizou-se um modelo também proposto por Lun e Savage (1986), porém aplicado em mistura de partículas bidispersas:

$$g_0(\alpha_m) = \left(1 - \frac{\alpha_m}{\alpha_{p_{máx}}}\right)^{-\gamma_{p-q} \alpha_{p_{máx}}}, \quad (5.13)$$

onde a fração volumétrica da mistura α_m é dada pela soma das frações volumétricas das duas classes de partículas, e

$$\gamma_{p-q} = 1 + \frac{3}{2} \left(\frac{D_p D_q}{D_p + D_q}\right) \frac{\epsilon_{p-q}}{\alpha_m}, \quad (5.14)$$

com

$$\epsilon_{p-q} = 2 \left(\frac{\alpha_p}{D_p} + \frac{\alpha_q}{D_q} \right). \quad (5.15)$$

Os resultados obtidos por meio da simulação realizada no código MFSim e da teoria estão apresentados na Fig. 5.9 e na Tab. 5.4 para cada par de colisão. Observando a Fig. 5.9, os resultados encontrados para a velocidade relativa no momento da colisão utilizando o código MFSim apresentaram distribuições bem próximas dos resultados teóricos. Nota-se, na Tab. 5.4, que o maior erro relativo da frequência de colisão por unidade de volume foi encontrado para o par $q - q$ com valor igual a 3,05%. Com isso, o algoritmo de detecção foi validado também para uma mistura de partículas bidispersas. Essa validação garante ainda a validação para uma mistura de partículas polidispersas, uma vez que apenas colisões binárias são avaliadas.

Figura 5.9: Comparação da FDP das velocidades relativas no momento da colisão obtidas por meio da simulação utilizando o código MFSim com as obtidas por meio da relação fornecida pela teoria para uma mistura de partículas bidispersas.

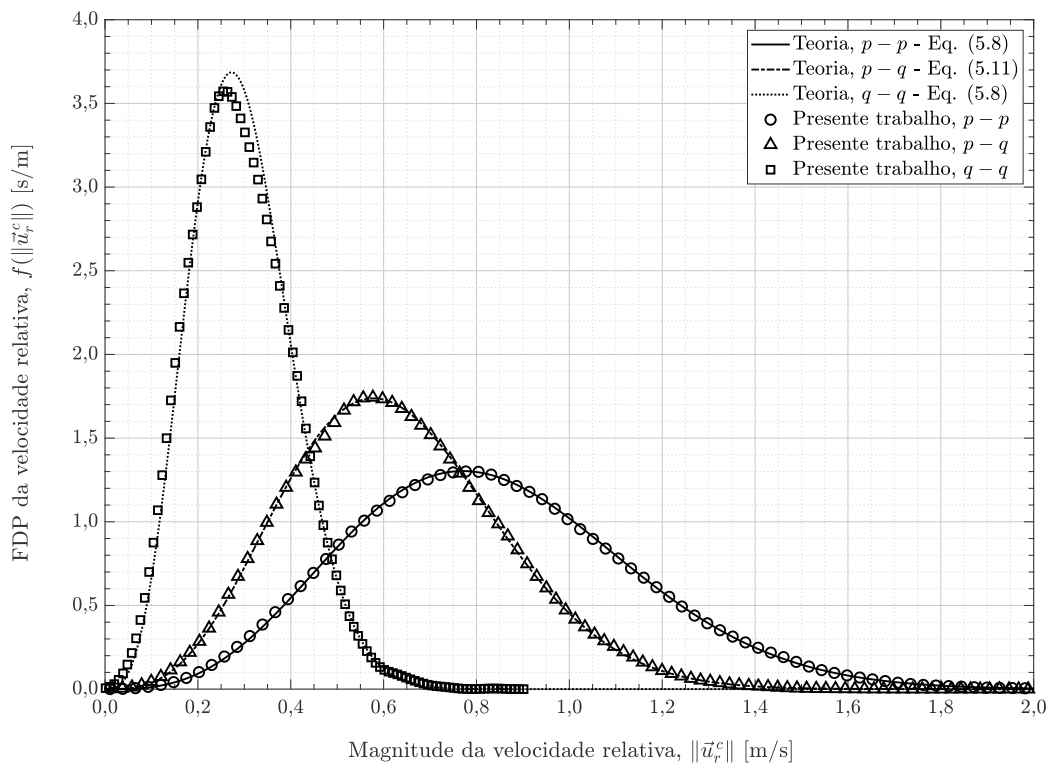


Tabela 5.4: Frequência de colisão por unidade de volume para uma mistura de partículas bidispersas.

Par de colisão	MFSim [$\text{s}^{-1}\text{m}^{-3}$]	Teoria [$\text{s}^{-1}\text{m}^{-3}$]	Erro relativo [%]
$p - p$	$2,984802 \times 10^8$	$2,976210 \times 10^8$	0,29
$p - q$	$6,296068 \times 10^7$	$6,275983 \times 10^7$	0,32
$q - q$	$6,595544 \times 10^6$	$6,394154 \times 10^6$	3,05

Em um sistema constituído de partículas bidispersas, os níveis de energia para cada classe de partículas não são os mesmos no estado de equilíbrio. Isso acontece porque as partículas mais pesadas não apresentam a mesma agitação que as partículas mais leves. Sendo assim, o estado de equilíbrio da agitação das partículas pode ser representado por:

$$m_p k_p = m_q k_q, \quad (5.16)$$

onde k_p e k_q correspondem à energia cinética específica para cada uma das classes de partículas. No caso de colisões elásticas, a energia cinética específica da mistura bidispersa k_m é dada por:

$$k_m = \frac{n_p m_p k_p + n_q m_q k_q}{n_p m_p + n_q m_q}. \quad (5.17)$$

Com base nas Eqs. (5.16) e (5.17) é possível obter as relações da energia cinética específica para cada uma das classes de partículas:

$$k_p = \frac{n_p m_p + n_q m_q}{m_p (n_p + n_q)} k_m, \quad (5.18)$$

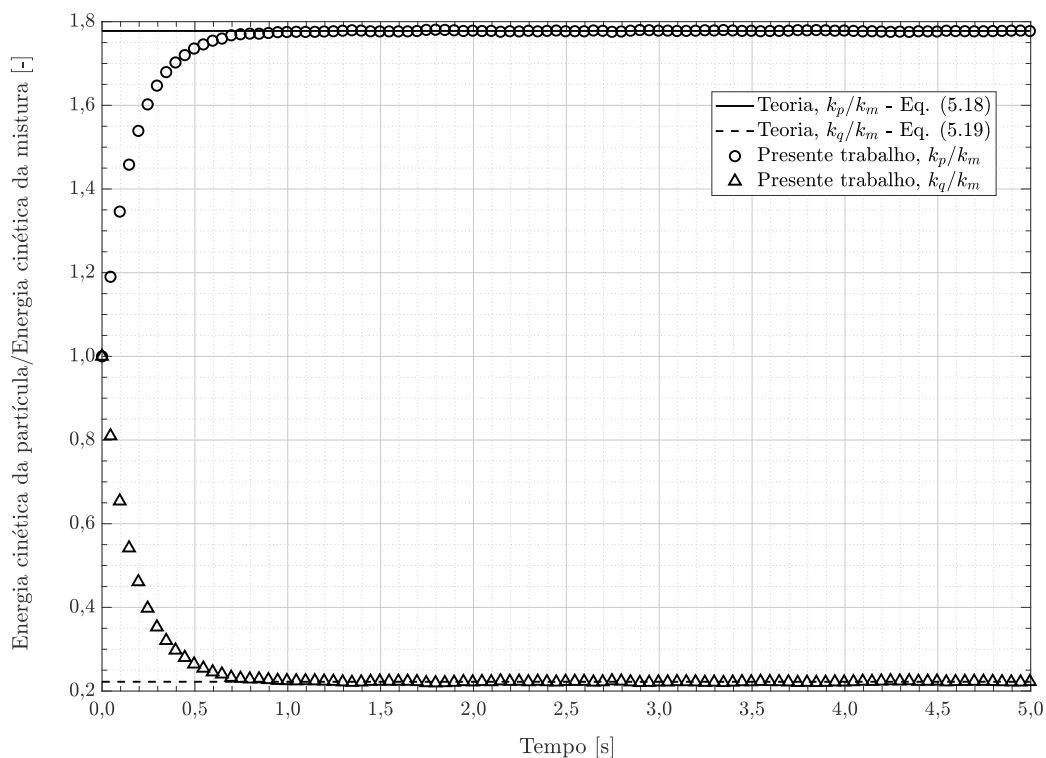
$$k_q = \frac{n_p m_p + n_q m_q}{m_q (n_p + n_q)} k_m. \quad (5.19)$$

Dividindo as Eqs. (5.18) e (5.19) pela energia cinética específica da mistura, as expressões para as razões k_p/k_m e k_q/k_m , que dependem apenas da massa e da concentração de partículas

de cada classe, são encontradas.

Com o intuito de comparar com as previsões da teoria de equilíbrio, as razões entre a energia cinética específica para cada classe de partículas e a energia cinética específica da mistura foram medidas na simulação numérica realizada. Na Fig. 5.10, percebe-se que as razões das energias cinéticas obtidas para cada passo de tempo da simulação convergem para os seus respectivos valores teóricos. Essa convergência dos resultados acontece devido à transferência de energia cinética entre as partículas que colidem. Com base nas comparações feitas na Fig. 5.10, validou-se o modelo de colisão.

Figura 5.10: Comparação das razões de energia cinética específica das partículas obtidas por meio da simulação utilizando o código MFSim com as previsões da teoria de equilíbrio.

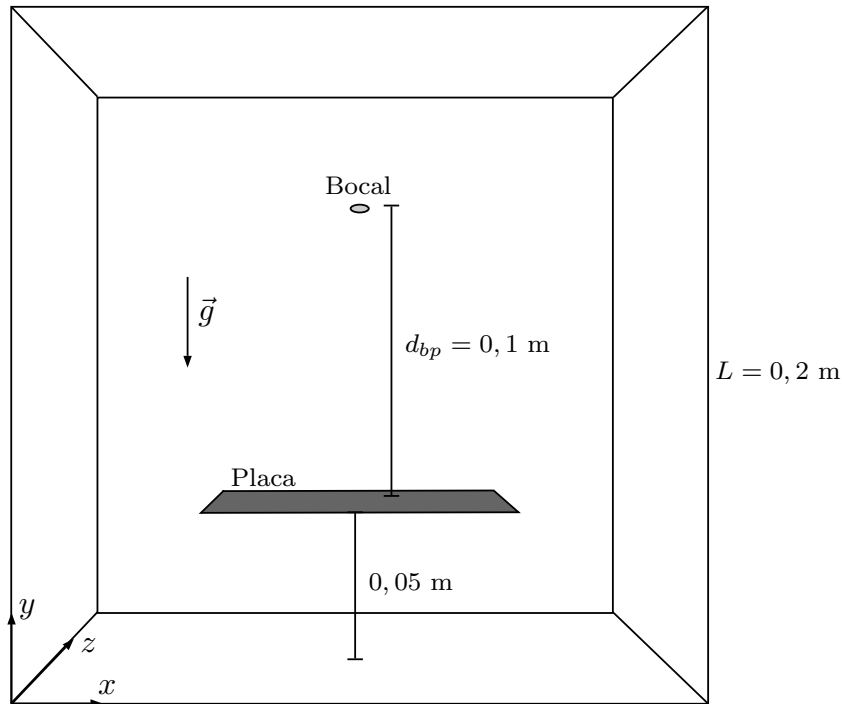


5.3 Validação da colisão entre partícula e fronteira imersa

Para validar o funcionamento do algoritmo de detecção de colisão entre partícula e fronteira imersa do código MFSim, alguns casos testes com a presença de uma geometria imersa no domínio computacional foram simulados. Optou-se pela validação analisando o comportamento esperado da física do problema através de simulações numéricas de um jato granular incidindo sobre uma placa plana. Essa configuração foi escolhida por ser simples,

de modo que os fenômenos envolvidos no problema possam ser facilmente visualizados.

Figura 5.11: Domínio computacional para os casos de validação do algoritmo de detecção de colisão entre partícula e fronteira imersa.



Fonte: Autoria própria.

