

ANA PAULA MOREIRA DE FREITAS

MODELAGEM NUMÉRICO-COMPUTACIONAL DA  
COALESCÊNCIA DE GOTAS E BOLHAS EM  
ESCOAMENTOS BIFÁSICOS TURBULENTOS



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA  
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

UBERLÂNDIA, MG

2023

ANA PAULA MOREIRA DE FREITAS

MODELAGEM NUMÉRICO-COMPUTACIONAL DA  
COALESCÊNCIA DE GOTAS E BOLHAS EM  
ESCOAMENTOS BIFÁSICOS TURBULENTOS

**Dissertação** apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos para obtenção do título de **Mestre em Engenharia Mecânica**.

**Área de Concentração:** Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos.

**Linha de Pesquisa:** Dinâmica dos Fluidos e Transferência de Calor.

Universidade Federal de Uberlândia (UFU)

Faculdade de Engenharia Mecânica

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

Orientador: João Marcelo Vedovotto

Coorientador: Jonathan Utzig

Uberlândia, MG

2023

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

F866 Freitas, Ana Paula Moreira de, 1993-  
2023      MODELAGEM NUMÉRICO-COMPUTACIONAL DA COALESCÊNCIA DE  
GOTAS E BOLHAS EM ESCOAMENTOS BIFÁSICOS TURBULENTOS  
[recurso eletrônico] / Ana Paula Moreira de Freitas. -  
2023.

Orientador: João Marcelo Vedovotto.

Coorientador: Jonathan Utzig.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de  
Uberlândia, Pós-graduação em Engenharia Mecânica.

Modo de acesso: Internet.

Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.di.2023.170>

Inclui bibliografia.

1. Engenharia mecânica. I. Vedovotto, João Marcelo ,  
1981-, (Orient.). II. Utzig, Jonathan, 1986-,  
(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**

Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica  
 Av. João Naves de Ávila, nº 2121, Bloco 1M, Sala 212 - Bairro Santa Mônica, Uberlândia-MG, CEP 38400-902  
 Telefone: (34) 3239-4282 - www.posmecanicaufu.com.br - secposmec@mecanica.ufu.br


**ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO**

Programa de Pós-Graduação em:	Engenharia Mecânica				
Defesa de:	Dissertação de Mestrado Acadêmico, nº 632, PPGEM				
Data:	29/03/2023	Hora de início:	13:30	Hora de encerramento:	15:55
Matrícula do Discente:	12022EMC002				
Nome do Discente:	Ana Paula Moreira de Freitas				
Título do Trabalho:	Modelagem numérico-computacional da coalescência de gotas e bolhas em escoamentos bifásicos turbulentos				
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 por meio de videoconferência a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, assim composta: Professores Doutores: Aristeu da Silveira Neto - FEMEC/UFU; Daniel Dall'Onder dos Santos - FEMEC/UFU; Carlos Antonio Ribeiro Duarte - UFCat; Jonathan Utzig (coorientador) - FURB; e João Marcelo Vedovotto - FEMEC/UFU, orientador da candidata.

Iniciando os trabalhos o presidente da mesa, Dr. João Marcelo Vedovotto, apresentou a Comissão Examinadora e a candidata, agradeceu a presença do público, e concedeu à Discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação da Discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

A seguir o senhor(a) presidente concedeu a palavra, pela ordem sucessivamente, aos(às) examinadores(as), que passaram a arguir o(a) candidato(a). Ultimada 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 **João Marcelo Vedovotto, Professor(a) do Magistério Superior**, em 29/03/2023, às 15:55, 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 **Daniel Dall'Onder dos Santos, Professor(a) do Magistério Superior**, em 29/03/2023, às 15:56, 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 **Aristeu da Silveira Neto, Professor(a) do Magistério Superior**, em 29/03/2023, às 15:56, 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 **Carlos Antonio Ribeiro Duarte, Usuário Externo**, em 29/03/2023, às 15:56, 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 **Jonathan Utzig, Usuário Externo**, em 03/04/2023, às 11:42, 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](https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **4376238** e o código CRC **5335B2B7**.

# AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente à Deus e aos amigos espirituais, por todas as bênçãos e proteção.

Agradeço ao meu orientador, professor João Marcelo, e meu coorientador, professor Jonathan, por todos ensinamentos, compreensão e paciência durante meu processo de aprendizado. Serei eternamente grata.

Agradeço aos meus pais, Celino e Marlene, por terem perseverado desde que eu era muito jovem. Pelos exemplos de superação, otimismo e honestidade.

Agradeço à minha irmã Michelet, pela amizade, companheirismo e por ter presenteado a família com um ser de tanta luz, meu sobrinho Gustavo, que sem nem saber falar, já me traz tanto aconchego e paz.

Agradeço ao meu noivo e amor de vidas, Arthur, por todo apoio, compreensão e suporte nos momentos de angústia.

Agradeço aos meus amigos que mesmo de longe, me apoiam e torcem por mim.

Agradeço os colegas do MFLab, especialmente, ao Paulo, Ricardo, Pedro e Valdson por estarem sempre dispostos a me ajudar. Ao Leon, por tantas conversas recompensadoras, conselhos e compartilhamento de ideias.

Agradeço à Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia por ter me acolhido, e à CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) por ter financiado o desenvolvimento desse trabalho.

Agradeço à todos que de uma forma ou de outra contribuíram ao longo da minha vida estudantil.



*“Embora ninguém possa voltar atrás e fazer um novo começo, qualquer um pode começar agora e fazer um novo fim”.*

*Chico Xavier*



# RESUMO

Os escoamentos gás-líquido e líquido-bolha são encontrados em diversas aplicações industriais e acadêmicas, como em *sprays*, reações químicas e flotação. A modelagem dos fenômenos mais relevantes nesses escoamentos é fundamental para compreender o comportamento das diferentes fases e como isso pode influenciar os processos aos quais esses escoamentos estão submetidos. Um fenômeno bastante presente nesses escoamentos é chamado de coalescência que, resumidamente, consiste na aglomeração de bolha-bolha ou gota-gota, formando bolhas ou gotas maiores. Dessa forma, o objetivo da presente dissertação consiste na implementação e validação de um modelo de coalescência no código computacional MFSim. Para verificar e validar este modelo, foram utilizados dois estudos de caso: um que consiste em duas nuvens de gotas que colidem uma com a outra e o outro que se trata de uma coluna de bolhas em regime homogêneo. O primeiro caso permite verificar o comportamento do algoritmo para essa simulação, verificando diversos fatores de coalescência e a saída destes resultados. Já a coluna de bolhas permite validar a quantidade de movimento linear, comparando com dados presentes na literatura, além de avaliar a coalescência neste tipo de escoamento. Os resultados encontrados para todos os dois casos foram satisfatórios, e com isso, conclui-se que utilizando o MFSim é possível simular escoamentos gás-líquido e líquido-bolha, nos quais o fenômeno da coalescência é relevante.

**Palavras-chave:** Coalescência, Escoamento Bifásico, Coluna de Bolhas, DPM.



# ABSTRACT

Gas-liquid and liquid-bubble flows are found in many industrial and academic applications, such as sprays, chemical reactions, and flotation. The modeling of the most relevant phenomena in these flows is essential to understand the behavior of the different phases and how this can influence the processes to which these flows are subjected. A phenomenon quite present in these flows is called coalescence, which, in short, consists of the agglomeration of bubble-bubble or drop-drop, forming bubbles or larger drops. Thus, the objective of this dissertation is the implementation and validation of a coalescence model in the MFSim computational code. To verify and validate this model, two case studies were used: one that consists of two clouds of droplets that collide with each other and the other that is a column of bubbles in a homogeneous regime. The first case allows verifying the behavior of the algorithm for this simulation, verifying several coalescence factors and the output of these results. The bubble column, on the other hand, allows validating the amount of linear movement, comparing with data present in the literature, in addition to evaluating the coalescence in this type of flow. The results found for all two cases were satisfactory, and with that, it is concluded that using MFSim it is possible to simulate gas-liquid and liquid-bubble flows, in which the phenomenon of coalescence is relevant.

**Keywords:** Coalescence, Two-Phase Flow, Bubble Column, DPM.



# LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Representação dos regimes de colisão: (a) rebatimento, (b) separação reflexiva, (c) separação por estiramento, (d) quebra e (e) coalescência. . . . .	25
Figura 2 – Quantidade de publicações desde 1999 sobre coalescência em trabalhos das áreas da engenharia mecânica e química. . . . .	26
Figura 3 – Ilustração de volumes elementares cada vez menores em torno de um ponto. . . . .	27
Figura 4 – Massa específica em função do volume elementar. . . . .	28
Figura 5 – Volume de controle contendo fluido e partículas. . . . .	30
Figura 6 – Regimes de um escoamento de fase dispersa em termos do transporte das partículas. . . . .	31
Figura 7 – Diagrama esquemático dos tipos de acoplamentos entre a fases contínua e dispersa. . . . .	32
Figura 8 – Ilustração das estruturas turbulentas resolvidas em cada um dos métodos de modelagem da turbulência. . . . .	33
Figura 9 – Ilustração dos métodos VOF, LSM e partícula discreta. . . . .	34
Figura 10 – Classificação dos métodos de rastreamento de partículas lagrangianas e suas principais características. . . . .	37
Figura 11 – Ilustração das forças peso e empuxo atuando em uma partícula imersa em um fluido. . . . .	39
Figura 12 – Ilustração da força de arrasto atuando em uma partícula imersa em um fluido. . . . .	39
Figura 13 – Ilustração da força de sustentação devido ao cisalhamento atuando em uma partícula imersa em um fluido. . . . .	41
Figura 14 – Ilustração da força de sustentação devido à rotação atuando em uma partícula imersa em um fluido. . . . .	42
Figura 15 – Ilustração de duas partículas com diâmetros $d_1$ e $d_2$ próximas de uma colisão. . . . .	44
Figura 16 – Representação dos regimes de colisão em função do numero de Weber e de um parâmetro de impacto. . . . .	45
Figura 17 – Representação do regime de rebatimento. . . . .	46
Figura 18 – Representação do regime de separação reflexiva. . . . .	46
Figura 19 – Representação do regime de separação por estiramento. . . . .	47
Figura 20 – Representação do regime de quebra. . . . .	47
Figura 21 – Representação do regime de coalescência. . . . .	48
Figura 22 – Representação esquemática do instante em que acontece o contato entre duas partículas. . . . .	61
Figura 23 – Representação esquemática do instante em que acontece o contato entre a partícula e a parede. . . . .	62
Figura 24 – Fluxograma do algoritmo de coalescência no MFSim. . . . .	63

Figura 25 – Simulação nos instantes de tempo: (a) $t = 0 s$ , (b) $t = 1.0 s$ , (c) $t = 2,0 s$ e (d) $t = 9,82 s$ . . . . .	66
Figura 26 – Coluna de bolhas retangular com superfície livre há $0,45 m$ e injeção de bolhas no plano inferior. . . . .	68
Figura 27 – Malha computacional nos instantes de tempo: (a) $t = 0 s$ , (b) $t = 1.0 s$ , (c) $t = 1.4 s$ , (d) $t = 1.75 s$ e (e) $t = 50 s$ . . . . .	70
Figura 28 – Simulação considerando bolhas como fase discreta e líquido ( $\phi = 1$ ) e gás ( $\phi = 0$ ) como fase contínua. Na interface $0 < \phi < 1$ . . . . .	70
Figura 29 – Simulação considerando bolhas como fase discreta e líquido ( $\rho_l = 1000 kg/m^3$ ) e gás ( $\rho_g = 1,2 kg/m^3$ ) como fase contínua. . . . .	71
Figura 30 – Evolução da coalescência das bolhas nos instantes de tempo: (a) $t = 1,4 s$ , (b) $t = 10 s$ , (c) $t = 50 s$ e (d) $t = 100 s$ . . . . .	71
Figura 31 – Histórico temporal da velocidade axial do líquido no centro da coluna, na altura de $z = 0,25, [m]$ . . . . .	72
Figura 32 – Flutuação da velocidade do líquido na direção $x$ em $z = 0,25 m$ : dados experimentais, acoplamento de duas e quatro vias sem coalescência e acoplamento de quatro vias com modelo de coalescência. . . . .	73
Figura 33 – Energia cinética turbulenta média do líquido em $z = 0,25 m$ : dados experimentais, acoplamento de duas e quatro vias sem coalescência e acoplamento de quatro vias com modelo de coalescência. . . . .	74
Figura 34 – Média da velocidade do líquido na direção $z$ em $z = 0,25 m$ : dados experimentais, acoplamento de duas e quatro vias sem coalescência e acoplamento de quatro vias com modelo de coalescência. . . . .	75
Figura 35 – Flutuação da velocidade do líquido na direção $z$ em $z = 0,25 m$ : dados experimentais, acoplamento de duas e quatro vias sem coalescência e acoplamento de quatro vias com modelo de coalescência. . . . .	75

# LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Algumas aplicações industriais envolvendo escoamentos bifásicos dispersos.	29
Tabela 2 – Parâmetros para inicialização de simulação do estudo de caso das nuvens de gotas. . . . .	65
Tabela 3 – Influência da rotação nas gotas com $C_C = 0,5$ , $e = 0,0$ , $\vec{V}_1 = (0,1; 0; 0) m/s$ , $\vec{V}_2 = (-0,1; 0; 0) m/s$ e rotação nas duas nuvens de gotas. . . . .	67
Tabela 4 – Influência da rotação nas gotas com $C_C = 0,5$ , $e = 0,0$ , $\vec{V}_1 = (0,1; 0; 0) m/s$ , $\vec{V}_2 = (-0,1; 0; 0) m/s$ e rotação somente na nuvem de gotas 2. . . . .	67
Tabela 5 – Parâmetros para inicialização de simulação do estudo de caso da coluna de bolhas. . . . .	69



# LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
DEM	<i>Discrete Element Method</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
DPM	<i>Discrete Particle Method</i>
IBM	<i>Immersed Boundary Method</i>
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
LPC	<i>Lagrangian Parcel Concept</i>
LSM	<i>Level-Set Method</i>
PIV	<i>Particle Image Velocimetry</i>
RANS	<i>Reynolds-Averaged Navier-Stokes</i>
URANS	<i>Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes</i>
V.C	<i>Volume de Controle</i>
VOF	<i>Volume of Fluid</i>



# LISTA DE SÍMBOLOS

$\alpha_c$	Fração volumétrica da fase contínua
$\alpha_d$	Fração volumétrica da fase dispersa
$A_p$	Área da partícula [ $m^2$ ]
$B$	Parâmetro de impacto
$C_a$	Coefficiente de massa adicionada
$C_B$	Coefficiente de Basset
$C_C$	Coefficiente de coalescência
$C_d$	Coefficiente de arrasto
$C_{lr}$	Coefficiente de sustentação devido à rotação
$C_{ls}$	Coefficiente de Saffman
$C_r$	Coefficiente de rotação
$D_p$	Diâmetro da partícula [ $m$ ]
$d_1$	Diâmetro da menor gota (ou bolha) [ $m$ ]
$d_2$	Diâmetro da menor gota (ou bolha) [ $m$ ]
$d_{p,1}$	Diâmetro da bolha ou gota 1 [ $m$ ]
$d_{p,2}$	Diâmetro da bolha ou gota 2 [ $m$ ]
$d_{p,1}^*$	Novo diâmetro da bolha ou gota 1 [ $m$ ]
$E_{rot}$	Energia de rotação [ $J$ ]
$E_{surf}$	Energia extra de superfície [ $J$ ]
$\epsilon$	Potência específica de transformação viscosa [ $W/m^3$ ]
$\epsilon_1$	Fração Volumétrica da fase 1
$\epsilon_2$	Fração Volumétrica da fase 2
$\epsilon_f$	Fração Volumétrica da mistura

$F_a$	Força de massa adicionada [ $N$ ]
$F_B$	Força de Basset [ $N$ ]
$F_d$	Força de arrasto [ $N$ ]
$F_{lr}$	Força de sustentação devido à rotação [ $N$ ]
$F_{ls}$	Força de Saffman [ $N$ ]
$F_{pt}$	Força de pressão [ $N$ ]
$h_0$	Espessura inicial do filme [ $m$ ]
$h_f$	Espessura final do filme [ $m$ ]
$\phi$	Função indicadora
$I_p$	Momento de inercia da partícula [ $kg \cdot m^2$ ]
$m_p$	Massa da partícula [ $kg$ ]
$\dot{m}_f$	Vazão mássica de fluido [ $kg/s$ ]
$\dot{m}_p$	Vazão mássica de partículas [ $kg/s$ ]
$\mu_c$	Viscosidade da fase contínua [ $kg/ms$ ]
$\mu_1$	Viscosidade da fase 1 [ $kg/ms$ ]
$\mu_2$	Viscosidade da fase 2 [ $kg/ms$ ]
$n_p$	Concentração de partículas [ $unidade/m^3$ ]
$\nu$	Carga mássica
$\rho$	Massa específica do fluido [ $kg/m^3$ ]
$\rho_p$	Massa específica das partículas [ $kg/m^3$ ]
$\rho_1$	Massa específica da fase 1 [ $kg/m^3$ ]
$\rho_2$	Massa específica da fase 2 [ $kg/m^3$ ]
$r_{12}$	Raio equivalente da bolha ou gota coalescida [ $m$ ]
$r_{p,1}$	Raio da bolha ou gota 1 [ $m$ ]
$r_{p,2}$	Raio da bolha ou gota 2 [ $m$ ]
$Re_p$	Número de Reynolds da partícula

$Re_r$	Número de Reynolds de rotação
$Re_s$	Número de Reynolds do escoamento cisalhante
$St$	Número de Stokes
$T$	Torque [ $N \cdot m$ ]
$\vec{u}$	Velocidade linear do fluido [ $m/s$ ]
$\vec{u}_p$	Velocidade linear da partícula [ $m/s$ ]
$U_f$	Velocidade média do fluido [ $m/s$ ]
$U_p$	Velocidade média das partículas [ $m/s$ ]
$v_{p,rel}$	Velocidade relativa das partículas [ $m/s$ ]
$\forall$	Volume de fluido [ $m^3$ ]
$\forall_d$	Volume da fase dispersa [ $m^3$ ]
$\forall_m$	Volume da mistura de fluido e partículas [ $m^3$ ]
$\sigma$	Tensão interfacial [ $N/m$ ]
$\forall_p$	Volume da partícula [ $m^3$ ]
$t_{contato}$	Tempo de contato entre bolhas ou gotas [ $s$ ]
$t_{drenagem}$	Tempo de drenagem do filme entre bolhas ou gotas [ $s$ ]
$\tau_f$	Tempo característico do escoamento [ $s$ ]
$\tau_c$	Tempo médio entre colisões de partículas [ $s$ ]
$\tau_p$	Tempo de resposta da partícula [ $s$ ]
$\vec{\omega}_p$	Velocidade angular da partícula [ $rad/s$ ]
$We$	Número de Weber
$\vec{x}_p$	Posição da partícula [ $m$ ]



# SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO . . . . .	23
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA . . . . .	27
2.1	HIPÓTESE DO CONTÍNUO . . . . .	27
2.2	ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS . . . . .	28
2.2.1	FRAÇÃO VOLUMÉTRICA, CONCENTRAÇÃO E CARGA MÁSSICA . . . . .	29
2.2.2	NÚMERO DE WEBER . . . . .	30
2.2.3	REGIMES DO ESCOAMENTO BIFÁSICO DISPERSO . . . . .	31
2.2.4	TIPOS DE ACOPLAMENTO . . . . .	32
2.3	ABORDAGENS MATEMÁTICAS PARA ESCOAMENTOS TURBULEN- TOS . . . . .	32
2.4	ABORDAGENS MATEMÁTICAS PARA ESCOAMENTOS BIFÁSICOS DISPERSOS . . . . .	33
2.4.1	ABORDAGEM EULER-EULER . . . . .	33
2.4.1.1	MÉTODO VOLUME DE FLUIDO . . . . .	35
2.4.2	ABORDAGEM EULER-LAGRANGE . . . . .	36
2.5	TRANSPORTE DE PARTÍCULAS LAGRANGIANAS . . . . .	37
2.5.1	FORÇAS PESO E EMPUXO . . . . .	38
2.5.2	FORÇA DE ARRASTO . . . . .	38
2.5.3	FORÇA DE SAFFMAN . . . . .	40
2.5.4	EFEITO MAGNUS . . . . .	41
2.5.5	GRADIENTE DE PRESSÃO . . . . .	42
2.5.6	MASSA ADICIONADA . . . . .	43
2.5.7	FORÇA DE BASSET . . . . .	43
2.5.8	TORQUE . . . . .	43
2.6	REGIMES DE COLISÃO . . . . .	44
2.6.1	REBATIMENTO . . . . .	45
2.6.2	SEPARAÇÃO REFLEXIVA . . . . .	45
2.6.3	SEPARAÇÃO POR ESTIRAMENTO . . . . .	46
2.6.4	QUEBRA . . . . .	47
2.6.5	COALESCÊNCIA . . . . .	47
2.6.5.1	UMA REVISÃO DA APLICAÇÃO DA COALESCÊNCIA . . . . .	48
2.6.5.2	MODELO DE O'ROURKE . . . . .	50
2.6.5.3	MODELO BASEADO NO TEMPO DE DRENAGEM DO FILME . . . . .	51
2.6.5.4	MODELO DENSO . . . . .	53

2.7	FECHAMENTO DO CAPÍTULO . . . . .	54
3	METODOLOGIA . . . . .	55
3.1	MODELAGEM MATEMÁTICA . . . . .	55
3.1.1	MODELAGEM DA FASE CONTÍNUA . . . . .	55
3.1.1.1	FORMULAÇÃO PARA A FLUIDODINÂMICA . . . . .	55
3.1.1.2	MODELO DE FECHAMENTO DA TURBULÊNCIA . . . . .	57
3.1.2	MODELAGEM DA FASE DISPERSA . . . . .	58
3.1.3	TERMO DE ACOPLAMENTO DAS FASES . . . . .	59
3.1.4	COLISÃO PARTÍCULA-PARTÍCULA . . . . .	59
3.1.5	COLISÃO PARTÍCULA-PAREDE . . . . .	61
3.2	MODELAGEM NUMÉRICO-COMPUTACIONAL . . . . .	62
3.2.1	ALGORITMO DA COALESCÊNCIA . . . . .	62
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES . . . . .	65
4.1	NUVEM DE GOTAS . . . . .	65
4.2	COLUNA DE BOLHAS . . . . .	67
5	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS . . . . .	77
	REFERÊNCIAS . . . . .	79

# 1 INTRODUÇÃO

Os escoamentos estão presentes no cotidiano das pessoas, desde a água escoando em uma torneira até o ar em torno de uma aeronave. Compreender o comportamento dos escoamentos traz possibilidades de aplicações e previsões desses comportamentos. E a área responsável por esse estudo é chamada de **Mecânica dos Fluidos**, que é uma das áreas presentes na Engenharia Mecânica.

O estudo da mecânica dos fluidos remonta aos dias da Grécia antiga, quando Arquimedes investigou a estática dos fluidos e a flutuabilidade e formulou o princípio de Arquimedes, que foi publicado em sua obra por volta de 250 aC e traduzida milhares de anos depois para o título *On Floating Bodies*. Leonardo da Vinci, em torno de 1500, trouxe um rápido avanço na mecânica dos fluidos com observações e experimentos sobre os movimento dos fluidos. Em seus cadernos, foi encontrado um vasto número de invenções, incluindo o desenho de uma bomba hidráulica e algumas máquinas voadoras. Em seguida, teve-se a invenção do barômetro por Evangelista Torricelli em 1643, a lei de Pascal para hidrostática postulada em 1653 por Blaise Pascal, o estudo da viscosidade por Isaac Newton publicado em 1687 no livro *Principia* e, por fim em 1739, os estudos de Daniel Bernoulli no ramo da dinâmica dos fluidos o qual firmou o termo "hidrodinâmica". Estes foram exemplos importantes para o estabelecimento dos ramos da mecânica dos fluidos, sendo elas: a *hidrostática* que estuda a estática dos fluidos, ou seja, o estudo dos fluidos em repouso e, a *hidrodinâmica* que estuda a dinâmica dos fluidos, ou seja, o movimento dos fluidos.

