

Ricardo Tadeu Oliveira Catta Preta

**Modelagem matemática e computacional de
escoamentos turbulentos bifásicos em
regime denso**

Uberlândia

2023

Ricardo Tadeu Oliveira Catta Preta

**Modelagem matemática e computacional de
escoamentos turbulentos bifásicos em regime denso**

Universidade Federal de Uberlândia–UFU

Faculdade de Engenharia Mecânica

Programa de Pós-Graduação

Orientador: Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto

Uberlândia

2023

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

P942 Preta, Ricardo Tadeu Oliveira Catta, 1989-
2023 Modelagem matemática e computacional de escoamentos
turbulentos bifásicos em regime denso [recurso
eletrônico] / Ricardo Tadeu Oliveira Catta Preta. -
2023.

Orientador: Aristeu da Silveira Neto.
Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Uberlândia,
Pós-graduação em Engenharia Mecânica.
Modo de acesso: Internet.
Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.te.2023.418>
Inclui bibliografia.

1. Engenharia mecânica. I. Silveira Neto, Aristeu da
,1955-, (Orient.). II. Universidade Federal de
Uberlândia. Pós-graduação em Engenharia Mecânica. III.
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: | Tese de Doutorado Acadêmico, nº 358, PPGEM | | | | |
| | Data: | 24/07/2023 | Hora de início: | 14:00 | Hora de encerramento: |
| Matrícula do Discente: | 11823EMC013 | | | | |
| Nome do Discente: | Ricardo Tadeu Oliveira Catta Preta | | | | |
| Título do Trabalho: | Modelagem matemática e computacional de escoamentos turbulentos bifásicos em regime denso | | | | |
| 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: | "Modelagem de escoamentos turbulentos bifásicos - Sprays" | | | | |

Reuniu-se por meio de videoconferência a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, assim composta: Professores Doutores: Francisco José de Souza - FEMEC/UFU; Daniel Dall'Onder dos Santos - FEMEC/UFU; Henry França Meier - FURB; Juan Pablo de Lima Costa Salazar - UFSC; Ricardo Serfaty - PETROBRAS; e Aristeu da Silveira Neto - FEMEC/UFU, orientador do candidato.

Iniciando os trabalhos, o presidente da mesa, Dr. Aristeu da Silveira Neto, apresentou a Comissão Examinadora e o candidato, agradeceu a presença do público, e concedeu ao Discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação do Discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

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

Aprovado.

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

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

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



Documento assinado eletronicamente por **Aristeu da Silveira Neto, Professor(a) do Magistério Superior**, em 24/07/2023, às 17:44, 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 24/07/2023, às 17:44, 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 **Juan Pablo de Lima Costa Salazar, Usuário Externo**, em 24/07/2023, às 17:45, 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 **ricardo serfaty, Usuário Externo**, em 24/07/2023, às 17:45, 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 **Francisco José de Souza, Professor(a) do Magistério Superior**, em 24/07/2023, às 17:45, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Henry França Meier, Usuário Externo**, em 24/07/2023, às 17:54, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **4602743** e o código CRC **5B7916E3**.

Agradecimentos

Gostaria de começar agradecendo a todos os grandes cientistas que já faleceram, mas contribuíram para a construção do conhecimento em mecânica dos fluidos, desde Newton, passando por Navier, Stokes, Einstein até o Landau. Não menos importante, gostaria de agradecer à minha Mãe, irmãs, família, minha companheira Monize, ao Programa de Pós-graduação da Engenharia Mecânica da UFU e ao MFLab pelo suporte e infraestrutura necessários para a realização dos trabalhos.

Ao Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto, o qual tenho a honra de ter tido como meu orientador nos últimos 7 anos. Com ele, obtive o exemplo do que é orientar um aluno, e obtive discussões maravilhosas sobre a mecânica dos fluidos.

Ao Prof. Dr. João Marcelo Vedovotto e a Dra. Millena Martins Villar Vale pelas contribuições teóricas e computacionais ao longo de toda minha pesquisa.

Agradeço aos meus antigos orientadores Dra. Jaqueline, Dr. Libardo e ao professor que foi fonte de grande inspiração como físico, Dr. Filadelfo Cardoso do Santos.

Ao Igor Baratta, por ser o meu grande exemplo e influenciador de boas ideias. Aos meus amigos, Alejandro, Daniel, Vinícios, Rodrigo e todos os companheiros do Laboratório MFLab que tive contato nos últimos 7 anos. Sem ajuda deles e do suporte do MFLab, nada disso seria possível.

Resumo

Escoamentos turbulentos em sistemas multifásicos representam um desafio significativo na física clássica, oferecendo um campo em aberto para pesquisa. Compreender esse fenômeno pode levar a avanços importantes com aplicações em engenharia. O objetivo desta tese é desenvolver um modelo para avaliar como a presença de um regime denso de partículas em um fluido afeta a turbulência. É sabido que partículas imersas em um fluido alteram sua viscosidade. Utilizando a formulação Euler-Lagrange e a metodologia LES (Large Eddy Simulation), aplicamos uma filtragem passa-baixa às equações de balanço de massa, de quantidade de movimento linear e de energia. Propomos uma decomposição tripla do campo de velocidade euleriana para considerar as flutuações causadas pelo movimento relativo entre as fases contínua e dispersa. Realizamos simulações de dois problemas distintos. O primeiro problema é um caso icônico de injeção de bolhas na parte inferior de uma coluna vertical preenchida com água. O segundo problema envolve a simulação de um caso de spray de cone cheio. Também propomos uma viscosidade modificada e uma força de arrasto em função da fração volumétrica da fase contínua. Avaliamos diferentes modelos de fechamento para a turbulência e comparamos os resultados da formulação de três vias com a de duas vias. Os resultados das simulações computacionais foram comparados com os resultados de um experimento material. A energia cinética turbulenta obtida no experimento material se aproximou bastante do modelo de Smagorinsky com uma constante $C_s = 0,15$. A análise dos dados coletados validou o modelo proposto e demonstrou como a modelagem de escoamentos turbulentos densos incorpora mais física para a descrição do problema.

Palavras-chave: Escoamentos Multifásicos; Turbulência; Euler-Lagrange; Regime Denso; Simulação das Grandes Estruturas.

Abstract

Turbulent flows in multiphase systems represent a significant challenge in classical physics, offering an open field for research. Understanding this phenomenon can lead to important advancements with engineering applications. The objective of this thesis is to develop a model to assess how the presence of a dense particle regime in a fluid affects turbulence. It is known that particles immersed in a fluid alter its viscosity. Utilizing the Euler-Lagrange formulation and the Large Eddy Simulation (LES) methodology, we apply a low-pass filtering to the equations of mass balance, linear momentum, and energy. We propose a triple decomposition of the Eulerian velocity field to account for fluctuations caused by the relative motion between the continuous and dispersed phases. We conduct simulations of two distinct problems. The first problem is an iconic case of bubble injection at the bottom of a water-filled vertical column. The second problem involves simulating a full cone spray case. We also propose a modified viscosity and drag force based on the volumetric fraction of the continuous phase. We evaluate different closure models for turbulence and compare the results of the three-way formulation with the two-way formulation. The results of the computational experiments are compared with those of a physical experiment. The turbulent kinetic energy obtained in the physical experiment closely matched the Smagorinsky model with a constant $C_s = 0.15$. The analysis of the collected data validates the proposed model and demonstrates how the modeling of dense turbulent flows incorporates more physics for describing the phenomenon.

Keywords: Multiphase Flows; Turbulence; Euler-Lagrange; Dense Regime; Large Eddy Simulation.

Lista de figuras

| | |
|---|----|
| Figura 1 – Classificação de escoamentos multifásicos conforme a fração volumétrica da fase. Adaptado de Messa et al. (2021). | 28 |
| Figura 2 – Fluxograma da metodologia proposta. | 35 |
| Figura 3 – Modelo icônico-diagramático criado por Deen, Hjertager e Solberg (2000) | 36 |
| Figura 4 – Fração volumétrica máxima da fase contínua para uma partícula lagrangiana inserida em um cubo de volume $1 m^3$ | 78 |
| Figura 5 – Fração volumétrica máxima para uma partícula lagrangeana em função da razão entre o tamanho do filtro δ e do raio máximo r_m | 79 |
| Figura 6 – Fração volumétrica máxima para uma partícula lagrangiana em função da razão entre a malha computacional Δ e do raio máximo r_m | 80 |
| Figura 7 – Localização das variáveis na célula de MAC (VILLAR, 2007). | 84 |
| Figura 8 – Razão da viscosidade molecular modificada com a viscosidade molecular da fase contínua (μ_m/μ^k) em função da razão entre a fração volumétrica da fase dispersa com a fração volumétrica máxima. Sendo $\delta_n = nr_d$, com $n = 0, 3, 5, 7, 10$ e r_d é o raio da partícula. | 91 |
| Figura 9 – Razão da viscosidade molecular modificada com a viscosidade da fase contínua (μ_m/μ^k) em função da fração volumétrica da fase dispersa. Sendo $\delta_n = nr_d$, com $n = 0, 3, 5, 7, 10$ e r_d é o raio da partícula. | 93 |
| Figura 10 – Razão da viscosidade molecular modificada com a viscosidade da fase contínua (μ_m/μ^k) em função da fração volumétrica da fase dispersa. Sendo ε_{dm} , assíntotas das curvas da viscosidade molecular modificada. | 94 |