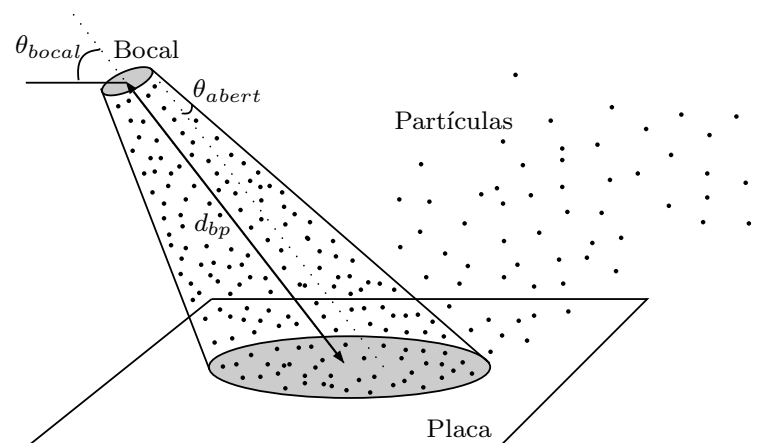
Um caso padrão foi definido com base nos parâmetros utilizados no trabalho de Ciampini, Spelt e Papini (2003). Adotou-se um bocal circular com 4,8 mm de diâmetro, por onde as partículas são injetadas sem rotação no domínio computacional, o qual está exposto na Fig. 5.11. As propriedades dessas partículas podem ser observadas na Tab. 5.5, na qual percebe-se que as colisões entre partículas também foi considerada. Inicialmente, adotou-se o ângulo formado pelos eixos perpendicular ao plano do bocal e horizontal como sendo $\theta_{bocal} = 90^\circ$, e o ângulo de abertura do jato como sendo $\theta_{abert} = 0^\circ$. Considerou-se o domínio computacional preenchido por ar em repouso, porém desprezou-se qualquer influência das partículas no ar. Utilizou-se um domínio cúbico de lado $L = 0,2$ m dividido em 2 processos na direção z , e uma malha uniforme composta por 40 células computacionais em cada uma das direções coordenadas. Para todas as faces do domínio, aplicou-se a condição de saída de partículas. Uma placa plana de $0,1$ m \times $0,1$ m constituída de 105 428 elementos triangulares foi posicionada a $0,1$ m do bocal. As simulações foram realizadas para um passo de tempo $\Delta t_L = 5 \times 10^{-5}$ s.

Tabela 5.5: Parâmetros dos casos de validação do algoritmo de detecção de colisão entre partícula e fronteira imersa.

Parâmetros das partículas
Vazão mássica, $\dot{m}_p = 0,025758 \text{ kg/s}$
Diâmetro, $D_p = 420 \text{ }\mu\text{m}$
Massa específica, $\rho_p = 1000 \text{ kg/m}^3$
Velocidade inicial, $\ \vec{u}_p(0)\ = 20 \text{ m/s}$
Colisão partícula-partícula
Coefficiente de restituição, $e_{p-p} = 0,3$
Coefficiente de fricção, $\mu_{d_{p-p}} = 0$
Colisão partícula-placa
Coefficiente de restituição, $e_{p-w} = 0,3$
Coefficiente de fricção, $\mu_{d_{p-w}} = 0,1$

Na Seção 5.3.1, uma análise da otimização realizada no algoritmo de colisão entre partícula e fronteira imersa é apresentada. Na Seção 5.3.2, uma comparação do comportamento do jato granular quanto à colisão entre partículas é feita. Nas Seções 5.3.3 e 5.3.4, comparações entre os resultados obtidos nas simulações variando o ângulo de abertura do jato e variando o ângulo do bocal são realizadas, respectivamente. Na Fig. 5.12, pode-se observar

Figura 5.12: Representação esquemática dos ângulos de abertura do jato e do bocal.



Fonte: Autoria própria

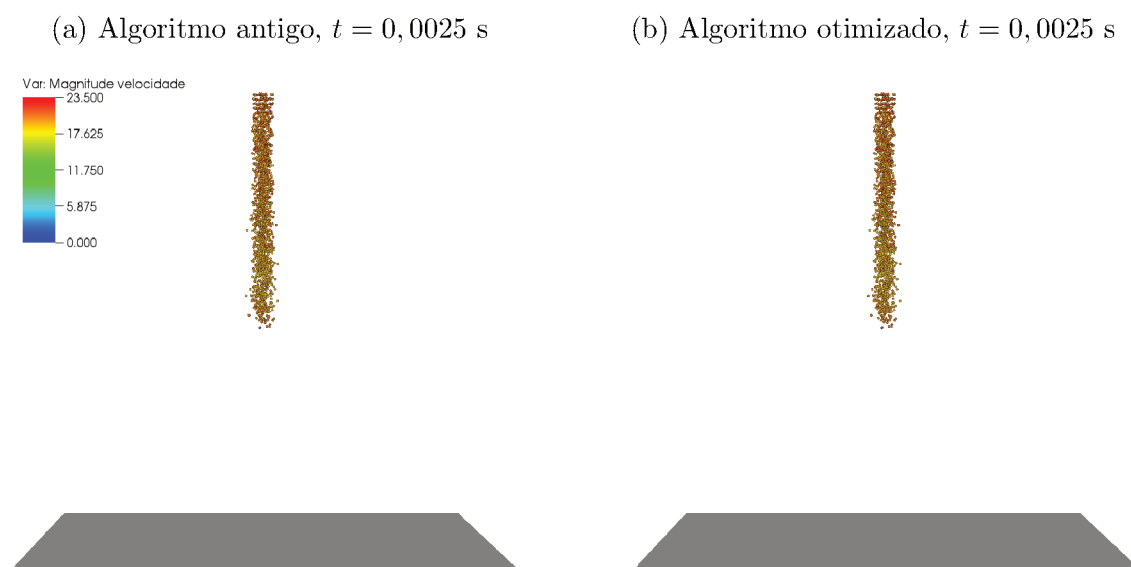
uma representação esquemática desses ângulos.

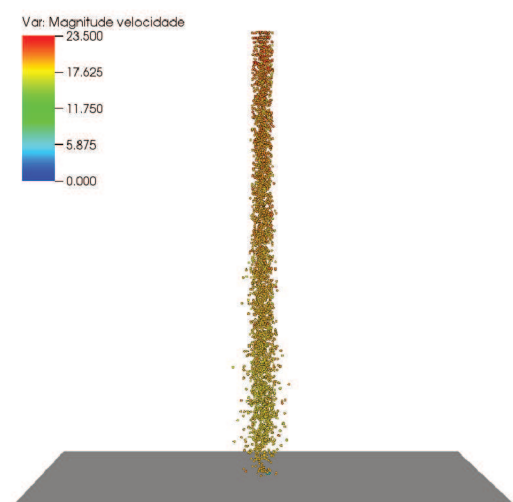
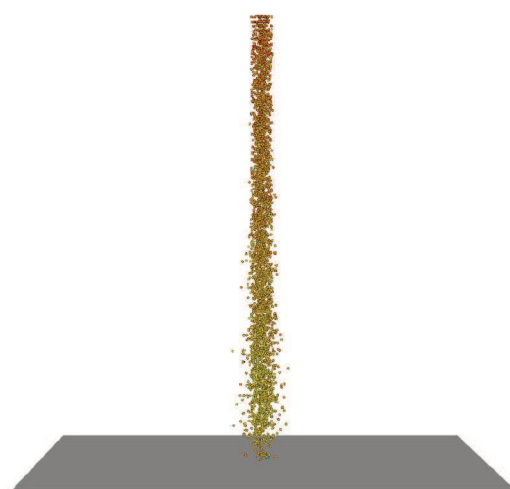
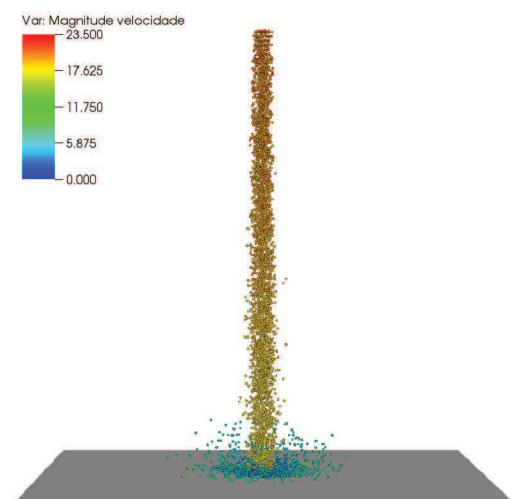
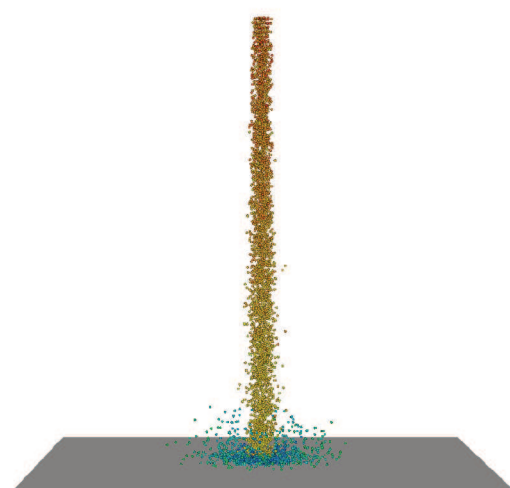
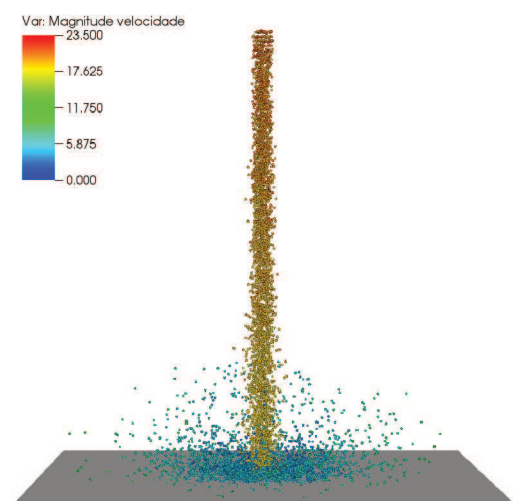
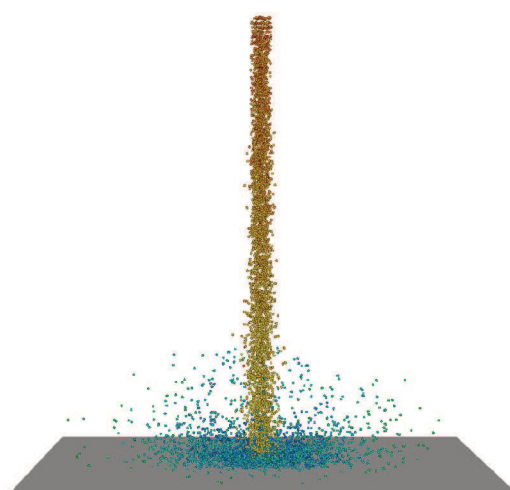
5.3.1 Otimização do algoritmo de colisão

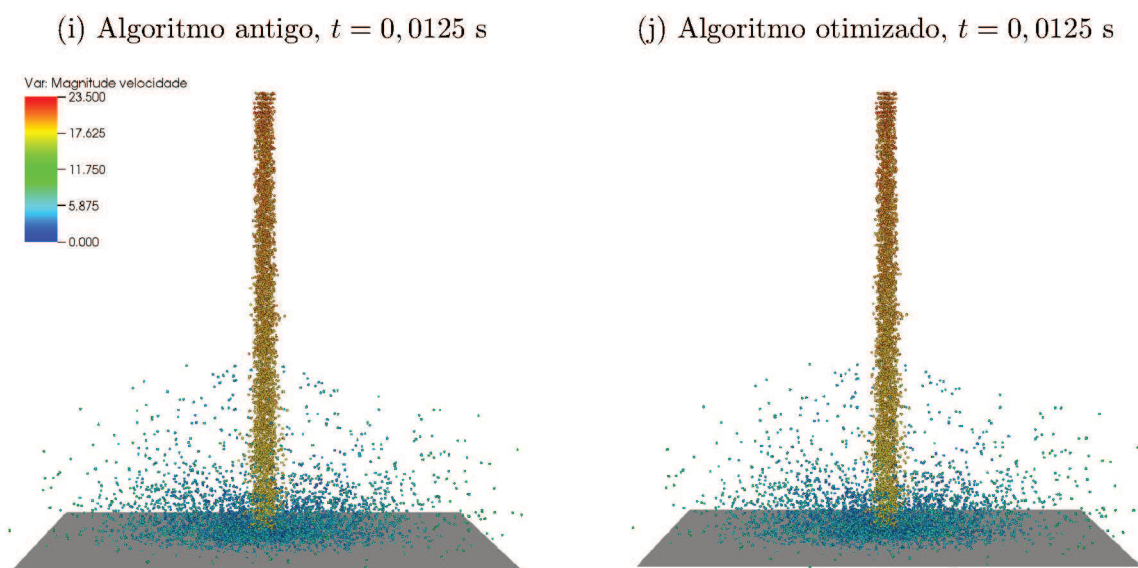
Previamente, no código MFSim, a checagem para detectar se ocorreu alguma colisão entre partículas e fronteira imersa era feita para todos os possíveis pares formados por partículas e elementos triangulares existentes no domínio computacional. Entretanto, isso era bastante ineficiente devido ao alto custo computacional. Dependendo do número de partículas presentes no domínio e do número de elementos triangulares que compunham a geometria imersa, a simulação numérica era inviável. Nesse sentido, pensou-se em uma busca mais restritiva de maneira que a checagem seja realizada apenas para os elementos triangulares mais próximos de cada partícula, conforme apresentado na Seção 4.2.2.9.