Atualmente diversos pesquisadores vêm desenvolvendo trabalhos na área e muitos avanços em turbulência (KELIN; GERMANO, 2020; RAJAPPAN; MCKINLEY, 2020; JIANG et al., 2020; ZHANG; AGARWAL, 2020), escoamentos lentos (*creeping flows*) (KOLESKI; BICKEL, 2020), escoamentos multifásicos e meios porosos (CHIAPOLINO et al., 2020; NGUYEN; PAPAVALASSILOU, 2020), escoamentos potenciais (BADDOO, 2020), fluidos não newtonianos (DOSTALÍK et al., 2020), escoamentos envolvendo misturas (COOKSON, 2020), interação fluido-estrutura (SILVA-LEON; CIONCOLINI, 2020) e métodos numéricos voltados para soluções de escoamentos diversos (WEIJERMARS; KHANAL; ZUO, 2020; MIMEAU; MORTAZAVI, 2020; SU et al., 2020) foram encontrados.

Os escoamentos multifásicos são compostos por mais de uma fase, sendo elas: gás, líquido e sólido. No dia-a-dia são estes escoamentos os mais presentes e para representar um escoamento qualquer, muitas vezes será necessário considerar as diferentes fases presentes nele. Um exemplo é a lama composta por água e sedimentos, o ar atmosférico composto por ar e particulados de poluentes oriundos da queima de combustível pelos veículos, queimadas da biomassa de florestas, resíduos de chaminés dos complexos industriais, poeira, entre outros.

Então, os estudos que envolvem os escoamentos multifásicos podem apresentar desafios na busca em representá-los, principalmente se tratando de experimentos.

Do ponto de vista científico, a Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD, do inglês: *Computational Fluid Dynamics*) revela-se como ferramenta essencial à compreensão e análise de vários fenômenos cuja investigação experimental é difícil ou mesmo impossível em alguns casos. Por isso, o CFD tem tido um papel fundamental no desenvolvimento de produtos mais eficientes, tais como aeronaves, automóveis e trens de alta velocidade. Além de permitir a otimização do projeto, há também a vantagem de reduzir consideravelmente o custo e o ciclo de desenvolvimento, já que muitos experimentos dispendiosos e complexos não precisam ser realizados.

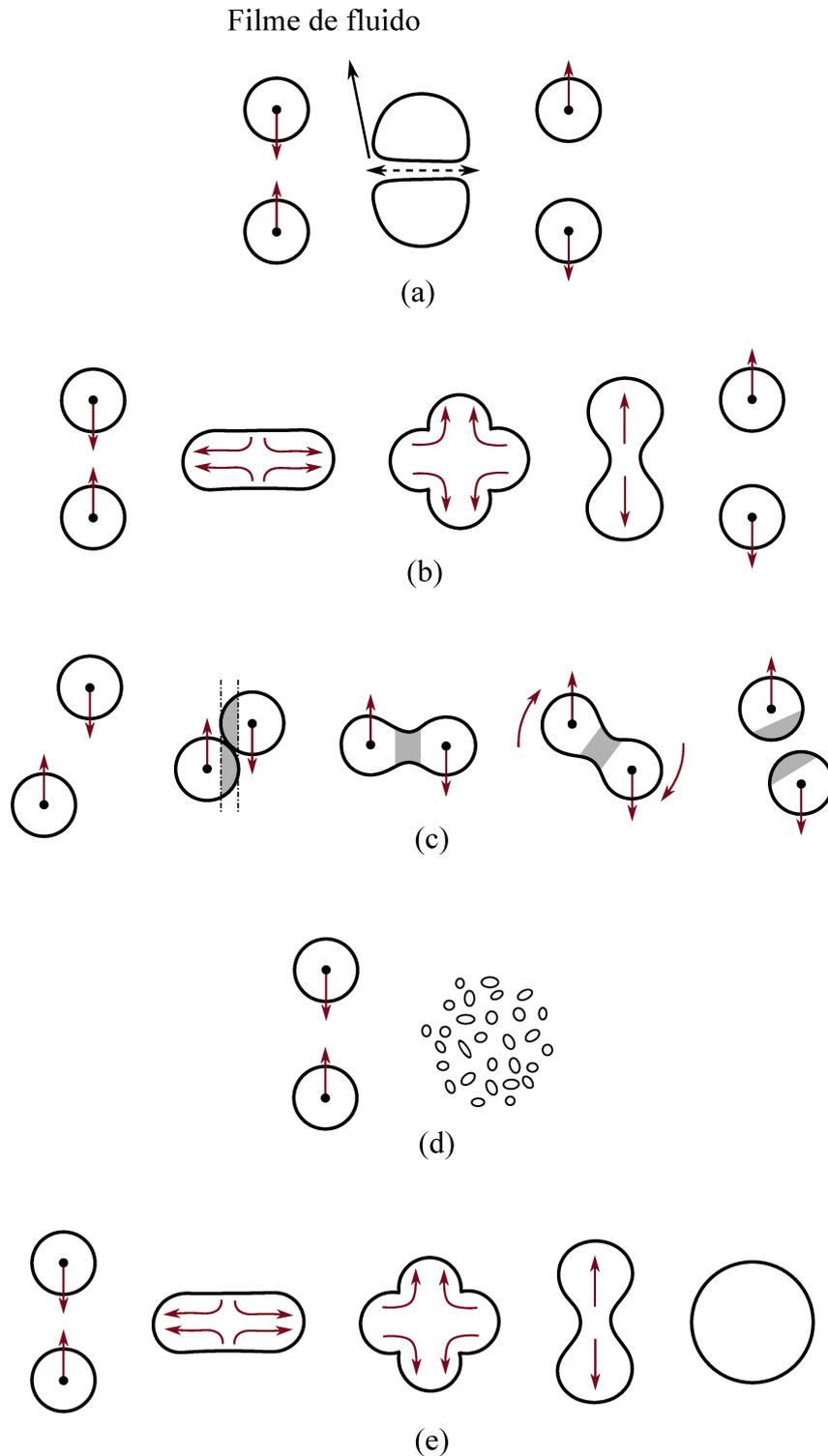
A utilização do CFD permite, então, o estudo exploratório, investigativo e preventivo de diversos fenômenos conhecidos, tais como: camadas de misturas oriundas da formação de uma camada cisalhante entre escoamentos de fluidos com velocidades diferentes, jatos formados a partir da injeção de fluido em um bocal, esteiras formadas a partir de campos inflexionais de velocidade em déficit em relação ao meio que envolve a esteira, camada limite encontrada na interação entre um corpo e um fluido promovendo forças fluidodinâmicas que são propagadas no interior do fluido pelos processos de transporte difusivo e advectivo, escoamentos envolvendo partículas quaisquer sujeitas à colisões, para citar alguns (SILVEIRA-NETO, 2020).

O último exemplo citado envolve uma vasta área de estudo devido à sua aplicabilidade na academia e nas indústrias química, bioquímica, petrolífera e metalúrgica. Alguns exemplos são: transporte pneumático de partículas, recuperação de petróleo bruto, movimento de poluentes na atmosfera, injeção de combustível em motores e escoamento de partículas em ciclones. Além dessas aplicações, diferentes tipos de reações químicas, oxidação, cloração, alquilação, polimerização, esterificação e hidrogenação podem ser estudadas utilizando o CFD e abordagens direcionadas (LEONARD et al., 2015).

A presença de partículas em um escoamento pode modificá-lo devido às interações interpartículas e entre as partículas e o fluido. Analisando a primeira e assumindo as partículas sólidas, alguns fenômenos podem ocorrer advindos das colisões inelásticas, elásticas e parcialmente elásticas. Por outro lado, se as partículas são formadas por gás ou líquido, as colisões entre elas podem gerar: rebatimento (*bouncing*), separação reflexiva (*reflexive separation*), separação por estiramento (*stretching separation*), coalescência (*coalescence*) e quebra (*shattering*). A proposta deste trabalho é direcionada ao estudo da coalescência. Na Fig. 1 são exemplificados os regimes de rebatimento, coalescência, separação reflexiva e separação por estiramento.

Diante disso, o objetivo deste trabalho consiste na implementação de um modelo adequado para a solução de problemas que envolvem o fenômeno da coalescência. A implementação deve ser realizada no pacote computacional MFSim. O MFSim surgiu com o trabalho de Villar (2007) sobre escoamentos multifásicos, e vem sendo desenvolvido no Laboratório de Mecânica dos Fluidos sediado na Universidade Federal de Uberlândia, em parceria com a PETRO-

Figura 1 – Representação dos regimes de colisão: (a) rebatimento, (b) separação reflexiva, (c) separação por estiramento, (d) quebra e (e) coalescência.

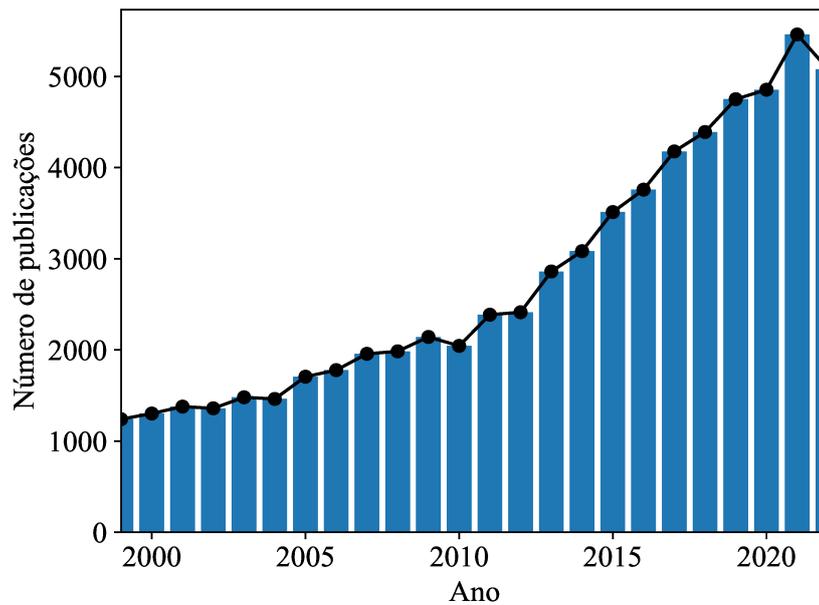


Fonte: Adaptado de (SILVEIRA-NETO et al., 2021).

BRAS. O código está escrito, predominantemente, na linguagem Fortran, contendo algumas partes escritas em linguagem C e C++. Após esta implementação, deve-se realizar simulações que mostrem o seu bom funcionamento.

De acordo com uma busca no *science direct* por coalescência em trabalhos envolvendo engenharia mecânica e química, este tema têm ganhado visibilidade na comunidade científica. A Fig. 2 apresenta a quantidade de trabalhos que envolvem a temática ao longo dos anos.

Figura 2 – Quantidade de publicações desde 1999 sobre coalescência em trabalhos das áreas da engenharia mecânica e química.



Fonte: Autoria própria.

A presente dissertação encontra-se organizada em cinco capítulos, incluindo este que consiste em uma breve introdução ao tema. No Capítulo 2, encontra-se a revisão bibliográfica necessária para compreensão do tema, abordando os escoamentos bifásicos. No Capítulo 3, são apresentadas as equações para solução das fases contínua e dispersa, além da apresentação do algoritmo implementado para resolver o fenômeno de coalescência no MFSim. No Capítulo 4, a verificação e validação dos resultados são apresentados e discutidos. Por fim, no Capítulo 5 é realizado o fechamento do trabalho com as conclusões pertinentes.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Nesse capítulo são apresentados os conceitos que servem de base para o desenvolvimento do presente trabalho. Inicialmente será brevemente abordada a hipótese do contínuo para que, em seguida, os conceitos de escoamentos multifásicos sejam definidos. Então, apresenta-se uma visão geral sobre as abordagens numéricas para escoamentos turbulentos e escoamentos bifásicos dispersos, empregados no pacote MFSim. Em seguida, as forças presentes no transporte de partículas lagrangianas são discorridas e, por fim, os modelos numéricos para a coalescência são brevemente introduzidos.

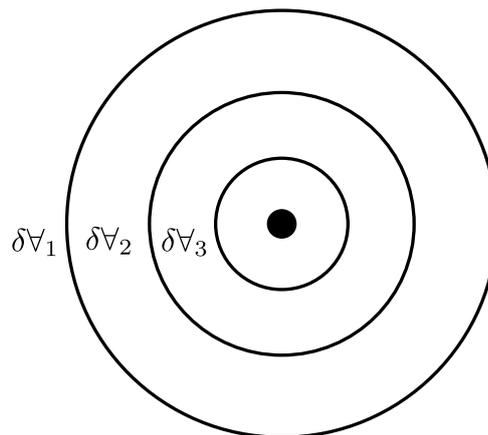
### 2.1 HIPÓTESE DO CONTÍNUO

Os fluidos, como toda matéria, consistem em moléculas separadas por um espaço supostamente vazio. No entanto, a determinação matemática das propriedades do fluido, como a massa específica, assume uma aproximação suave do limite, à medida que o volume de amostragem se torna menor (KATOPODES, 2019). Ou seja,

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

em que,  $\delta m$  é a massa molecular e  $\delta V$  é o volume elementar que a contém.

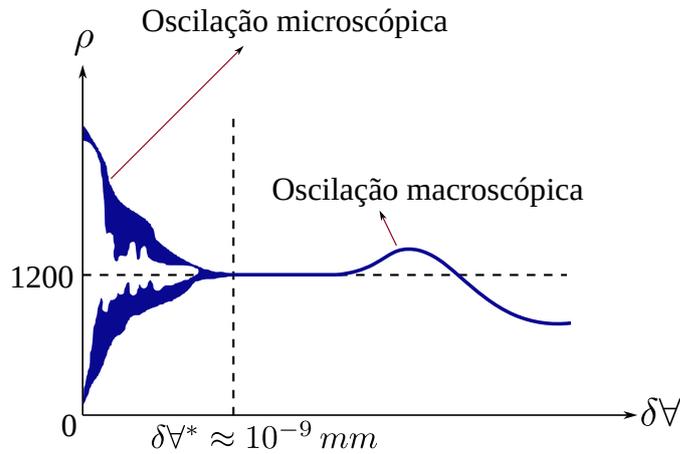
Figura 3 – Ilustração de volumes elementares cada vez menores em torno de um ponto.



Fonte: Autoria própria.

Supondo a medição da massa específica em um ponto do espaço, conforme volumes cada vez menores ao redor do ponto na Fig. 3, ao diminuir os volumes indefinidamente, acontecerá que o movimento aleatório das moléculas começará a influir no resultado da medida. Ao plotar os resultados da medida de massa específica como função dos volumes elementares, obtém-se o gráfico da Fig. 4.

Figura 4 – Massa específica em função do volume elementar.



Fonte: Adaptado de White (2011).

Tratar o fluido como meio contínuo é uma abordagem bastante comum e válida, exceto em casos específicos. A maior parte dos problemas de engenharia trabalham com dimensões físicas muito maiores do que o espaçamento médio molecular. Dessa forma, para aplicar a hipótese do contínuo é necessário que o comprimento característico do sistema (como o seu diâmetro) seja muito maior do que o percurso livre médio das moléculas. Logo, as propriedades do fluido devem variar continuamente em seu interior. Uma exceção da aplicabilidade da hipótese do contínuo pode ser em situações com pressões extremamente baixas, como em altitudes elevadas, então o percurso livre médio torna-se muito grande. Nesses casos, deve-se utilizar a **teoria do escoamento de gases rarefeitos** (ÇENGEL; CIMBALA, 2015). Neste trabalho são utilizadas situações em que a hipótese do contínuo é aplicada. Após ter a compreensão sobre a hipótese do contínuo, é possível definir os escoamentos multifásicos.

## 2.2 ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS

Os escoamentos multifásicos são compostos por duas ou mais fases. A presença de apenas duas fases estabelece um escoamento bifásico. Quando as duas fases são formadas por fluidos diferentes, ambas são denominadas meios contínuos. Por outro lado, quando uma delas é um meio contínuo e a outra se encontra espalhada nesse meio em uma dispersão, o escoamento é formado por uma fase contínua e outra dispersa.

A fase dispersa é aquela composta de agregados de partículas em uma dispersão, podendo ser partículas sólidas, gotas ou bolhas. Há inúmeras aplicações industriais de escoamentos bifásicos dispersos, de acordo com sua tipologia, como, gás-sólido, líquido-sólido, gás-gotícula, líquido-gotícula e líquido-bolha, conforme exemplificado na Tab. 1.

Em escoamentos bifásicos dispersos, o transporte das partículas pela fase contínua é de grande relevância. Dependendo da concentração de partículas, este transporte será afetado por interações fluidodinâmicas, colisões e outros fenômenos como, por exemplo, coalescência de

Tabela 1 – Algumas aplicações industriais envolvendo escoamentos bifásicos dispersos.

Fase contínua-dispersa	Aplicações
Gás-sólido	Transporte pneumático, separação de partículas, 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	Coluna de bolhas, aeração de efluentes, flotação, cavitação

Fonte: Adaptado de [Sommerfeld \(2017\)](#).

gotículas ou bolhas e aglomeração de partículas sólidas ([SOMMERFELD, 2017](#)). Dessa forma, o comportamento da fase dispersa depende de alguns fatores, como por exemplo: a concentração, o tamanho e a densidade das partículas. Além disso, o comportamento da fase contínua influencia o comportamento da fase dispersa. Por isso, é muito importante caracterizar os escoamentos e é preciso definir parâmetros e propriedades importantes para as diferentes fases. Ao longo desta seção, objetiva-se levantar estes parâmetros e propriedades. Neste trabalho, o termo "partículas" referenciará partículas sólidas, gotas, gotículas e bolhas.

### 2.2.1 FRAÇÃO VOLUMÉTRICA, CONCENTRAÇÃO E CARGA MÁSSICA

Supõe-se um volume de fluido contendo partículas espalhadas, conforme esquema na Fig. 5. A fração volumétrica da fase dispersa pode ser obtida como:

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

em que  $V_d$  e  $V_m$  são os volumes da fase dispersa e da mistura contendo fluido e partículas, respectivamente.  $N_p$  representa o número de partículas no interior de  $V_m$  e  $V_{p_n}$  é o volume de cada partícula  $n$  contida no volume de fluido.

De forma análoga, a fração volumétrica da fase contínua pode ser obtida a partir da equação:

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

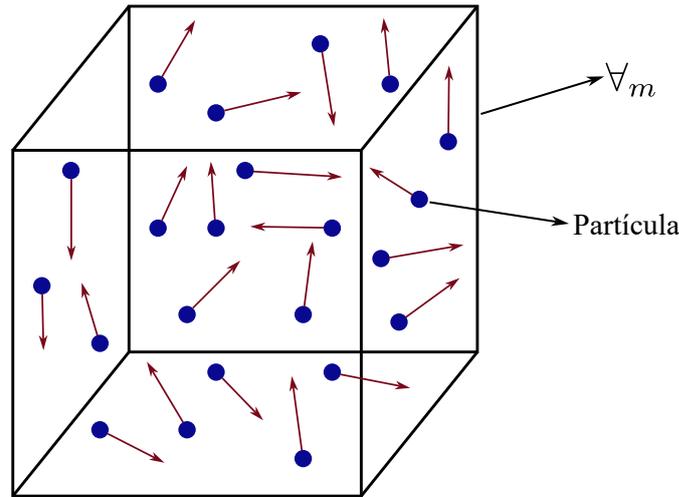
em que,  $V_c$  é o volume da fase contínua. Por definição:

$$\alpha_d + \alpha_c = 1 \quad (2.4)$$

A concentração de partículas pode ser obtida a partir da razão entre a quantidade de uma substância (massa, volume ou número de entidades da substância) e o volume da mistura. Ou seja:

$$n_p = \frac{N_p}{V_m} \quad (2.5)$$

Figura 5 – Volume de controle contendo fluido e partículas.



Fonte: Autoria própria.

A carga mássica é outro parâmetro importante na caracterização dos escoamentos e pode ser obtido pela razão entre as vazões mássicas de partículas  $\dot{m}_p$  e de fluido  $\dot{m}_f$ . Então:

$$\eta = \frac{\dot{m}_p}{\dot{m}_f} = \frac{\alpha_d \rho_p U_p}{(1 - \alpha_d) \rho U_f}, \quad (2.6)$$

em que,  $\rho_p$  e  $\rho$  são as massas específicas das partículas e do fluido, respectivamente.  $U_f$  e  $U_p$  são as velocidades médias do fluido e das partículas, respectivamente (SOMMERFELD, 2017).

### 2.2.2 NÚMERO DE WEBER

O número de Weber representa, fisicamente, a razão entre os efeitos inerciais e os efeitos causados pela tensão interfacial que atua nas gotas (ou bolhas), se tornando assim um excelente parâmetro para buscar prever o resultado de um processo de colisão. O número de Weber pode ser calculado através da seguinte expressão:

$$We = \frac{\rho_c d_2 v_{rel}^2}{\sigma}, \quad (2.7)$$

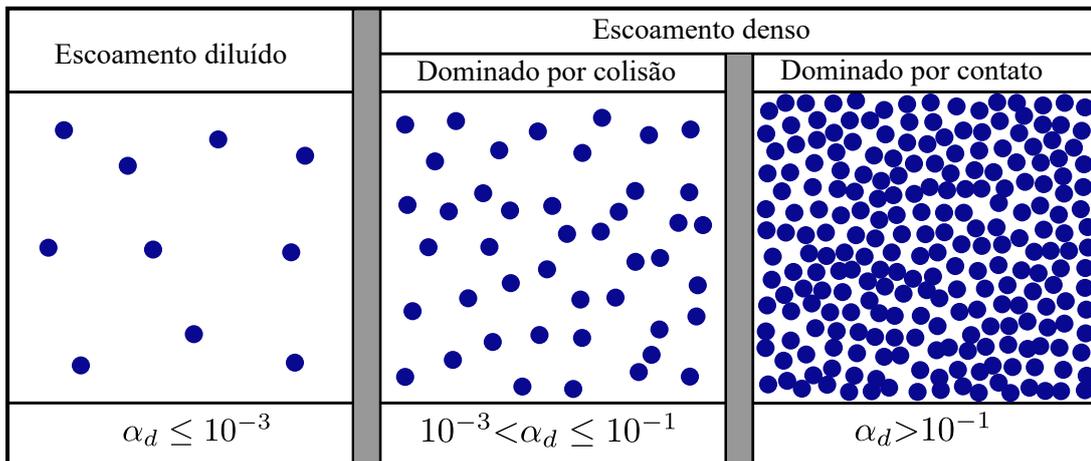
em que,  $\rho_c$  é a densidade da fase contínua,  $d_2$  é o diâmetro da menor gota (ou bolha),  $v_{rel}$  é a velocidade relativa entre as gotas (ou bolhas) que sofreram a colisão e  $\sigma$  é a tensão interfacial que age sobre a gota (ou bolha) analisada.

Na literatura, uma ampla gama de valores para o número crítico de Weber vêm sendo estudado. Sevik e Park (1973) sugeriram um Weber crítico  $We_{crit} \sim 1$  para bolhas de ar em jatos de escoamentos turbulentos. Segundo Kolev (2007),  $We_{crit} = 12$  é o valor mais utilizado considerando quebra (*break-up*) de gotas e bolhas devido à estabilidade hidrodinâmica. Para um maior aprofundamento dos números críticos de Weber, sugere-se consultar Lau et al. (2014).

### 2.2.3 REGIMES DO ESCOAMENTO BIFÁSICO DISPERSO

Crowe et al. (2011) sugere que a fração volumétrica da fase dispersa ( $\alpha_d$ ) determina se o escoamento deve ser tratado como diluído ou denso. De acordo com a Fig 6, para frações volumétricas menores que 0,001 os escoamentos são considerados diluídos e as forças de arrasto e sustentação são as forças predominantes na determinação da trajetória das partículas. Para frações volumétricas maiores do que isso, os escoamentos são considerados densos e podem ser classificados em dois regimes: dominado por colisão e dominado por contato. O escoamento é dominado por colisão quando as partículas colidem umas com as outras, mas o tempo de contato é menor que o intervalo de tempo entre as colisões. No entanto, o escoamento é dominado por contato quando as partículas permanecem em constante contato e os valores de fração volumétrica da fase dispersa são maiores que 0,1.

Figura 6 – Regimes de um escoamento de fase dispersa em termos do transporte das partículas.