| | |
|---|-----|
| Figura 11 – Imagens da interação entre as bolhas deletadas e o movimento da VOF (Volume of Fluid) no instante da eliminação. Na legenda, volfrac representa a fração volumétrica da função coloração, marcando 1 onde é líquido e 0 onde é gás. | 97 |
| Figura 12 – Malha do campo euleriano da figura acima | 97 |
| Figura 13 – Visão superior da injeção e movimento de bolhas na coluna de água. | 98 |
| Figura 14 – Visão inferior da injeção e movimento de bolhas na coluna de água. | 98 |
| Figura 15 – Injeção de bolhas de ar num canal vertical preenchido com água em instantes diferentes. Em cada coluna, temos o tempo da simulação e as respectivas imagens dos campos de isoQ (Critério Q), e a dinâmica das bolhas. Imagens feitas com o Software Paraview. | 100 |
| Figura 16 – Imagens instantâneas da coluna de bolhas. Mostramos a interação entre as bolhas e a interface livre água-ar modelada com o método VOF. | 101 |
| Figura 17 – A imagem é no instante onde as bolhas são deletadas na interface. Podemos observar a interação entre as bolhas e a interface livre água-ar modelada pelo método VOF. | 102 |
| Figura 18 – Velocidade média na direção z. | 103 |
| Figura 19 – Desvio padrão da velocidade na direção z | 104 |
| Figura 20 – Modificação da viscosidade molecular (μ') média do campo euleriano. | 105 |
| Figura 21 – Desvio padrão modificação da viscosidade molecular (μ') do campo euleriano. | 106 |
| Figura 22 – Densidade média do campo euleriano. | 107 |
| Figura 23 – Desvio padrão da densidade do campo euleriano. | 108 |
| Figura 24 – Valor da vorticidade média do campo euleriano. | 109 |
| Figura 25 – Desvio padrão da vorticidade do campo euleriano. | 110 |
| Figura 26 – Fração volumétrica média da fase contínua. | 112 |
| Figura 27 – Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 113 |

| | |
|--|-----|
| Figura 28 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 114 |
| Figura 29 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 114 |
| Figura 30 – Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 115 |
| Figura 31 – Densidade espectral de energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana e a reta com inclinação de $-5/3$. 116 | |
| Figura 32 – Velocidade média dos campos eulerianos da formulação de duas vias (com viscosidade efetiva $\mu_{ef} = \mu^k + \mu_t$) e três vias (com viscosidade efetiva $\mu_{ef} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu' + \mu_t)$) comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 118 |
| Figura 33 – Desvio padrão dos campos eulerianos da formulação de duas vias (com viscosidade efetiva $\mu_{ef} = \mu^k + \mu_t$) e três vias (com viscosidade efetiva $\mu_{ef} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu' + \mu_t)$) comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 119 |
| Figura 34 – Desvio padrão dos campos eulerianos da formulação de duas vias (com viscosidade efetiva $\mu_{ef} = \mu^k + \mu_t$) e três vias (com viscosidade efetiva $\mu_{ef} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu' + \mu_t)$) na direção x, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 120 |
| Figura 35 – Energia cinética turbulenta dos campos eulerianos da formulação de duas vias (com viscosidade efetiva $\mu_{ef} = \mu^k + \mu_t$) e três vias (com viscosidade efetiva $\mu_{ef} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu' + \mu_t)$), comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 121 |

| | |
|--|-----|
| Figura 36 – Velocidade média dos campos eulerianos da formulação 3-vias tradicional (com viscosidade efetiva $\mu_{ef_1} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu_t)$) e nossa formulação 3-vias, sem e com fechamento da turbulência (com viscosidades efetivas $\mu_{ef_2} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu')$ e $\mu_{ef_3} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu' + \mu_t)$) comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 126 |
| Figura 37 – Desvio padrão de w dos campos eulerianos da formulação 3-vias tradicional (com viscosidade efetiva $\mu_{ef_1} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu_t)$) e nossa formulação 3-vias, sem e com fechamento da turbulência (com viscosidades efetivas $\mu_{ef_2} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu')$ e $\mu_{ef_3} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu' + \mu_t)$) comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 127 |
| Figura 38 – Desvio padrão de u dos campos eulerianos da formulação 3-vias tradicional (com viscosidade efetiva $\mu_{ef_1} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu_t)$) e nossa formulação 3-vias, sem e com fechamento da turbulência (com viscosidades efetivas $\mu_{ef_2} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu')$ e $\mu_{ef_3} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu' + \mu_t)$) comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 128 |
| Figura 39 – Energia cinética turbulenta dos campos eulerianos da formulação 3-vias tradicional (com viscosidade efetiva $\mu_{ef_1} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu_t)$) e nossa formulação 3-vias, sem e com fechamento da turbulência (com viscosidades efetivas $\mu_{ef_2} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu')$ e $\mu_{ef_3} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu' + \mu_t)$) comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 129 |
| Figura 40 – Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 130 |
| Figura 41 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z , comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 131 |
| Figura 42 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x , comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 131 |

| | |
|---|-----|
| Figura 43 – Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 132 |
| Figura 44 – Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 134 |
| Figura 45 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 134 |
| Figura 46 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 135 |
| Figura 47 – Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 135 |
| Figura 48 – Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 137 |
| Figura 49 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 138 |
| Figura 50 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 139 |
| Figura 51 – Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 139 |
| Figura 52 – Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 140 |
| Figura 53 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 141 |
| Figura 54 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 142 |

| | |
|---|-----|
| Figura 55 – Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 143 |
| Figura 56 – Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 144 |
| Figura 57 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 144 |
| Figura 58 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 145 |
| Figura 59 – Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 145 |
| Figura 60 – Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 146 |
| Figura 61 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 147 |
| Figura 62 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 147 |
| Figura 63 – Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 148 |
| Figura 64 – Velocidade média do campo euleriano comparada com o resultado experimental de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 150 |
| Figura 65 – Desvio padrão do campo de flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado experimental de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 150 |
| Figura 66 – Desvio padrão do campo de flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado experimental de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 151 |

| | |
|--|-----|
| Figura 67 – Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparada com o resultado experimental de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 151 |
| Figura 68 – Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 152 |
| Figura 69 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 153 |
| Figura 70 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 153 |
| Figura 71 – Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 154 |
| Figura 72 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 155 |
| Figura 73 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001). | 155 |

Lista de tabelas

| | |
|--|-----|
| Tabela 1 – Modelos de fechamento da turbulência que foram simulados. . . | 96 |
| Tabela 2 – Cálculo dos erros para velocidade média w | 117 |
| Tabela 3 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de w | 117 |
| Tabela 4 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de u | 117 |
| Tabela 5 – Cálculo dos erros para k_e | 117 |
| Tabela 6 – Cálculo dos erros para velocidade média w | 121 |
| Tabela 7 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de w | 122 |
| Tabela 8 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de u | 122 |
| Tabela 9 – Cálculo dos erros para k_e | 122 |
| Tabela 10 – Cálculo dos erros para a velocidade média de w | 132 |
| Tabela 11 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de w | 133 |
| Tabela 12 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de u | 133 |
| Tabela 13 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de k_e | 133 |
| Tabela 14 – Cálculo dos erros para a velocidade média de w | 136 |
| Tabela 15 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de w | 136 |
| Tabela 16 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de u | 136 |
| Tabela 17 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de k_e | 136 |
| Tabela 18 – Cálculo dos erros para a velocidade média de w | 141 |
| Tabela 19 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de w | 142 |
| Tabela 20 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de u | 142 |
| Tabela 21 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de k_e | 143 |
| Tabela 22 – Comparação das forças de arrasto e viscosidade | 149 |

Sumário

| | | |
|------------|--|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO | 20 |
| 1.1 | Importância do tema e contextualização | 22 |
| 1.2 | Objetivos | 24 |
| 1.2.1 | Objetivos gerais | 24 |
| 1.2.2 | Objetivos específicos | 24 |
| 2 | REVISÃO BIBLIOGRÁFICA | 26 |
| 2.1 | Visão geral da modelagem multifásica | 26 |
| 2.1.1 | Classificação de escoamentos multifásicos | 26 |
| 2.1.2 | Classificação das metodologias de escoamentos multifásicos | 26 |
| 2.1.3 | Classificação das metodologias para escoamento da fase contínua | 27 |
| 2.1.4 | Classificação das metodologias para escoamento da fase dispersa | 29 |
| 2.2 | Principais autores consultados sobre a metodologia dos multifásicos | 30 |
| 2.2.1 | Einstein e Landau | 30 |
| 2.2.2 | G. K. Batchelor e D. A. Drew | 31 |
| 2.2.3 | Bird, Anderson e Jackson | 31 |
| 2.2.4 | Ishii | 31 |
| 2.2.5 | Evrard, Denner e Berend | 32 |
| 2.2.6 | Capecelatro e Desjardins | 32 |
| 2.3 | Mecânica Estatística e Processamento de Dados | 32 |
| 3 | METODOLOGIA | 34 |
| 3.1 | Preliminares | 34 |
| 3.2 | Modelo físico | 35 |
| 3.3 | Modelagem Matemática | 37 |
| 3.3.1 | Modelagem proposta por Drew | 37 |
| 3.3.1.1 | Propriedades de filtragem | 37 |
| 3.3.1.2 | Dedução da equação da continuidade para escoamentos bifásicos | 39 |