A fim de avaliar a eficiência do algoritmo otimizado para detecção de colisão entre partícula e fronteira imersa, o caso citado anteriormente foi simulado utilizando a versão antiga do algoritmo e, em seguida, utilizando a versão otimizada. Na Fig. 5.13, a trajetória das partículas obtidas através das simulações com os dois algoritmos podem ser observadas para vários tempos distintos.

Figura 5.13: Trajetória das partículas no caso do jato granular, considerando o algoritmo antigo (esquerda) e o algoritmo otimizado (direita).



(c) Algoritmo antigo, $t = 0,005$ s(d) Algoritmo otimizado, $t = 0,005$ s(e) Algoritmo antigo, $t = 0,0075$ s(f) Algoritmo otimizado, $t = 0,0075$ s(g) Algoritmo antigo, $t = 0,01$ s(h) Algoritmo otimizado, $t = 0,01$ s



Percebe-se que com ambos algoritmos foi possível detectar as colisões entre as partículas e a placa, visto que houve uma mudança na trajetória das mesmas. Além disso, nas Figs. 5.14 e 5.15, é possível identificar que os resultados encontrados utilizando os dois algoritmos são estatisticamente semelhantes tanto para o ângulo de impacto médio, como para a frequência de impacto média das partículas na placa em um tempo de 0,05 s.

Figura 5.14: Ângulo de impacto médio das partículas na placa em 0,05 s, considerando o algoritmo antigo (esquerda) e o algoritmo otimizado (direita).

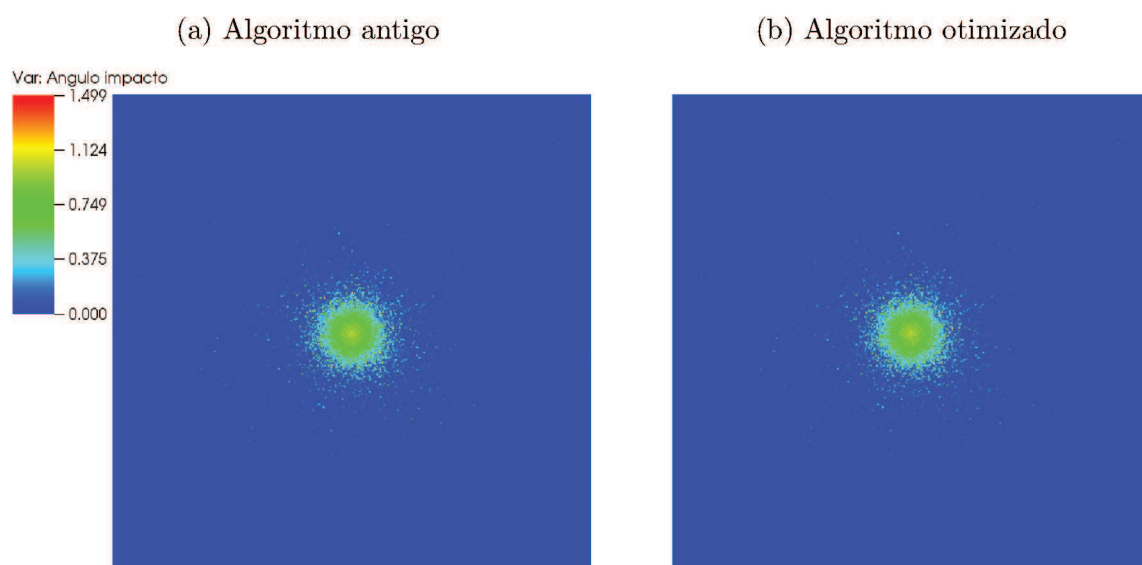
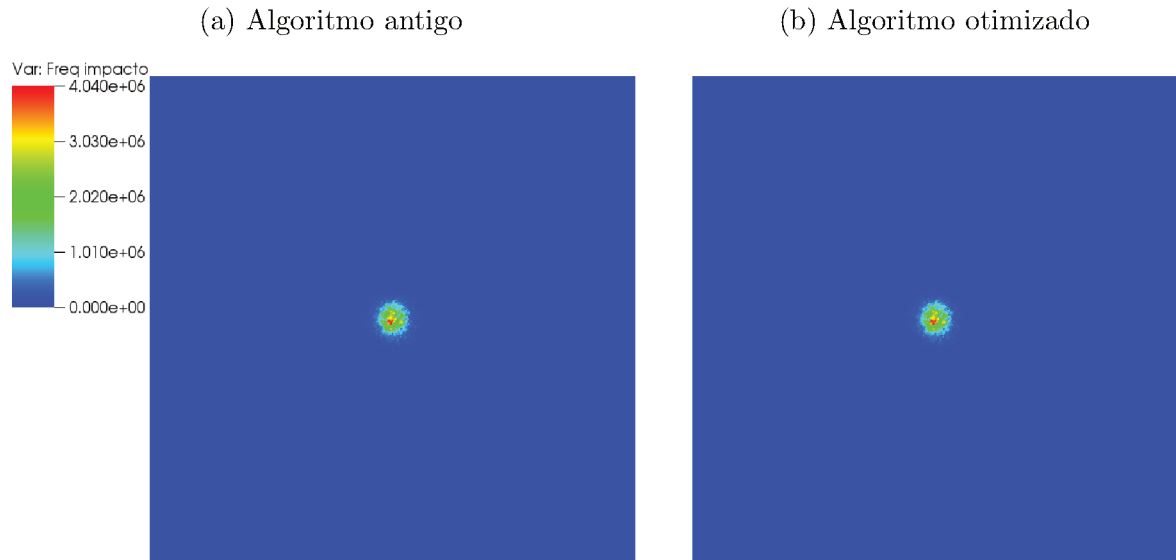


Figura 5.15: Frequência de impacto média das partículas na placa em 0,05 s, considerando o algoritmo antigo (esquerda) e o algoritmo otimizado (direita).



Depois de observar que os resultados foram mantidos semelhantes mesmo com as alterações no algoritmo, faz-se necessário avaliar o custo computacional de cada um para determinar se as mudanças foram significativas. Portanto, o número de partículas presentes no domínio e o tempo computacional gasto para executar cada algoritmo foram colocados na Tab. 5.6 para cinco passos de tempo diferentes. A partir desta tabela, pode-se dizer que o algoritmo otimizado é eficiente, porque utilizando-o houve uma redução, em torno de 98 %, do custo computacional para os passos de tempo considerados.

Tabela 5.6: Custo computacional de cada algoritmo para cinco passos de tempo diferentes.

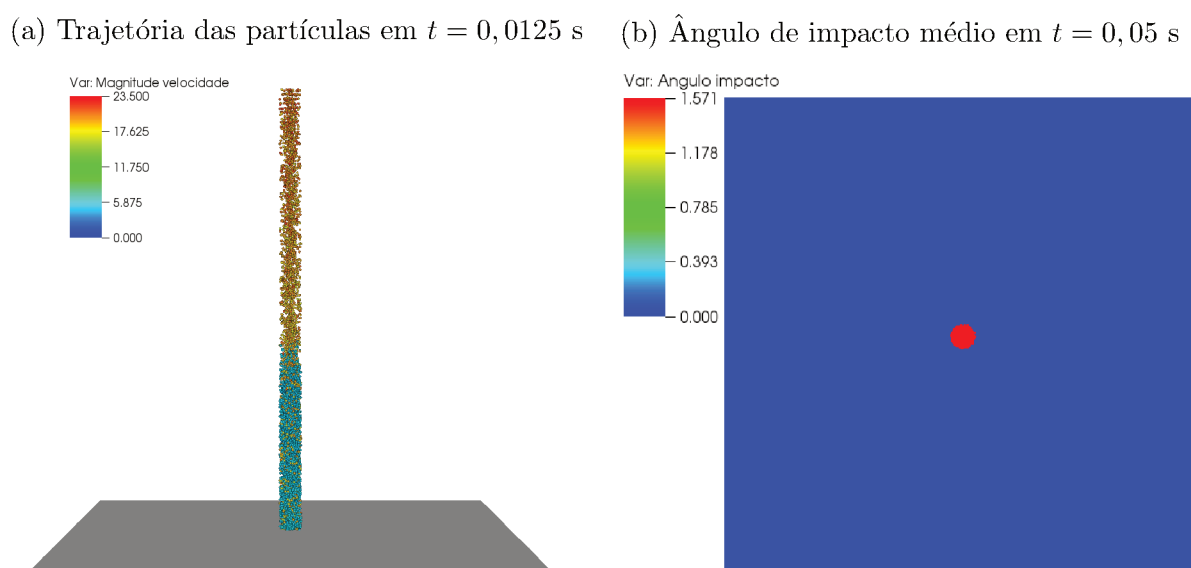
Passo de tempo	Tempo físico [s]	Número de partículas	Tempo computacional [s]	
			Antigo	Otimizado
50	0,0025	1734	3,699192	0,001851
100	0,0050	3434	7,369841	0,019378
150	0,0075	5134	9,846468	0,111698
200	0,0100	6834	11,881860	0,168622
250	0,0125	8534	14,066600	0,226801

5.3.2 Efeitos das colisões entre partículas

Para mostrar a importância da colisão entre as partículas no presente estudo de caso, realizou-se uma comparação entre os resultados da simulação numérica do caso padrão, que contempla a modelagem de colisão partícula-partícula, com uma simulação desprezando os efeitos desse fenômeno. Vale lembrar que as partículas são injetadas sem ângulo de abertura, e por isso, o seu vetor velocidade inicial forma um ângulo de 90° com o plano da placa.

Para a simulação que não considera colisão partícula-partícula, o vetor velocidade das partículas mantém-se sempre com a mesma direção, já que nenhum evento ocorre para que a mesma seja alterada. Quando as partículas colidem com a placa, apenas o sentido do vetor velocidade é alterado. Assim, analisando a Fig. 5.16a, observa-se o que era esperado acontecer: as partículas continuam na mesma reta de trajetória inicial até colidirem com a placa perdendo aceleração. Por causa da colisão com a fronteira imersa elas mudam o sentido da trajetória sem mudar a direção. Por fim, conforme a Fig. 5.16b, nota-se, como também era esperado, que o ângulo de impacto médio das partículas na placa é exatamente 90° .

Figura 5.16: Resultados da simulação do jato granular desconsiderando os efeitos das colisões entre partículas.



5.3.3 Variação do ângulo de abertura do jato

O ângulo de abertura do jato foi considerado nas simulações por meio da decomposição do vetor velocidade inicial das partículas. Então, para cada partícula injetada, um ângulo aleatório Φ era gerado dentro do intervalo $[\theta_{bocal} - \theta_{abert}, \theta_{bocal} + \theta_{abert}]$, de modo que as componentes da velocidade inicial fossem definidas por:

$$u_p(0) = \|\vec{u}_p(0)\| \cos \Phi, \quad (5.20a)$$

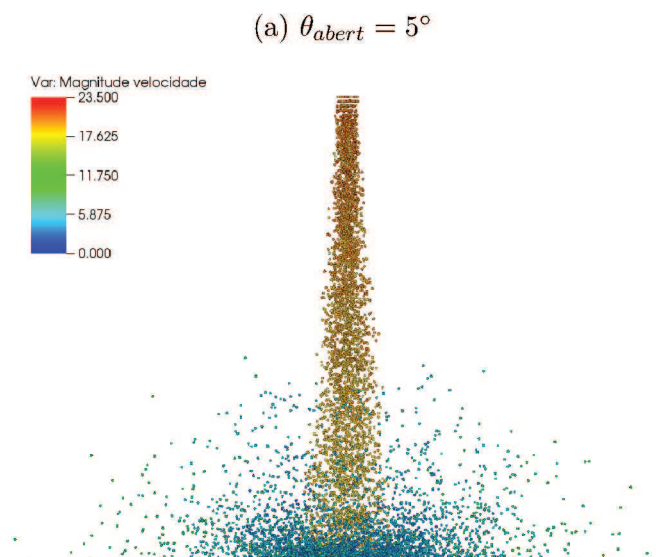
$$v_p(0) = \|\vec{u}_p(0)\| \sin \Phi, \quad (5.20b)$$