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

Sommerfeld (2017), por outro lado, caracteriza os dois regimes de escoamento com base na razão entre o tempo de resposta da partícula ( $\tau_p$ ) e o tempo médio entre as colisões  $\tau_c$ . Se o tempo médio entre as colisões é maior do que o tempo de resposta da partícula, o regime é diluído. Por outro lado, se o tempo de resposta da partícula é menor do que o tempo médio entre colisões, o regime é denso e possui alta frequência de colisão. Dessa forma:

- Regime diluído  $\rightarrow \frac{\tau_p}{\tau_c} < 1$ ;
- Regime denso  $\rightarrow \frac{\tau_p}{\tau_c} > 1$ .

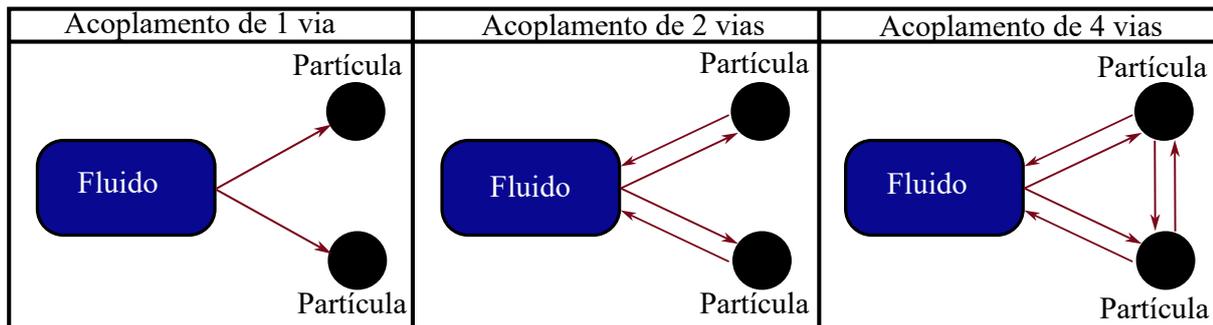
O tempo médio entre colisões  $\tau_c$  é encontrado a partir do inverso da frequência de colisão.

Ressalta-se que, mesmo se tratando de um escoamento globalmente diluído, podem ocorrer regiões densas devido acúmulo de partículas, sendo necessário considerar as diferentes fenomenologias em um mesmo escoamento.

## 2.2.4 TIPOS DE ACOPLAMENTO

Nos escoamentos bifásicos com presença de partículas alguns efeitos podem acontecer de acordo com a interação entre as fases. Essa interação de uma fase sobre a outra e entre si mesma está relacionada com os tipos de acoplamentos. Eles podem acontecer devido à transferência de massa pela evaporação de gotas, pela transferência de quantidade de movimento linear devido às forças fluidodinâmicas envolvidas, ou mesmo por meio da transferência térmica entre as fases.

Figura 7 – Diagrama esquemático dos tipos de acoplamentos entre a fases contínua e dispersa.



Fonte: Adaptado de Santos (2019).

Dessa forma, conforme exemplificado na Fig. 7, o acoplamento 1 via ocorre quando a fase contínua afeta a fase dispersa, mas o contrário não acontece. Já no acoplamento 2 vias os efeitos de uma fase sobre a outra de forma mútua é considerado. E no acoplamento 4 vias, além de uma fase afetar a outra mutuamente, existem efeitos de uma partícula sobre a outra de forma recíproca na fase dispersa devido as colisões.

## 2.3 ABORDAGENS MATEMÁTICAS PARA ESCOAMENTOS TURBULENTOS

Os métodos de modelagem para escoamentos turbulentos são divididos em três classes principais: DNS (do inglês: *Direct Numerical Simulation*), LES (do inglês: *Large Eddy Simulation*) e RANS (do inglês: Reynolds-Averaged Navier-Stokes). A escolha de cada uma dessas classes depende principalmente do quanto se deseja representar do escoamento.

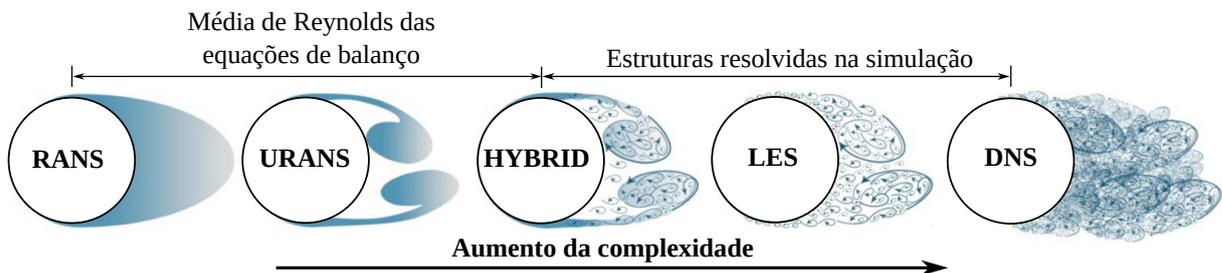
As metodologias da classe Simulação Numérica Direta (DNS) resolve todas as estruturas turbilhonares do escoamento com as equações de balanço de massa e quantidade de movimento linear (conhecida por equação de Navier-Stokes). Dessa forma, para garantir uma resolução adequada, o espaçamento da malha deve ser menor que a menor estrutura do escoamento. Somente assim é possível resolver todas as estruturas turbilhonares formadas.

Já na classe Simulação de Grandes Estruturas (LES), apenas as grandes estruturas são resolvidas utilizando as equações filtradas de Navier-Stokes e a equação de balanço de massa. Aqui são necessários modelos submalha para modelar a interação entre as estruturas menores que o tamanho do filtro e as estruturas resolvidas. Nota-se então que a metodologia LES não exige uma malha tão refinada quanto a utilizada em DNS.

Por último, as metodologias da classe Média de Reynolds das equações de Navier-Stokes (RANS), como o próprio nome diz, se trata de um método baseado na média de Reynolds das equações de balanço. Na literatura, são encontrados modelos que se diferem, principalmente, entre aqueles que dependem e aqueles que não dependem da viscosidade turbulenta. Quando o termo temporal é considerado nas equações médias de Navier-Stokes, uma nova classe pode ser citada, a URANS (do inglês: *Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes*).

Além disso, existem os modelos híbridos, que são uma combinação entre os modelos das classes URANS e LES. A Fig. 8, ilustra as estruturas turbilhonares resolvidas em cada uma das metodologias citadas. Para um maior aprofundamento, consultar [Silveira-Neto \(2020\)](#).

Figura 8 – Ilustração das estruturas turbulentas resolvidas em cada um dos métodos de modelagem da turbulência.



Fonte: Adaptado de [Hart \(2016\)](#).

## 2.4 ABORDAGENS MATEMÁTICAS PARA ESCOAMENTOS BIFÁSICOS DISPERSOS

As classes descritas acima são, em sua maioria, aplicadas em escoamentos monofásicos. Contudo, é necessário descrever abordagens que são capazes de resolver as diferentes fases de um escoamento multifásico e como uma fase afetar a outra. Assim, duas abordagens podem ser adotadas: a Euler-Euler e a Euler-Lagrange. Ambas abordagens necessitam que as partículas sejam muito menores do que as dimensões da malha computacional.

### 2.4.1 ABORDAGEM EULER-EULER

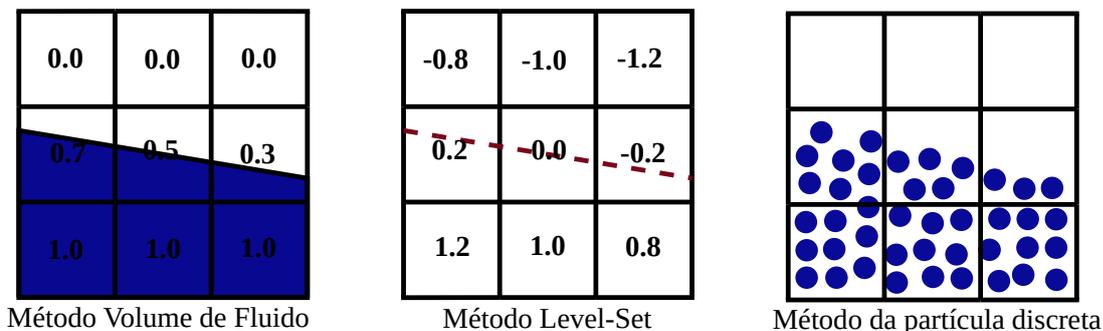
Na abordagem Euler-Euler ou modelagem de dois fluidos (TFM, do inglês: *Two-Fluid Models*), as duas fases do escoamento se comportam como meios contínuos interpenetrantes,

ou seja, são tratadas no referencial euleriano (SANTOS, 2019).

Nos modelos TFM, propriedades como a massa de partículas por unidade de volume são consideradas como uma propriedade contínua e a velocidade da partícula é a velocidade média sobre um volume de controle ou célula computacional. Além disso, a transferência de massa, quantidade de movimento ou energia através da interface das fases requer uma média sobre os volumes de controle (SOMMERFELD, 2017). Alguns métodos baseados na captura da interface deformável formada entre os dois fluidos imiscíveis podem ser utilizados. Dois bastante difundidos são: os métodos LSM (do inglês: *Level-Set Methods*) e VOF (do inglês: *Volume of Fluid*).

Os métodos LSM, introduzidos por Osher e Sethian (1998), são técnicas computacionais empregadas no rastreamento de interfaces móveis registrando-se a distância até a interface. Estes métodos são particularmente projetados para problemas tridimensionais em que a topologia da interface em evolução muda durante o tempo e para problemas com presença das chamadas cúspides ou pontas agudas (SETHIAN; SMEREKA, 2003). Por outro lado, os métodos VOF rastreiam as interfaces móveis registrando o volume fracionário de uma célula computacional preenchida com fluido. Além disso, outra abordagem para os escoamentos bifásicos dispersos está no rastreamento de cada partícula individualmente. Na Fig. 9 é ilustrado o domínio para cada uma dessas abordagens. Os métodos que envolvem o rastreamento de cada partícula serão discutidos a seguir na abordagem Euler-Lagrange.

Figura 9 – Ilustração dos métodos VOF, LSM e partícula discreta.



Fonte: Adaptado de Sethian e Smereka (2003).

Sommerfeld (2017) discutiu vantagens e limitações no uso dos métodos LSM e VOF em escoamentos bifásicos dispersos com presença de bolhas e gotas. De acordo com este estudo, o VOF conserva a massa e permite mudanças topológicas que ocorrem durante a quebra e coalescência. Mas o VOF considera que a coalescência sempre ocorre quando as bolhas ou gotas se aproximam. Um desafio no uso da metodologia VOF é a necessidade da reconstrução geométrica da interface para garantir uma topologia suave. Existem diversos métodos para a reconstrução da interface, para entendê-los consultar Rudman (1997).

Por outro lado, o LSM não requer nenhuma reconstrução geométrica da interface e a transição de um fluido para o outro ocorre suavemente em várias células. Além disso, o vetor

normal e a curvatura da interface são obtidos com precisão e isso é de suma importância para a determinação da tensão interfacial. No entanto, para evitar *overshoots* no gradiente da função de ajuste de nível próximo à interface, é necessária uma reinicialização nessa função. Com isso, o LSM apresenta robustez e simplicidade, mas enfrenta o problema de não conservação de massa. Por isso, essa abordagem é muitas vezes acoplada a outros métodos, como VOF e método de fluido fantasma (PROSPERETTI; TRYGGVASON, 2009).

Na abordagem Euler-Euler apresentam-se melhores resultados considerando escoamentos bifásicos dispersos densos, como os encontrados em leitos fluidizados (BALZER; SIMONIN, 1993; SUNDARESAN, 2000) ou em colunas de bolhas (ZHANG; DEEN; KUIPERS, 2009). 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. Outra possibilidade seria, utilizar estratégias de Balanço Populacional para lidar com esta limitação na abordagem Euler-Euler.

De acordo com o que foi apresentado acima, neste trabalho optou-se pela utilização da metodologia VOF no rastreamento de interfaces.

#### 2.4.1.1 MÉTODO VOLUME DE FLUIDO

O método VOF utiliza uma função indicadora  $\phi(x,y,z,t)$  que aponta a fração volumétrica de fluido presente em uma determinada posição  $(x,y,z)$  no tempo  $t$ . Essa função pode ser entendida como a fração volumétrica de uma fase. Assim, ela varia entre zero (ausência da fase de interesse) e a unidade (volume preenchido completamente pela fase de interesse) e assume-se que a interface está localizada em algum valor diferente de zero e a unidade. A partir da quantidade fracionária de líquido é possível determinar a posição e a orientação da interface em uma determinada célula computacional. Dessa forma, a função indicadora  $\phi$  é descrita por:

$$\phi = \frac{\epsilon_1}{\epsilon_1 + \epsilon_2} = \frac{\epsilon_1}{\epsilon_f}, \quad (2.8)$$

em que  $\epsilon$  é a fração volumétrica e os índices 1, 2 e  $f$  representam as fases um, dois e fase que contém a mistura das duas fases anteriores chamada de fase fluida. O movimento da fase fluida é descrito por uma equação de advecção:

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u}_f \cdot \nabla\phi = 0 \quad (2.9)$$

A densidade da fase fluida é definida por:

$$\rho_c = \phi\rho_1 + (1 - \phi)\rho_2 \quad (2.10)$$

A viscosidade média local do fluido é calculada via média harmônica da viscosidade cinemática das fases envolvidas de acordo com a seguinte expressão (JAIN; KUIPERS; DEEN, 2014):

$$\frac{\rho_c}{\mu_c} = \phi \frac{\rho_1}{\mu_1} + (1 - \phi) \frac{\rho_2}{\mu_2} \quad (2.11)$$

#### 2.4.2 ABORDAGEM EULER-LAGRANGE

Na abordagem Euler-Lagrange, a fase contínua é tratada no referencial euleriano, enquanto que a fase dispersa é tratada no referencial lagrangiano.

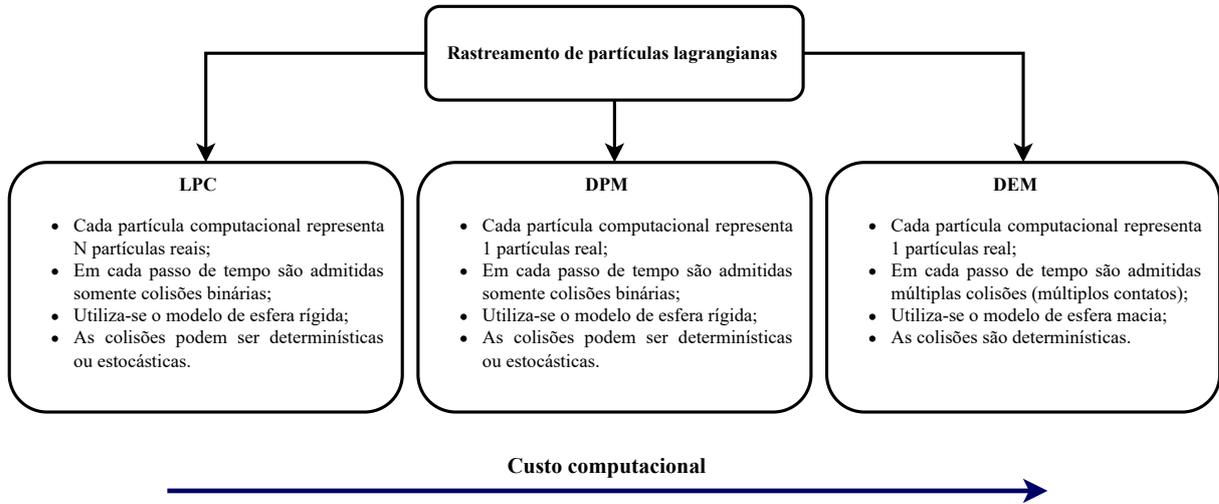
Um dos modelos utilizados nessa abordagem é o de fronteira imersa (IBM, do inglês: *Immersed Boundary Method*) que resolve o campo de escoamento ao redor de cada partícula. Este método é inviável quando há um número de partículas muito alto, uma vez que o custo computacional aumenta drasticamente (ver, por exemplo, Kempe e Fröhlich (2012), Maitri et al. (2018)).

Outra forma de modelar a estrutura lagrangiana é utilizando modelos que utilizam a aproximação ponto-partícula. Neste caso, considerando a abordagem clássica, as partículas são modeladas como pontos materiais e devem ser menores do que a célula computacional para que as perturbações causadas na fase contínua fiquem contidas dentro da faixa de espaçamento da malha. Com a aproximação ponto partícula, ao invés de resolver o escoamento em torno da partícula, as partículas são rastreadas no campo de escoamento previamente resolvido pela segunda lei de Newton. E, dessa forma, comparando o IBM e a aproximação ponto-partícula, o último é mais barato quando se tem um número alto de partículas presentes no escoamento. 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, como: as forças de corpo e fluidodinâmicas atuantes nas partículas, o acoplamento de 2 vias, colisões entre partículas e entre partículas e paredes (SANTOS, 2019). Contudo, na abordagem não clássica, há a ocorrência de infinitas partículas acumuladas em um ponto e algumas estratégias podem ser tomadas para evitar isso, por exemplo, criar um volume virtual em torno de cada uma, utilizado para computar as colisões.

Sommerfeld (2017) sugeriu uma classificação para a abordagem ponto-partícula conforme apresentado na Fig. 10. No método de parcela lagrangiana (LPC, do inglês: *Lagrangian Parcel Concept*), cada parcela na simulação representa um certo número de partículas reais, sendo assim chamadas de parcelas. Essa representação traz vantagens para os casos em que as partículas possuem tamanho diminuto e o rastreamento de todas elas torna-se inviável do ponto de vista computacional.

No método da partícula discreta (DPM, do inglês: *Discrete Particle Method*), todas as partículas reais do sistema são rastreadas individualmente. Tanto no LPC quanto no DPM, o modelo de esfera rígida é adotado, no qual apenas colisões instantâneas entre pares de partículas

Figura 10 – Classificação dos métodos de rastreamento de partículas lagrangianas e suas principais características.



Fonte: Adaptado de [Sommerfeld \(2017\)](#).

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 ( $\alpha_d \leq 0,1$ ).

Por fim, no método do elemento discreto (DEM, do inglês: *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 como corpos deformáveis ([SANTOS, 2019](#)).

## 2.5 TRANSPORTE DE PARTÍCULAS LAGRANGIANAS

Na abordagem lagrangiana ponto-partícula, a trajetória de cada partícula precisa ser resolvida. Quando forças atuam na partícula, as componentes de velocidade linear da partícula são modificadas e isso provoca uma alteração em sua posição. Já as alterações nas componentes de velocidade angular são causadas devido à atuação de um torque gerado pelas interações viscosas com o fluido. 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:

$$\frac{d\vec{x}_p}{dt} = \vec{u}_p, \quad (2.12)$$

$$m_p \frac{d\vec{u}_p}{dt} = \sum \vec{F}, \quad (2.13)$$

$$I_p \frac{d\vec{\omega}_p}{dt} = \sum \vec{T}, \quad (2.14)$$

em que  $\vec{x}_p$ ,  $\vec{u}_p$  e  $\vec{\omega}_p$  representa a posição, a velocidade linear e a velocidade angular da partícula, respectivamente.  $m_p$  e  $I_p$  são a massa e o momento de inércia da partícula,  $\vec{F}$  e  $\vec{T}$  representam, respectivamente, as diferentes forças e torques que podem estar atuando na partícula.

As forças podem ser classificadas em forças externas e forças fluidodinâmicas. As partículas, podem, por exemplo, sofrer a influência das forças externas peso e empuxo. Quanto às forças fluidodinâmicas, as mais relevantes para os escoamentos bifásicos dispersos são: força de arrasto, forças de sustentação devido ao cisalhamento e rotação da partícula, força de Basset, massa adicionada ou massa virtual e o gradiente de pressão.

Considerar ou não o movimento angular das partículas depende de cada aplicação. Casos que apresentam grandes mudanças na vorticidade do fluido geram um torque sobre a partícula induzindo um deslizamento angular. 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. Nestes casos, a velocidade angular das partículas deve ser avaliada (SOMMERFELD, 2017).

Em muitos estudos, é considerado que as partículas possuem formato esférico e isso simplifica a obtenção das equações 2.12, 2.13 e 2.14. Ao longo deste trabalho, esta consideração é aplicada e as expressões da trajetória de uma partícula são evidenciadas. Além disso, a referência dos valores das propriedades do fluido é admitida como a posição da própria partícula.

### 2.5.1 FORÇAS PESO E EMPUXO

A força peso consiste na atração entre dois corpos e atua na direção do campo gravitacional  $\vec{g}$ . Já a força de empuxo atua na direção oposta dessa força peso e, pelo princípio de Arquimedes, está associada à diferença de pressão entre a parte inferior e superior de um corpo imerso em um fluido. Somando-se as duas forças (ver Fig. 11), tem-se a expressão:

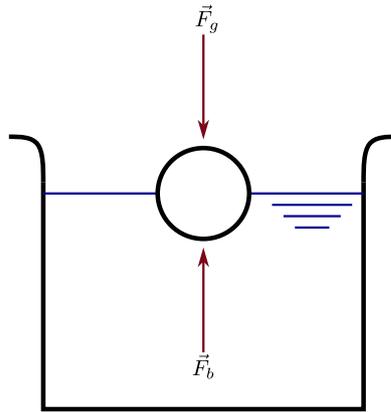
$$\vec{F}_{gb} = m_p \vec{g} \left( 1 - \frac{\rho}{\rho_p} \right) \quad (2.15)$$

### 2.5.2 FORÇA DE ARRASTO

A força de arrasto, presente em qualquer interação e contato de um corpo com um fluido, ocorre devido à diferença de velocidades entre o corpo e o escoamento em seu entorno. O sentido dessa força é sempre contrário ao movimento relativo do corpo em relação ao fluido circundante, conforme Fig. 12. A força de arrasto é calculada por:

$$F_d = \frac{\rho}{2} v_{rel}^2 A_p C_d, \quad (2.16)$$

Figura 11 – Ilustração das forças peso e empuxo atuando em uma partícula imersa em um fluido.



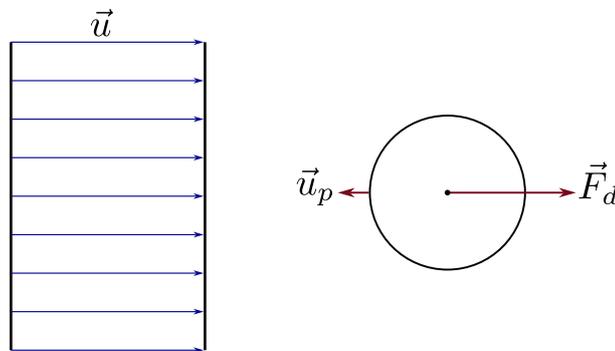
Fonte: Autoria própria.

em que,  $v_{rel}$  é a velocidade relativa entre o fluido e a partícula e  $C_d$  é o coeficiente de arrasto.  $A_p$  é a área da seção transversal da partícula esférica, dada por:

$$A_p = \frac{\pi}{4} D_p^2, \quad (2.17)$$

sendo  $D_p$  o diâmetro da partícula.

Figura 12 – Ilustração da força de arrasto atuando em uma partícula imersa em um fluido.



Fonte: Adaptado de Santos (2019).