| | | |
|------------|---|-----------|
| 3.3.1.3 | Dedução da equação do balanço de quantidade de movimento linear . . . | 40 |
| 3.3.2 | Modelagem proposta por Capecelatro e Desjardins | 44 |
| 3.3.2.1 | Propriedades de filtragem | 44 |
| 3.3.2.2 | Dedução da equação da continuidade | 48 |
| 3.3.2.3 | Dedução da equação do balanço da quantidade de movimento linear filtrada | 49 |
| 3.3.3 | Modelagem proposta pelo Evrard, Denner e Wachen | 51 |
| 3.3.3.1 | Equação da continuidade para a fração volumétrica | 51 |
| 3.3.3.2 | Equação do balanço de quantidade de movimento linear sem mudança de fase | 52 |
| 3.3.4 | Modelagem proposta por Deen, Solberg e Hjertager (2001) | 52 |
| 3.3.5 | Metodologia adotada | 54 |
| 3.3.5.1 | Função indicadora e propriedades de filtragem | 54 |
| 3.3.5.2 | Filtragem da equação da continuidade | 55 |
| 3.3.5.3 | Filtragem das equações de Navier-Stokes | 57 |
| 3.3.5.4 | Decomposição do campo de velocidade | 61 |
| 3.3.5.5 | Fechamento dos componentes de R_{ij}^p | 63 |
| 3.3.5.6 | Fechamento dos componentes de τ_{ij}^t | 65 |
| 3.3.5.7 | Equações para o balanço de quantidade de movimento linear para escoamentos turbulentos bifásicos em regime denso | 66 |
| 3.3.5.8 | Resumo do problema de fechamento para escoamentos bifásicos turbulentos em regime denso | 67 |
| 3.3.5.9 | Filtragem da equação de energia térmica | 68 |
| 3.3.5.10 | Simplificação da equação da energia térmica | 70 |
| 3.3.5.11 | Decomposição dos campos de temperatura e velocidade | 70 |
| 3.3.5.12 | Equações lagrangianas | 73 |
| 3.3.5.13 | Equação de movimento para as partículas lagrangianas | 73 |
| 3.3.5.14 | Equação da energia térmica para partículas lagrangianas | 75 |
| 3.3.5.15 | Método para a escolha da função núcleo de suporte compacto | 76 |
| 3.3.6 | Um resumo para o sistema completo de equações matemáticas para escoamentos bifásicos densos incompressíveis e turbulentos | 81 |
| 3.4 | Modelagem discreta e computacional | 82 |
| 3.4.1 | MFSim | 82 |
| 3.4.2 | Formulação euleriana | 83 |

| | | |
|------------|---|------------|
| 3.4.3 | Formulação lagrangiana | 84 |
| 3.4.4 | Pseudo algoritmo | 85 |
| 4 | RESULTADOS E DISCUSSÕES | 87 |
| 4.1 | Análise computacional da viscosidade molecular modificada . | 87 |
| 4.2 | Experimento material | 95 |
| 4.3 | Simulação computacional | 95 |
| 4.3.1 | Caso 1 ($C_s = 0, 15$): | 96 |
| 4.3.1.1 | Análise qualitativa | 97 |
| 4.3.1.2 | Análise quantitativa | 112 |
| 4.3.1.3 | Discussão sobre o impacto das diferentes formas de modelar a viscosidade efetiva | 124 |
| 4.3.2 | Caso 2 ($C_s = 0, 1$): | 130 |
| 4.3.2.1 | Análise quantitativa | 130 |
| 4.3.3 | Caso 3 ($C_s = 0, 2$): | 133 |
| 4.3.3.1 | Análise quantitativa | 134 |
| 4.3.4 | Comparação entre os casos 1, 2 e 3: | 137 |
| 4.3.4.1 | Análise quantitativa | 137 |
| 4.3.5 | Caso 4 (Germano-Lilly): | 140 |
| 4.3.5.1 | Análise quantitativa | 140 |
| 4.3.6 | Comparação entre os casos 1, 2, 3 e 4: | 144 |
| 4.3.6.1 | Análise quantitativa | 144 |
| 4.3.7 | Caso 5: | 146 |
| 4.3.7.1 | Análise quantitativa | 146 |
| 4.3.8 | Comparação com modelos de outros autores | 148 |
| 4.3.8.1 | Comparação com Deen, Solberg e Hjertager (2001) | 148 |
| 4.3.9 | Comparação com o modelo de Zhang, Deen e Kuipers (2006) | 152 |
| 5 | CONCLUSÃO | 157 |
| 6 | ATIVIDADES FUTURAS | 159 |
| | REFERÊNCIAS | 160 |

| | | |
|-----------|------------------------------|------------|
| | APÊNDICES | 168 |
| .1 | Deduções das equações | 169 |
| .1.1 | Dedução da equação 3.31 | 169 |
| .1.2 | Dedução da equação 3.38 | 169 |
| .1.3 | Dedução da equação 3.39 | 170 |
| .1.4 | Dedução da equação 3.40 | 170 |
| .1.5 | Dedução da equação 3.62 | 170 |
| .1.6 | Dedução da equação 3.65 | 171 |
| .1.7 | Dedução da equação 3.80 | 172 |
| .1.8 | Dedução da equação 3.82 | 172 |
| .1.9 | Dedução da equação 3.32 | 173 |

1 Introdução

Em 1905, em seu famoso ano miraculoso, Albert Einstein defendeu sua tese de doutorado (com correções em 1906) (EINSTEIN, 1906). A partir desse estudo, ficou demonstrado matematicamente que a presença de partículas sólidas em um líquido altera a viscosidade do fluido. Em outras palavras, Einstein demonstrou que em um escoamento bifásico é necessária uma modificação da viscosidade molecular da fase contínua. Seu trabalho foi deduzido para baixas concentrações de esferas e escoamento em regime de Stokes (baixo número de Reynolds), mas serviu de base para estudos posteriores com alto número de Reynolds e concentrações mais elevadas de partículas — podendo estar na fase líquida ou gasosa (ISHII; HIBIKI, 2010; BATCHELOR; GREEN, 1972; ROSTI; BRANDT; MITRA, 2018).

Existem muitas categorias de estudo sobre a viscosidade. Na presente pesquisa, trataremos especificamente do ramo conhecido como viscosidade de suspensões (BIRD, 2002; BATCHELOR, 2000). Há modelos para suspensões de partículas sólidas e em regime diluído — onde se enquadra o modelo do Einstein. Alguns são modelos para regimes semi-diluídos, como os de Guth (1938), Vand (1948), Trevelyan e Mason (1951), Batchelor (1977). Para escoamentos com partículas não esféricas e concentradas existem modelos como Krieger e Dougherty (1959), Ishii e Hibiki (2010).

Quando incorporamos a análise da modificação da viscosidade no contexto da turbulência, o desafio se torna significativamente mais avançado. Como bem alertaram Balachandar e Eaton (2010): “*Turbulence and multiphase flows are two of the most challenging topics in fluid mechanics, and when combined they pose a formidable challenge, even in the dilute dispersed regime*”. Essa declaração alerta para outro desafio da modelagem da viscosidade modificada: quando a fração volumétrica de partículas é densa. Esta área ainda é pouco explorada (DENN; MORRIS, 2014). A razão é que não sabemos exatamente como a flutuação das partículas contribuem para a promoção ou atenuação dos efeitos turbulentos. Muitos trabalhos chegam a conclusões distintas e contraditórias sobre a real influência da

concentração de partículas no espectro de energia cinética turbulenta (CROWE et al., 2011).

Como majoritariamente os escoamentos que acontecem na natureza são multifásicos, avanços científicos sobre o tema são de vital importância. No presente trabalho será abordada uma modelagem para a termo-fluidodinâmica de um sistema do tipo Euler-Lagrange. Para as equações eulerianas são propostas modificações para o balanço de quantidade de movimento linear e para o balanço de energia térmica. Na modelagem das equações lagrangianas, são propostas modificações para a força de arrasto e para a condução térmica.

Em escoamentos bifásicos com abordagem euleriana-lagrangiana, o movimento relativo entre as partículas (fase dispersa) e o fluido (fase contínua) induz flutuações nos campos eulerianos do escoamento (LANCE; BATAILLE, 1991). Sendo constatada experimentalmente a influência desse movimento relativo entre os campos, propomos uma abordagem matemática que capture essas informações observadas. Para tal, partimos da hipótese de que as flutuações promovidas pelas partículas que ocorrem nos campos de velocidade, pressão, massa específica e temperatura, possam ser distinguidas das flutuações promovidas pelo escoamento turbulento. Um importante ponto da nossa proposta é a possibilidade de existir turbulência mesmo sem o movimento relativo entre a fase contínua e as partículas, podendo assim, distinguir a influência das flutuações do campo euleriano e lagrangiano.

Queremos analisar a influência que as partículas promovem no escoamento. Para isso, inicialmente realizamos uma filtragem (passa baixa) sobre as equações diferenciais que envolvem os campos eulerianos. O procedimento ocorre com o auxílio de uma função indicadora e de uma função núcleo de Dirac, a qual tem suporte compacto. Essa filtragem será realizada sobre todo o domínio do escoamento e irá permitir a identificação de cada fase presente. Por fim, as equações de balanço (Navier-Stokes, da continuidade e da energia térmica), são modificadas, em função da fração volumétrica da fase contínua e de alguns termos adicionais — que serão abordados nos capítulos seguintes.

A não linearidade das equações de NS, requer uma decomposição do campo

de velocidade euleriana após o procedimento de filtragem citado anteriormente. É precisamente nesta etapa de decomposição que propomos o campo de velocidade como a soma de três contribuições. A primeira, $\bar{\mathbf{u}}$, é a velocidade calculada por meio da metodologia LES (Large Eddy Simulation). A segunda contribuição é \mathbf{u}' , que representa as flutuações do campo de velocidade devidas aos efeitos turbulentos do escoamento. Por último, temos \mathbf{u}'' representando as flutuações que ocorrem quando existe um movimento relativo entre as partículas e o fluido.

Para a equação da energia térmica, o processo de filtragem do termo advectivo também acarreta um problema semelhante ao das equações de NS após a filtragem. De forma análoga, o campo de temperatura é proposto como uma decomposição tripla. \bar{T} é o campo de temperatura filtrado, T' é a flutuação do campo euleriano e T'' é a flutuação do campo que surge quando há uma diferença de temperatura relativa entre as partículas e o fluido.