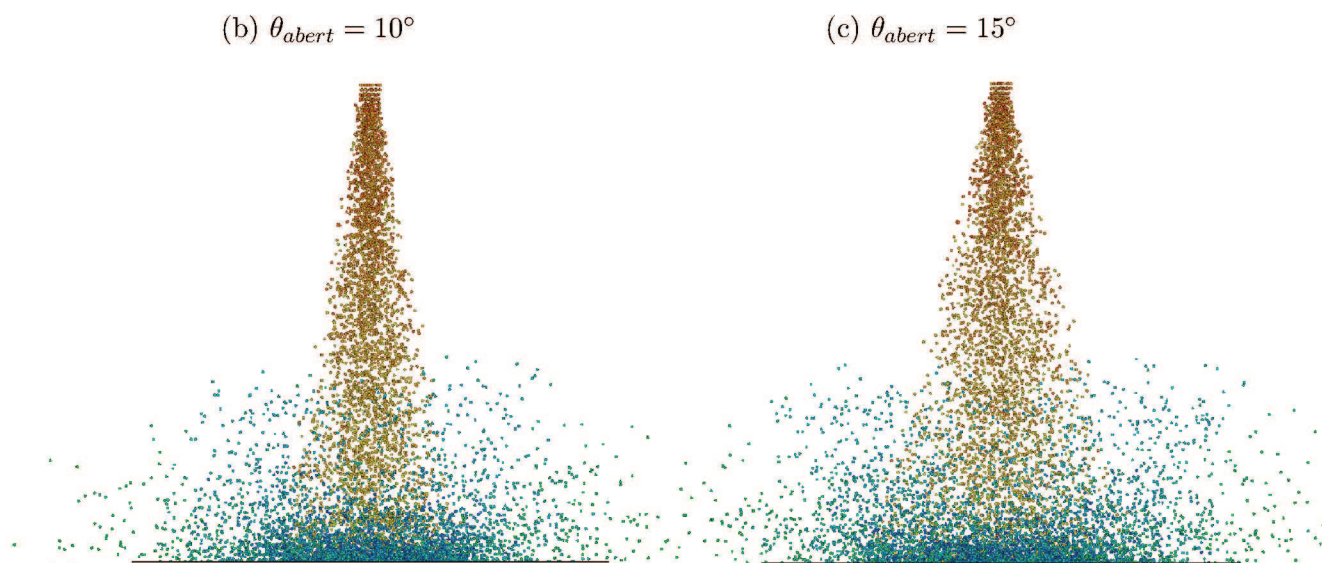
$$w_p(0) = 0. \quad (5.20c)$$

Para avaliar a influência do ângulo de abertura no comportamento do jato granular e, assim, a colisão entre as partículas e a placa, realizou-se três simulações considerando ângulos de abertura diferentes: 5° , 10° e 15° . Na Fig. 5.17, a trajetória das partículas são mostradas em $t = 0,0125$ s. Nas Figs. 5.18 e 5.19, o ângulo de impacto médio e a frequência de impacto média das partículas na placa são apresentados para um tempo de 0,05 s.

À medida que o ângulo de abertura aumenta, as partículas se espalham mais. Consequentemente, a área abrangente pelas colisões das partículas na placa tende a aumentar.

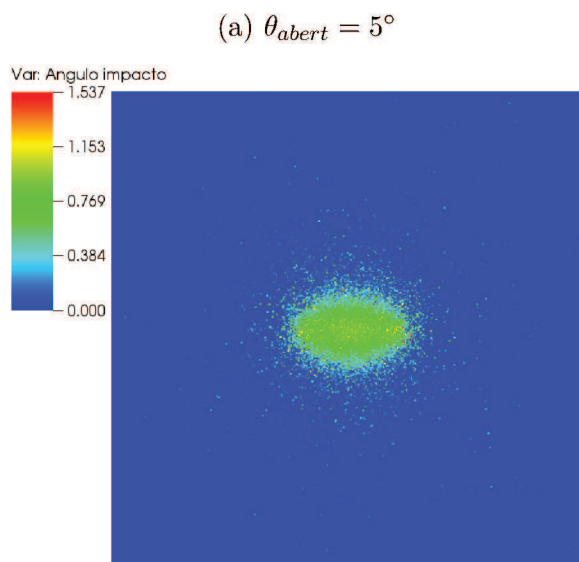
Figura 5.17: Trajetória das partículas no caso do jato granular em 0,05 s, considerando vários ângulos de abertura.





Conforme mostrado na Fig. 5.19, quanto maior essa área, menor é a frequência de impacto máxima em um determinado instante, ou seja, as colisões não ficam concentradas apenas na região central da placa. No entanto, como pode ser percebido a partir da Fig. 5.18, a faixa do ângulo de impacto não se altera significativamente com a variação do ângulo de abertura. Mesmo o processo de erosão não tendo sido modelado no presente trabalho, por fugir ao escopo, é possível fazer uma analogia com esse fenômeno analisando a frequência de impacto. Quanto menor o ângulo de abertura, mais intenso é o desgaste da região central da placa com o tempo, devido ao maior número de choques de partículas nessa região.

Figura 5.18: Ângulo de impacto médio das partículas na placa (vista superior) no caso do jato granular em 0,05 s, considerando vários ângulos de abertura.



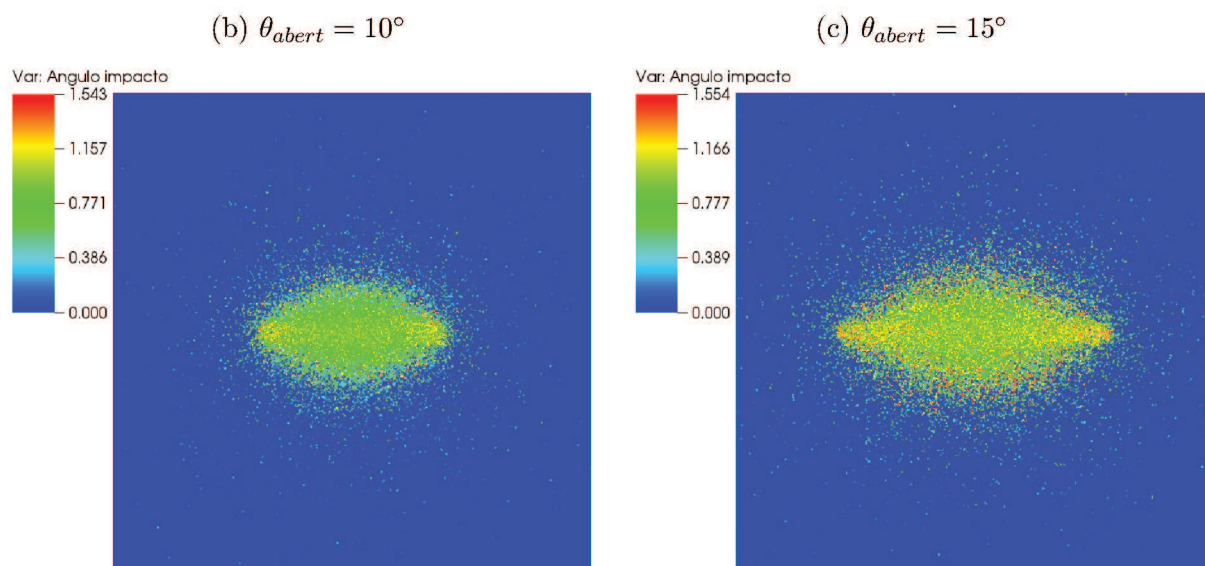
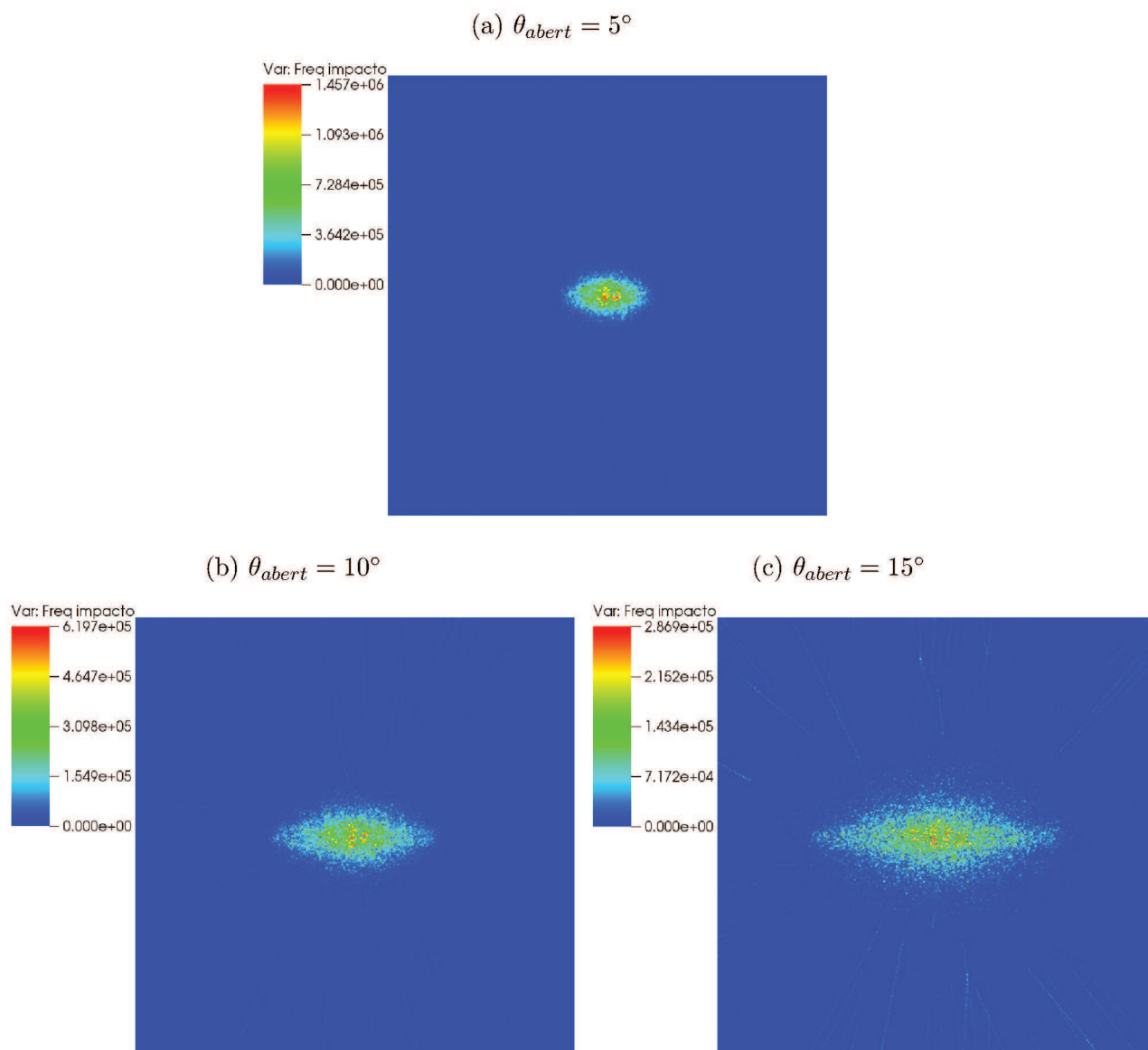


Figura 5.19: Freqüência de impacto média das partículas na placa (vista superior) no caso do jato granular em 0,05 s, considerando vários ângulos de abertura.