Substituindo a Eq. 2.17 na Eq. 2.16 e abrindo a expressão de  $v_{rel}$ , tem-se a força de arrasto em sua forma vetorial:

$$\vec{F}_d = \frac{\pi \rho}{8} D_p^2 C_d \|\vec{u} - \vec{u}_p\| (\vec{u} - \vec{u}_p) \quad (2.18)$$

Na literatura, diversos trabalhos relacionam o coeficiente de arrasto com o número de Reynolds de uma esfera (ver Goossens (2019)). O número de Reynolds de uma partícula esférica é calculado por:

$$Re_p = \frac{\rho D_p \|\vec{u} - \vec{u}_p\|}{\mu} \quad (2.19)$$

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 resolvendo as equações de Navier-Stokes desconsiderando os termos inerciais. Foi estabelecida então a lei de Stokes que relaciona o coeficiente de arrasto e o número de Reynolds, dada por:

$$C_d = \frac{24}{Re_p} \quad (2.20)$$

É possível, também, obter o tempo de resposta da partícula sólida como (CROWE et al., 2011):

$$\tau_p = \frac{\rho_p D_p^2}{18\mu} \quad (2.21)$$

Já na região de transição,  $0,5 < Re_p < 10^3$ , os efeitos inerciais se tornam predominantes. Quando  $Re_p \approx 24$ , o escoamento começa a separar de forma simétrica. E, quando  $Re_p \approx 130$ , essa separação se torna instável e periódica (SOMMERFELD, 2000). Neste regime, diversas correlações foram obtidas (GOOSSENS, 2019). Uma correlação bastante utilizada nas simulações de partículas lagrangianas é a de Schiller e Naumann (1933) que se ajusta bem para números de Reynolds até  $10^3$  e é dada por:

$$C_d = \frac{24}{Re_p} (1 + 0,15 Re_p^{0,687}) \quad (2.22)$$

Para o intervalo  $10^3 < Re_p < 2 \times 10^5$ , conhecido por regime de Newton, constatou-se que o coeficiente de arrasto é aproximadamente constante, ou seja:

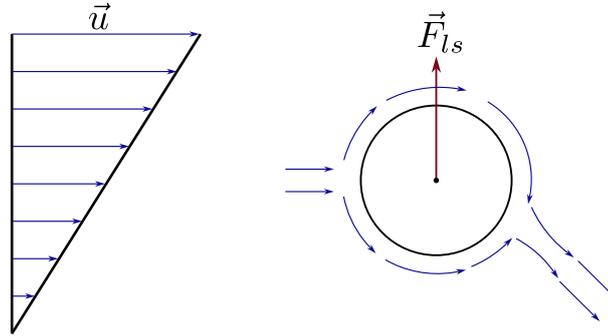
$$C_d \approx 0,44 \quad (2.23)$$

Em escoamentos com números de Reynolds altos,  $Re_p \approx 2,5 \times 10^5$ , tem-se a chamada crise do arrasto e acontece devido a transição de uma camada limite laminar para uma turbulenta a montante do ponto de descolamento da camada limite. Existe também o regime supercrítico que corresponde a  $Re_p > 4 \times 10^5$ .

### 2.5.3 FORÇA DE SAFFMAN

A força de sustentação devido ao cisalhamento foi analisada por Saffman em Saffman (1965) e Saffman (1968), por isso essa força é também conhecida por força de Saffman. Conforme ilustrado na Fig. 13, 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

Figura 13 – Ilustração da força de sustentação devido ao cisalhamento atuando em uma partícula imersa em um fluido.



Fonte: Adaptado de Santos (2019).

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.

Mei (1992) propôs um ajuste para a força de Saffman para Reynolds médios e altos, como:

$$C_{ls} = \begin{cases} \frac{4,1126}{\sqrt{Re_s}} [(1 - 0,3314\beta^{0,5})exp(-0,1Re_p) + 0,3314\beta^{0,5}] & Re_p \leq 40 \\ \frac{4,1126}{\sqrt{Re_s}} [0,0524(\beta Re_p)^{0,5}] & Re_p > 40 \end{cases} \quad (2.24)$$

em que  $\beta = 0,5 \frac{Re_s}{Re_p}$  na faixa  $0,005 < \beta < 0,4$ , E o número de Reynolds do escoamento cisalhante é dado por:

$$Re_s = \frac{\rho D_p^2 \|\vec{\omega}\|}{\mu} \quad (2.25)$$

Dessa forma, a força de sustentação pode ser descrita por (SOMMERFELD, 2000):

$$\vec{F}_{ls} = \frac{\pi\rho}{8} D_p^3 C_{ls} [(\vec{u} - \vec{u}_p) \times \vec{\omega}], \quad (2.26)$$

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

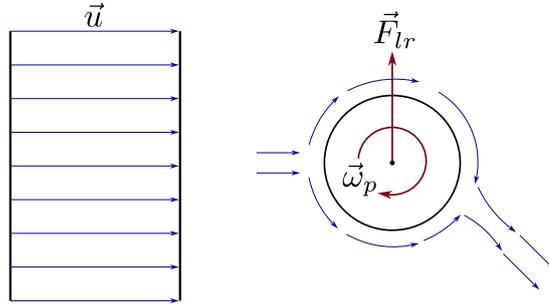
#### 2.5.4 EFEITO MAGNUS

A força de sustentação devido à rotação ou simplesmente efeito Magnus, é causada quando uma partícula em rotação  $\vec{\omega}_p$  está imersa em um escoamento. Então, uma força de sustentação é causada devido a uma distribuição de pressão formada nos dois hemisférios da partícula, semelhante ao que acontece em um escoamento cisalhante. A Fig. 14 ilustra o sentido da força.

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

$$\vec{F}_{lr} = \frac{\pi\rho}{8} D_p^3 (\vec{\omega}_p \times \vec{u}_p) \quad (2.27)$$

Figura 14 – Ilustração da força de sustentação devido à rotação atuando em uma partícula imersa em um fluido.



Fonte: Adaptado de Santos (2019).

Para uma faixa de  $10 < Re_p < 140$ , Oesterle e Dinh (1998) propuseram a seguinte expressão:

$$\vec{F}_{lr} = \frac{\pi\rho}{8} D_p^2 \|\vec{u} - \vec{u}_p\| \frac{\vec{\Omega} \times (\vec{u} - \vec{u}_p)}{\|\vec{\Omega}\|}, \quad (2.28)$$

em que,  $\vec{\Omega}$  é a velocidade de rotação da partícula em relação ao fluido e é dada por:

$$\vec{\Omega} = \frac{1}{2} \vec{\nabla} \times \vec{u} - \vec{\omega}_p \quad (2.29)$$

O coeficiente de sustentação  $C_{lr}$  é calculado por:

$$C_{lr} = 0,45 + (2\gamma - 0,45) \exp(-0,075\gamma^{0,4} Re_p^{0,7}), \quad (2.30)$$

sendo  $\gamma = 0,5 \frac{Re_r}{Re_p}$ . Por fim, o número de Reynolds de rotação é dado por:

$$Re_r = \frac{\rho D_p^2 \|\vec{\Omega}\|}{\mu} \quad (2.31)$$

### 2.5.5 GRADIENTE DE PRESSÃO

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):

$$\vec{F}_{pt} = \frac{m_p}{\rho_p} (-\nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau}), \quad (2.32)$$

em que,  $\nabla p$  é o gradiente de pressão local e  $\nabla \cdot \vec{\tau}$  é o divergente da tensão cisalhante. Através da equação de Navier-Stokes, sabe-se que:

$$-\nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau} = \rho \left( \frac{D\vec{u}}{Dt} - \vec{g} \right) \quad (2.33)$$

Dessa forma, a força de pressão total é:

$$\vec{F}_{pt} = \frac{\pi\rho}{6}D_p^3 \left( \frac{D\vec{u}}{Dt} - \vec{g} \right) \quad (2.34)$$

No lado direito da Eq. 2.34, o primeiro termo representa a aceleração do fluido e o segundo é a força de empuxo.

### 2.5.6 MASSA ADICIONADA

Sabe-se que, quando uma partícula no interior de um volume de fluido é acelerada ou desacelerada, a mesma move esse volume de fluido. E isso acontece devido uma força que acelera ou desacelera o fluido ao redor da partícula, conhecido por massa adicionada. Tal força é obtida por (SOMMERFELD, 2000):

$$\vec{F}_a = \frac{\pi\rho}{12}D_p^3C_a \left( \frac{D\vec{u}}{Dt} - \frac{d\vec{u}_p}{dt} \right), \quad (2.35)$$

em que  $C_a$  é o coeficiente para a massa adicionada e pode ser obtido através dos dados experimentais de Odar e Hamilton (1964).

### 2.5.7 FORÇA DE BASSET

A força de Basset corresponde à 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 da trajetória da partícula. A força de Basset pode ser calculada por (SOMMERFELD, 2000):

$$\vec{F}_B = \frac{3}{2}\sqrt{\pi\rho\mu}C_B \int_0^t \frac{\frac{D\vec{u}}{Dt} - \frac{d\vec{u}_p}{dt}}{\sqrt{t-t'}} dt', \quad (2.36)$$

em que,  $C_B$  é o coeficiente de Basset e pode ser obtido mediante resultados experimentais de Odar e Hamilton (1964).

### 2.5.8 TORQUE

O torque que age sobre uma partícula faz com que essa partícula rotacione em torno de um eixo. Para Reynolds de partícula baixos, Rubinow e Keller (1961) propuseram a expressão:

$$\vec{T} = -\pi\mu D_p^3 \vec{\omega}_p \quad (2.37)$$

Sommerfeld (2000) propôs outra expressão que considera a influencia do fluido e a velocidade de rotação relativa:

$$\vec{T} = \frac{\rho}{2} \left( \frac{D_p}{2} \right)^5 C_r \|\vec{\Omega}\| \vec{\Omega}, \quad (2.38)$$

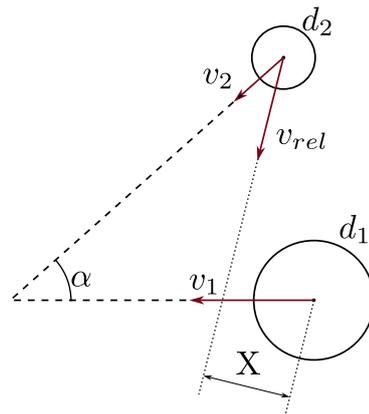
em que o coeficiente de rotação  $C_r$  para  $32 < Re_r < 1000$  calculado numericamente através de:

$$C_r = \frac{12,9}{\sqrt{Re_r}} + \frac{128,4}{Re_r} \quad (2.39)$$

## 2.6 REGIMES DE COLISÃO

Fisicamente, em escoamentos bifásicos dispersos, as partículas podem colidir entre si ou mesmo com as paredes. Segundo [Brenn \(2011\)](#), o resultado do evento de colisão entre duas partículas é dependente da energia de impacto, da razão entre o tamanho das partículas e das condições do meio contínuo que as circunda, como por exemplo, viscosidade, densidade e frações de mistura. Após a colisão das partículas, além do rebatimento e quebra, podem ocorrer aglomeração de partículas sólidas e coalescência de bolhas ou gotas.

Figura 15 – Ilustração de duas partículas com diâmetros  $d_1$  e  $d_2$  próximas de uma colisão.



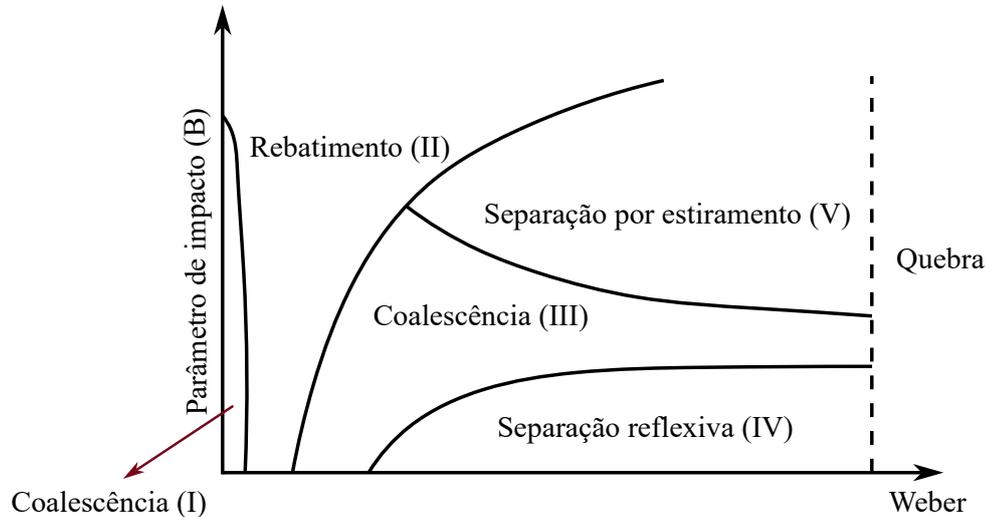
Fonte: Adaptado de [\(SILVEIRA-NETO et al., 2021\)](#).

Supondo duas gotas (ou bolhas), uma maior com diâmetro  $d_1$  e outra menor com diâmetro  $d_2$ , próximas de uma colisão, conforme Fig. 15, pode-se dividir os possíveis resultados de um evento de colisão binária de gotas (ou bolhas) em cinco regimes: Rebatimento (*bouncing*), Coalescência (*coalescence*), separação reflexiva (*reflexive separation*), separação por estiramento (*stretching separation*) e quebra (*shattering*). A Fig. 16 apresenta um fluxograma esquemático das prováveis configurações das gotas (ou bolhas) pós colisão em função do número de Weber e de um parâmetro de impacto dado por:

$$B = \frac{2X}{d_1 + d_2} \quad (2.40)$$

Existe uma imensa gama de modelos para colisão de gotas (ou bolhas), mas a maioria destes modelos não contemplam todos os possíveis regimes de colisão, uma vez que, dependendo da aplicação que se deseja, um mecanismo de colisão irá se sobrepôr aos demais, de

Figura 16 – Representação dos regimes de colisão em função do número de Weber e de um parâmetro de impacto.



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

modo que se possa negligenciar os demais efeitos, em uma perspectiva global, ao se comparar o modelo numérico com os resultados de experimentações materiais.

Abaixo, serão brevemente descritos os mecanismos de cada uma das possibilidades de resultados descritos. Em seguida, serão apresentados dois modelos para a coalescência, foco deste trabalho.

### 2.6.1 REBATIMENTO

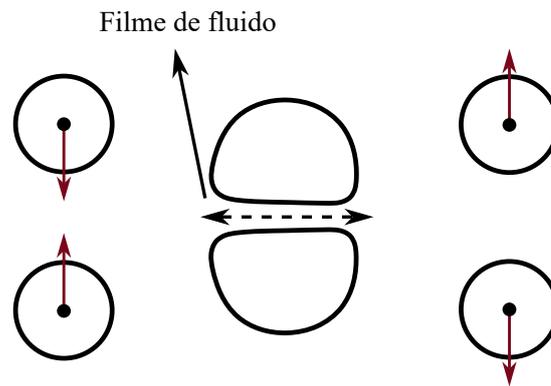
Quando duas gotas (ou bolhas), que estão imersas em um meio contínuo, se aproximam, uma camada de fluido é comprimida na região entre as gotas (ou bolhas). No caso em que ocorre uma colisão com rebatimento, região II da Fig. 16, as gotas não possuem força suficiente para vencer esse filme de fluido, que passa a impedir o contato entre as interfaces das gotas (ou bolhas). De forma que durante a colisão, estas apenas deformam-se e são impulsionadas em direções diferentes das direções iniciais, conforme representado esquematicamente na Fig. 17.

### 2.6.2 SEPARAÇÃO REFLEXIVA

Em colisões binárias, o fenômeno da separação reflexiva ocorre quando as gotas (ou bolhas) se combinam momentaneamente e em seguida separam-se, formando duas ou mais gotas (ou bolhas). A separação reflexiva, representada pela região IV da Fig. 16 é caracterizada por ocorrer em colisões quase frontais, nas quais as gotas (ou bolhas) se unem e deformam-se, sofrendo um achatamento na direção normal e um estiramento na direção radial, formando assim um disco.

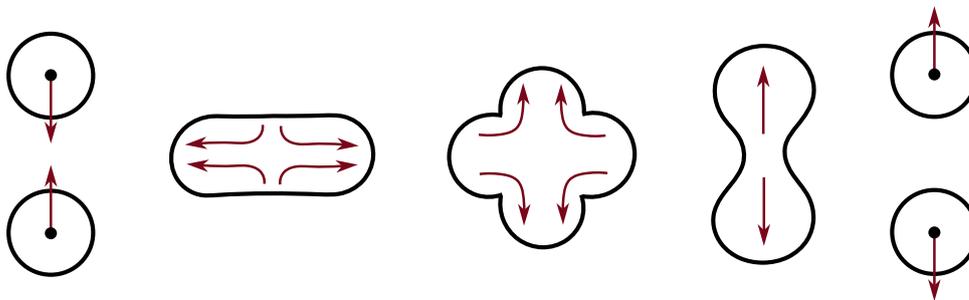
Logo após a formação do disco, a tensão interfacial começa a agir sobre o mesmo,

Figura 17 – Representação do regime de rebatimento.



Fonte: Adaptado de (SILVEIRA-NETO et al., 2021).

Figura 18 – Representação do regime de separação reflexiva.



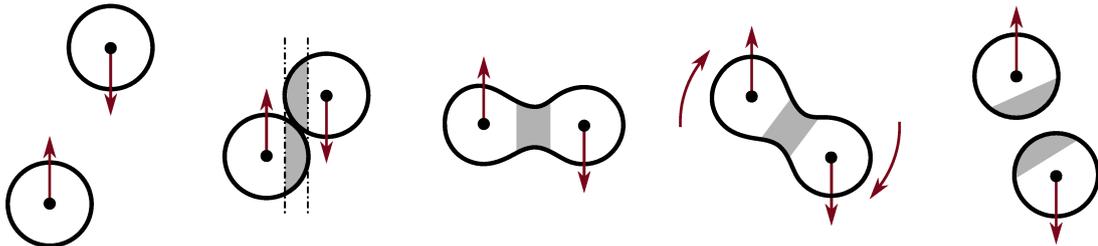
Fonte: Adaptado de (SILVEIRA-NETO et al., 2021).

fazendo que este contraia radialmente e se expanda na direção normal. Essa ação reflexiva forma um cilindro longo na direção normal, e caso o número de Weber for alto o suficiente, ou seja, a inércia do cilindro de fluido for maior que sua tensão interfacial, este cilindro se separará em duas ou mais partes, dando origem a novas gotas (ou bolhas), conforme ilustrado na Fig. 18. Caso contrário, o efeito reflexivo continuará, provocando oscilações até que toda a energia para deformar o cilindro seja gasta, porém sem que este se separe, mas coalesça em uma única gota (ou bolha).

### 2.6.3 SEPARAÇÃO POR ESTIRAMENTO

A separação por estiramento, na região V da Fig. 16, ocorre a elevados parâmetros de impacto, ou seja, colisões quase tangenciais. Neste mecanismo de colisão, apenas uma pequena parte de cada gota (ou bolha) entra em contato direto com a outra, criando uma região de interação onde as gotas (ou bolhas) estão aderidas. Porém, devido à quantidade de movimento linear de cada gota (ou bolha), estas tendem a permanecer em movimento mesmo após a criação da pequena região de contato. Dessa forma, tal região é esticada e as gotas (ou bolhas) podem sofrer uma rotação em torno do contato até que se separem novamente em duas gotas (ou bolhas), conforme ilustrado na Fig. 19.

Figura 19 – Representação do regime de separação por estiramento.

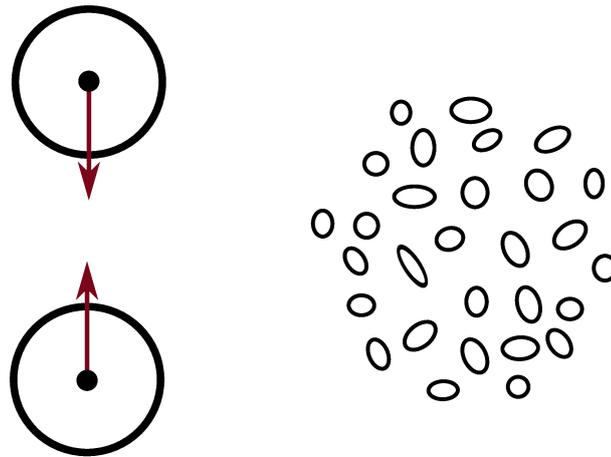


Fonte: Adaptado de (SILVEIRA-NETO et al., 2021).

#### 2.6.4 QUEBRA

A quebra ocorre em colisões com altas velocidades relativas, de modo que, as forças decorrentes dos efeitos provocados pela tensão interfacial sejam negligenciáveis quando comparados com os efeitos inerciais. Dessa forma, o fenômeno é majoritariamente regido pela inércia do sistema e os efeitos de tensões interfaciais se tornam de importância secundária (BAUMGARTEN, 2006).

Figura 20 – Representação do regime de quebra.



Fonte: Adaptado de (SILVEIRA-NETO et al., 2021).

Durante este tipo de colisão, as gotas se chocam com uma energia cinética alta que ocasiona a desintegração das gotas em um conjunto formado por muitas gotas menores. A Fig. 20 ilustra o mecanismo de quebra de gotas por colisão.

#### 2.6.5 COALESCÊNCIA

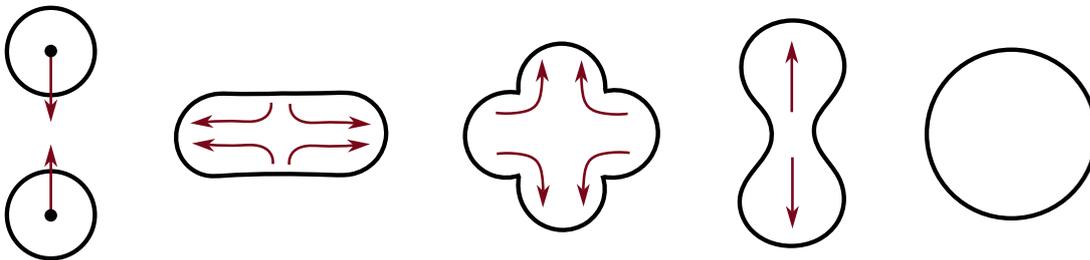
Quando duas gotas colidem e durante o processo de colisão estas se unem permanentemente formando uma única gota, tal fenômeno recebe a denominação de coalescência. A coalescência pode ocorrer para baixos e altos números de Weber, conforme regiões I e III na Fig. 16, respectivamente.

Em números de Weber mais baixos a energia de impacto entre as gotas (ou bolhas) é pequena, de modo que a colisão ocorre de maneira lenta o suficiente para que o filme de fluido comprimido escape da interface de colisão das gotas (ou bolhas), permitindo assim o contato entre as superfícies e a adesão das gotas (ou bolhas).

Já números de Weber mais elevados indicam uma velocidade normal de impacto alta, de forma que as gotas (ou bolhas) podem se chocar com uma quantidade de movimento alta o suficiente para vencer o filme de fluido.

Os mecanismos de coalescência são exemplificados na Fig. 21.

Figura 21 – Representação do regime de coalescência.



Fonte: Adaptado de (SILVEIRA-NETO et al., 2021).

#### 2.6.5.1 UMA REVISÃO DA APLICAÇÃO DA COALESCÊNCIA

Na literatura foram encontrados modelos para coalescência baseados em balanço de energia rotacional e de superfície (O'ROURKE, 1981) e modelos baseados no tempo de drenagem no filme formado pelo contato de duas gotas (ou bolhas) (PRINCE; BLANCH, 1990).

Tennison et al. (1984), estudaram a coalescência de jatos de injeção de combustível em motores diesel de alta pressão comum. Os autores realizaram uma combinação de estudos experimentais e numéricos para compreender como a coalescência afeta a formação da nuvem de *spray* e, conseqüentemente, a mistura e a queima de combustível. Eles utilizaram o modelo de O'Rourke e concluíram que a coalescência é um fator importante na formação da nuvem de *spray* e que a pressão do sistema de injeção de combustível afeta a quantidade de coalescência ocorrida. Além disso, os autores destacaram a importância de considerar a coalescência na modelagem numérica de jatos de injeção de combustível em motores diesel de alta pressão comum.

Ashgriz e Poo (1990) estudaram o processo de coalescência e separação em colisões binárias de gotículas líquidas. Os autores usaram simulações computacionais para investigar a dinâmica de coalescência, utilizando o modelo de O'Rourke, e separação de gotículas líquidas a números de Weber e parâmetros de impacto característicos de separação reflexiva. Eles concluíram que a coalescência depende do impacto da colisão, da tensão interfacial da gotícula e da viscosidade do fluido. Além disso, eles descobriram que a separação ocorre com base na tensão interfacial e no número de Reynolds da colisão. O trabalho destaca a importância da

compreensão da dinâmica de coalescência e separação de gotículas líquidas para aplicações em indústrias, como a produção de medicamentos e alimentos.