Para a modelagem das equações lagrangianas, foram propostas equações visando a contribuição da viscosidade modificada no número de Reynolds (presente na força de arrasto); e no número de Nusselt — na equação de balanço da energia térmica. Tais mudanças afetam as equações com as quais modela-se a termo-fluidodinâmica de modo a contabilizar os efeitos do movimento relativo entre os campos.

1.1 Importância do tema e contextualização

Anos após o início da pandemia de Covid-19, o tema de escoamentos multifásicos nunca se mostrou tão popular. Antes escondido em assuntos de cunho mais tecnológico, as aplicações dos conceitos envolvendo escoamentos multifásicos não eram tão populares. A pandemia trouxe uma discussão que se passa de forma inevitável sobre essa ciência. A discussão sobre a transmissão do vírus de forma aérea, foi frequentemente apresentada nas redes de comunicações jornalísticas sobre pesquisas feitas para se determinar a distância mínima entre as pessoas para manter a segurança. Vários artigos científicos, com nomes importantes da área, foram publicados ao longo dos últimos anos para apresentar de forma sistemática como proceder nessas situações que exigem uma previsibilidade imediata na tomada

de decisões (BALACHANDAR et al., 2020; CHONG et al., 2021; ZUO; USPAL; WEI, 2020). Como a transmissão do vírus ocorre na maior parte das situações envolvendo um caminho aéreo, necessariamente envolve a mecânica dos fluidos (MITTAL; NI; SEO, 2020; BHAGAT et al., 2020). As próprias gotículas provenientes da tosse são tratadas como um fluido (KATRE et al., 2021). Sendo o escoamento de ar ao nosso redor, frequentemente turbulento, a modelagem do problema está na área de discussão desta tese.

O fenômeno da turbulência em escoamentos monofásicos é complexo e ainda é considerado um problema em aberto na ciência. Quando tratamos a turbulência em escoamentos multifásicos, o problema é ainda mais complexo, e seu entendimento continua longe de estar consolidado (KOLEV, 2011).

Partículas sólidas suspensas em um escoamento são comuns em muitas áreas de aplicação da engenharia, incluindo transporte de sedimentos, reatores de leito fluidizado para líquidos e gás, caldeiras e torres de resfriamento em usinas termoelétricas (MORAN et al., 2010; MORAN et al., 2002). Esta categoria de escoamento é muito presente durante a conversão termoquímica de biomassa, e com o recente interesse para a produção de combustíveis renováveis, um grande esforço tem sido feito para avançar no conhecimento da física envolvida (CAPECELATRO; DESJARDINS, 2013).

A maioria dos escoamentos bifásicos e multifásicos de interesse prático que envolvem vários tempos e comprimentos característicos, estão inseridos no processo de atomização, responsável pela formação de spray líquido (EVRARD; DENNER; WACHEM, 2019). Spray líquido é um dos principais processos em máquinas à combustão, onde o aumento na área resultante da atomização do combustível é a chave para se ter energia limpa e eficiente (LEFEBVRE, 2017). Outras aplicações com a atomização de spray incluem processos de fabricação de drogas farmacêuticas (FINLAY, 2001), secagem por pulverização (ESLAMIAN; AHMED; ASHGRIZ, 2006), contenção de fogo (LENTATI; CHELLIAH, 1998), revestimento ou pintura.

Escoamentos bifásicos também podem ser encontrados na indústria convencional e em centrais nucleares, como, por exemplo, em setores onde a ebulição é utilizada para transporte e transferência de energia (JURIC; TRYGGVASON,

1998). Alternativamente, instabilidades interfaciais acionadas por tensão interfacial são exploradas em tecnologias de impressão a jato de tinta, onde o conhecimento da dinâmica da geração de gota é essencial para uma execução mais precisa do processo (CASTREJON-PITA et al., 2013).

1.2 Objetivos

Agora apresentaremos os objetivos gerais e específicos da tese.

1.2.1 Objetivos gerais

- Modelagem da turbulência na interface entre líquido e gás;
- Compreensão matemática e física do processo de filtração das partículas;
- Propor modelos para o fechamento da turbulência.

1.2.2 Objetivos específicos

- Obter uma compreensão de escoamentos turbulentos bifásicos densos;
- Compreender como o processo de filtração das partículas é realizado e o impacto da fração volumétrica nas equações de balanço de massa e de quantidade de movimento linear;
- Pesquisar e propor métodos para analisar escoamentos bifásicos densos onde o diâmetro das partículas tem dimensões maiores, iguais ou menores que o comprimento característico de Kolmogorov;
- Analisar a importância das flutuações do campo de velocidade decorrentes do processo de filtração das partículas e quantificar de que forma os termos que surgem influenciam a modelagem da turbulência monofásica ou multifásica diluída;
- Apresentar uma proposta de modelagem para o fechamento da turbulência que leva em conta a fração volumétrica;

- Implementar em nível computacional a proposta apresentada;
- Validar as implementações;
- Redação de artigos;
- Redação e defesa da tese.

No próximo capítulo, faremos uma revisão bibliográfica sobre o que está sendo estudado no tema. Abordaremos o que tem de mais fundamental e o que tem de mais moderno sobre a modelagem de fechamento da turbulência em escoamentos densos.

2 Revisão bibliográfica

A modelagem de escoamentos multifásicos vem sendo estudada cada vez mais nas últimas décadas. A proposta de contabilizar os efeitos da fração volumétrica para as equações do balanço de massa, de quantidade de movimento linear e de energia, são discutidas em artigos clássicos (ANDERSON; JACKSON, 1967; ISHII; ZUBER, 1979; DREW, 1983). As bases matemáticas desses artigos são bem semelhantes, e serviram de influência para as futuras linhas de pesquisa nas metodologias Euler-Lagrange e Euler-Euler, apresentadas por Sommerfeld (2017), Balachandar e Eaton (2010), Capecelatro e Desjardins (2013), Evrard, Denner e Wachem (2019). Três das principais metodologias são apresentadas nesse plano. Uma abordagem clássica, deduzida por Drew (1983), e outras duas mais contemporâneas desenvolvidas por Capecelatro e Desjardins (2013) e por Evrard, Denner e Wachem (2019). Mas antes das três principais metodologias, faremos uma breve introdução sobre os tipos de classificações que existem para escoamentos multifásicos.

2.1 Visão geral da modelagem multifásica

2.1.1 Classificação de escoamentos multifásicos

Em um escoamento multifásico é importante separar as formulações de cada fase presente. Alguns autores classificam duas fases distintas: fase contínua (fluido onde a partícula está imersa) e fase dispersa (bolhas, partículas sólidas ou gotas) (LOTH et al., 2006). O acoplamento entre a fase contínua e a dispersa, varia conforme o grau de interação entre as fases. Apresentaremos as diferenças básicas entre escoamentos dispersos, densos e os mecanismos de acoplamento que cada formulação requer.

2.1.2 Classificação das metodologias de escoamentos multifásicos

As metodologias para o tratamento das fases contínua e dispersa são divididas basicamente entre a formulação euleriana e lagrangiana. A formulação euleriana

pode servir tanto para a fase contínua como para a fase dispersa. Entretanto, a formulação lagrangiana é apenas para a fase dispersa. Outra grande diferença está em como tratar a formulação lagrangiana. Tratá-la como partículas pontuais fornecem resultados bem distintos em relação a resultados com partículas tratadas como densidades de pontos. Essas formulações serão detalhadas no capítulo de Metodologia.

Pela figura (1), temos na última coluna, um modelo das possíveis interações entre fluido e partícula. Na primeira figura, com fração volumétrica da fase da partícula, $\varepsilon < 5 \times 10^{-7}$, temos como interação apenas uma influência — fluido influenciando a partícula. Na segunda figura, com fração volumétrica entre $5 \times 10^{-7} < \varepsilon < 5 \times 10^{-4}$, temos o acoplamento duas vias; ou seja, temos dois tipos de influência — fluido influenciando a partícula e a partícula influenciando o fluido. No acoplamento 3 vias, na terceira figura, temos 3 tipos de influência — além do acoplamento duas vias, ainda existe a mudança no processo de contabilização da partícula. Na interação 3 vias, as partículas param de ser tratadas como pontuais, e viram densidades de pontos, como função da fração volumétrica.

Continuando a descrição sobre a figura (1), temos o acoplamento 4 vias. Esse tipo de acoplamento pode ser de duas formas: pode ser constituído pelo acoplamento 2 vias e contabiliza as colisões entre as partículas (CROWE et al., 2011); ou constitui o acoplamento 3 vias e contabiliza as colisões entre as densidades de pontos (sendo esta, a nova condição da fase da partícula). Os modelos de colisões dominantes e contato dominante simplesmente diferenciam o que é um contato e o que é uma colisão entre as partículas. A partir do acoplamento 3, o escoamento já pode ser considerado denso.