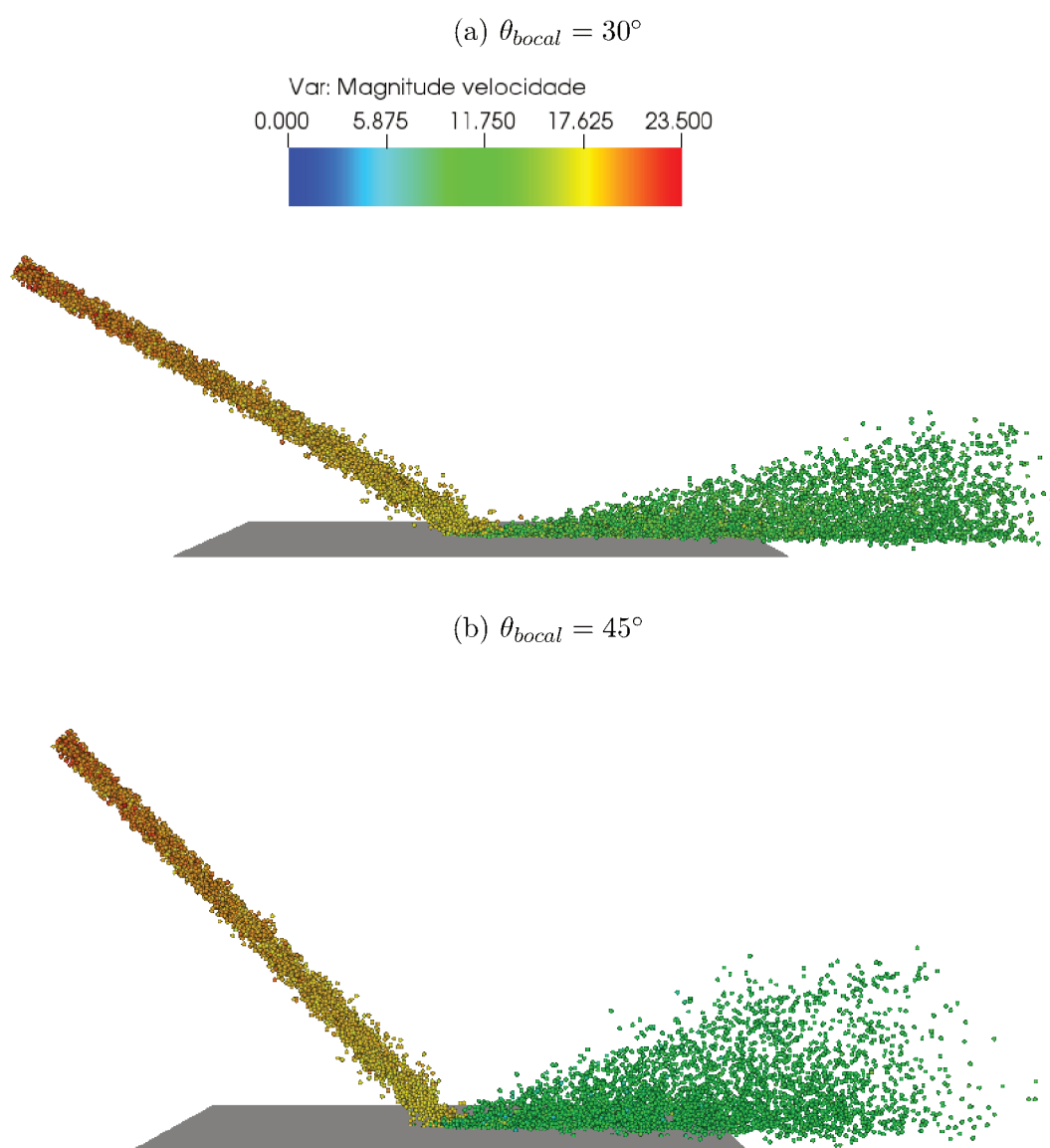


5.3.4 Variação do ângulo do bocal

Assim como o ângulo de abertura do jato, o ângulo do bocal foi considerado nas simulações numéricas por meio do ângulo Φ nas Eqs. (5.20). A influência do ângulo do bocal nas colisões das partículas com a placa é investigada com base em três simulações distintas adotando os seguintes valores para o ângulo do bocal: 30° , 45° e 60° . Para todos os três casos, a distância entre o bocal e a placa foi mantida igual a 0,1 m.

Analisando a Fig. 5.20, nota-se que quanto menor o ângulo do bocal, maior é a magnitude da velocidade das partículas após a colisão com a placa. Os resultados apresentados na

Figura 5.20: Trajetória das partículas no caso do jato granular em 0,05 s, considerando vários ângulos do bocal.



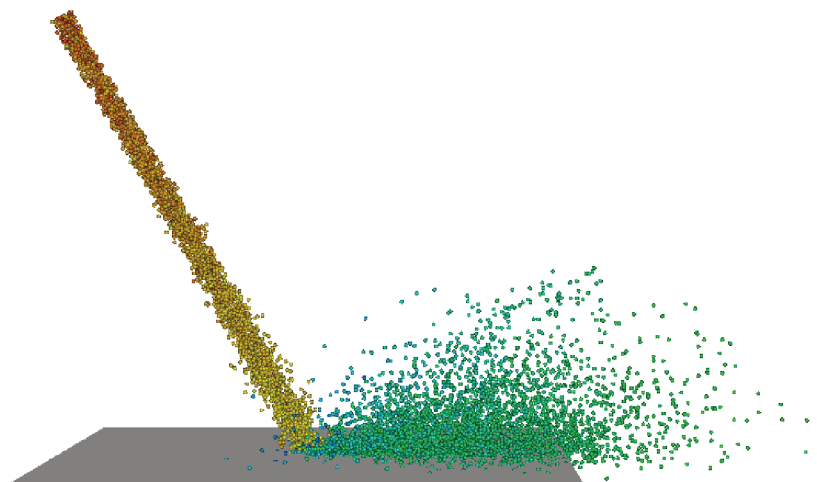
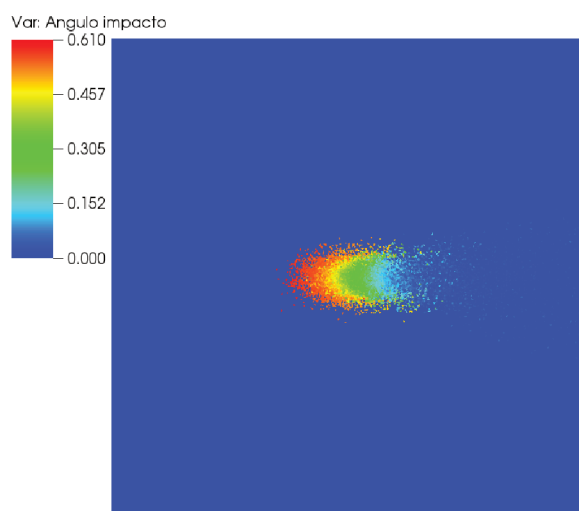
(c) $\theta_{bocal} = 60^\circ$ 

Fig. 5.21 confirmam o que é visualizado na Fig. 5.20. Para cada ângulo do bocal encontrou-se um padrão em que os valores de ângulo de impacto médio diminuem no sentido positivo do eixo x . Comparando os resultados das simulações, a faixa do ângulo de impacto médio é maior justamente para o caso com maior ângulo do bocal. Além disso, observando a Fig. 5.22, a frequência de impacto média é obtida conforme esperado. A região de impacto aumenta a medida que o ângulo de impacto diminui. Contudo, a faixa de valores para a frequência de impacto médio das partículas na placa não se altera de forma expressiva com a variação do ângulo do bocal.

Figura 5.21: Ângulo de impacto médio das partículas na placa (vista superior) no caso do jato granular em 0,05 s, considerando vários ângulos do bocal.

(a) $\theta_{bocal} = 30^\circ$ 

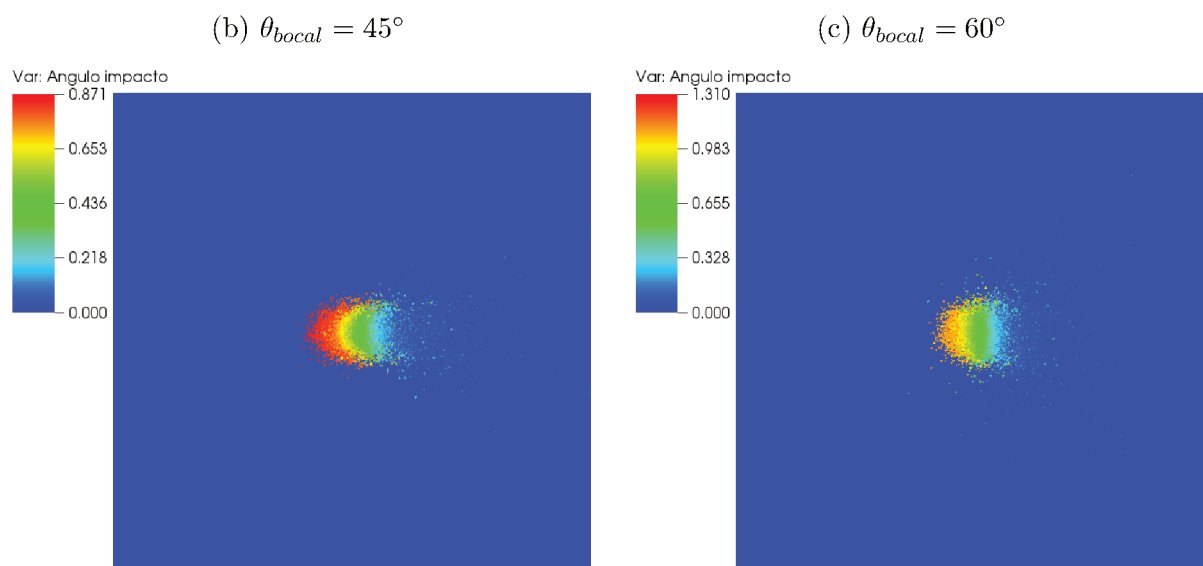
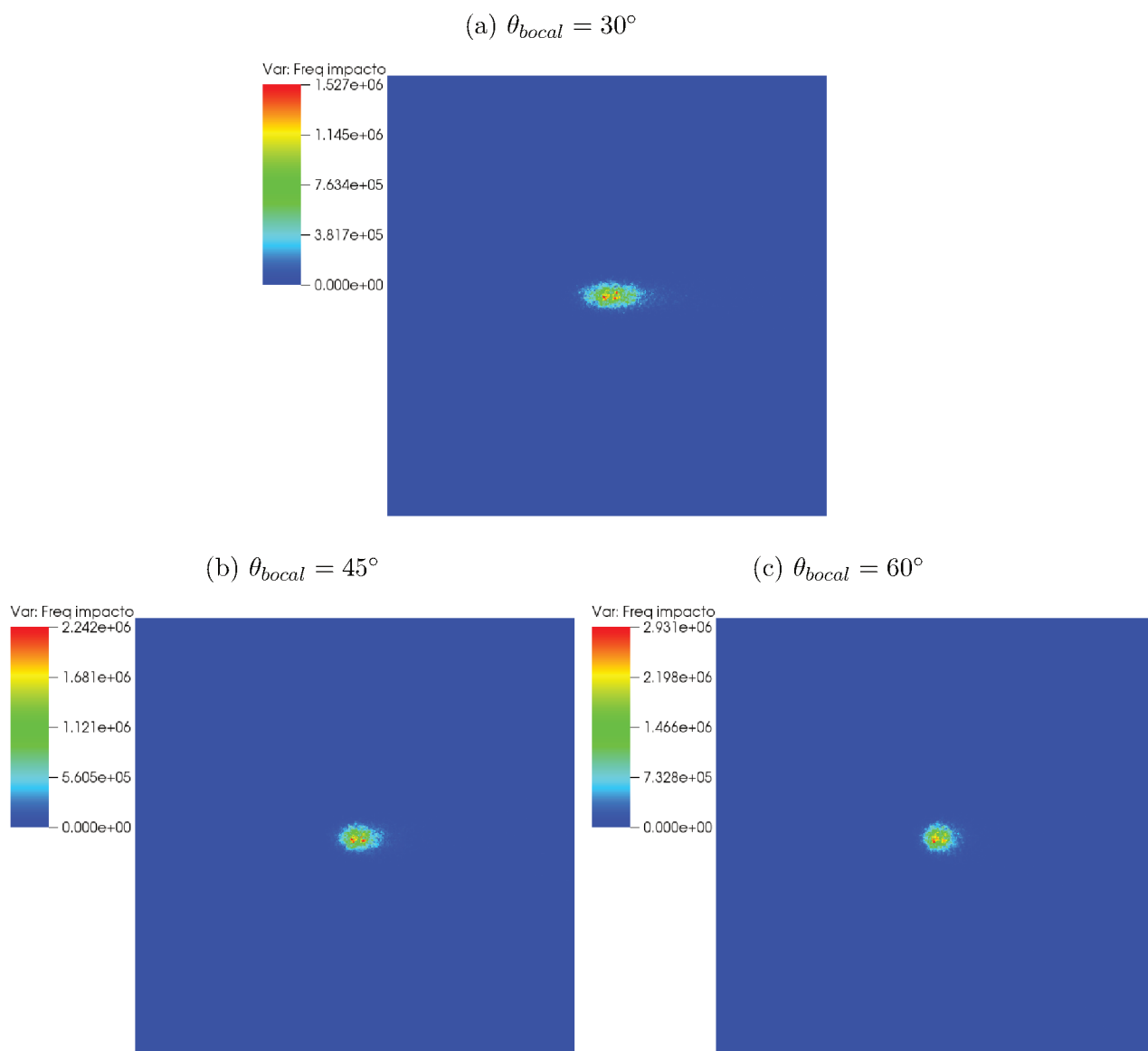


Figura 5.22: Frequência de impacto média das partículas na placa (vista superior) no caso do jato granular em 0,05 s, considerando vários ângulos do bocal.