[Sommerfeld, Bourloutski e Bröder \(2003\)](#) abordaram o cálculo da dinâmica de escoamentos de bolhas de gases em soluções líquidas, incluindo a consideração da coalescência das bolhas. Para modelar a coalescência, os autores utilizaram a modelagem baseada no cálculo do tempo de drenagem do filme formado pelo contato das suas bolhas. Os autores utilizaram o método Euler/Lagrange para realizar simulações computacionais e investigar a influência da coalescência na dinâmica do escoamento. Eles concluíram que a coalescência afeta significativamente a distribuição de tamanho de bolhas e a transferência de massa e energia térmica.

[Munnannur e Reitz \(2007\)](#) apresentaram um novo modelo preditivo para a colisão de gotículas binárias utilizando como base o modelo de O'Rourke. Eles desenvolvem uma equação que descreve o comportamento da coalescência durante a colisão de gotículas. O modelo é baseado em experimentos e é capaz de prever com precisão o resultado da colisão, incluindo a formação de gotículas maiores ou quebra de gotículas. Este modelo é útil na compreensão da dinâmica da coalescência e pode ser aplicado em diversas aplicações industriais.

[Zhang e Law \(2011\)](#) analisaram o processo de coalescência de gotículas em colisões binárias em um meio gasoso. Usando simulações computacionais e a modelagem de [Prince e Blanch \(1990\)](#), os autores estudaram a deformação das gotículas antes da coalescência e a influência da pressão do gás na velocidade e no resultado da colisão. Eles concluíram que a deformação é crucial para a eficiência da coalescência e que a pressão do gás afeta significativamente a velocidade e a qualidade da coalescência.

[Kwakkel, Breugem e Boersma \(2013\)](#) e [Jain, Kuipers e Deen \(2014\)](#) também utilizaram o modelo de [Prince e Blanch \(1990\)](#) em suas simulações. [Kwakkel, Breugem e Boersma \(2013\)](#) simularam escoamentos de gotículas com coalescência e quebra. O objetivo é incluir um modelo de coalescência/quebra nas simulações de gotículas usando o método CLSVOF (do inglês *Coupled Level-Set/Volume-of-Fluid*). O artigo mostrou que o método CLSVOF é capaz de simular corretamente a coalescência e quebra de gotículas em escoamentos multifásicos, sendo importante para diversas aplicações, como a produção de biocombustíveis e a formação de nuvens e gotas. Por outro lado, [Jain, Kuipers e Deen \(2014\)](#) investigaram o processo de coalescência em colunas de bolhas usando uma abordagem híbrida de volume de fluido e modelo de bolhas discretas. Os resultados da simulação numérica mostraram que a coalescência é influenciada por fatores como a viscosidade, tensão superficial e velocidade das bolhas. Além disso, os autores encontraram que a modelagem híbrida é uma ferramenta eficaz para prever a coalescência em colunas de bolhas.

Notou-se então que os modelos baseados no cálculo de energia foram majoritariamente aplicados à escoamentos bifásicos com presença de gotas. Enquanto que, os modelos baseados no cálculo de tempo foram aplicados à escoamentos com presença de gotas e de bolhas. Ambos modelos são descritos a seguir.

### 2.6.5.2 MODELO DE O'ROURKE

O'Rourke (1981) propôs em sua tese de doutorado, um modelo que resolve a coalescência para altos números de Weber e a separação por estiramento.

No modelo proposto por O'Rourke, utiliza-se do balanço energético para se estimar o resultado do processo de colisão, ou seja, se as gotas coalescem ou se separam novamente. Desta forma, baseando-se nos resultados teóricos de Brazier-Smith, Jennings e Lathan (1972), se a energia rotacional das gotas ( $E_{rot}$ ), for maior que a energia extra de superfície ( $\Delta E_{surf}$ ), assume-se que separação por estiramento ocorre, caso contrário, coalescência.

A energia rotacional pode ser calculada por:

$$E_{rot} = \frac{L^2}{2J}, \quad (2.41)$$

em que,  $L$  é momento angular em relação ao centro de massa das gotas coalescidas e  $J$  é o momento de inércia correspondente ao centro de massa das gotas coalescidas.  $L$  é calculado pela expressão abaixo:

$$L = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} v_{p_{rel}} X, \quad (2.42)$$

em que,  $m_1$  e  $m_2$  referem-se as massas das gotas de diâmetro maior e menor, respectivamente.  $X$  é a projeção da distância entre os centros das gotas na direção normal a velocidade relativa (ver Fig. 15) e  $v_{p_{rel}}$  é a velocidade relativa entre as gotas e calculada por:

$$v_{p_{rel}} = \sqrt{v_1^2 + v_2^2 - 2v_1 v_2 \cos \alpha}, \quad (2.43)$$

em que,  $v_1$  e  $v_2$  são as velocidades das gotas de diâmetro maior e menor, respectivamente. E  $\alpha$  é o ângulo de colisão existente entre as trajetórias das gotas em colisão.

O momento de inércia  $J$ , é obtido por:

$$J = \frac{2}{5} (m_1 + m_2) r_{ef}^2, \quad (2.44)$$

em que,  $r_{ef}$  é raio efetivo das gotas coalescidas, o qual é calculado a partir dos raios das duas gotas através da equação:

$$r_{ef} = (r_1^3 + r_2^3)^{1/3} \quad (2.45)$$

Já a energia extra de superfície das gotas coalescidas, pode ser calculada com a equação:

$$\Delta E_{surf} = 4\pi\sigma (r_1^2 + r_2^2 - r_{ef}^2) \quad (2.46)$$

Como a energia rotacional e a energia extra de superfície delimitam as condições entre coalescência e separação por estiramento, as equações 2.41 e 2.46 quando igualadas fornecem um parâmetro de impacto crítico ( $B_{crit}$ ), o qual representa a condição de transição entre os dois possíveis resultados da colisão.

$$B_{crit} = \frac{2X_{crit}}{d_1 + d_2} = \sqrt{\frac{24}{5We} \frac{(\Delta^3 + 1)^{11/3}}{\Delta^5(\Delta + 1)^2} [\Delta^2 + 1 - (\Delta^3 + 1)^{2/3}]}, \quad (2.47)$$

em que  $\Delta$  é a razão de diâmetro das gotas e pode ser calculado por:

$$\Delta = \frac{d_2}{d_1} \quad (2.48)$$

Quando as duas gotas coalescem, a gota resultante do processo de colisão terá uma velocidade e uma temperatura diferente das gotas que colidiram. O'Rourke (1981) propõe que a nova velocidade e temperatura possam ser estimadas através de uma média ponderada pelas massas das gotas em colisão:

$$v_{coales} = \frac{m_1 v_1 + m_2 v_2}{m_1 + m_2} \quad (2.49)$$

$$T_{coales} = \frac{m_1 T_1 + m_2 T_2}{m_1 + m_2} \quad (2.50)$$

Para detalhamento matemático na situação de ocorrer separação por estiramento, consultar a tese O'Rourke (1981). Alguns autores estudaram a modelagem de coalescência em escoamentos multifásicos utilizando a modelagem de O'Rourke, tais como Lee, Kim e Lee (2008), Zhang, Li e Liu (2009), Li, Liu e Liu (2011). Em geral, eles se concentraram em verificar e aprimorar a eficácia da modelagem de O'Rourke na simulação da coalescência de gotículas em escoamentos multifásicos. Isso foi realizado através da comparação de resultados teóricos com experimentos e/ou outros modelos teóricos. Alguns dos artigos também exploraram a aplicação da modelagem de O'Rourke em diferentes configurações de escoamento multifásico e avaliam sua precisão na previsão da coalescência de gotículas. Os autores sugeriram que a modelagem de O'Rourke é uma ferramenta útil para a simulação da coalescência em escoamentos multifásicos, mas ainda há espaço para melhorias e aprimoramentos.

### 2.6.5.3 MODELO BASEADO NO TEMPO DE DRENAGEM DO FILME

Sommerfeld, Bourloutski e Bröder (2003), propuseram avaliar se a colisão de duas bolhas (ou gotas) resultaria em coalescência ou não, a partir da comparação do tempo de contato com o tempo de drenagem do filme formado pelo contato das duas bolhas (ou gotas), que é calculado pelo modelo de Prince e Blanch (1990). Se o tempo de drenagem do filme for menor que o tempo de contato da bolha, indica rompimento do filme e ocorre a coalescência. Dessa

forma, o tempo de contato das bolhas e o tempo de drenagem do filme podem ser calculados, respectivamente:

$$t_{contato} = \frac{C_C R_{ij}}{|v_{b,rel}|} \quad (2.51)$$

$$t_{drenagem} = \sqrt{\frac{r_{12}^3 \rho_l}{16\sigma}} \ln \frac{h_0}{h_f} \quad (2.52)$$

em que  $h_0$  é a espessura inicial do filme e  $h_f$  sua espessura final logo antes da ruptura. Esses valores dependem do sistema considerado, por isso são necessários experimentos para obter melhores estimativas (SOMMERFELD; BOURLOUTSKI; BRÖDER, 2003).  $v_{b,rel}$  é a velocidade relativa entre as duas bolhas (ou gotas). O raio equivalente da bolha (ou gota) para um sistema de duas bolhas (ou gotas) de tamanhos diferentes interagindo é obtido como sendo a média harmônica dos raios dessas duas bolhas (CHESTERS; HOFMAN, 1982):

$$r_{12} = 2 \left( \frac{1}{r_{p,1}} + \frac{1}{r_{p,2}} \right)^{-1} \quad (2.53)$$

Na Eq. 2.51, em que  $C_C$  representa a razão entre a distância de deformação e o raio efetivo da bolha (ou gota) e pode ser considerado como uma constante de calibração. Nota-se então, que o tempo de contato é um valor estocástico que explica a aleatoriedade do movimento da bolha induzido pela turbulência, e que é expresso pela componente normal da velocidade relativa do impacto.

As propriedades da nova bolha (ou gota) em caso de coalescência são obtidas a partir dos balanços de massa e momento. Nas equações que seguem, o \* representam as propriedades da bolha ou (gota) coalescida. O novo diâmetro da bolha e o número de bolhas (ou gotas) reais são dadas respectivamente por:

$$d_{p,1}^* = (d_{p,1}^3 + d_{p,2}^3)^{1/3} \quad (2.54)$$

$$N_{p,1}^* = N_{p,1} \left( \frac{d_{p,1}}{d_{p,1}^*} \right)^3 \quad (2.55)$$

As componentes de velocidade linear da nova bolha (ou gota) no sistema de coordenadas pode ser obtida como, por exemplo, na direção  $y$ :

$$v_{p,1}^* = \left( \frac{m_{p,1}v_{p,1} + m_{p,2}v_{p,2}}{m_{p,1} + m_{p,2}} \right) \quad (2.56)$$

De forma análoga, é possível ter as expressões das componentes em  $x$  e  $z$ .

Além disso, supondo rotação das bolhas (ou gotas), as componentes de velocidade angular da bolha (ou gota) coalescida no sistema de coordenadas pode ser obtida como, por exemplo, na direção  $y$ :

$$\omega_{yp,1}^* = \left( \frac{I_{p,1}\omega_{yp,1} + I_{p,2}\omega_{yp,2}}{I_{eq}} \right), \quad (2.57)$$

em que,  $I$  representa o momento de inércia das bolhas (ou gotas) e  $I_{eq}$  é o momento de inércia da bolha (ou gota) formada após a coalescência, considerando topologia esférica.  $I_{eq}$  pode ser calculado por:

$$I_{eq} = \frac{2(m_{p,1} + m_{p,2}) \left( \frac{d_{p,1}^*}{2} \right)^2}{5} \quad (2.58)$$

De forma semelhante, é possível obter as componentes das velocidades angulares nas direções  $x$  e  $z$ .

De forma geral, foi verificado que, os trabalhos que utilizam a modelagem de [Prince e Blanch \(1990\)](#) para a coalescência em escoamentos multifásicos exploram a física da coalescência de partículas em fluidos. Isso inclui o estudo da dinâmica da coalescência, bem como a identificação de fatores que afetam a taxa de coalescência, como a turbulência, a viscosidade e as propriedades das partículas, a depender de cada aplicação ([LIAO; LUCAS, 2010](#); [SOLIGO; ROCCON; SOLDATI, 2019](#)). Dessa forma, a modelagem baseada no cálculo do tempo de drenagem é amplamente utilizada como uma ferramenta importante para compreender e prever a dinâmica da coalescência em escoamentos multifásicos considerando a coalescência de gotas, gotículas e bolhas.

#### 2.6.5.4 MODELO DENSO

No MFSim, acoplado à modelagem VOF têm o modelo denso para captura da interface bifásica líquido gás. Neste caso, as frações de líquido e gás são ponderadas a partir das equações para as fases Euleriana e Lagrangiana, e a quantidade trocada entre elas, conforme abaixo.

As equações de balanço para a fase Euleriana são descritas pela equação da continuidade e de balanço de quantidade de movimento linear considerando a fração volumétrica do gás ( $\epsilon_g$ ), respectivamente:

$$\frac{\partial \epsilon_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon_g \vec{u}) = 0 \quad (2.59)$$

$$\rho \left[ \frac{\partial (\epsilon_g \vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon_g \vec{u} \otimes \vec{u}) \right] = -\epsilon_g \nabla p + \nabla \cdot (\epsilon_g \vec{\tau}) + \epsilon_g \rho \vec{g} + \epsilon_g \vec{f}_\sigma + \vec{M}^d \quad (2.60)$$

em que  $\rho$  é a massa específica do fluido,  $\vec{u}$  o vetor velocidade,  $p$  a pressão e  $\vec{g}$  o vetor campo gravitacional.  $\vec{\tau}$  é o tensor de tensão para um fluido Newtoniano e  $\vec{f}_\sigma$  é a força de tensão superficial, dada por:

$$\vec{f}_\sigma = \sigma \kappa \nabla \epsilon_l \quad (2.61)$$

Na Equação 2.61,  $\sigma$  é o coeficiente de tensão interfacial,  $\kappa$  a curvatura da interface e  $\epsilon_l$  é a fração de líquido. A equação de balanço de interface é obtida por:

$$\frac{\partial \epsilon_l}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \epsilon_l = 0 \quad (2.62)$$

E a Fração volumétrica de gás é calculada por:

$$\epsilon_g = 1 - \sum_p g(|\vec{x} - \vec{x}_p|) V_p \quad (2.63)$$

em que  $\sum_p$  é a soma de todas as bolhas ou gotas,  $\vec{x}_p$  e  $V_p$  são o centro de massa e o volume da bolha ou gota, respectivamente. Por fim,  $g(|\vec{x} - \vec{x}_p|)$  é um filtro passa-baixa baseado em uma função Gaussiana computada com base nas posições  $\vec{x}_p$  e  $\vec{x}$ , sendo a última a posição central do volume da célula computacional (EVRARD; DENNER; WACHEM, 2019).

## 2.7 FECHAMENTO DO CAPÍTULO

No presente capítulo, alguns conceitos relacionados aos escoamentos multifásicos com foco nos escoamentos bifásicos dispersos foram apresentados, assim como abordagens matemáticas existentes na literatura para o tratamento desse escoamento. Dentre as abordagens mencionadas, a Euler-Lagrange através da aproximação ponto-partícula é considerada no presente trabalho. Na fase dispersa, o DPM é adotado. A fim de incluir as interações entre partículas, o modelo de coalescência de Sommerfeld, Bourloutski e Bröder (2003) foi implementado, por abranger tanto simulações com gotas, quanto com bolhas. Como o foco da presente dissertação são os escoamentos gás-líquido e líquido-bolha com valores de fração volumétrica não tão elevados, as bolhas e gotas são tratadas como esféricas. O movimento linear e angular são avaliados, de modo que as forças predominantes sobre cada bolha (ou gota) são as forças peso-empuxo, de arrasto, de sustentação devido ao cisalhamento e de sustentação devido à rotação.

## 3 METODOLOGIA

### 3.1 MODELAGEM MATEMÁTICA

Neste capítulo, é abordada a modelagem matemática considerada no desenvolvimento do presente trabalho. Para a fase contínua, as equações médias transientes de Reynolds com o modelo Sub-Malha de Smagorinsky foram empregados. Para a fase dispersa, o movimento das partículas foi resolvido baseando-se na segunda lei de Newton.

#### 3.1.1 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.

##### 3.1.1.1 FORMULAÇÃO PARA A FLUIDODINÂMICA

A equação da continuidade juntamente com as equações de Navier-Stokes são suficientes para resolver os escoamentos isotérmicos de fluidos em regimes laminares, de transição à turbulência e turbulentos. Ambas equações são apresentadas, respectivamente, abaixo em notação indicial para escoamentos incompressíveis:

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

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

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

As simulações DNS exigem o uso de malhas demasiadamente finas, sendo a metodologia de maior custo computacional, principalmente quando se trata de número de Reynolds elevados, geralmente presentes na indústria. Dessa forma, é necessário aplicar metodologias adequadas para os escoamentos turbulentos sem que envolva custo computacional excessivo. As técnicas previamente apresentadas na seção 2.3 são exemplos. Uma das metodologias de simulação de escoamentos turbulentos consiste na decomposição do espectro de estruturas 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

(MAGUALHãES, 2018):

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

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

As equações acima não podem ser resolvidas diretamente devido ao termo não linear  $\bar{u}_i \bar{u}_j$  que aparece na Eq. 3.4. Dessa maneira, a decomposição dos campos 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:

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

em que o termo  $\overline{u'_i u'_j}$  é conhecido por tensor de Reynolds. A Equação 3.6 consiste na equação média transiente de Reynolds, a qual em conjunto com a Eq. 3.3 constitui 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 coordenadas  $x$ ,  $y$  e  $z$ . Diante disso, tem-se o problema de fechamento da turbulência, que pode ser resolvido 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  $\mu_t$  a viscosidade dinâmica turbulenta,  $\delta_{ij}$  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 na Eq. 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, aplicando 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 Equações 3.12 ainda não estão fechadas, pois o cálculo da viscosidade turbulenta não foi definido, sendo 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.

### 3.1.1.2 MODELO DE FECHAMENTO DA TURBULÊNCIA

Para o fechamento da turbulência optou-se pelo modelo sub-malha de Smagorinsky. Esse modelo foi proposto inicialmente por Smagorinsky (1963), baseando-se na hipótese do equilíbrio local para as estruturas turbilhonares sub-malha. Esta hipótese requer que a transferência ( $P^k$ ) de energia cinética turbulenta,  $k$ , da banda resolvida para a banda não resolvida do espectro de energia cinética turbulenta, seja igual à potência específica de transformação viscosa ( $\epsilon^k$ ) de energia cinética turbulenta  $k$  em energia térmica, ou seja (SILVEIRA-NETO, 2020):

$$P^k = \epsilon^k. \quad (3.13)$$

O modelo proposto por Smagorinsky (1963) calcula a viscosidade dinâmica turbulenta por:

$$\mu_t = \rho (C_{Sm} \Delta)^2 S, \quad (3.14)$$

sendo

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

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

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

Na Equação 3.14,  $\Delta$  é o tamanho característico da malha de discretização e  $C_{Sm}$  é a Constante de Smagorinsky que foi analiticamente determinada como  $C_{Sm} = 0,180$  por Lilly (1992).

### 3.1.2 MODELAGEM DA FASE DISPERSA

A fase dispersa é tratada no referencial lagrangiano utilizando o método da partícula discreta. Cada partícula presente no escoamento gás-líquido ou líquido-bolha tem seu movimento descrito pela segunda lei de Newton:

$$\frac{d\vec{x}_p}{dt} = \vec{u}_p, \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{u}_p}{dt} = & \vec{g} \left( 1 - \frac{\rho}{\rho_p} \right) + \frac{\pi\rho}{8m_p} D_p^2 C_d \|\vec{u} - \vec{u}_p\| (\vec{u} - \vec{u}_p) + \frac{\pi\rho}{8m_p} D_p^3 C_{ls} [(\vec{u} - \vec{u}_p) \times \vec{\omega}] + \\ & \frac{\pi\rho}{8m_p} D_p^2 \|\vec{u} - \vec{u}_p\| \frac{\vec{\Omega} \times (\vec{u} - \vec{u}_p)}{\|\vec{\Omega}\|} + \frac{\pi\rho}{6} D_p^3 \left( \frac{D\vec{u}}{Dt} - \vec{g} \right) + \frac{\pi\rho}{12} D_p^3 C_a \left( \frac{D\vec{u}}{Dt} - \frac{d\vec{u}_p}{dt} \right) + \\ & \frac{3}{2} \sqrt{\pi\rho\mu} C_B \int_0^t \frac{\frac{D\vec{u}}{Dt} - \frac{d\vec{u}_p}{dt}}{\sqrt{t-t'}} dt' \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\frac{d\vec{\omega}_p}{dt} = \frac{\rho}{64} \frac{D_p^5}{I_p} C_r \|\vec{\Omega}\| \vec{\Omega} \quad (3.19)$$

Assumindo partículas esféricas:

$$m_p = \frac{\pi}{6} \rho_p D_p^3 \quad (3.20)$$

e

$$I_p = 0,1 m_p D_p^2 \quad (3.21)$$

Na Equação 3.18, foram consideradas as forças peso e empuxo, força de arrasto, forças de sustentação devido ao cisalhamento e à rotação, força de pressão, força de Basset e massa adicionada. Contudo, em cada estudo de caso é verificado quais forças podem ser negligenciadas ou não. Os fatores presentes nessas forças foram apresentados na seção 2.5.

Sabendo que  $u_i = U_i + u'_i$  são as componentes da velocidade instantânea do fluido, as médias das componentes das velocidades,  $U_i$ , são obtidas através da interpolação do campo

resolvido do escoamento, e as flutuações,  $u'_i$ , são calculadas pelo modelo de dispersão de Langevin proposto por Sommerfeld (2001).

O passo de tempo adotado no transporte das partículas é ajustado conforme algumas escalas de tempo locais mais relevantes, como: o tempo requerido para uma partícula atravessar um volume de controle  $t_{CV}$ , o tempo de resposta da partícula  $\tau_p$ , a escala integral de tempo da turbulência  $T_L$ , e o tempo médio de colisão binária de partículas  $\tau_c$ . É necessário considerar o tempo de colisão para garantir que dentro de um passo de tempo aconteça apenas colisões entre duas partículas. Sendo assim, o passo de tempo deve ser calculado em função do menor valor das escalas de tempo citadas (SANTOS, 2019):

$$\Delta t \propto \min(t_{CV}, \tau_p, T_L, \tau_c). \quad (3.22)$$

### 3.1.3 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:

$$\vec{f}_{u,p} = -\frac{1}{V_{V.C}} \sum_{n=1}^{N_p} m_{p_n} \left[ \frac{d\vec{u}_{p_n}}{dt} - \vec{g} \left( 1 - \frac{\rho}{\rho_{p_n}} \right) \right], \quad (3.23)$$

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

$$\vec{S}_{u,p} = -\frac{1}{V_{CV}} \sum_k m_{p_k} N_{p_k} \left[ \frac{d\vec{u}_{p_k}}{dt} - \vec{g} \left( 1 - \frac{\rho}{\rho_{p_k}} \right) \right]. \quad (3.24)$$

Na Equação 3.24, o somatório em  $k$  está relacionado ao número de partículas computacionais passando por um determinado volume de controle com volume  $V_{CV}$ ,  $m_{p_k}$  é a massa de uma partícula individual, e  $N_{p_k}$  é o número de partículas reais em uma partícula computacional.