2.1.3 Classificação das metodologias para escoamento da fase contínua

A fase contínua é determinada basicamente pelo cálculo do número de Knudsen característico do problema avaliado (CROWE, 2005). Ou seja, se a razão entre o livre caminho médio molecular e o comprimento característico de uma célula euleriana for menor que 0,01, a fase pode ser considerada contínua (KARNIADAKIS; BESKOK; ALURU, 2006; CROWE et al., 2011; SOMMERFELD, 2017). A fase

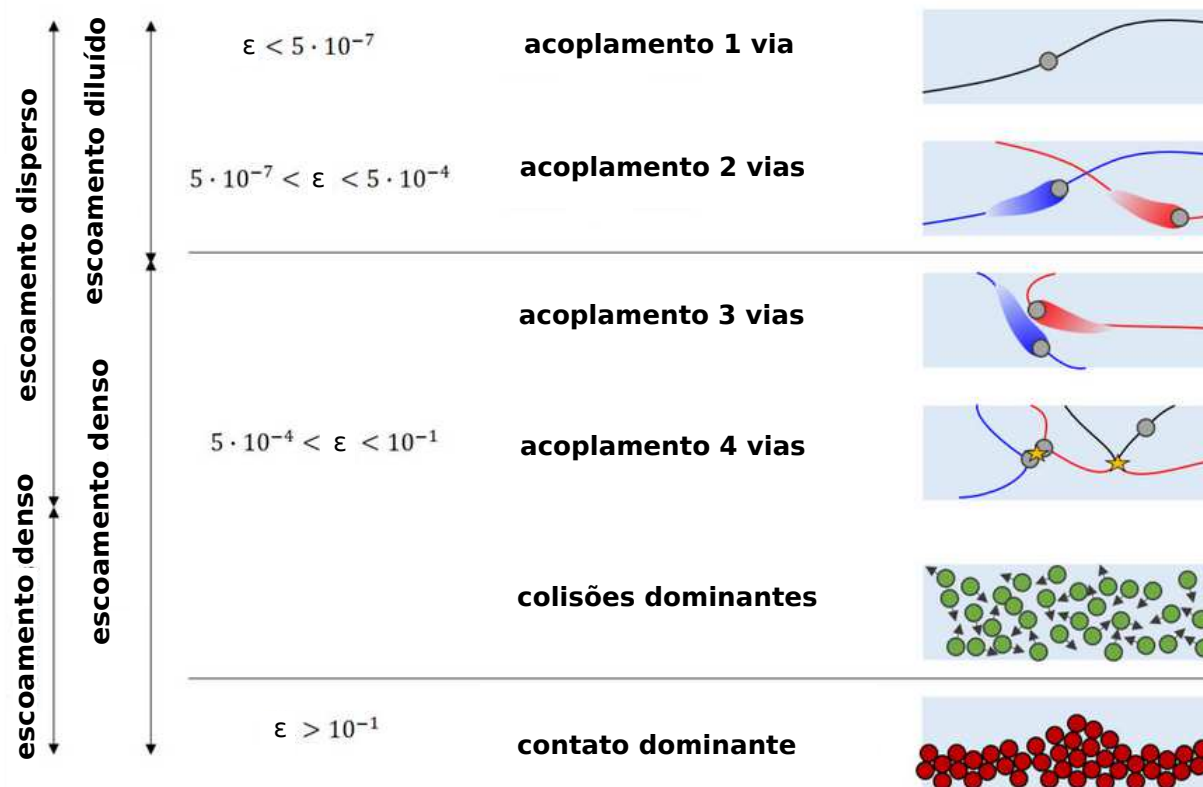


Figura 1 – Classificação de escoamentos multifásicos conforme a fração volumétrica da fase. Adaptado de Messa et al. (2021).

contínua contém campos inerentes ao seu domínio. Como solução das equações do balanço de massa, de quantidade de movimento linear e da energia térmica, temos os campos de densidade, velocidade, temperatura e pressão sob determinadas condições de contorno e iniciais.

Um passo importante na escolha das equações diferenciais parciais com as quais modelamos o fenômeno, são as escolhas de hipóteses tais como: incompressibilidade/compressibilidade, escoamento viscoso ou potencial e se o escoamento é isotérmico ou térmico.

Por fim, temos a caracterização e o tratamento dos regimes de escoamentos. Para os casos de escoamentos laminares, as equações de balanço são consideravelmente simplificadas, mas ainda, exige uma complexidade mais elevada do que os escoamentos monofásicos em regime laminar. Para escoamentos em transição, o

desafio de simulação ainda exige muita melhoria para dar robustez aos algoritmos utilizados (LOTH et al., 2006).

Em escoamentos turbulentos multifásicos para altos números de Reynolds, ou seja, para os campos eulerianos em regime estatisticamente permanente, existem três importantes formulações para a modelagem da turbulência. São comumente aplicadas a metodologia DNS (Direct Numerical Simulation), a metodologia das grandes estruturas ou LES (Large Eddy Simulation), e a metodologia das equações médias de Reynolds RANS/URANS. Tais metodologias são detalhadas na dissertação dos autores Catta-Preta e Silveira-Neto (2018).

2.1.4 Classificação das metodologias para escoamento da fase dispersa

Apresentaremos 4 métodos tradicionais para modelar a dinâmica envolvendo a fase dispersa. Basicamente, podemos avaliar a fase dispersa com equações de campo euleriano, ou como partículas lagrangianas. A diferença básica entre as duas formulações está na medida do referencial e no tipo de equação que será usada. Na formulação euleriana, utilizamos as equações de balanço de massa, de quantidade de movimento linear e de energia, e o referencial é fixo em algum ponto do domínio. Já na formulação lagrangiana, utilizamos a segunda lei de Newton e o referencial acompanha a partícula. As quatro formas são resumidas abaixo:

- **Euleriana com tratamento de fluidos mistos:** é utilizada apenas uma equação de balanço de quantidade de movimento linear para as duas fases. É basicamente a equação de NS, porém, a massa específica é uma combinação linear entre a fração volumétrica e a massa específica de cada fase. Para a viscosidade, ocorre uma combinação linear análoga, entre as frações volumétricas e as viscosidades de cada fase (LOTH et al., 2006).
- **Euleriana com tratamento de força pontual:** nesta abordagem, as partículas são modeladas com uma equação de balanço de quantidade de movimento ponderada pela fração volumétrica da partícula. A equação para essa formulação é aplicada em todo o domínio computacional.

- **Lagrangiana com tratamento de força pontual:** para esta formulação utilizamos a segunda lei de Newton, aplicada para todas as partículas. Nesta abordagem, a equação de balanço da fase euleriana é ponderada pela fração volumétrica da fase contínua, e a segunda lei de Newton terá uma força de arrasto que também dependerá da fração volumétrica da fase contínua. Detalharemos mais essa abordagem ao longo da seção de metodologia, pois esta será utilizada ao longo da tese.
- **Lagrangiana com tratamento de superfície resolvido:** as equações de balanço serão aplicadas apenas fora da região das partículas. A força de arrasto sobre as partículas é calculada ao longo de toda a trajetória, e assim, é adicionada às forças externas que atuam sobre as partículas. Nessa formulação também é utilizada a segunda lei de Newton (CROWE et al., 2011).

2.2 Principais autores consultados sobre a metodologia dos multifásicos

Nesta seção listaremos os principais autores da área de escoamentos multifásicos que contribuíram para a compreensão do tema presente. Autores clássicos para a formulação matemática dos problemas são tratados em importantes artigos como Anderson e Jackson (1967), Drew (1983), Ishii e Zuber (1979). Esses três são os principais do ponto de vista de formulação matemática. Outras referências mais contemporâneas são os artigos do Balachandar e Eaton (2010), e os livros clássicos de Ishii e Hibiki (2010), Drew e Passman (2006), Crowe (2005), Crowe et al. (2011), Clift, Grace e Weber (2005), Tryggvason, Scardovelli e Zaleski (2011). Alguns dos principais autores consultados são listados abaixo.

2.2.1 Einstein e Landau

Dois ganhadores de prêmio nobel na física, são importantes para a formação do autor da presente tese. Na visão de um físico como Einstein (1906), a ideia de multifásico começou a ganhar sentido do ponto de vista matemático. Propor como a

viscosidade do escoamento é alterada com a presença de partículas, foi inicialmente formulada por Albert Einstein, em sua tese de doutorado. Outro importante físico e matemático que colaborou no tratamento da viscosidade do escoamento envolvendo esferas sólidas, foi L. D. Landau em Landau e Lifshitz (2013b).

2.2.2 G. K. Batchelor e D. A. Drew

Drew (1983), como matemático, forneceu o rigor necessário para o tratamento de filtração das partículas. Outro matemático foi de extrema importância para o avanço no tema de viscosidade modificada devida à presença de partículas, G. K. Batchelor, com seu *Magnum opus* Batchelor (2000), e com o artigo Batchelor (1977), formalizou a base do tratamento para a viscosidade.

2.2.3 Bird, Anderson e Jackson

Anderson e Jackson (1967) e Bird (2002), trabalhando pelo departamento engenharia química, forneceram importantes contribuições vindas do ponto de vista complementar de engenheiros químicos. Na obra do Bird (2002), no primeiro capítulo, existe um resumo dos principais modelos para a viscosidade modificada. A obra do Bird foi uma leitura necessária para a introdução do tema.

De um ponto de vista mais aprofundado, Anderson e Jackson (1967), contribuíram para uma formulação matemática que é muito utilizada atualmente. O principal de sua formulação foi bem reproduzida nos artigos publicados pelos Evrard, Denner e Wachem (2019). Deduções sobre identidades matemáticas não provadas nos artigos de Anderson e Jackson (1967), Evrard, Denner e Wachem (2019), são apresentadas nos capítulos de metodologia, e são uma contribuição dos autores da presente.

2.2.4 Ishii

Trabalhando pelo departamento de engenharia nuclear, o clássico livro de termo fluidodinâmica, Ishii e Hibiki (2010), fornece um dos mais completos livros sobre escoamentos multifásicos. Discussões sobre o processo e os tipos de médias para contabilizarmos a filtração das partículas são discutidas nesse livro. Outra

importante contribuição dessa obra está na sua discussão sobre a turbulência e sobre dados experimentais obtidos em Ishii e Zuber (1979), sobre como a fração volumétrica das partículas altera a viscosidade do escoamento. Com esses dados sobre a viscosidade, foi possível utilizá-los como “benchmarking” para a calibragem do modelo proposto na tese.

2.2.5 Evrand, Denner e Berend

O principal ponto levantado para o tema da presente tese, foi um questionamento que surgira sobre o artigo dos autores Evrand, Denner e Wachem (2019). Nesse trabalho, é levantado o alerta da dificuldade da modelagem da turbulência em escoamentos multifásicos. No artigo não é considerada a modificação da viscosidade molecular. O argumento foi que o escoamento avaliado não estava em regime turbulento. Essa afirmação nos causou uma dúvida sobre a importância da flutuação das partículas para os cálculos dos campos eulerianos. Ou seja, toda a teoria proposta na presente tese, é oriunda desse questionamento.