5.4 Validação da dispersão de partículas devido à turbulência

A dispersão de partículas em um caso de turbulência de grelha (*grid turbulence*) é um teste comum para a validação de modelos de dispersão. O escoamento turbulento gerado atrás da grelha é formado por um fluido com velocidade média uniforme e a turbulência pode ser considerada isotrópica. As simulações realizadas para este caso foram baseadas no experimento de Snyder e Lumley (1971). De acordo com os autores, as curvas de decaimento da energia são adequadamente representadas por:

$$\frac{\bar{u}^2}{w'^2} = 42,4 \left(\frac{x}{M} - 16 \right), \quad (5.21)$$

e

$$\frac{\bar{u}^2}{v'^2} = 39,4 \left(\frac{x}{M} - 12 \right), \quad (5.22)$$

em que $\bar{u} = 6,55$ m/s, $M = 0,0254$ m é o espaçamento da grelha, e w' é adotado como sendo igual a v' . Com isso, como nas simulações o modelo $k - \epsilon$ padrão foi aplicado, a energia cinética turbulenta pode ser avaliada pela Eq. (3.8), enquanto que a potência de dissipação viscosa é dada por (MILOJEVIĆ, 1990):

$$\epsilon = -\bar{u} \frac{dk}{dx}. \quad (5.23)$$

No experimento de Snyder e Lumley (1971), quatro partículas diferentes foram utilizadas com propriedades listadas na Tab. 5.7. Quanto às propriedades do fluido, considerou-se $\rho = 1,177$ kg/m³ e $\mu = 1,846 \times 10^{-5}$ kg/(m·s). A seção de teste do túnel de vento do experimento foi posicionada verticalmente, com o escoamento para cima no sentido positivo do eixo x . O cálculo das velocidades das partículas e de suas trajetórias iniciou em $x/M = 20$ até $x/M = 180$, e em $x/M = 68,4$ a dispersão da partícula e o tempo foram zerados, assim como no experimento. A média foi realizada em torno de 2000 trajetórias para cada tipo de partícula, de forma que em cada início de trajetória, a partícula era posicionada na linha central do domínio de seção $0,4064$ m \times $0,4064$ m. Aplicaram-se condições de entrada e saída

na direção x , as quais correspondem às condições Dirichlet e advectiva para a velocidade do fluido, respectivamente, e Dirichlet e Neumann para k e ϵ . Nas direções y e z , considerou-se a condição periódica. Por fim, o domínio foi discretizado em uma malha uniforme com $\Delta x = M$, e dividido em 8 processos na direção x .

Tabela 5.7: Dados das partículas.

Parâmetro	Partícula 1	Partícula 2	Partícula 3	Partícula 4
D_p [μm]	46,5	87,0	87,0	46,5
ρ_p [kg/m^3]	260	1000	2500	8900
St	0,44	5,87	14,69	14,93

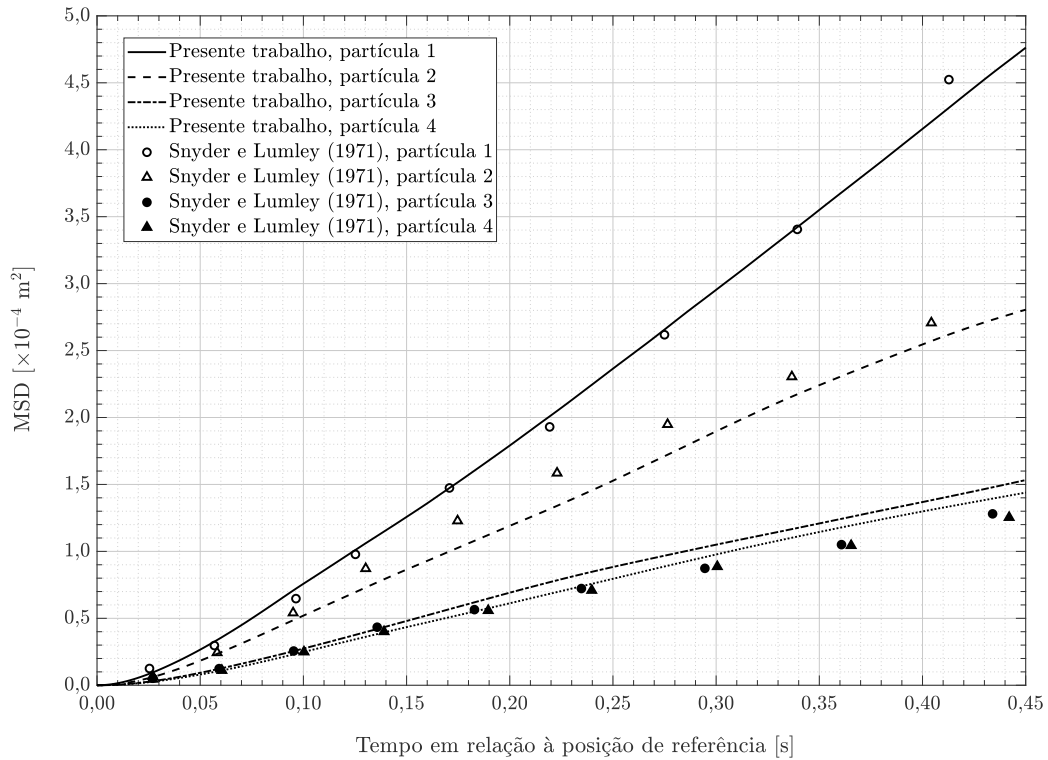
Diante de tudo isso, a validação é realizada comparando os resultados simulados no código MFSim com os resultados medidos experimentalmente para o deslocamento quadrático médio das partículas (MSD - *Mean Squared Displacement*). Tal parâmetro representa a média dos quadrados dos deslocamentos em relação à uma posição anterior de referência de cada partícula, sendo dado por:

$$\text{MSD} \equiv \langle (y_p - y_{p_0}) \rangle = \frac{1}{N_p} \sum_{n=1}^{N_p} (y_{p_n}(t) - y_{p_n}(0))^2, \quad (5.24)$$

onde N_p é o número de trajetórias, $y_{p_n}(0) = y_{p_0}$ é a posição de referência para cada trajetória da partícula considerada e $y_{p_n}(t)$ é a posição de cada uma em um determinado tempo t . No presente caso a posição de referência é adotada em $x/M = 68,4$ para seguir as mesmas condições experimentais. A comparação dos resultados é então apresentada na Fig. 5.23.

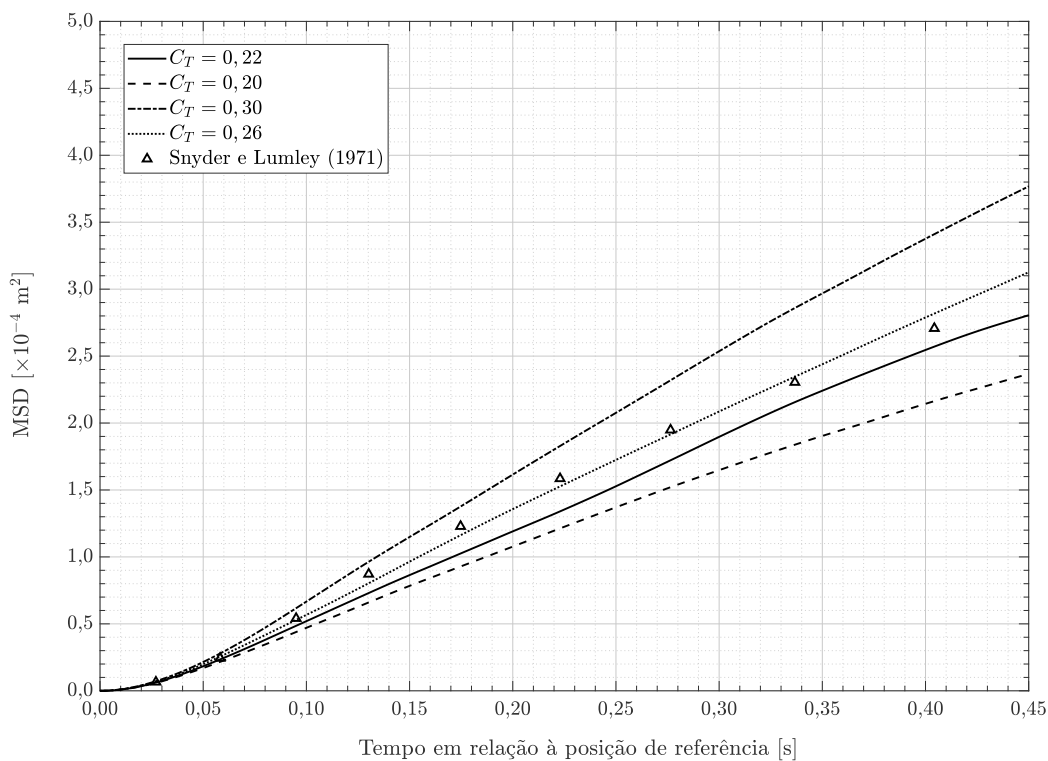
Nota-se na Fig. 5.23, que os resultados obtidos numericamente para o deslocamento quadrático médio das partículas se aproximam daqueles medidos experimentalmente. Como esperado, quanto menor o número de Stokes, maior a dispersão das partículas, porque maior é a influência da turbulência no transporte das mesmas. As partículas 3 e 4, cujos valores de número de Stokes são próximos, apresentaram um comportamento muito similar no experimento, e isso se repetiu nos resultados das simulações. Os resultados obtidos para a partícula 2 foram os que mais se distanciaram dos dados experimentais.

Figura 5.23: Comparação entre os resultados experimentais e os resultados obtidos numericamente através do código MFSim avaliando a dispersão para cada tipo de partícula.



Milojević (1990) mostrou que o valor do coeficiente C_T presente na Eq. (3.38) para calcular a escala de tempo integral lagrangiana influencia significativamente os resultados da dispersão das partículas. Para o modelo adotado em seu trabalho, o autor encontrou um coeficiente otimizado com valor $C_T = 0,3$ em comparação com os dados experimentais da partícula 2 fornecidos por Snyder e Lumley (1971). O valor assumido por Milojević (1990) foi considerado aceitável, uma vez que pertencia à faixa de valores esperada: 0,133 – 0,444 (HINZE, 1975 apud MILOJEVIĆ, 1990). A fim de avaliar essa mesma influência no presente trabalho, o caso da turbulência de grelha com a presença da partícula 2 foi simulado, através do código MFSim, para quatro valores de C_T , sendo eles 0,2, 0,3 e 0,26, além do 0,22 que já havia sido considerado nas simulações anteriores, cujos resultados estão mostrados na Fig. 5.23. Observa-se na Fig. 5.24 que é possível obter uma melhor aproximação dos resultados experimentais alterando o valor desse coeficiente, conforme mencionado por Milojević (1990). Com base nas simulações e no modelo de dispersão adotado no presente trabalho, percebe-se na figura que para $C_T = 0,26$ os resultados apresentaram melhor concordância com os valores experimentais.

Figura 5.24: Comparação dos resultados de dispersão da partícula 2 obtidos numericamente através do código MFSim para diferentes coeficientes da escala de tempo integral lagrangiana com os dados experimentais.



5.5 Fechamento do capítulo

Os resultados obtidos a partir das simulações numéricas e as consequentes discussões foram apresentados neste capítulo em quatro seções. Na primeira seção, o acoplamento de 2 vias foi validado para um problema simplificado comparando os resultados numéricos com resultados da solução analítica para a quantidade de movimento linear das duas fases do escoamento. Com isso, garantiu-se a conservação da quantidade de movimento linear total do sistema. Na segunda seção, o algoritmo de detecção e o modelo de colisão partícula-partícula foram validados com base na teoria cinética de gases, para uma mistura monodispersa e uma mistura bidispersa de partículas. As distribuições do ângulo de colisão e da velocidade relativa no momento da colisão, a frequência de colisão e a energia cinética das partículas foram avaliadas, obtendo o comportamento esperado pela teoria. Na terceira seção, o algoritmo de colisão entre partículas e fronteira imersa foi validado. Os resultados das simulações foram avaliados conforme o comportamento físico esperado das colisões de partículas com uma

placa, o que foi garantido. Por último, na quarta seção, o modelo de dispersão de partículas foi validado com base no deslocamento quadrático médio das partículas, considerando diferentes números de Stokes. Obteve-se uma boa aproximação dos resultados numéricos com resultados experimentais para um caso de uma grelha turbulenta.

CAPÍTULO VI

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

O foco do presente trabalho consistiu em modelar computacionalmente escoamentos gás-sólido utilizando um código CFD, conhecido por MFSim, com malha adaptativa dinâmica. Essa modelagem seguiu uma abordagem Euler-Lagrange com base na aproximação de que uma partícula é um ponto material. O principal cuidado que se deve ter com essa aproximação é quanto ao tamanho das partículas, as quais precisam ser menores que a célula computacional.

A caracterização de um escoamento bifásico disperso é fundamental para um melhor entendimento sobre o assunto, bem como para identificar os fenômenos envolvidos. Diferenciar os mecanismos presentes em cada tipo de acoplamento dependendo da fração volumétrica da fase dispersa foi importante para o desenvolvimento do presente trabalho. Se $\alpha_d \leq 10^{-6}$, tem-se o acoplamento de 1 via, no qual o movimento das partículas é influenciado pelo campo de escoamento do fluido e, por isso, forças fluidodinâmicas são consideradas nas equações de transporte das partículas. Além das forças, considera-se também o torque atuante nas partículas, porque mesmo adotando a hipótese de ponto material, o movimento de rotação das partículas não deve ser desprezado. Como elas sofrem interferência do campo de escoamento em problemas que apresentam paredes ou grandes mudanças na vorticidade do fluido, a velocidade angular das partículas é alterada.