### 3.1.4 COLISÃO PARTÍCULA-PARTÍCULA

Quando partículas colidem, conforme Fig. 22, 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,  $\|\vec{u}_{rc_t}^-\| > -\frac{7}{2}\mu_d(1+e)(\vec{u}_r^- \cdot \vec{n})$ :

$$\vec{u}_p^+ = \vec{u}_p^- - \left(\frac{m_q}{m_p + m_q}\right)(1+e)(\vec{u}_r^- \cdot \vec{n})(\mu_d \vec{t} + \vec{n}), \quad (3.25a)$$

$$\vec{\omega}_p^+ = \vec{\omega}_p^- - \frac{5\mu_d}{D_p} \left(\frac{m_q}{m_p + m_q}\right)(1+e)(\vec{u}_r^- \cdot \vec{n})(\vec{n} \times \vec{t}). \quad (3.25b)$$

- Para a condição de não deslizamento:

$$\vec{u}_p^+ = \vec{u}_p^- - \left(\frac{m_q}{m_p + m_q}\right) \left[ \frac{2}{7} \vec{u}_{rc_t}^- + (1+e) \vec{u}_{rc_n}^- \right], \quad (3.26a)$$

$$\vec{\omega}_p^+ = \vec{\omega}_p^- - \frac{10}{7} \frac{1}{D_p} \left(\frac{m_q}{m_p + m_q}\right) (\vec{n} \times \vec{u}_{rc_t}^-). \quad (3.26b)$$

Nas Equações 3.25 e 3.26, os sobrescritos  $-$  e  $+$  correspondem às propriedades antes e depois da colisão, respectivamente.  $e$  e  $\mu_d$  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:

$$\vec{u}_r^- = \vec{u}_p^- - \vec{u}_q^-, \quad (3.27)$$

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

$$\vec{u}_{rc}^- = \vec{u}_r^- + \frac{D_p}{2} \vec{\omega}_p^- \times \vec{n} + \frac{D_q}{2} \vec{\omega}_q^- \times \vec{n}, \quad (3.28)$$

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

$$\vec{u}_{rc_n}^- = (\vec{u}_{rc}^- \cdot \vec{n}) \vec{n}, \quad (3.29a)$$

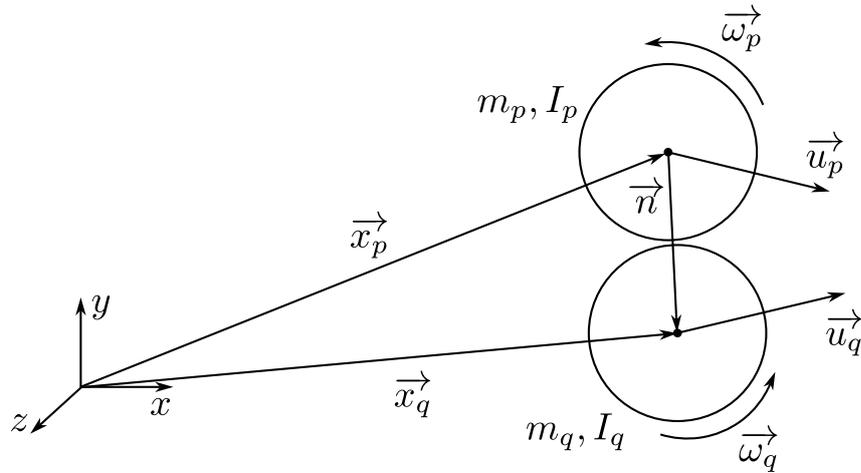
e

$$\vec{u}_{rc_t}^- = \vec{u}_{rc}^- - \vec{u}_{rc_n}^-, \quad (3.29b)$$

sendo  $\vec{n}$  o vetor normal unitário cujo sentido está indicado na Fig. 22, e  $\vec{t}$  o vetor tangencial unitário obtido por:

$$\vec{t} = \frac{\vec{u}_{rc_t}^-}{\|\vec{u}_{rc_t}^-\|}. \quad (3.30)$$

Figura 22 – Representação esquemática do instante em que acontece o contato entre duas partículas.



Fonte: Adaptado de (SANTOS, 2019).

### 3.1.5 COLISÃO PARTÍCULA-PAREDE

As partículas presentes em escoamentos no interior de dutos, canais e colunas, por exemplo, estão sujeitas a colisões com as paredes circundantes. Caso isso aconteça, sabe-se que as partículas têm 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,  $\|\vec{u}_{rc_t}^-\| > -\frac{7}{2} \mu_d (1 + e) (\vec{u}_p^- \cdot \vec{n})$ :

$$\vec{u}_p^+ = \vec{u}_p^- - (1 + e) (\vec{u}_p^- \cdot \vec{n}) (\mu_d \vec{t} + \vec{n}), \quad (3.31a)$$

$$\vec{\omega}_p^+ = \vec{\omega}_p^- - \frac{5\mu_d}{D_p} (1 + e) (\vec{u}_p^- \cdot \vec{n}) (\vec{n} \times \vec{t}). \quad (3.31b)$$

- Para a condição de não deslizamento:

$$\vec{u}_p^+ = \vec{u}_p^- - \frac{2}{7} \vec{u}_{rc_t}^- - (1 + e) \vec{u}_{rc_n}^-, \quad (3.32a)$$

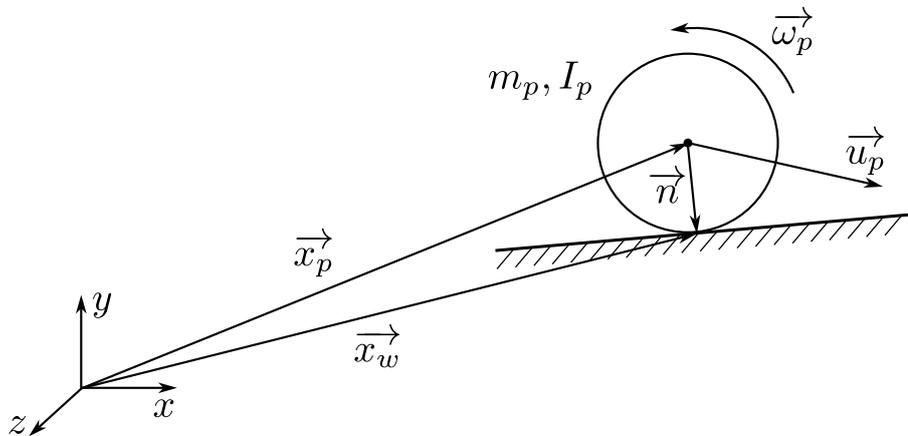
$$\vec{\omega}_p^+ = \vec{\omega}_p^- - \frac{10}{7} \frac{1}{D_p} (\vec{n} \times \vec{u}_{rc_t}^-). \quad (3.32b)$$

Nas Equações 3.31 e 3.32, os coeficientes  $e$  e  $\mu_d$  estão associados às propriedades materiais do par partícula-parede.  $\vec{u}_{rc}^-$  é o vetor relativo no ponto de contato antes da colisão:

$$\vec{u}_{rc}^- = \vec{u}_p^- + \frac{D_p}{2} \vec{\omega}_p^- \times \vec{n}, \quad (3.33)$$

cujas componentes normal e tangencial são dadas da mesma forma como apresentadas nas Eqs. 3.29, sendo  $\vec{n}$  o vetor normal unitário cujo sentido está indicado na Fig. 23.

Figura 23 – Representação esquemática do instante em que acontece o contato entre a partícula e a parede.



Fonte: Adaptado de (SANTOS, 2019).

## 3.2 MODELAGEM NUMÉRICO-COMPUTACIONAL

O MFSim vêm sendo desenvolvido no MFLab/UFU em parceria com a Petrobrás e resultados satisfatórios foram obtidos empregando-o na resolução de problemas envolvendo escoamentos turbulentos (DAMASCENO; VEDOVOTTO; SILVEIRA-NETO, 2015; ELIAS, 2018), multifásicos (BARBI et al., 2018), com mudança de fase (PINHEIRO; VEDOVOTTO, 2019) e problemas envolvendo interações fluido-estrutura (NETO et al., 2019). Um dos destaques do MFSim é a utilização de malha bloco estruturada com refinamento local adaptativo dinâmico, possibilitando que o refinamento ocorra em regiões com maior formação de vorticidade, por exemplo. No caso em que as simulações em referencial Lagrangiano são implementadas no MFSim, os particulados (sólidos ou líquidos) são tratados como elementos de fluidos (ou sólidos) como partículas. O rastreamento dessas partículas é baseado na aplicação da segunda lei de Newton e são oferecidos modelos adequados para o tratamento das colisões (SANTOS, 2019). Dessa forma, a implementação do modelo de coalescência, contribuição do presente trabalho, será avaliada e discutida nas próximas seções.

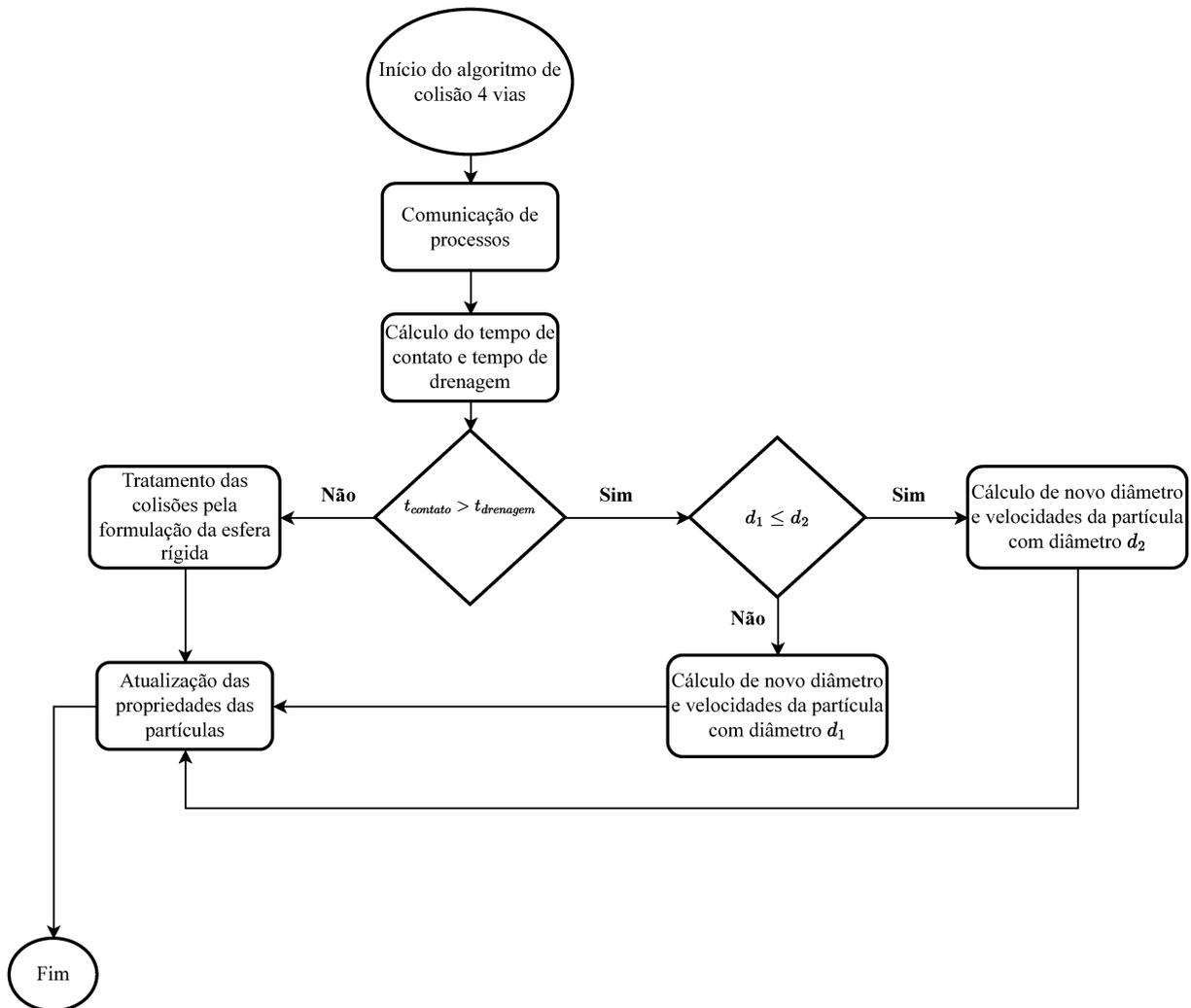
### 3.2.1 ALGORITMO DA COALESCÊNCIA

O algoritmo implementado para resolver casos que ocorrem a coalescência pode ser observado na Fig. 24 abaixo.

As equações da seção 2.6.5.3 foram aplicadas no algoritmo. A atualização da partícula, aqui representada por bolha ou gota, com maior diâmetro foi uma escolha para melhores efeitos visuais. Então, as partículas menores foram marcadas por uma *flag* e após o *loop* do algoritmo de 4 vias terminar, as partículas menores foram deletadas do domínio.

No *loop* do algoritmo de colisão 4 vias, logo após a identificação de uma colisão binária, o cálculos dos tempos de contato e drenagem, conforme Eqs. 2.51 e 2.52, respectivamente são

Figura 24 – Fluxograma do algoritmo de coalescência no MFSim.



Fonte: Autoria própria.

calculados. Em seguida, verifica-se qual o maior valor resultante destas duas equações. Caso o tempo de contato seja maior, verifica-se qual das duas partículas possui o maior diâmetro e elege-se ela para atualizar o diâmetro e as velocidades, conforme Eqs. 2.54, 2.56 e 2.57. Contudo, se o resultado do cálculo do tempo de drenagem é maior do que o do tempo de contato, o algoritmo segue com a formulação da esfera rígida presente no algoritmo de colisão 4 vias. Por fim, as propriedades das duas partículas presentes na colisão são atualizadas.



## 4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

No presente capítulo, os resultados e as discussões das simulações computacionais utilizando o código MFSim são apresentados. Dois estudos de caso foram feitos, na seção 4.1 foram analisados a simulação com nuvem de gotas e na 4.2 foram analisados escoamentos borbulhantes em coluna de bolhas. No primeiro foi avaliada a estabilidade e aspectos do algoritmo. O segundo foi utilizado para validar o algoritmo comparando com resultados encontrados na literatura.

### 4.1 NUVEM DE GOTAS

O primeiro teste consistiu em colidir frontalmente duas nuvens de gotas em um domínio de  $1\text{ cm}^3$  sem escoamento e sem ação da gravidade. Cada nuvem possui 500 gotas com propriedades da água, negligenciando as características térmicas. Cada nuvem foi posicionada no centro da face  $xy$  em  $z = 0,5\text{ cm}$  e o *setup* é apresentado na Tab. 2. A constante de calibração foi escolhida para impor ao sistema uma condição de coalescência intermediária, de forma que não fosse negligenciado o fenômeno, assim como não submetida condição de alta coalescência. Uma estimativa da espessura inicial do filme em sistemas ar-água é dada por Kirkpatrick e Lockett (1974), e a espessura final do filme é normalmente tomada como  $0,01\ \mu\text{m}$  (KIM; LEE, 1987). O diâmetro inicial das gotas foi estabelecido com uma distribuição normal, com média de  $0,01\text{ mm}$  e desvio padrão de  $0,002\text{ mm}$ . A nuvem de gotas à esquerda da Fig. 25 é referenciada como nuvem de gotas 1, enquanto que a da direita é referenciada como nuvem de gotas 2, e suas velocidades lineares e angulares são descritas abaixo.

Tabela 2 – Parâmetros para inicialização de simulação do estudo de caso das nuvens de gotas.

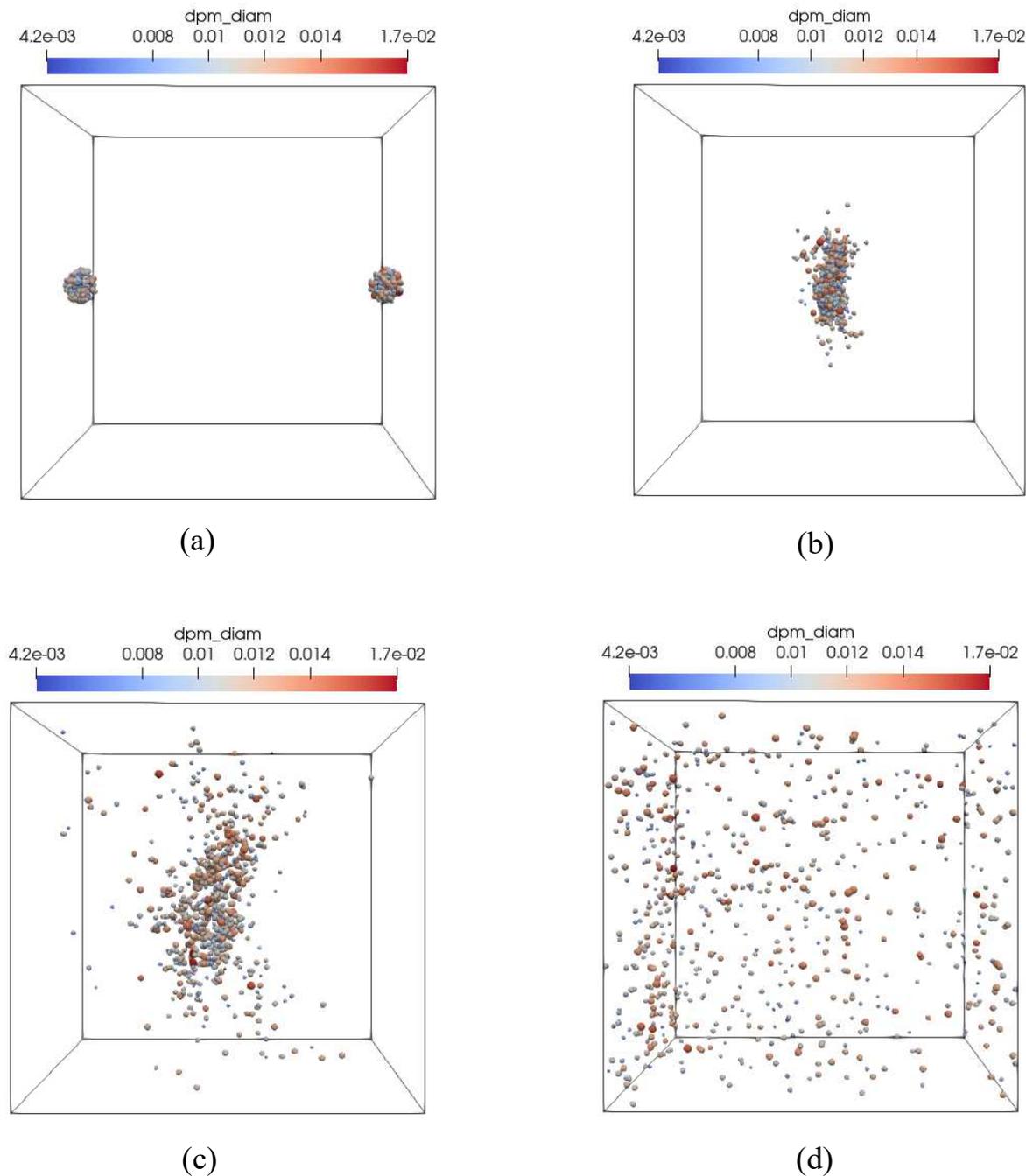
Parâmetro [unidade]	Valor
Constante de calibração da coalescência	0,5
Espessura inicial do filme [mm]	1,0
Espessura final do filme [ $\mu\text{m}$ ]	0,01
Distribuição normal para o diâmetro inicial das gotas [mm]	[0,01; 0,002]
Velocidade linear inicial da nuvem de gotas 1 [m/s]	$\vec{V}_1 = (1,5; 0; 0)$
Velocidade linear inicial da nuvem de gotas 2 [m/s]	$\vec{V}_2 = (-1,5; 0; 0)$
Velocidade angular inicial da nuvem de gotas 1 [rad/s]	$\vec{\Omega}_1 = (20; 0; 0)$
Velocidade angular inicial da nuvem de gotas 2 [rad/s]	$\vec{\Omega}_2 = (20, 0, 0)$
Coefficiente de restituição	0,7

Fonte: Autoria própria.

As condições de contorno para as gotas no domínio foram reflexão para as paredes superior, inferior, frontal e traseira e, escorregamento livre para as paredes esquerda e direita. A Fig.

25 abaixo mostra alguns instantes de tempo da simulação. Ao final, restaram 746 gotas, ou seja, 254 gotas foram coalescidas e as gotas resultantes tiveram volume maior que as anteriores. Um vídeo da simulação considerando  $\vec{V}_1 = (0,1; 0; 0) \text{ m/s}$  e  $\vec{V}_2 = (-0,1; 0; 0) \text{ m/s}$  pode ser visualizado através do link: <<https://youtu.be/tvyt3Ysq78>>. Velocidades baixas foram consideradas para ser possível visualizar a coalescência de forma gradativa.

Figura 25 – Simulação nos instantes de tempo: (a)  $t = 0 \text{ s}$ , (b)  $t = 1.0 \text{ s}$ , (c)  $t = 2,0 \text{ s}$  e (d)  $t = 9,82 \text{ s}$



Fonte: Autoria própria.

Um estudo de sensibilidade foi realizado a fim de analisar a influência da rotação das gotas no processo de coalescência. Notou-se com os resultados apresentados nas tabelas 3 e 4

que a rotação não exerce grande influência na ocorrência da coalescência, segundo o modelo utilizado. Além disso, a consideração da rotação não gera grande custo computacional, em ambas simulações, considerando a rotação ou não, o tempo de simulação se manteve próximo. Todos os testes foram realizados com processamento serial em uma máquina ASPIRE I3-6100U.

Tabela 3 – Influência da rotação nas gotas com  $C_C = 0,5$ ,  $e = 0,0$ ,  $\vec{V}_1 = (0,1;0;0) m/s$ ,  $\vec{V}_2 = (-0,1;0;0) m/s$  e rotação nas duas nuvens de gotas.

$\vec{\Omega}_1 = \vec{\Omega}_2 [rad/s]$	<i>gotas coalescidas</i>	<i>tempo de simulação (serial)</i>
(0,0,0)	617	14,3359
(10,0,0)	617	14,4176
(20,0,0)	618	14,4582
(30,0,0)	617	14,7399

Fonte: Autoria própria.

Tabela 4 – Influência da rotação nas gotas com  $C_C = 0,5$ ,  $e = 0,0$ ,  $\vec{V}_1 = (0,1;0;0) m/s$ ,  $\vec{V}_2 = (-0,1;0;0) m/s$  e rotação somente na nuvem de gotas 2.

$\vec{\Omega}_2 [rad/s]$	<i>gotas coalescidas</i>	<i>tempo de simulação (serial)</i>
(0,0,0)	617	14,3359
(10,0,0)	617	13,6412
(20,0,0)	617	13,6975
(30,0,0)	617	14,7399

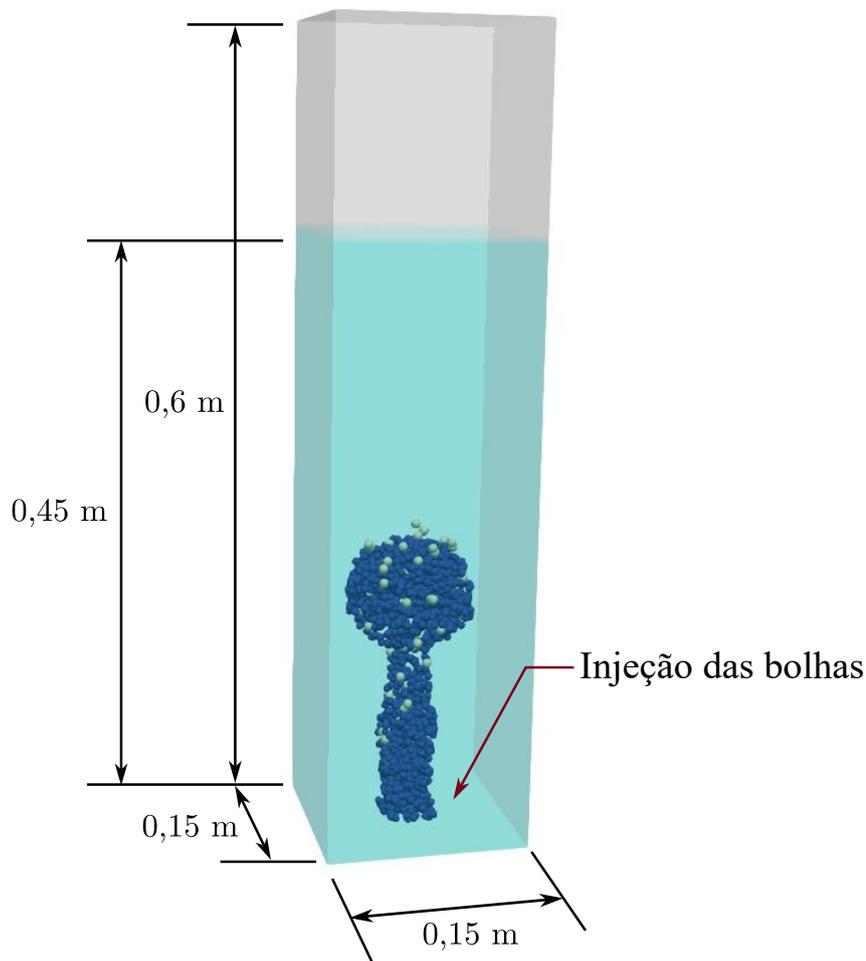
Fonte: Autoria própria.