2.2.6 Capecelatro e Desjardins

Após a leitura dos artigos anteriores, o artigo proposto por Capecelatro e Desjardins (2013) nos mostrou um passo a mais para a modelagem da turbulência para escoamentos multifásicos. Apesar de fornecer uma modificação da viscosidade molecular de uma forma breve, e até certo ponto, incompatível do ponto de vista da formulação matemática, os autores Capecelatro e Desardins apresentam bons tópicos para a nossa discussão da seção de Metodologias.

2.3 Mecânica Estatística e Processamento de Dados

Já sabemos que a turbulência é um ramo da mecânica estatística. Portanto, uma forte revisão sobre mecânica estatística podem ser vistas em livros como Reif (2009), Landau e Lifshitz (2013a), Monin e Yaglom (2013), Pitaevskii, Lifshitz e Sykes (2017), Monin e Yaglom (2013), Monin e Yaglom (2007). Os conceitos básicos da mecânica estatística foram de extrema importância para o pré e pós-

processamento dos dados. Os principais livros sobre o estudo do tratamento dos dados foram em Scopatz e Huff (2015), Kutz (2013).

Um software para o pós-processamento, criado pelo autor da presente tese, está disponibilizado em <https://github.com/ricardocatta/post-processing_MFSim>. Com esse software, desenvolvido ao longo da tese, podem-se calcular médias, desvios padrões, variância, matrizes de correlação, cálculos de incertezas aleatórias, estatísticas e associadas. Além de calcular propagação de incertezas e a transformada de Fourier para obter a energia cinética turbulenta. Como resultado, temos como output, gráficos da velocidade média, desvios padrões e energia cinética turbulenta.

3 Metodologia

3.1 Preliminares

Quando visamos entender um fenômeno natural, o melhor caminho para a busca do conhecimento é através do método científico. A modelagem de um problema físico começa pela observação do fenômeno e pelo levantamento de perguntas acerca do problema. Posteriormente, realizamos uma revisão bibliográfica para ver quais das perguntas levantadas já possuem respostas e quais continuam sobre a sombra do desconhecido. Após essa etapa, é o momento de criarmos hipóteses cuidadosas para possíveis soluções das perguntas levantadas que ainda não são bem compreendidas. As hipóteses levantadas são testadas com a modelagem física, matemática e computacional do problema. Na presente tese, realizamos simulações computacionais do problema físico (que será detalhado nas seções seguintes). Com os resultados obtidos após o pós-processamento, podemos avaliar e tirar conclusões se as hipóteses adotadas durante a modelagem fornecem resultados compatíveis com os dados de experimentos materiais. Como última etapa do método, realizamos o compartilhamento dos resultados com a comunidade científica.

Apresentaremos um fluxograma da metodologia proposta nesta tese para a modelagem de escoamentos bifásicos em regime denso.

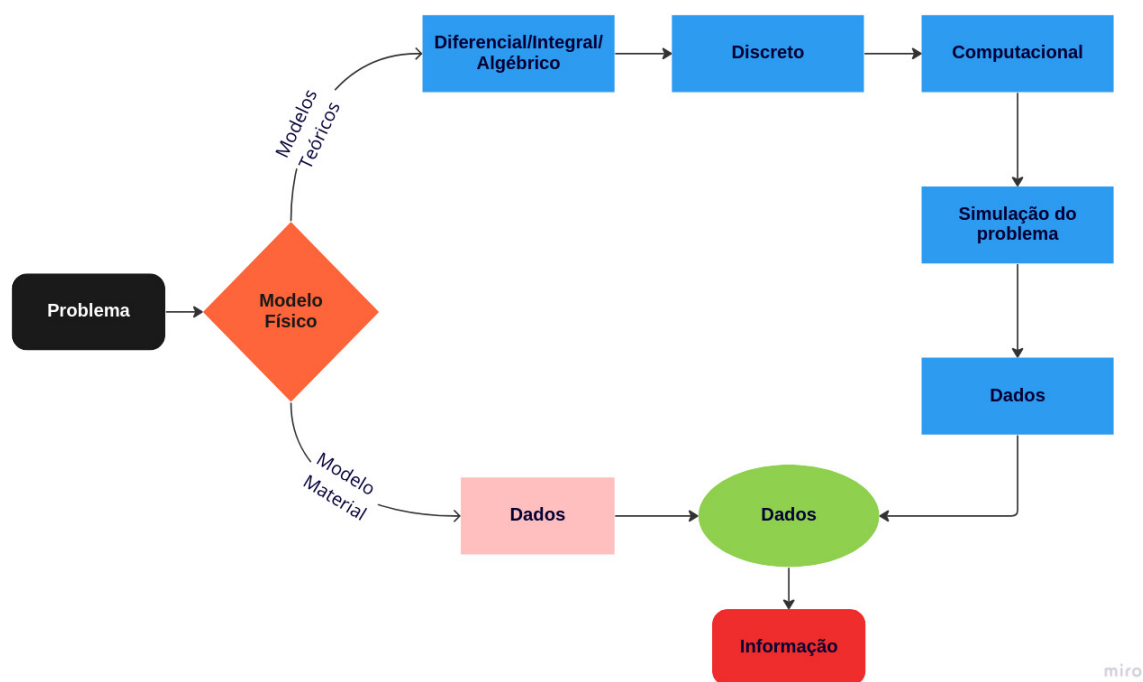


Figura 2 – Fluxograma da metodologia proposta.

3.2 Modelo físico

Nosso problema é investigar o papel da turbulência para a modelagem de escoamentos bifásicos em regime denso. A principal linha de pensamento que buscamos resposta é: a fração volumétrica das partículas em regime denso influencia a turbulência? Em caso positivo, como podemos representar essa influência?

O problema físico a ser analisado é um reservatório vertical preenchido com água. Nesse reservatório, são injetadas no seu interior, bolhas com diâmetros e velocidades constantes. O fenômeno da coalescência não é considerado (DEEN; HJERTAGER; SOLBERG, 2000). O escoamento é considerado incompressível e isotérmico. O modelo físico para esse problema está apresentado na Figura 3.

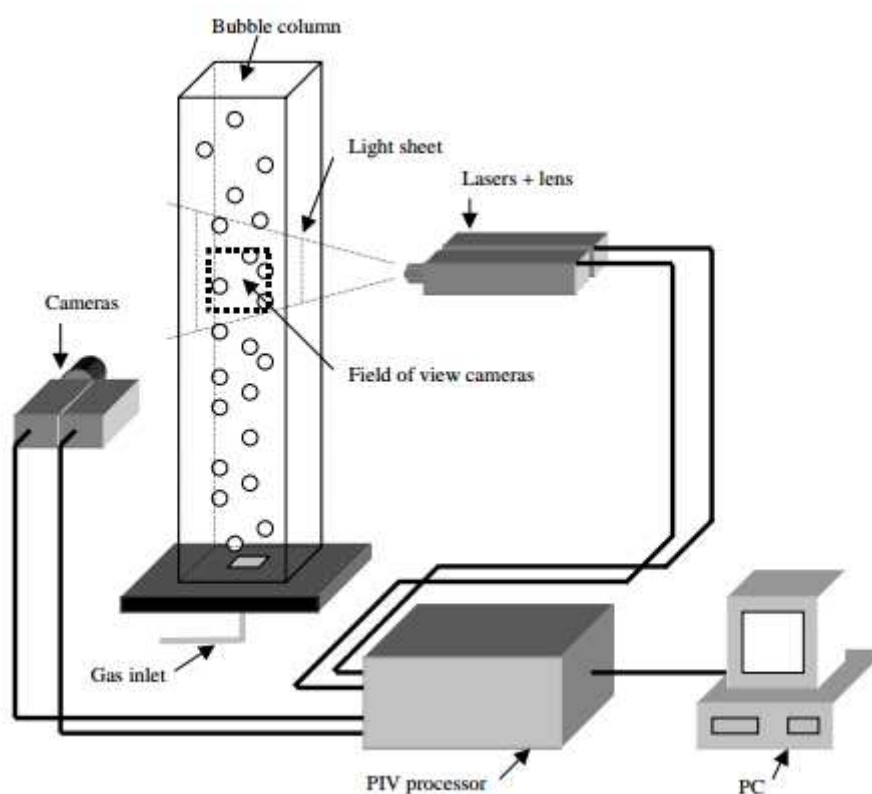


Figura 3 – Modelo icônico-diagramático criado por Deen, Hjertager e Solberg (2000)

A coluna de bolhas possui 0,6 m de altura e seção quadrada de lado 0,15 m. A coluna está preenchida com água até 0,45 m, sendo o restante preenchido com ar. No experimento material, foi utilizado um sistema PIV (Particle Tracking Velocimetry) para medir os campos de velocidade das partículas. Todas as medidas foram feitas na altura 0,25 m.

Os dados obtidos com o experimento material são apresentados por Deen, Solberg e Hjertager (2001). Os resultados do pós-processamento desta etapa de modelagem servirão de base para a calibragem e o julgamento dos resultados obtidos computacionalmente. Ou seja, será estabelecida uma modelagem *a posteriori*.

3.3 Modelagem Matemática

3.3.1 Modelagem proposta por Drew

É importante destacar que, ao longo de toda a tese, será adotada a notação indicial para escrever as equações, onde está implícita a convenção de soma de Einstein.

Antes de apresentar a teoria do processo de filtragem do escoamento na presença das partículas, é necessário definir algumas propriedades básicas da matemática envolvida.