Se $10^{-6} < \alpha_d \leq 10^{-3}$, o acoplamento é dito 2 vias, porque não só o fluido influencia a trajetória das partículas, como as partículas também influenciam o transporte do fluido.

Nesse sentido, um termo de acoplamento é computado de acordo com as forças fluidodinâmicas atuantes nas partículas para todas as direções coordenadas, e é acrescentado nas equações de quantidade de movimento linear da fase contínua. Na Seção 5.1, a implementação do termo de acoplamento que modela a interação entre as duas fases do escoamento foi testada comparando a quantidade de movimento linear das fases em função do tempo com resultados de solução analítica. A partir dos resultados de validação, foi possível demonstrar que a troca de quantidade de movimento linear manteve a tendência esperada de forma que a quantidade de movimento linear total se conservou ao longo de todas as simulações, mesmo para simulações em paralelo com diferentes quantidades de processos e simulações com diferentes níveis de refinamento da malha.

Se $\alpha_d > 10^{-3}$, além das interações entre as fases do escoamento, as partículas também trocam quantidade de movimento em consequência das colisões entre elas. Para tratar essas colisões, uma modelagem adequada é necessária. A modelagem determinística de esfera rígida mostrou-se eficaz para os problemas estudados. Optou-se pelo modelo de esfera rígida ao invés do modelo de esfera macia, uma vez que as simulações foram limitadas a escoamentos não muito densos e pelo fato do modelo de esfera macia ser computacionalmente mais caro. A escolha por uma metodologia determinística ao invés de uma estocástica ocorreu para que houvesse uma melhor compreensão do fenômeno de colisão, pelo fato da sua implementação ser mais fácil e direta de entender, além de que a colisão pode ser visualizada no pós-processamento dos resultados através de testes simples facilitando a busca de erros e a solução de problemas de implementação. Na Seção 5.2, tanto o algoritmo de detecção implementado como o modelo de colisão entre partículas foram testados em simulações diferentes, sendo um caso monodisperso e outro polidisperso, com o objetivo de comparar os resultados com a teoria cinética de gases. Em ambos os casos, os resultados obtidos seguiram a mesma tendência da teoria e apresentaram baixos valores de erro para a frequência de colisão por unidade de volume. Os erros encontrados variaram entre 0,24 % e 3,05 %. Com isso, conclui-se que o algoritmo de detecção, bem como o modelo de colisão partícula-partícula foram validados no código.

Quando um certo escoamento é simulado, sua região de abrangência é restringida por um domínio computacional. Por esse motivo, a aplicação de condições de contorno nas

fronteiras do domínio é necessária, até mesmo para as partícula existentes em um escoamento bifásico disperso. As condições de contorno mais comuns que foram aplicadas no presente trabalho são: a condição de entrada, por onde acontece a injeção de partículas; a condição de saída, por onde as partículas são deletadas; a condição periódica, na qual as partículas que saem de um lado do domínio são reinjetadas do lado oposto; e a condição de parede, na qual as partículas colidem mudando a sua trajetória. Para a condição de parede, adotou-se o modelo de esfera rígida.

No entanto, nem todos os problemas envolvendo paredes podem ser simulados utilizando as fronteiras do domínio computacional como as próprias paredes. Como a malha do código MFSim é bloco-estruturada, qualquer geometria circular, com curvas ou mais complexa que um paralelepípedo precisa ser tratada de uma outra forma. Para isso, utiliza-se no código o método da fronteira imersa. Ao simular escoamentos com partículas considerando esse método, torna-se importante que as partículas reconheçam a presença de um obstáculo representado por uma malha lagrangiana. Sendo assim, um algoritmo de colisão entre partículas e os elementos dessa malha foi criado. De início, a checagem para determinar uma possível colisão era totalmente inapropriada e ineficiente, pois conforme o número de partículas do problema aumentava, o tempo gasto na execução de uma iteração também aumentava significativamente. Buscando melhorar o custo computacional, desenvolveu-se uma outra maneira de checar as possíveis colisões com a fronteira imersa. Na Seção 5.3, segundo os resultados de verificação para o caso de um jato granular incidindo em uma placa, representada computacionalmente por uma fronteira imersa, conseguiu-se uma redução de 98 % do tempo gasto para executar o algoritmo de colisão entre partícula e fronteira imersa.

Escoamentos turbulentos são de grande importância nas aplicações industriais. Entretanto, simular esse tipo de escoamento pode ser muito caro computacionalmente dependendo da abordagem numérica empregada. Os modelos de fechamento das classes RANS ou URANS podem ser alternativas para isso. A simulação de escoamentos turbulentos gás-sólido utilizando algum desses modelos requer que a interação entre o fenômeno da turbulência e a dispersão das partículas seja considerada através de uma modelagem da flutuação da velocidade do fluido. Na Seção 5.4, o modelo de dispersão implementado foi validado para um caso de turbulência de grelha avaliando o comportamento de quatro partículas diferentes ao longo

desse escoamento. Por fim, os resultados numéricos apresentaram uma boa aproximação com os resultados experimentais fornecidos na literatura.

Dando sequência ao tema, para trabalhos futuros, recomenda-se simular e validar um caso de um escoamento turbulento gás-sólido no interior de uma geometria circular com curva, como por exemplo um cotovelo. A ideia desse caso seria acoplar tudo o que está disponível no código e comparar os resultados obtidos com dados da literatura. Além disso, recomenda-se considerar a rugosidade das paredes nas simulações, visto que ela interfere na direção da velocidade da partícula após colidir com uma parede. Como outra recomendação, tem-se a implementação e a validação de uma metodologia estocástica para tratar a colisão entre partículas. Com isso, seria interessante comparar os resultados fornecidos a partir dessa metodologia e a sua influência no custo computacional do código com a metodologia determinística já implementada. Por último, recomenda-se implementar um modelo para avaliar erosão. Esse consiste em um problema que afeta consideravelmente as indústrias que utilizam sistemas de transporte pneumático devido ao alto desgaste abrasivo dos dutos causado pela passagem de particulados sobre a superfície das paredes.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABHYANKAR, S. *et al.* Petsc/ts: A modern scalable ode/dae solver library. *arXiv preprint arXiv:1806.01437*, 2018.

ALLETTO, M. *Numerical Investigation of the Influence of Particle–Particle and Particle–Wall Collisions in Turbulent Wall–Bounded Flows at High Mass Loadings*. Tese (Doutorado) — Institut für Mechanik, 2014. Disponível em: <<http://edoc.sub.uni-hamburg.de/hsu/volltexte/2014/3077/>>.

ALLETTO, M.; BREUER, M. One-way, two-way and four-way coupled les predictions of a particle-laden turbulent flow at high mass loading downstream of a confined bluff body. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 45, p. 70–90, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2012.05.005>>.

ARMENIO, V.; FIOROTTO, V. The importance of the forces acting on particles in turbulent flows. *Physics of Fluids*, AIP, v. 13, n. 8, p. 2437–2440, 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1385390>>.

ASCHER, U. M.; RUUTH, S. J.; WETTON, B. T. Implicit-explicit methods for time-dependent partial differential equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, SIAM, v. 32, n. 3, p. 797–823, 1995. Disponível em: <<https://doi.org/10.1137/0732037>>.

BALAY, S. *et al.* *PETSc Web page*. 2019. Disponível em: <<https://www.mcs.anl.gov/petsc>>.

BARBI, F. *et al.* Numerical experiments of ascending bubbles for fluid dynamic force calculations. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, Springer, v. 40, n. 11, p. 519, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s40430-018-1435-7>>.

BARBOSA, P. R.; JÚNIOR, P. S. Optimization of power consumption in pneumatic conveying systems by adaptive control of the flow regime. In: *Proceedings of COBEM*. [s.n.], 2003. Disponível em: <<https://doi.org/10.1615/IHTC12.3490>>.

BIRD, G. A. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. [S.l.]: Oxford University Press, 1994. ISBN 0-19-856195-4.

CHAN-BRAUN, C. *et al.* Force and torque acting on particles in a transitionally rough open-channel flow. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 684, p. 441–474, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/jfm.2011.311>>.

- CHORIN, A. J. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of Computation*, American Mathematical Society, v. 22, n. 104, p. 745–762, 1968. Disponível em: <<https://doi.org/10.1090/S0025-5718-1968-0242392-2>>.
- CHOU, P. Y. On velocity correlations and the solutions of the equations of turbulent fluctuation. *Quarterly of Applied Mathematics*, Brown University, v. 3, n. 1, p. 38–54, 1945. Disponível em: <<https://www.jstor.org/stable/43633490>>.
- CIAMPINI, D.; SPELT, J.; PAPINI, M. Simulation of interference effects in particle streams following impact with a flat surface: Part i. theory and analysis. *Wear*, Elsevier, v. 254, n. 3-4, p. 237–249, 2003.
- COURANT, R.; FRIEDRICHS, K.; LEWY, H. On the partial difference equations of mathematical physics. *IBM urnal of Research and Development*, IBM, v. 11, n. 2, p. 215–234, 1967. Disponível em: <<https://doi.org/10.1147/rd.112.0215>>.
- CROWE, C.; TROUTT, T.; CHUNG, J. Particle interactions with vortices. In: *Fluid Vortices. Fluid Mechanics and Its Applications*. Springer, Dordrecht, 1995. v. 30, p. 829–861. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-94-011-0249-0_19>.
- CROWE, C. T. *et al. Multiphase flows with droplets and particles*. 2. ed. [S.l.]: CRC press, 2011. ISBN 978-1-4398-4050-4.
- CUNDALL, P. A.; STRACK, O. D. A discrete numerical model for granular assemblies. *G'eotechnique*, v. 29, n. 1, p. 47–65, 1979. Disponível em: <<https://doi.org/10.1680/geot.1979.29.1.47>>.
- DAMASCENO, M. M. R. *Desenvolvimento de uma modelagem para escoamentos reativos em malhas adaptativas do tipo bloco-estruturada*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2018. Disponível em: <<https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/21483>>.
- DAMASCENO, M. M. R.; SANTOS, J. G. F.; VEDOVOTO, J. M. Simulation of turbulent reactive flows using a fdf methodology—advances in particle density control for normalized variables. *Computers & Fluids*, Elsevier, v. 170, p. 128–140, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2018.05.004>>.
- DAMASCENO, M. M. R.; VEDOVOTO, J. M.; Silveira Neto, A. Turbulent inlet conditions modeling using large-eddy simulations. *Computer Modeling in Engineering & Sciences*, v. 104, n. 2, p. 105–132, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.3970/cmcs.2015.104.105>>.
- DENNIS, S.; SINGH, S.; INGHAM, D. The steady flow due to a rotating sphere at low and moderate reynolds numbers. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 101, n. 2, p. 257–279, 1980. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/S0022112080001656>>.
- DU, M. *et al.* A modified dsmc method for simulating gas–particle two-phase impinging streams. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 66, n. 20, p. 4922–4931, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ces.2011.06.061>>.
- DUARTE, B. A. F. *et al.* An extension of oberbeck–boussinesq approximation for thermal convection problems. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, Springer, v. 40, n. 6, p. 317, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s40430-018-1181-x>>.

- DUARTE, C. A. R. *Simulation of a new pipe design for erosion reduction in curves*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2017. Disponível em: <<https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/18329>>.
- ELGHOBASHI, S. On predicting particle-laden turbulent flows. *Applied scientific research*, Springer, v. 52, n. 4, p. 309–329, 1994. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/bf00936835>>.
- FERREIRA, V. M. V. *A hybrid LES / Lagrangian FDF method on adaptive, block-structured mesh*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2015. Disponível em: <<https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/14982>>.
- FOX, R. W.; MCDONALD, A. T.; PRITCHARD, P. J. *Introdução à Mecânica dos fluidos*. 8. ed. [S.l.]: LTC, 2014. Tradução e Revisão Técnica: Ricardo Nicolau Nassar Koury, Luiz Machado. ISBN 978-85-216-2583-4.
- GARCIA, M. *Development and validation of the Euler–Lagrange formulation on a parallel and unstructured solver for large-eddy simulation*. Tese (Doutorado) — Universidade de Toulouse, Toulouse, 2009. Disponível em: <<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00414067>>.
- GIBOU, F. *et al.* A review of level-set methods and some recent applications. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 353, p. 82–109, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.jcp.2017.10.006>>.
- GOOSSENS, W. R. A. Review of the empirical correlations for the drag coefficient of rigid spheres. *Powder Technology*, Elsevier, 2019. Accepted Manuscript. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.04.075>>.
- HANSON, T. D. *A Hash Table for C Structures*. 2013. Disponível em: <<http://troydhanson.github.io/uthash/>>.
- HARLOW, F. H.; NAKAYAMA, P. I. *Transport of turbulence energy decay rate*. New Mexico, 1968. Disponível em: <<https://digital.library.unt.edu/ark:/67531/metadc1026296/>>.
- HART, J. Comparison of turbulence modeling approaches to the simulation of a dimpled sphere. *Procedia Engineering*, Elsevier, v. 147, p. 68–73, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.proeng.2016.06.191>>.
- HINZE, J. O. *Turbulence*. 2. ed. New York: McGraw–Hill, 1975.
- HJELMFELT, A.; MOCKROS, L. Motion of discrete particles in a turbulent fluid. *Applied Scientific Research*, Springer, v. 16, n. 1, p. 149–161, 1966. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/bf00384062>>.
- HOFFMANN, A. *et al.* Advantages and risks in increasing cyclone separator length. *AIChE journal*, Wiley Online Library, v. 47, n. 11, p. 2452–2460, 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/aic.690471109>>.
- HUBER, N.; SOMMERFELD, M. Modelling and numerical calculation of dilute-phase pneumatic conveying in pipe systems. *Powder Technology*, Elsevier, v. 99, n. 1, p. 90–101, 1998. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0032-5910\(98\)00065-5](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(98)00065-5)>.