## 4.2 COLUNA DE BOLHAS

Os escoamentos bifásicos conhecidos por escoamentos borbulhantes são formados pela presença de bolhas espalhadas no meio líquido. Para o estudo desses escoamentos são utilizadas as chamadas colunas de bolhas. Tais colunas podem ter seção transversal circular, quadrada ou retangular, de acordo com a aplicação desejada. A coluna é parcialmente cheia de líquido, no caso bifásico, ou líquida com sólidos em suspensão, no caso multifásico, tendo uma interface de líquido em contato com gás na parte superior. A injeção de gás ocorre na parte inferior da coluna através de placas distribuidoras, estas podem ter diferentes vazões ou formatos que controlam o tamanho das bolhas formadas. As bolhas escoam pelo líquido até a interface líquido-gás juntando-se ao gás contido acima da líquido-gás. Um esquema de uma coluna de bolhas com seção transversal quadrada pode ser observada na Fig. 26 abaixo.

Entre as principais aplicações de colunas de bolhas estão as reações em indústrias químicas, bioquímicas, petrolíferas e metalúrgicas. Os diferentes tipos de reações químicas, oxidação,

Figura 26 – Coluna de bolhas retangular com superfície livre há 0,45 m e injeção de bolhas no plano inferior.



Fonte: Autoria própria.

cloração, alquilação, polimerização, esterificação e hidrogenação podem ser implementadas em colunas de bolhas (LEONARD *et al.*, 2015).

Diversos estudos têm sido feitos nas últimas décadas com o objetivo de verificar o comportamento do escoamento em colunas de bolhas e a sensibilidade deste frente aos parâmetros da coluna, como formato e dimensões da coluna, vazão de injeção de gás, dimensões das bolhas e tipos de placas distribuidoras, para citar alguns. Dessa forma, o CFD vêm como uma ferramenta viável e de baixo custo na realização destes estudos. Sendo possível simular e prever inúmeras condições envolvendo as colunas de bolhas. Por isso, este estudo de caso foi escolhido para validação do modelo de coalescência implementado.

Os regimes normalmente encontrados em colunas de bolhas são: regime homogêneo, regime heterogêneo e de transição. O regime homogêneo pode ser classificado em duas sub-classificações: o escoamento perfeitamente borbulhante que ocorre quando as bolhas possuem formato esférico com aproximadamente o mesmo diâmetro e, o escoamento borbulhante imperfeito caracterizados por uma distribuição de tamanho de bolha aproximadamente iguais. Já o

regime heterogêneo é observado quando há uma distribuição de tamanho de bolha maior onde bolhas pequenas e grandes coexistem. Nesse regime, fenômenos de quebra e coalescência controlam o escoamento que normalmente não é controlado pela bolha primária no distribuidor de gás (KANTARCI; BORAK; ULGEN, 2005). Leonard et al. (2015) fizeram um extenso estudo sobre os parâmetros que norteiam a transição entre os regimes mencionados.

Neste estudo de caso, foram combinados dois métodos para a simulação: o volume de fluido e o modelo de bolha discreta. O método volume de fluido resolve a superfície livre e o método da bolha discreta rastreia e resolve a dinâmica das bolhas dispersas. Além disso, a coalescência é considerada e os resultados são confrontados com resultados existentes na literatura. Os parâmetros de simulação são apresentados na tabela abaixo e o algoritmo utilizou a forma não divergente para a simulação.

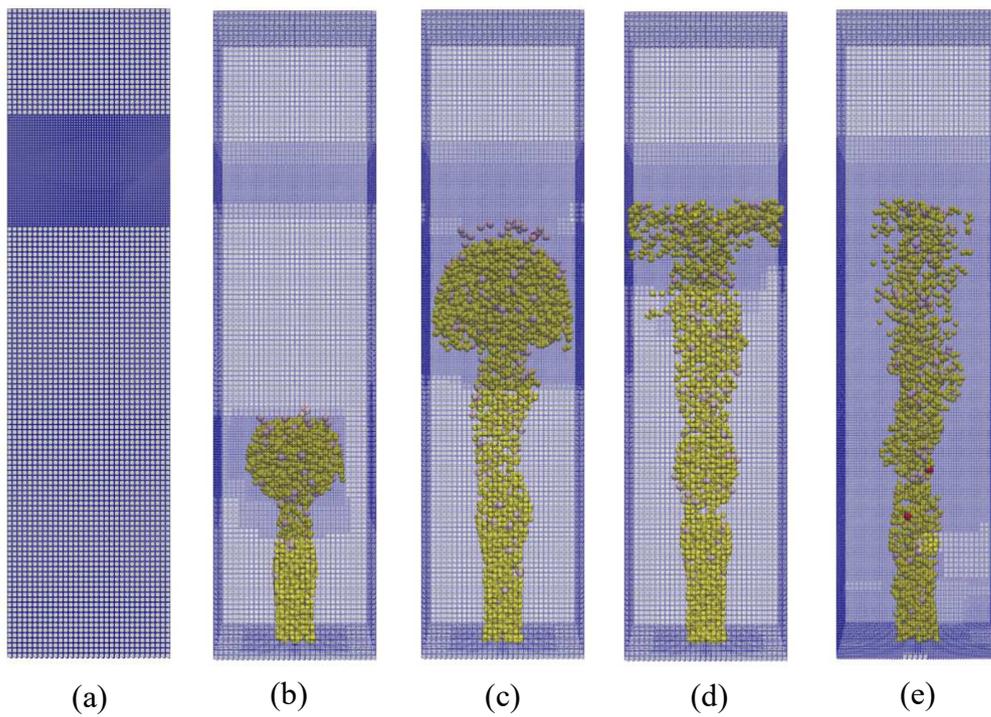
Tabela 5 – Parâmetros para inicialização de simulação do estudo de caso da coluna de bolhas.

Parâmetro	Valor
Densidade do líquido	1000 [ $kg/m^3$ ]
Densidade do gás	1,2 [ $kg/m^3$ ]
Viscosidade do líquido	$1,0 \times 10^{-3}$ [ $Pa \cdot s$ ]
Viscosidade do gás	$1,802 \times 10^{-5}$ [ $Pa \cdot s$ ]
Tensão Superficial	0,073 [ $N/m$ ]
Dimensão da coluna ( $C \times L \times A$ )	$0,15 \times 0,15 \times 0,6$ [ $m$ ]
Altura inicial de líquido	0,45 [ $m$ ]
Diâmetro inicial da bolha	$4,0 \times 10^{-3}$ [ $m$ ]
Número de bolhas injetadas a cada passo de tempo	1000
Número de células computacionais inicial ( $NX \times NY \times NZ$ )	$32 \times 32 \times 128$
Quantidade de níveis físicos da malha	2
Tempo de simulação	300 [ $s$ ]

Fonte: Autoria própria.

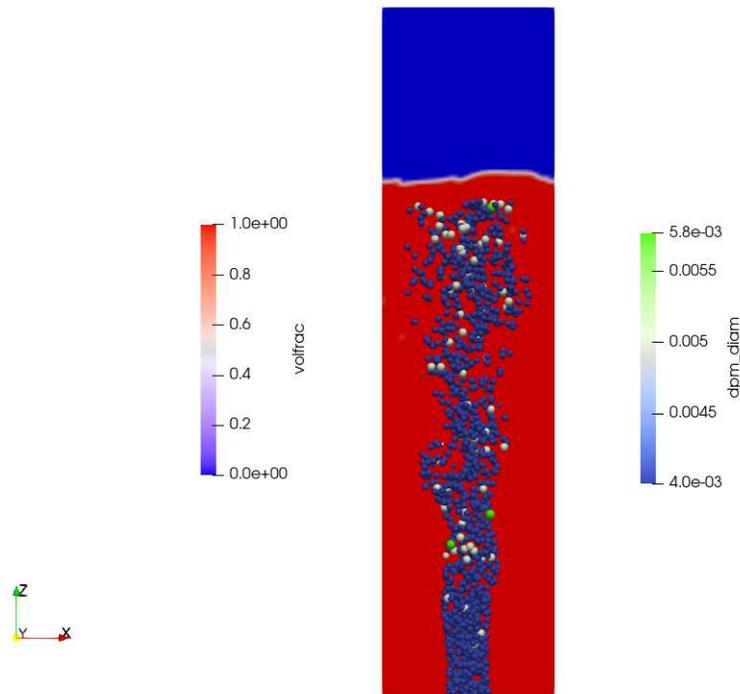
Conforme Tab. 5, dois níveis físicos foram considerados. A malha dinâmica foi utilizada com células mais finas de 2,34  $mm$  nas regiões com mudança de densidade, ou seja, nas regiões de interface entre líquido e gás e entre líquido e bolhas, conforme apresentado na Fig. 27. No instante inicial, o refinamento acontece em torno da superfície livre ainda em repouso e, à medida que as bolhas são inseridas no domínio, este refinamento é feito em torno da maior concentração de bolhas (região do chapéu do cogumelo) e na interface entre o líquido e o gás. Então, quando o chapéu do cogumelo atinge a superfície livre e as bolhas são deletadas do domínio, este refinamento de malha se estende por quase todo o domínio contido por líquido e bolhas, até o fim da simulação. Para a turbulência, foi utilizado o modelo Sub-malha de Smagorinky com constante igual a 0,180, assim como utilizado por (DEEN; SOLBERG; HJERTAGER, 2001). A Fig. 28 apresenta um instante da simulação bifásica. Qualitativamente, notou-se uma boa captura da interface utilizando a metodologia VOF. Já a Fig. 29 apresenta os contornos de densidade em um instante de tempo.

Figura 27 – Malha computacional nos instantes de tempo: (a)  $t = 0 s$ , (b)  $t = 1.0 s$ , (c)  $t = 1.4 s$ , (d)  $t = 1.75 s$  e (e)  $t = 50 s$ .



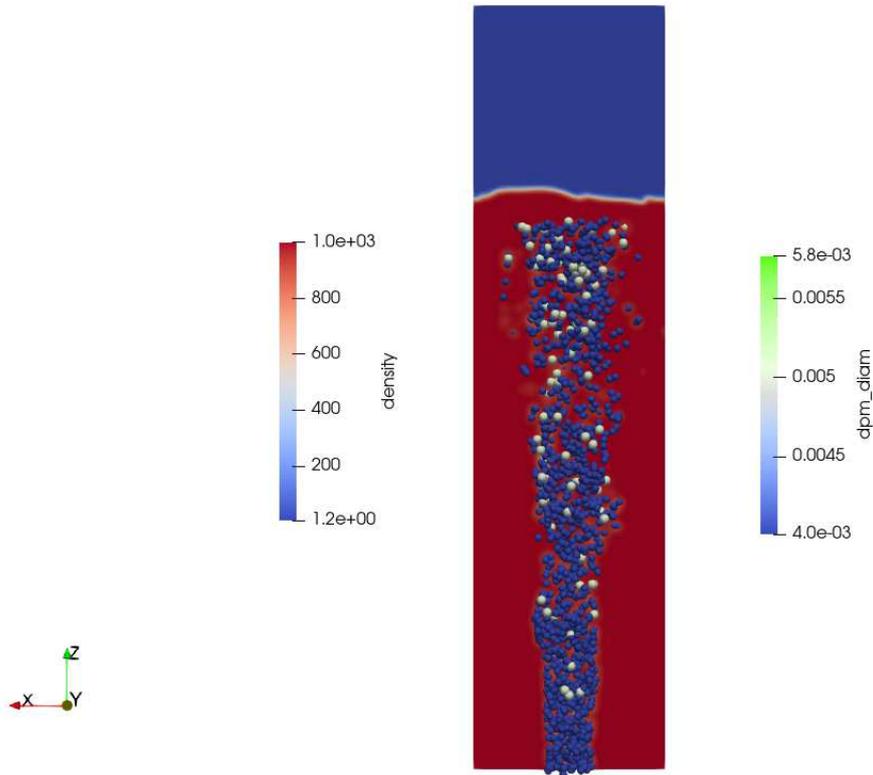
Fonte: Autoria própria.

Figura 28 – Simulação considerando bolhas como fase discreta e líquido ( $\phi = 1$ ) e gás ( $\phi = 0$ ) como fase contínua. Na interface  $0 < \phi < 1$ .



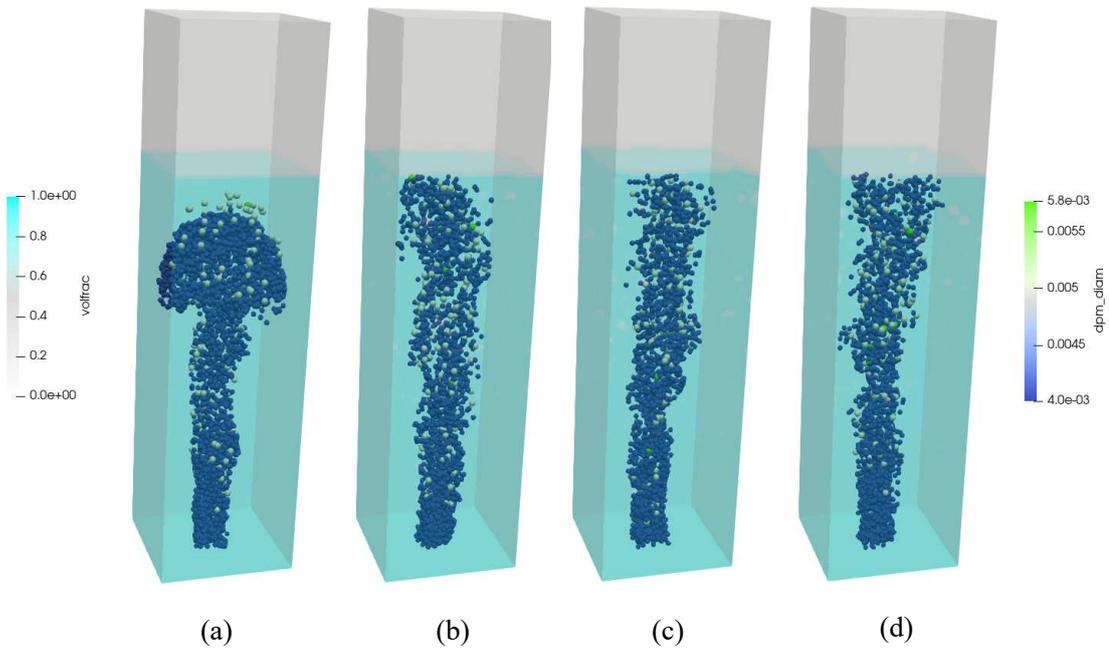
Fonte: Autoria própria.

Figura 29 – Simulação considerando bolhas como fase discreta e líquido ( $\rho_l = 1000 \text{ kg/m}^3$ ) e gás ( $\rho_g = 1,2 \text{ kg/m}^3$ ) como fase contínua.



Fonte: Autoria própria.

Figura 30 – Evolução da coalescência das bolhas nos instantes de tempo: (a)  $t = 1,4 \text{ s}$ , (b)  $t = 10 \text{ s}$ , (c)  $t = 50 \text{ s}$  e (d)  $t = 100 \text{ s}$ .

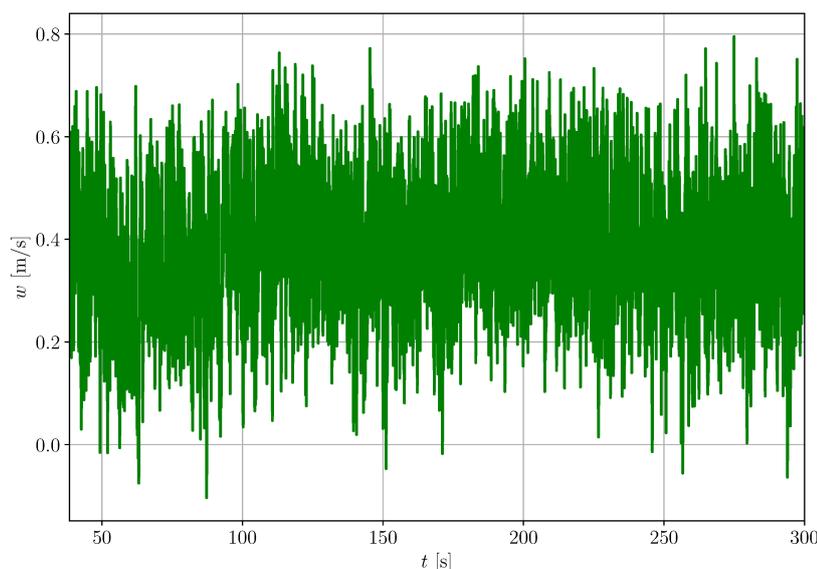


Fonte: Autoria própria.

Para a validação quantitativa, foram utilizados os dados experimentais e computacionais sem coalescência com abordagem Euler/Euler de [Deen, Solberg e Hjertager \(2001\)](#), esta escolha foi motivada pela revisão de outros trabalhos envolvendo o tema, os quais também validaram seus resultados com os dados experimentais aqui utilizados, tais como: [Sarhan, Naser e Brooks \(2018\)](#), [Gruber, Radl e Khinast \(2015\)](#), [Amooghin et al. \(2015\)](#) e [Jain, Kuipers e Deen \(2014\)](#). Sendo os resultados numéricos obtidos por [Jain, Kuipers e Deen \(2014\)](#) também utilizados para validação e referência de *setup* deste estudo de caso. Instantâneos da simulação em vários passos de tempo apresentados na Fig. 30 mostram o movimento das bolhas e a evolução da coalescência das mesmas. A simulação foi feita para o fator de coalescência de  $C_C = 0,1$  e isto pode ser justificado por [Deen, Solberg e Hjertager \(2001\)](#) terem adicionado cloreto de sódio ao líquido utilizado nos experimentos para evitar a coalescência das bolhas e tornar a Velocimetria por Imagem de Partículas (PIV) mais clara. De fato, o modelo matemático proposto no presente trabalho foi resolvido com e sem a coalescência das bolhas.

O escoamento foi simulado por um período de 300 s e a média dos dados foi calculada por um período de tempo de aproximadamente 200 s na coordenada  $z = 0,25$  m. [Deen, Solberg e Hjertager \(2001\)](#) adquiriu os disparos PIV acima de 900 s ao longo da condição de escoamento estável, enquanto que os resultados de sua simulação foi calculado em média por 140 s a partir de 10 s. Já, [Jain, Kuipers e Deen \(2014\)](#) utilizaram a média de 150 s entre 20 s e 170 s de simulação. A condição de transição é apresentada na Fig. 31 que ilustra a velocidade axial do líquido ao longo do tempo.

Figura 31 – Histórico temporal da velocidade axial do líquido no centro da coluna, na altura de  $z = 0,25$ , [m].

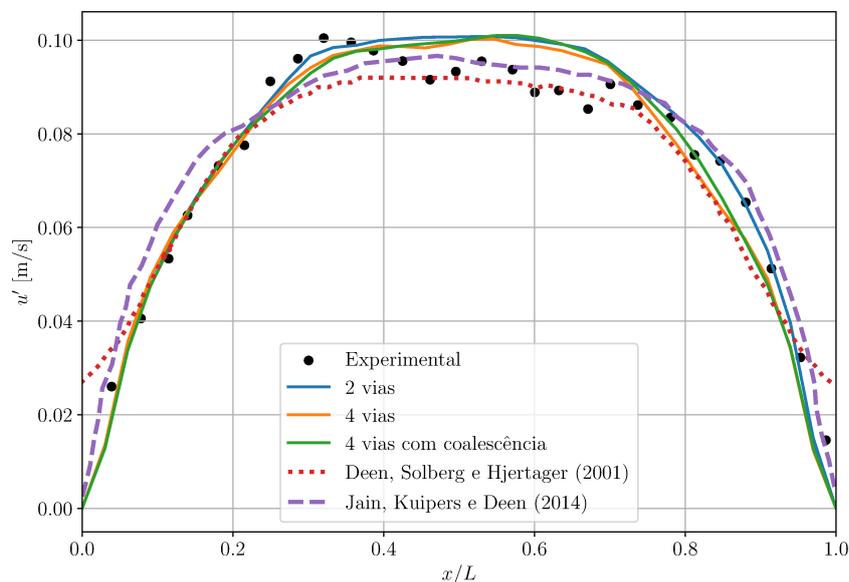


Fonte: Autoria própria.

As variações do modelo foram feitas buscando um melhor entendimento do código computacional e da física por trás do fenômeno da coluna de bolhas. A modelagem Lagrangiana e de colisão deve ser verificada e validada para entidades leves como bolhas de gás. A primeira comparação relevante é entre os resultados de acoplamento de quatro vias, ou seja, os efeitos coalescentes e não coalescentes na fase líquida. Vale ressaltar que as validações dos dados experimentais fazem sentido apenas com os resultados não coalescentes.

O movimento do líquido induzido pelas bolhas ascendentes pode ser analisado a partir de suas componentes de velocidade. Na Fig. 32, a componente transversal da velocidade média flutuante é mostrada. A região central da coluna apresenta as maiores flutuações devido à presença da maior quantidade de bolhas. Ao invés do comportamento simétrico esperado para um escoamento médio, tanto os dados numéricos quanto os experimentais apresentam alguma assimetria devido a estatísticas não estacionárias. Além disso, há uma validação notável para todas as modelagens testadas, ou seja, a colisão e coalescência das bolhas têm efeito desprezível nesta variável.

Figura 32 – Flutuação da velocidade do líquido na direção  $x$  em  $z = 0,25\text{ m}$ : dados experimentais, acoplamento de duas e quatro vias sem coalescência e acoplamento de quatro vias com modelo de coalescência.

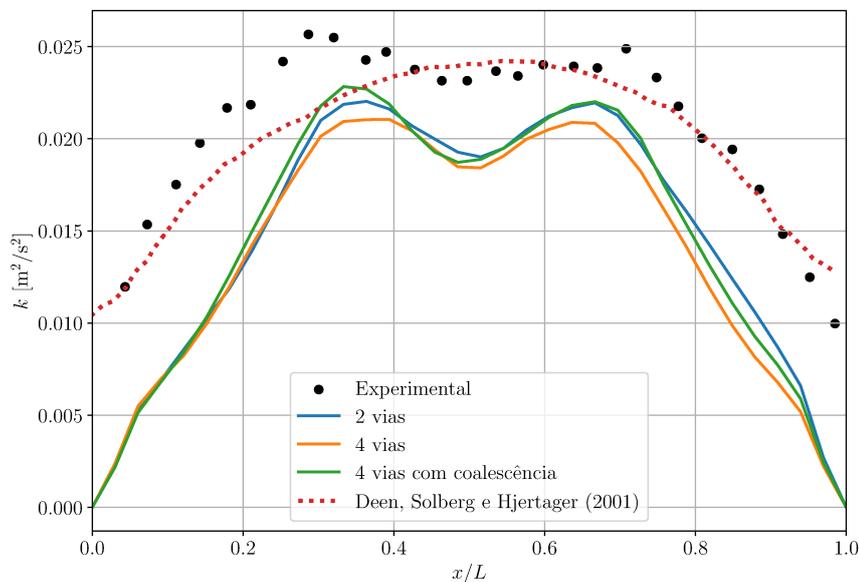


Fonte: Autoria própria.

Por outro lado, se todas as componentes flutuantes forem avaliadas ao longo da energia cinética do líquido, observam-se diferenças entre as modelagens, como apresenta a Fig. 33. Perfis bimodais resultam das simulações utilizando o MFSim, assim como as medidas experimentais, ao contrário da simulação Euler/Euler não coalescente de Deen, Solberg e Hjertager (2001). Dois picos e uma região central com menor energia são causados pelo limite da pluma da bolha, que dissipa a energia através das paredes, onde a velocidade é zero e os dados expe-

rimentais não podem ser adquiridos. A solução bidirecional, quando contabilizadas as colisões e a coalescência das bolhas, apresenta a maior quantidade de energia comparada aos demais resultados numéricos. Mesmo havendo uma defasagem entre os resultados numéricos e o experimental, notou-se um bom ajuste qualitativo da energia cinética turbulenta, conservando-se as características comportamentais.