3.3.1.1 Propriedades de filtragem

Seja $g(r)$ uma função definida para $r > 0$, com as seguintes propriedades:

- “A filtragem local é atingida via convolução com um filtro kernel $g : \text{Re}^+ \rightarrow \text{Re}^+$ suave, decrescendo monotonicamente em Re^+ , sendo esta normalizada de modo que” (EVRARD; DENNER; WACHEM, 2019):

$$\int_{\Omega_\infty} g(r) dV = 1.$$

onde Ω_∞ é o espaço tridimensional, e g é uma função núcleo, escolhida de modo a ter suporte compacto em uma esfera S_δ de raio δ , em um volume dV .

A filtragem espacial de uma informação qualquer f é dada por:

$$\langle f \rangle(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega_\infty} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) f(\mathbf{y}, t) d^3\mathbf{y},$$

onde $dV = d^3\mathbf{y}$.

Podemos então concluir que para se obter a filtragem de uma informação qualquer, $\langle f \rangle(\mathbf{x}, t)$, é necessária uma integral de convolução dessa informação, $(f(\mathbf{y}, t))$, com uma função núcleo normalizada em uma região específica, $(d^3\mathbf{y})$. Assumido que o processo de filtragem apresentado, satisfaça:

$$\langle f + g \rangle = \langle f \rangle + \langle g \rangle;$$

$$\langle \langle f \rangle g \rangle = \langle f \rangle \langle g \rangle;$$

$$\langle c \rangle = c,$$

onde c é uma constante.

As propriedades indicadas acima são chamadas regra de Reynolds. Outras duas importantes propriedades de filtragem são as chamadas regra de Leibniz e regra de Gaus, respectivamente (DREW, 1983),

$$\begin{aligned}\left\langle \frac{\partial f}{\partial t} \right\rangle &= \frac{\partial}{\partial t} \langle f \rangle; \\ \left\langle \frac{\partial f}{\partial x_i} \right\rangle &= \frac{\partial}{\partial x_i} \langle f \rangle.\end{aligned}$$

Essas duas últimas propriedades garantem a comutação entre os operadores derivada temporal e espacial com o operador filtragem.

Para aplicar o processo de identificação dos sistemas euleriano e lagrangiano, é introduzido o conceito de função indicadora $\chi^k(\mathbf{x}, t)$ (DREW, 1983).

$$\chi^k(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1, & \text{se } \mathbf{x} \in \text{à fase } k \text{ no tempo } t \\ 0, & \text{se } \mathbf{x} \in \text{demais fases} \end{cases}$$

onde k representa a fase contínua, ou seja, a fase representada no campo euleriano. A filtragem passa baixa da função indicadora é dada por:

$$\langle \chi^k \rangle(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega_\infty} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \chi^k(\mathbf{y}, t) d^3 \mathbf{y}.$$

Temos como definição, que a filtragem dessa função é a fração volumétrica da fase contínua; $\varepsilon^k(\mathbf{x}, t) = \langle \chi^k \rangle(\mathbf{x}, t)$. A filtragem da derivada material da função indicadora, nos fornece uma importante equação para o balanço da fração volumétrica.

$$\begin{aligned}\frac{D}{Dt} (\varepsilon^k(\mathbf{x}, t)) &= \frac{D}{Dt} \left[\int_{\Omega_\infty} g(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) \chi^k(\mathbf{y}, t) d^3 \mathbf{y} \right] \\ &= \int_{\Omega_\infty} g(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) \frac{D}{Dt} \chi^k(\mathbf{y}, t) d^3 \mathbf{y} \\ &= \left\langle \frac{D}{Dt} \chi^k(\mathbf{x}, t) \right\rangle \\ &= 0.\end{aligned}$$

ou seja:

$$\begin{aligned}\frac{D}{Dt} \chi^k(\mathbf{x}, t) &= 0 \\ \frac{\partial \chi^k}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \chi^k &= 0.\end{aligned}$$

Pela equação acima, um importante resultado pode ser concluído, pois, sendo a função coloração diferente de 1 apenas na interface entre duas fases, o vetor velocidade, \mathbf{v} , representa a velocidade da interface que está sendo transportada.

3.3.1.2 Dedução da equação da continuidade para escoamentos bifásicos

A equação da continuidade para escoamentos bifásicos densos, é modificada pela presença da fração volumétrica. No trabalho do Drew (1983) partindo da equação clássica da continuidade, tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho^k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho^k u_i) = 0.$$

Inicialmente, toda equação da continuidade deve ser multiplicada pela função indicadora, e posteriormente, do lado esquerdo será somada a densidade da fase contínua vezes a derivada material da função indicadora, que já foi demonstrada ser nula:

$$\chi^k \frac{\partial}{\partial t} (\rho^k) + \chi^k \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho^k u_i) + \rho^k \left[\frac{\partial \chi^k}{\partial t} + v_i \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right] = 0.$$

Utilizando a regra da cadeia e somando os dois lados da equação por $\rho^k u_i \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i}$:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\chi^k \rho^k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\chi^k \rho^k u_i) + \rho^k v_i \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} = \rho^k u_i \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i}.$$

Colocando os termos que dependem do gradiente da função indicadora do lado direito da equação acima e colocando em evidência o gradiente da função indicadora e a densidade da fase contínua, obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\chi^k \rho^k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\chi^k \rho^k u_i) = \rho^k (u_i - v_i) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i}.$$

Agora a equação da continuidade está pronta para receber o processo de filtragem passa baixa. Para isso basta multiplicá-la pela função núcleo e depois integrá-la ao longo de todo o domínio.

$$\int_{\Omega_\infty} g(|x_i - y_i|) \left[\frac{\partial}{\partial t} (\chi^k \rho^k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\chi^k \rho^k u_i) \right] dy_i = \int_{\Omega_\infty} g(|x_i - y_i|) \left[\rho^k (u_i - v_i) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right] dy_i.$$

Por fim, basta utilizar as propriedades de filtragem de Reynolds e de Leibniz.

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \chi^k \rho^k \rangle + \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \chi^k \rho^k u_i \rangle = \left\langle \rho^k (u_i - v_i) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right\rangle.$$

Existem duas categorias de variáveis filtradas que são comumente utilizadas para a modelagem de escoamentos multifásicos, chamadas filtragens de fase — ou filtragem ponderada pela função indicadora — e a filtragem ponderada pela massa específica; que são tipos de filtragem de favre (WILLIAMS, 2018) apresentadas em Drew e Passman (2006):

$$\begin{aligned} \tilde{a} &= \frac{\langle \chi^k a \rangle}{\varepsilon^k}; \\ \bar{a} &= \frac{\langle \chi^k \rho^k a \rangle}{\varepsilon^k \tilde{\rho}_f}. \end{aligned}$$

Assim, utilizando as filtragens de favre, temos finalmente a forma final para a equação da continuidade para escoamentos bifásicos:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon^k \tilde{\rho}_f) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon^k \tilde{\rho}_f \bar{u}_i) = \Gamma.$$

sendo o termo “fonte” Γ , dado por:

$$\Gamma = \left\langle \rho^k (u_i - v_i) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right\rangle.$$

O termo Γ difere de zero quando ocorre um movimento relativo entre a fase contínua (euleriana) e a fase dispersa (lagrangiana). Ou seja, quando a velocidade do fluido (u_i) diferir da velocidade da interface (v_i) entre as duas fases. Por outro lado, quando (u_i) e (v_i) forem iguais, o termo Γ se anula. Para o caso onde a fração volumétrica é igual a 1 e o escoamento é monofásico, voltamos à equação da continuidade convencional. Essa característica é um indicativo que a equação da continuidade para escoamentos bifásicos é uma equação mais geral para o balanço de massa.

3.3.1.3 Dedução da equação do balanço de quantidade de movimento linear

Agora precisamos realizar a dedução das equações para o balanço de quantidade de movimento linear. O procedimento é análogo ao realizado para a equação da

continuidade em escoamentos bifásicos, pois essas equações também serão afetadas pela fração volumétrica da fase contínua.

Temos que as componentes da equação de Cauchy, escrita na forma divergente, é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho^k u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho^k u_i u_j) = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}.$$

sendo σ_{ij} o tensor de tensões que atuam sobre as partículas de fluido. Para fluidos newtonianos, quando decomposto em sua parte diagonal e deviatórica, é dado por (BATCHELOR, 2000):

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= -p\delta_{ij} + \tau_{ij} \\ &= -p\delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right). \end{aligned}$$

onde a parte diagonal, $-p\delta_{ij}$, representa o tensor de tensões normais à partícula de fluido, e $\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right)$, a deviatórica, é o tensor de tensões viscosas.

Para podermos determinar as equações de Navier-Stokes (N-S) para um escoamento bifásico denso, precisamos multiplicar toda a equação pela função indicadora. Assim, será possível determinar onde cada fase estará presente. Além disso, devemos somar do lado esquerdo da equação de N-S por um termo que irá possibilitar colocar a nova equação em sua forma divergente (sendo a forma apropriada para o método dos Volumes Finitos). Porém, vale ressaltar que esse termo a mais que está sendo somado no lado esquerdo não irá desbalancear a equação, visto que já foi demonstrado que a derivada material da função indicadora é nula.

$$\chi^k \frac{\partial}{\partial t} (\rho^k u_i) + \chi^k \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho^k u_i u_j) + \rho^k u_i \left[\frac{\partial \chi^k}{\partial t} + v_j \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right] = \chi^k \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}.$$

Utilizando a regra do produto e somando do lado esquerdo e direito o termo $\rho^k u_i u_j \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j}$,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\chi^k \rho^k u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\chi^k \rho^k u_i u_j) + \rho^k u_i v_j \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} = \rho^k u_i u_j \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} + \chi^k \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}.$$

Colocando os gradientes da função indicadora em evidência e passando-os para o lado direito da equação,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\chi^k \rho^k u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\chi^k \rho^k u_i u_j) = \rho^k u_i (u_j - v_j) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} + \chi^k \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}.$$

Agora a última equação está na forma desejada para passar pelo processo de filtragem passa baixa. Para tal, é necessário multiplicar toda equação pela função núcleo e depois integrá-la em todo o domínio. Para fins didáticos, esse procedimento será efetuado inicialmente no lado esquerdo da equação acima, e posteriormente no seu lado direito RHS; do inglês (right hand side):

$$\int_{\Omega_\infty} g(|x_i - y_i|) \left[\frac{\partial}{\partial t} (\chi^k \rho^k u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\chi^k \rho^k u_i u_j) \right] dV_y = \frac{\partial}{\partial t} \langle \chi^k \rho^k u_i \rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \chi^k \rho^k u_i u_j \rangle,$$

onde dV_y representa o volume infinitesimal da partícula centrada no ponto y .