JONES, W.; LAUNDER, B. E. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *International journal of heat and mass transfer*, Elsevier, v. 15, n. 2, p. 301–314, 1972. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0017-9310\(72\)90076-2](https://doi.org/10.1016/0017-9310(72)90076-2)>.

KAJISHIMA, T. Influence of particle rotation on the interaction between particle clusters and particle-induced turbulence. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Elsevier, v. 25, n. 5, p. 721–728, 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2004.05.007>>.

KAJISHIMA, T.; TAKIGUCHI, S. Interaction between particle clusters and particle-induced turbulence. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Elsevier, v. 23, n. 5, p. 639–646, 2002. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0142-727X\(02\)00159-5](https://doi.org/10.1016/S0142-727X(02)00159-5)>.

KEMPE, T.; FRÖHLICH, J. An improved immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particle laden flows. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 231, n. 9, p. 3663–3684, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.jcp.2012.01.021>>.

KUIPERS, J. *et al.* A numerical model of gas-fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 47, n. 8, p. 1913–1924, 1992. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0009-2509\(92\)80309-Z](https://doi.org/10.1016/0009-2509(92)80309-Z)>.

LAIN, S.; GRILLO, C. Comparison of turbulent particle dispersion models in turbulent shear flows. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, Scielo, v. 24, n. 3, p. 351–363, 2007. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1590/S0104-66322007000300005>>.

LAÍN, S.; SOMMERFELD, M. Characterisation of pneumatic conveying systems using the euler/lagrange approach. *Powder Technology*, Elsevier, v. 235, p. 764–782, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2012.11.029>>.

LAUNDER, B. E.; SHARMA, B. Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. *Letters in heat and mass transfer*, Pergamon, v. 1, n. 2, p. 131–137, 1974. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0094-4548\(74\)90150-7](https://doi.org/10.1016/0094-4548(74)90150-7)>.

LESIEUR, M.; MÉTAIS, O.; COMTE, P. *Large-eddy simulations of turbulence*. Cambridge University Press, 2005. ISBN 9780511755507. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/CBO9780511755507>>.

LIMA, R. S. *Desenvolvimento e implementação de malhas adaptativas bloco-estruturadas para computação paralela em mecânica dos fluidos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2012. Disponível em: <<https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/14727>>.

LUCCI, F. *et al.* Modulation of isotropic turbulence by particles of taylor length-scale size. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 650, p. 5–55, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/S0022112009994022>>.

LUN, C.; SAVAGE, S. The effects of an impact velocity dependent coefficient of restitution on stresses developed by sheared granular materials. *Acta Mechanica*, Springer, v. 63, n. 1-4, p. 15–44, 1986. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01182538>>.

MAGALHÃES, G. M. *Soluções contínuas e discretas de escoamentos cisalhantes livres em regimes laminar e turbulento*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2018. Disponível em: <<https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/22955>>.

- MAITRI, R. V. *et al.* An improved ghost-cell sharp interface immersed boundary method with direct forcing for particle laden flows. *Computers and Fluids*, Elsevier, v. 175, p. 111–128, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2018.08.018>>.
- MALLOUPPAS, G.; WACHEM, B. van. Large eddy simulations of turbulent particle-laden channel flow. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 54, p. 65–75, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2013.02.007>>.
- MEI, R. An approximate expression for the shear lift force on a spherical particle at finite reynolds number. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 18, n. 1, p. 145–147, 1992. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0301-9322\(92\)90012-6](https://doi.org/10.1016/0301-9322(92)90012-6)>.
- MELO, R. R. d. S. *Modelagem e simulação de escoamentos turbulentos com efeitos térmicos, utilizando a metodologia da fronteira imersa e malha adaptativa*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2017. Disponível em: <<https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/18667>>.
- MEZHERICHER, M.; BROSH, T.; LEVY, A. Modeling of particle pneumatic conveying using dem and dpm methods. *Particulate Science and Technology*, Taylor & Francis, v. 29, n. 2, p. 197–208, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/02726351003792914>>.
- MICHAELIDES, E.; CROWE, C. T.; SCHWARZKOPF, J. D. *Multiphase Flow Handbook*. 2. ed. [S.l.]: CRC Press, 2016. ISBN 978-1-4987-0100-6.
- MILOJEVIĆ, D. Lagrangian stochastic-deterministic (LSD) predictions of particle dispersion in turbulence. *Particle & Particle Systems Characterization*, Wiley Online Library, v. 7, n. 1-4, p. 181–190, 1990. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/ppsc.19900070132>>.
- MIRJALILI, S. *et al.* Interface-capturing methods for two-phase flows: An overview and recent developments. *Center for Turbulence Research Annual Research Briefs*, p. 117–135, 2017. Disponível em: <<http://web.stanford.edu/~sjsuresh/mirjalili2017.pdf>>.
- MOLERUS, O. Overview: pneumatic transport of solids. *Powder Technology*, Elsevier, v. 88, n. 3, p. 309–321, 1996. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0032-5910\(96\)03136-1](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(96)03136-1)>.
- NETO, H. R. *et al.* Influence of seabed proximity on the vibration responses of a pipeline accounting for fluid-structure interaction. *Mechanical Systems and Signal Processing*, Elsevier, v. 114, p. 224–238, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ymssp.2018.05.017>>.
- NOROUZI, H. R. *et al.* *Coupled CFD-DEM modeling: Formulation, implementation and application to multiphase flows*. John Wiley & Sons, 2016. ISBN 978-1-119-00513-1. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/9781119005315>>.
- ODAR, F.; HAMILTON, W. S. Forces on a sphere accelerating in a viscous fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 18, n. 2, p. 302–314, 1964. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/S0022112064000210>>.
- OESTERLE, B.; DINH, T. B. Experiments on the lift of a spinning sphere in a range of intermediate reynolds numbers. *Experiments in Fluids*, Springer, v. 25, n. 1, p. 16–22, 1998. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s003480050203>>.

PAWAR, S. *et al.* Lagrangian modelling of dilute granular flow—modified stochastic dsmc versus deterministic dpm. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 105, p. 132–142, 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ces.2013.11.004>>.

PINHEIRO, A. P.; VEDOVOTO, J. M. Evaluation of droplet evaporation models and the incorporation of natural convection effects. *Flow, Turbulence and Combustion*, Springer, p. 1–22, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s10494-018-9973-8>>.

PIVELLO, M. R. *et al.* A fully adaptive front tracking method for the simulation of two phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 58, p. 72–82, 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2013.08.009>>.

POPE, S. B. *Turbulent flows*. Cornell University, New York: Cambridge University Press, 2000. ISBN 9780511840531. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/CBO9780511840531>>.

RIBERA, R. L. *Understanding the dynamics of gas-liquid-solid contact points*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2015. Disponível em: <<http://repositorio.ufu.br/handle/123456789/21285>>.

RUBINOW, S. I.; KELLER, J. B. The transverse force on a spinning sphere moving in a viscous fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 11, n. 3, p. 447–459, 1961. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/S0022112061000640>>.

SAKIZ, M. *Simulation numerique lagrangienne et modelisation eulerienne d'écoulements diphasiques gaz-particules en canal vertical*. Marne-la-vallée: [s.n.], 1999. 316 p. Disponível em: <<http://www.theses.fr/1999ENPC9925>>.

SCHILLER, L.; NAUMANN, A. A drag coefficient correlation. *Z. Ver Deutsch. Ing*, v. 77, p. 318–323, 1933.

SHAO, X.; WU, T.; YU, Z. Fully resolved numerical simulation of particle-laden turbulent flow in a horizontal channel at a low reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 693, p. 319–344, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/jfm.2011.533>>.

SILVA, R. P. *Desenvolvimento, implementação e validação de uma estrutura de dados para transporte euleriano-lagrangiano e aplicações em escoamentos bifásicos usando refinamento adaptativo de malha*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2016.

SNYDER, W. H.; LUMLEY, J. Some measurements of particle velocity autocorrelation functions in a turbulent flow. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 48, n. 1, p. 41–71, 1971. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/S0022112071001460>>.

SOMMERFELD, M. Theoretical and experimental modelling of particulate flows. *Lecture Series 2000-06*, von Karman Institute for Fluid Dynamics, 2000. Disponível em: <<https://pt.scribd.com/document/210268575/2000-Modelling-Particulate-Flows>>.

SOMMERFELD, M. Validation of a stochastic lagrangian modelling approach for inter-particle collisions in homogeneous isotropic turbulence. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 27, n. 10, p. 1829–1858, 2001. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/s0301-9322\(01\)00035-0](https://doi.org/10.1016/s0301-9322(01)00035-0)>.

- SOMMERFELD, M. Numerical methods for dispersed multiphase flows. In: *Particles in Flows. Advances in Mathematical Fluid Mechanics*. Birkhauser, Cham, 2017. p. 327–396. ISBN 978-3-319-60282-0. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-60282-0_6>.
- TSUJI, Y.; TANAKA, T.; ISHIDA, T. Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe. *Powder Technology*, Elsevier, v. 71, n. 3, p. 239–250, 1992. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0032-5910\(92\)88030-L](https://doi.org/10.1016/0032-5910(92)88030-L)>.
- UHLMANN, M. An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 209, n. 2, p. 448–476, 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.03.017>>.
- UHLMANN, M. Interface-resolved direct numerical simulation of vertical particulate channel flow in the turbulent regime. *Physics of Fluids*, AIP, v. 20, n. 5, p. 053305, 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.2912459>>.
- UTZIG, J. *Dinâmica das partículas em leito fluidizado circulante*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2016. Disponível em: <<https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/18235>>.
- VEDOVOTO, J. M.; SERFATY, R.; Silveira Neto, A. Mathematical and Numerical Modeling of Turbulent Flows. *Anais da Academia Brasileira de Ciências*, Scielo, v. 87, p. 1195–1232, 2015. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1590/0001-3765201520140510>>.
- VILLAR, M. M. *Análise numérica detalhada de escoamentos multifásicos bidimensionais*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2007. Disponível em: <<https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/14664>>.
- WACHEM, B. V. *et al.* Comparative analysis of cfd models of dense gas–solid systems. *AIChE Journal*, Wiley Online Library, v. 47, n. 5, p. 1035–1051, 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/aic.690470510>>.
- WANG, D.; RUUTH, S. J. Variable step-size implicit-explicit linear multistep methods for time-dependent partial differential equations. *Journal of Computational Mathematics*, Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing, v. 26, n. 6, p. 838–855, 2008. Disponível em: <<https://www.jstor.org/stable/43693484>>.
- WANG, Z.; FAN, J.; LUO, K. Combined multi-direct forcing and immersed boundary method for simulating flows with moving particles. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 34, n. 3, p. 283–302, 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2007.10.004>>.
- WHITE, F. M. *Mecânica dos fluidos*. 6. ed. [S.l.]: AMGH, 2011. Tradução: Mario Moro Fecchio, Nelson Manzanares Filho; Revisão Técnica: José Carlos Cesar Amorim. ISBN 978-85-8055-009-2.
- WILCOX, D. C. *et al.* *Turbulence modeling for CFD*. 2. ed. La Cañada, CA: DCW Industries, Inc., 2006. ISBN 9780963605108.
- WUNSCH, D.; FEDE, P.; SIMONIN, O. Validation procedure for discrete particle simulation of turbulent two-phase flows with droplet coalescence. *ERCOFTAC*, v. 82, p. 40–48, 2010.

ZHANG, H. *et al.* Effect of collisions on the particle behavior in a turbulent square duct flow. *Powder Technology*, Elsevier, v. 269, p. 320–336, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.powtec.2014.08.070>>.

ZHONG, W. *et al.* Dem simulation of gas–solid flow behaviors in spout-fluid bed. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 61, n. 5, p. 1571–1584, 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ces.2005.09.015>>.