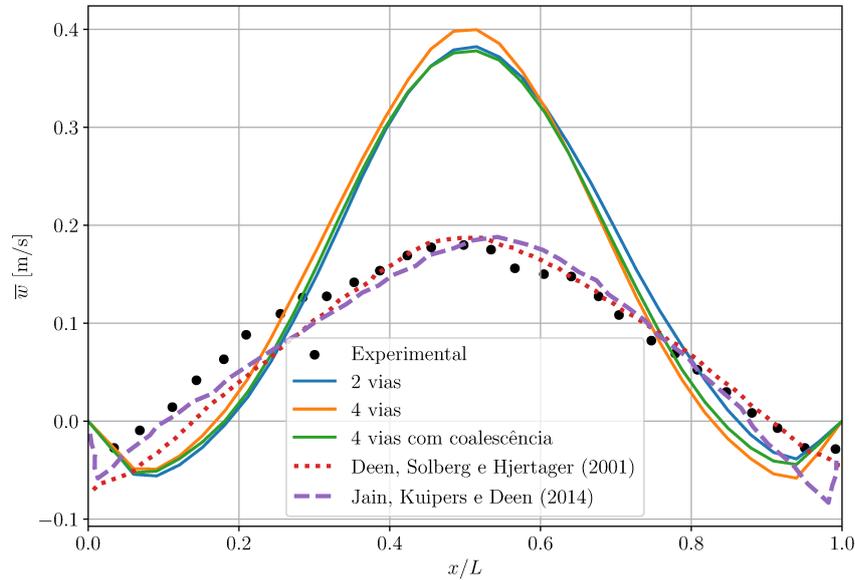
Figura 33 – Energia cinética turbulenta média do líquido em  $z = 0,25\text{ m}$ : dados experimentais, acoplamento de duas e quatro vias sem coalescência e acoplamento de quatro vias com modelo de coalescência.



Fonte: Autoria própria.

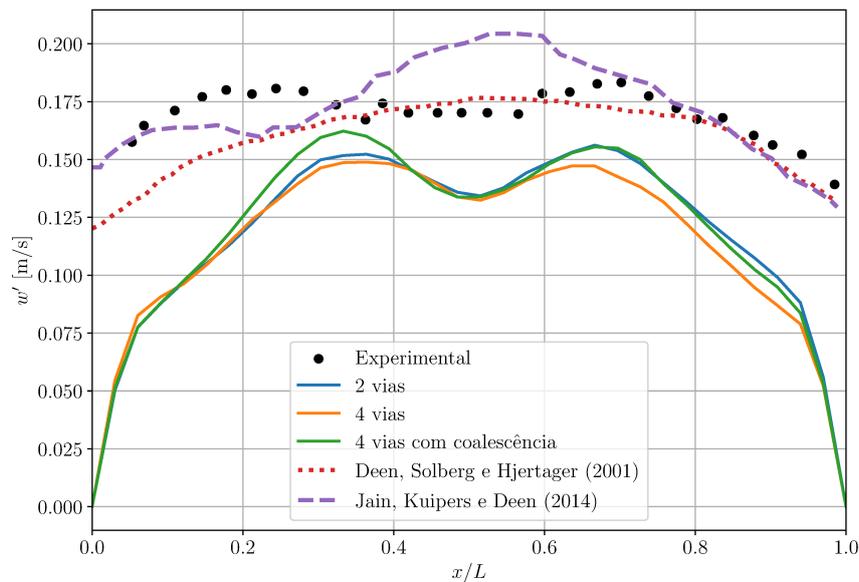
A média axial e as velocidades flutuantes mostram uma diferença ainda maior entre os dados experimentais e as simulações, conforme apresentado na Fig. 34 e na Fig. 35. No entanto, há uma superprevisão de duas vezes a velocidade axial média do líquido no centro da coluna. Nenhuma diferença significativa é observada entre os perfis de velocidade axial média, enquanto o caso coalescente causou menor flutuação na fase líquida. Esperava-se que com a pluma oscilando transversalmente como o "efeito cobra", espalharia a transferência de energia e estimularia mais colisões de bolhas e coalescência, o que resultaria em uma diferença mais proeminente entre os casos numéricos deste trabalho. Mesmo simulando 300 s físicos isso não ocorreu e a diferença com os resultados dos demais autores é notável. Contudo, o presente trabalho utilizou a formulação não divergente que não garante o balanço da informação que está sendo transportada ao longo do volume finito. Para mais informações dessa limitação e comparação de simulações utilizando a formulação divergente e a formulação não divergente consultar Preta (2018).

Figura 34 – Média da velocidade do líquido na direção  $z$  em  $z = 0,25\text{ m}$ : dados experimentais, acoplamento de duas e quatro vias sem coalescência e acoplamento de quatro vias com modelo de coalescência.



Fonte: Autoria própria.

Figura 35 – Flutuação da velocidade do líquido na direção  $z$  em  $z = 0,25\text{ m}$ : dados experimentais, acoplamento de duas e quatro vias sem coalescência e acoplamento de quatro vias com modelo de coalescência.



Fonte: Autoria própria.

Por fim, a Figura 35 apresenta novamente uma boa captura do comportamento da flutuação da velocidade do líquido na direção  $z$  entre as curvas dos resultados computacionais utilizando o MFSim e os dados experimentais. Apesar do presente trabalho utilizar como li-

teratura principal, o trabalho de [Jain, Kuipers e Deen \(2014\)](#), notou-se discrepância entre os resultados apresentados pelo solver utilizado pelos autores e o MFSim. Além da característica citada acima, destaca-se três importantes diferenças na modelagem: utilização da modelagem denso junto à VOF no MFSim para captura da interface líquido-gás, utilização da abordagem LES para a modelagem do escoamento turbulento e a consideração do *break-up* das bolhas por [Jain, Kuipers e Deen \(2014\)](#), em que os autores verificaram que este fenômeno é dominante próxima a interface líquido-gás. Essas considerações podem contribuir para a diferença entre os resultados aqui apresentados.

## 5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

O foco do presente trabalho consistiu em modelar computacionalmente o fenômeno de coalescência utilizando um código CFD, conhecido por MFSim. Essa modelagem seguiu uma abordagem Lagrangiana com base na aproximação de partículas esféricas. Com isso, não é possível, por exemplo, simular com detalhes o filme formado na interface entre duas bolhas ou gotas.

A implementação do modelo de coalescência proposto por [Sommerfeld, Bourloutski e Bröder \(2003\)](#) foi feita no código MFSim. Simulações com a abordagem Euler-Lagrange foram realizadas e validadas de acordo com dados encontrados na literatura por [Deen, Solberg e Hjertager \(2001\)](#) e [Jain, Kuipers e Deen \(2014\)](#). [Deen, Solberg e Hjertager \(2001\)](#) apresentaram resultados experimentais utilizando cloreto de sódio para anular os efeitos coalescentes do experimento, além de simularem computacionalmente a coluna de bolhas negligenciando a coalescência e utilizando uma abordagem Euler/Euler. Entre seus resultados computacionais, os autores apresentaram resultados utilizando o modelo de Sub-Malha de Smagorinsky para o fechamento da turbulência. Por outro lado, [Jain, Kuipers e Deen \(2014\)](#) utilizaram uma abordagem híbrida de volume de fluido e modelo de bolhas discretas para investigar o processo da coalescência em colunas de bolhas.

A dinâmica da interface líquido-gás foi observada nas simulações. O modelo de coalescência foi estudado e notou-se que para um fator de coalescência de 0,1, o fenômeno é dominante no início da simulação. Além disso, confrontando os resultados presentes na literatura, notou-se uma boa concordância qualitativa e quantitativa dos resultados apresentados neste trabalho. Empregando-se O MFSim, foram obtidos resultados, cujo o comportamento se aproxima mais daquele verificado nos dados experimentais.

Além disso, verificou-se que a presença da coalescência em problemas envolvendo partículas é primordial para a representação da física de problemas industriais. A partir da análise dos resultados obtidos simulando o estudo de caso da nuvem de gotas fica evidente que o comportamento observado fisicamente seria semelhante ao apresentado neste trabalho. Já no caso da coluna de bolhas que possui aplicações industriais, é de conhecimento a predominância de estudos em regime de transição de homogêneo para heterogêneo, assim como em regime heterogêneo. E para alcançar estes regimes com bolhas de diversos tamanhos, é necessário que a coalescência seja considerada.

Dando sequência ao tema, para trabalhos futuros, propõe-se simular computacionalmente no MFSim o estudo de caso da coluna de bolhas considerando um modelo adequado

para a turbulência em escoamentos borbulhantes com a modelagem denso, como por exemplo, os modelos da classe LES. Além disso, realizar a modelagem de partículas não esféricas, neste caso, poderia estudar e aproximar à realidade a coalescência. Dessa forma, simular colunas de bolhas em regime heterogêneo, onde o fenômeno da coalescência tende a influenciar diretamente o escoamento, seria possível. Como outra recomendação, poderia implementar novos modelos de coalescência e comparar com os resultados fornecidos a partir desta metodologia.

## REFERÊNCIAS

- AMOOGHIN, A. E. et al. Computational fluid dynamics simulation of bubble coalescence and breakup in an internal airlift reactor: Analysis of effects of a draft tube on hydrodynamics and mass transfer. *Applied Mathematical Modelling*, v. 39, p. 1616–1642, 2015. Citado na página [72](#).
- ASHGRIZ, N.; POO, J. Y. Coalescence and separation in binary collisions of liquid drops. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 221, p. 183–204, 1990. Citado na página [48](#).
- BADDOO, P. J. Lightning solvers for potential flows. *Fluids*, v. 5, 2020. Citado na página [23](#).
- BALZER, G.; SIMONIN, O. Extension of eulerian gas-solid flow modelling to dense fluidised bed prediction. *Proceedings of the 5th International Symposium on Refined Flow Modelling and Turbulence Measurements*, 1993. Citado na página [35](#).
- BARBI, F. et al. Numerical experiments of ascending bubbles for fluid dynamic force calculations. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, 2018. Citado na página [62](#).
- BAUMGARTEN, C. *Mixture Formation in Internal Combustion Engines*. [S.l.: s.n.], 2006. Citado na página [47](#).
- BRAZIER-SMITH, P. R.; JENNINGS, S. G.; LATHAN, J. The interaction of falling water drops: Coalescence. *Mathematical and Physical Sciences*, v. 326, p. 393–408, 1972. Citado na página [50](#).
- BRENN, G. *Droplet Collision*. [S.l.: s.n.], 2011. Citado na página [44](#).
- CHESTERS, A. K.; HOFMAN, G. Bubble coalescence in pure liquids. *Applied Scientific Research*, 1982. Citado na página [52](#).
- CHIAPOLINO, A. et al. Modeling heavy-gas dispersion in air with two-layer shallow water equations. *Fluids*, v. 5, 2020. Citado na página [23](#).
- COOKSON, H. R. and A. N. Assessing eulerian indicators for predicting mixing in a blinking vortex system with varying degrees of continuous transition. *Fluids*, v. 5, 2020. Citado na página [23](#).
- CROWE, C. T. et al. *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. 2. ed. [S.l.: s.n.], 2011. Citado 4 vezes nas páginas [31](#), [40](#), [45](#) e [59](#).
- DAMASCENO, M. M. R.; VEDOVOTTO, J. M.; SILVEIRA-NETO, A. Turbulent inlet conditions modeling using large-eddy simulations. *Computer Modeling in Engineering and Sciences*, 2015. Citado na página [62](#).
- DEEN, N. G.; SOLBERG, T.; HJERTAGER, B. H. Large eddy simulation of the gasliquid flow in a square cross-sectioned bubble column. *Chemical Engineering Science*, v. 56, p. 6341–6349, 2001. Citado 4 vezes nas páginas [69](#), [72](#), [73](#) e [77](#).

- DOSTALÍK, M. et al. A simple construction of a thermodynamically consistent mathematical model for non-isothermal flows of dilute compressible polymeric fluids. *Fluids*, v. 5, 2020. Citado na página 23.
- ELIAS, A. J. Modelagem híbrida URANS-LES para escoamentos turbulentos. In: . [S.l.: s.n.], 2018. Citado na página 62.
- EVARD, F.; DENNER, F.; WACHEM, B. van. A multi-scale approach to simulate atomisation processes. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 119, p. 194–2016, 2019. Citado na página 54.
- GOOSSENS, W. R. A. Review of the empirical correlations for the drag coefficient of rigid spheres. *Powder Technology*, 2019. Citado 2 vezes nas páginas 39 e 40.
- GRUBER, M. C.; RADL, S.; KHINAST, J. G. Simulation of bubbles behavior in steel continuous casting mold using an euler-lagrange framework with modified bubble coalescence and breakup models. *Chemical Engineering Science*, v. 137, p. 188–204, 2015. Citado na página 72.
- HART, J. *Comparison of turbulence modeling approaches to the simulation of a dimpled sphere*. [S.l.: s.n.], 2016. v. 147. Citado na página 33.
- JAIN, D.; KUIPERS, J. A. M.; DEEN, N. G. Numerical study of coalescence and breakup in a bubble column using a hybrid volume of fluid and discrete bubble model approach. *Chemical Engineering Science*, v. 119, 2014. Citado 5 vezes nas páginas 36, 49, 72, 76 e 77.
- JIANG, N. et al. On the foundations of eddy viscosity models of turbulence. *Fluids*, v. 5, 2020. Citado na página 23.
- KANTARCI, N.; BORAK, F.; ULGEN, K. O. Bubble column reactors. *Process Biochemistry*, v. 40, p. 2263–2283, 2005. Citado na página 69.
- KATOPODES, N. D. *Free Surface Flow: Environmental Fluid Mechanics*. [S.l.: s.n.], 2019. v. 1. Citado na página 27.
- KELIN, M.; GERMANO, M. Analysis and modelling of the commutation error. *Fluids*, v. 6, 2020. Citado na página 23.
- KEMPE, T.; FRÖHLICH, J. An improved immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particle laden flows. *Journal of Computational Physics*, v. 231, 2012. Citado na página 36.
- KIM, W. K.; LEE, K. L. Coalescence behavior of two bubbles in stagnant liquids. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, v. 20, p. 448–453, 1987. Citado na página 65.
- KIRKPATRICK, R. D.; LOCKETT, M. J. The influence of approach velocity on bubble coalescence. *Chemical Engineering Science*, v. 29, p. 2363–2373, 1974. Citado na página 65.
- KOLESKI, G.; BICKEL, T. Stokes equation in a semi-infinite region: Generalization of the lamb solution and applications to marangoni flows. *Fluids*, v. 5, 2020. Citado na página 23.
- KOLEV, N. I. *Multiphase Flow Dynamics, 1: Fundamentals*. [S.l.: s.n.], 2007. Citado na página 30.

KWAKKEL, M.; BREUGEM, W. P.; BOERSMA, B. J. Extension of a clsvof method for drople-laden flows with a coalescence/breakup model. *Journal of Computational Physics*, v. 253, p. 166–188, 2013. Citado na página 49.

LAU, Y. M. et al. Numerical study of bubble break-up in bubbly flows using a deterministic eulerlagrange framework. *Chem. Eng. Sci.*, v. 108, p. 9–22, 2014. Citado na página 30.

LEE, S. M.; KIM, D. H.; LEE, H. J. Experimental verification of the o’roure model for drop coalescence in multiphase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 34, p. 791–800, 2008. Citado na página 51.

LEONARD, C. et al. Bubble column reactors for high pressures and high temperatures operation. *Chemical engineering research and design*, v. 100, p. 391421, 2015. Citado 3 vezes nas páginas 24, 68 e 69.

LI, L. J.; LIU, Y. H.; LIU, J. J. Numerical investigation of drop coalescence in multiphase flows using the o’roure model. *Journal of Multiphase Flow*, v. 37, p. 898–906, 2011. Citado na página 51.

LIAO, Y.; LUCAS, D. A literature review on mechanisms and models for the coalescence process of fluid particles. *Chemical Engineering Science*, v. 65, p. 28512864, 2010. Citado na página 53.

LILLY, D. K. A proposed modification of the germano sub grid-scale closure method. *Phys. Fluids A*, v. 4, p. 633–635, 1992. Citado na página 58.

MAGUALHÃES, G. M. Soluções contínuas e discretas de escoamentos cisalhantes livres em regimes laminar e turbulento. *Dissertação de Mestrado - Universidade Federal de Uberlândia*, 2018. Citado na página 56.

MAITRI, R. V. et al. An improved immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particle laden flows. *Computers and Fluids*, v. 175, 2018. Citado na página 36.

MEI, R. An approximate expression for the shear lift force on a spherical particle at finite reynolds number. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 18, p. 145–147, 1992. Citado na página 41.

MIMEAU, C.; MORTAZAVI, I. A review of vortex methods and their applications: From creation to recent advances. *Fluids*, v. 6, 2020. Citado na página 23.

MUNNANNUR, A.; REITZ, R. A new predictive model for fragmenting and non-fragmenting binary droplet collisions. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 33, p. 873–896, 2007. Citado na página 49.

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*, 2019. Citado na página 62.

NGUYEN, V.; PAPAVALASSIOU, D. V. Hydrodynamic dispersion in porous media and the significance of lagrangian time and space scales. *Fluids*, v. 5, 2020. Citado na página 23.

ODAR, F.; HAMILTON, W. S. Forces on a sphere accelerating in a viscous fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 18, p. 302–314, 1964. Citado na página 43.

- OESTERLE, B.; DINH, T. B. Experiments on the lift of a spinning sphere in a range of intermediate reynolds numbers. *Experiments in Fluids*, v. 25, p. 16–22, 1998. Citado na página 42.
- O'ROURKE, P. J. *Collective Drop Effects on Vaporizing Liquid Sprays*. Tese (Doutorado) — Princeton University, New Jersey, 1981. Citado 3 vezes nas páginas 48, 50 e 51.
- OSHER, S. J.; SETHIAN, J. A. Fronts propagating with curvature dependent speed: algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *J. Comput. Phys.*, v. 79, 1998. Citado na página 34.
- PINHEIRO, A. P.; VEDOVOTTO, J. M. Evaluation of droplet evaporation models and the incorporation of natural convection effects. *Flow, Turbulence and Combustion*, 2019. Citado na página 62.
- PRETA, R. T. O. C. Implementação, comparação e avaliação de modelos submalhas não lineares. *Dissertação de Mestrado - Universidade Federal de Uberlândia*, 2018. Citado na página 74.
- PRINCE, M. J.; BLANCH, H. W. Bubble coalescence and break-up in airsparged bubble columns. *AIChE Journal*, v. 36, p. 1485–1499, 1990. Citado 4 vezes nas páginas 48, 49, 51 e 53.
- PROSPERETTI, A.; TRYGGVASON, G. *Computational Methods for Multiphase Flow*. [S.l.: s.n.], 2009. Citado na página 35.
- RAJAPPAN, A.; MCKINLEY, G. H. Polymers and plastrons in parallel yield enhanced turbulent drag reduction. *Fluids*, v. 5, 2020. Citado na página 23.
- RUBINOW, S. I.; KELLER, J. B. The transverse force on a spinning sphere moving in a viscous fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 11, p. 447–459, 1961. Citado 2 vezes nas páginas 41 e 43.
- RUDMAN, M. Volume-tracking methods for interfacial flow calculations. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, v. 24, 1997. Citado na página 34.
- SAFFMAN, P. G. The lift on a small sphere in a slow shear flow. *J. Fluid Mech*, v. 22, p. 385–400, 1965. Citado na página 40.
- SAFFMAN, P. G. Corrigendum to "the lift on a small sphere in a slow shear flow". *J. Fluid Mech*, v. 31, p. 624, 1968. Citado na página 40.
- SANTOS, J. G. F. Modelagem matemática e computacional de escoamentos gás-sólidos em malha adaptativa dinâmica. *Dissertação de Mestrado - Universidade Federal de Uberlândia*, 2019. Citado 10 vezes nas páginas 32, 34, 36, 37, 39, 41, 42, 59, 61 e 62.
- SARHAN, A. R.; NASER, J.; BROOKS, G. Effects of particle size and concentration on bubble coalescence and froth formation in a slurry bubble column. *Particuology*, v. 36, p. 82–95, 2018. Citado na página 72.
- SCHILLER, L.; NAUMANN, A. A drag coefficient correlation. *Ver Deutsch. Ing.*, v. 77, 1933. Citado na página 40.
- SETHIAN, J. A.; SMERKA, P. Level set methods for fluid interfaces. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 35, 2003. Citado na página 34.

- SEVIK, M.; PARK, S. H. The splitting of drops and bubbles by turbulent fluid flow. *J. Fluids Eng.*, v. 95, p. 53–60, 1973. Citado na página 30.
- SILVA-LEON, J.; CIONCOLINI, A. Experiments on flexible filaments in air flow for aeroelasticity and fluid-structure interaction models validation. *Fluids*, v. 5, 2020. Citado na página 23.
- SILVEIRA-NETO, A. *Escoamentos Turbulentos: Análise Física e Modelagem Teórica*. 1. ed. [S.l.: s.n.], 2020. Citado 3 vezes nas páginas 24, 33 e 57.
- SILVEIRA-NETO, A. et al. *Modelagem de um spray evaporativo água-amônia*. 2021. Citado 5 vezes nas páginas 25, 44, 46, 47 e 48.
- SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations. *Mon. Weath. Rev.*, v. 91, p. 99–164, 1963. Citado na página 57.
- SOLIGO, G.; ROCCON, A.; SOLDATI, A. Breakage, coalescence and size distribution of surfactant-laden droplets in turbulent flow. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 881, p. 244282, 2019. Citado na página 53.
- SOMMERFELD, M. Theoretical and experimental modelling of particulate flows. *Lecture Series 2000-06, von Karman Institute for Fluid Dynamics*, 2000. Citado 4 vezes nas páginas 40, 41, 42 e 43.
- SOMMERFELD, M. Validation of a stochastic lagrangian modelling approach for inter-particle collisions in homogeneous isotropic turbulence. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 27, p. 18291858, 2001. Citado na página 59.
- SOMMERFELD, M. Numerical methods for dispersed multiphase flows. p. 327–396, 2017. Citado 7 vezes nas páginas 29, 30, 31, 34, 36, 37 e 38.
- SOMMERFELD, M.; BOURLOUTSKI, E.; BRÖDER, D. Euler-lagrange calculations of bubbly flows with consideration of bubble coalescence. *Can. J. Chem. Eng.*, v. 81, p. 508–518, 2003. Citado 5 vezes nas páginas 49, 51, 52, 54 e 77.
- SU, X. et al. Investigation of high lift force generation of dragonfly wing by a novel advanced mode in hover. *Fluids*, v. 5, 2020. Citado na página 23.
- SUNDARESAN, S. Modeling the hydrodynamics of multiphase flow reactors: Current status and challenges. *AIChE J.*, v. 46, 2000. Citado na página 35.
- TENNISON, P. J. et al. An experimental and numerical study of sprays from a common rail injection system for use in an hsd diesel engine. *Journal of Engines*, v. 107, p. 1228–1244, 1984. Citado na página 48.
- VILLAR, M. M. Análise numérica detalhada de escoamentos multifásicos bidimensionais. *Tese de Doutorado - Universidade Federal de Uberlândia*, 2007. Citado na página 24.
- WEIJERMARS, R.; KHANAL, A.; ZUO, L. Fast models of hydrocarbon migration paths and pressure depletion based on complex analysis methods (cam): Mini-review and verification. *Fluids*, v. 5, 2020. Citado na página 23.
- WHITE, F. M. *Mecânica dos Fluidos*. 6. ed. [S.l.: s.n.], 2011. Citado na página 28.

ZHANG, D. H.; DEEN, N. G.; KUIPERS, J. A. M. Euler-euler modelling of flow, mass transfer, and chemical reaction in a bubble column. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 48, 2009. Citado na página 35.

ZHANG, P.; LAW, C. K. An analysis of head-on droplet collision with large deformation in gaseous medium. *Physics of Fluids*, v. 23, 2011. Citado na página 49.

ZHANG, X.; AGARWAL, R. K. Numerical simulation of fountain formation due to normal and inclined twin-jet impingement on ground. *Fluids*, v. 5, 2020. Citado na página 23.

ZHANG, X. L.; LI, X. J.; LIU, J. W. A new approach to modeling drop coalescence in multiphase flows using o’rourke’s model. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 35, p. 1160–1170, 2009. Citado na página 51.

ÇENGEL, Y. A.; CIMBALA, J. M. *Fluid mechanics: fundamentals and applications*. 3. ed. [S.l.: s.n.], 2015. Citado na página 28.