Para transformar a equação acima em termos da fração volumétrica, devemos utilizar as propriedades apresentadas de filtragem de favre.

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \chi^k \rho^k u_i \rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \chi^k \rho^k u_i u_j \rangle = \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i \bar{u}_j).$$

Agora é necessário filtrar o RHS da equação:

$$\int_{\Omega_\infty} g(|x_i - y_i|) \left[\rho^k u_i (u_j - v_j) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} + \chi^k \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \right] dV_y = \left\langle \rho^k u_i (u_j - v_j) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle + \left\langle \chi^k \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \right\rangle.$$

Que por meio da regra do produto de derivadas, e colocando em evidência o gradiente da função indicadora, pode ser reescrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \left\langle \rho^k u_i (u_j - v_j) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle + \left\langle \chi^k \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \right\rangle &= \left\langle \rho^k u_i (u_j - v_j) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial x_j} (\chi^k \sigma_{ij}) - \sigma_{ij} \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle \\ &= \left\langle [\rho^k u_i (u_j - v_j) - \sigma_{ij}] \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial x_j} (\chi^k \sigma_{ij}) \right\rangle. \end{aligned}$$

sendo aplicada as propriedades de filtragem, podemos definir

$$\begin{aligned} \left\langle [\rho^k u_i (u_j - v_j) - \sigma_{ij}] \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle &= M_i; \\ \left\langle \frac{\partial}{\partial x_j} (\chi^k \sigma_{ij}) \right\rangle &= \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\sigma}_{ij}), \end{aligned}$$

onde M_i representa a contribuição na força total no escoamento devida à interface, especificamente devida à tensão interfacial. Isso se deve ao fato de ter um gradiente da função indicadora nulo na interface entre as fases.

O termo M_i ainda pode ser reescrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned} M_i &= \left\langle \left[\rho^k u_i (u_j - v_j) - \sigma_{ij} \right] \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle \\ &= \left\langle \rho^k u_i (u_j - v_j) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle - \left\langle \sigma_{ij} \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle \\ &= \Gamma u_{s,i} - \left\langle \sigma_{ij} \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle, \end{aligned}$$

sendo que o termo Γ é o mesmo termo que aparece do lado direito da equação da continuidade, e $u_{s,i}$, é a componente i da velocidade que atua somente na superfície interfacial entre as duas fases.

Continuando a manipulação do termo M_i ,

$$\begin{aligned} M_i &= \Gamma u_{s,i} - \left\langle \sigma_{ij} \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle \\ &= \Gamma u_{s,i} - \left\langle (-p\delta_{ij} + \tau_{ij}) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle \\ &= \Gamma u_{s,i} - \left\langle (-p\delta_{ij} + p_s\delta_{ij} - p_s\delta_{ij} + \tau_{ij}) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle \\ &= \Gamma u_{s,i} - \left\langle [(p_s - p)\delta_{ij} - p_s\delta_{ij} + \tau_{ij}] \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle \\ &= \Gamma u_{s,i} + p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} - \left\langle [(p_s - p)\delta_{ij} + \tau_{ij}] \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle \\ &= \Gamma u_{s,i} + p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} - M_i^d, \end{aligned}$$

sendo:

$$\begin{aligned} M_i^d &= \left\langle [(p_s - p)\delta_{ij} + \tau_{ij}] \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle; \\ p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} &= \left\langle (p_s\delta_{ij}) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle, \end{aligned}$$

onde p_s , uma pressão de referência que só ocorre na superfície interfacial entre as duas fases do escoamento. O termo M_i^d é referido como a força interfacial específica,

embora não contenha o efeito da força média na interface devida à pressão média interfacial (DREW, 1983).

Finalmente, temos que o lado direito da equação do balanço de quantidade de movimento linear após o processo de filtragem das partículas é:

$$\begin{aligned} \left\langle \rho^k u_i (u_j - v_j) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle + \left\langle \chi^k \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \right\rangle &= -\frac{\partial (\varepsilon^k \tilde{p})}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\tau}_{ij}) + \Gamma u_{s,i} + p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} - M_i^d \\ &= -\varepsilon^k \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\tau}_{ij}) + \Gamma u_{s,i} + (p_s - \tilde{p}) \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} - M_i^d. \end{aligned}$$

Igualando o lado esquerdo já deduzido anteriormente com o RHS, temos os componentes da equação do balanço de quantidade de movimento linear:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i u_j) = -\varepsilon^k \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\tau}_{ij}) + \Gamma u_{s,i} + (p_s - \tilde{p}) \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} - M_i^d.$$

3.3.2 Modelagem proposta por Capecelatro e Desjardins

As propriedades de filtragem apresentadas por Capecelatro e Desjardins (2013) diferem em alguns pontos da filtragem apresentada na seção anterior. Esta modelagem é específica para um escoamento envolvendo fluido e partícula sólida, e a anterior é para um caso geral. Para uma melhor compreensão do método utilizado, serão expostas e deduzidas as principais propriedades envolvidas.

3.3.2.1 Propriedades de filtragem

A função núcleo é a mesma de antes, e necessita ainda das características de normalização.

$$\int_{\Omega_\infty} g(r) dV = 1.$$

Serão definidas as frações volumétricas para o líquido (ε_l , que é a fase contínua) e para a partícula (ε_d , fase dispersa).

$$\varepsilon_l(x_i, t) = \int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) dV_y,$$

sendo $\Omega_l(t)$ o domínio de líquido que varia no tempo, y_i são as componentes do vetor \vec{y} , que é a variável de varredura que irá mapear onde contém líquido. Já x_i , são as componentes do vetor \vec{x} , que está fixo na região de integração, e dV_y , é o elemento de volume nas vizinhanças do vetor \vec{y} . Analogamente, temos o mesmo raciocínio para a fração volumétrica da partícula.

$$\varepsilon_d(x_i, t) = \int_{\Omega_d(t)} g(|x_i - y_i|) dV_y.$$

A filtragem de uma variável $\psi(x_i, t)$ da fase líquida resulta em uma quantidade dada por $\bar{\psi}(x_i, t)$:

$$\varepsilon_l(x_i, t) \bar{\psi}(x_i, t) = \int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \psi(y_i, t) dV_y$$

Onde $\psi(x_i, t)$, que é a variável exata, é decomposta em uma parte filtrada e outra parte flutuante: $\psi(x_i, t) = \bar{\psi}(x_i, t) + \psi'(x_i, t)$.

O mesmo ocorre quando necessitamos a filtragem de uma variável $\phi(x_i, t)$ da fase dispersa, que resulta em uma quantidade dada por $\bar{\phi}(x_i, t)$:

$$\varepsilon_d(x_i, t) \bar{\phi}(x_i, t) = \int_{\Omega_d(t)} g(|x_i - y_i|) \phi(y_i, t) dV_y, \quad (3.1)$$

sendo $\phi(x_i, t)$, a variável exata que é decomposta em uma parte filtrada e outra flutuante: $\phi(x_i, t) = \bar{\phi}(x_i, t) + \phi'(x_i, t)$.

A fração volumétrica da partícula de líquido se relacionam de forma a manter sempre uma constante, que é o total da mistura.

$$\varepsilon_d(x_i, t) + \varepsilon_l(x_i, t) = 1.$$

Uma importante propriedade sobre a derivada das funções com núcleo de Dirac, é utilizada nos artigos do Evrard, Denner e Wachem (2019), Capecelatro e Desjardins (2013), Anderson e Jackson (1967),

$$\frac{\partial}{\partial x_i} g(x_i - y_i) = -\frac{\partial}{\partial y_i} g(x_i - y_i).$$

Como não encontramos a dedução para essa importante propriedade, vamos deduzi-la. A demonstração pode ser feita partindo da equação 3.2:

$$\int_{\Omega_\infty} g(|x_i - y_i|) dV_y = 1. \quad (3.2)$$

Primeiramente, derivamos a equação 3.2 dos dois lados em relação a x_i ,

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \int_{\Omega_\infty} g(|x_i - y_i|) dV_y = \frac{\partial}{\partial x_i}(1) = 0, \quad (3.3)$$

e derivamos a equação 3.2 dos dois lados em relação a y_i

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \int_{\Omega_\infty} g(|x_i - y_i|) dV_y = \frac{\partial}{\partial y_i}(1) = 0. \quad (3.4)$$

Posteriormente, somamos a equação 3.3 com a equação 3.4:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} \int_{\Omega_\infty} g(|x_i - y_i|) dV_y + \frac{\partial}{\partial y_i} \int_{\Omega_\infty} g(|x_i - y_i|) dV_y &= 0 \\ \int_{\Omega_\infty} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} g(|x_i - y_i|) + \frac{\partial}{\partial y_i} g(|x_i - y_i|) \right] dV_y &= 0. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Temos que a integral da equação 3.5 deve se anular para qualquer volume de integração Ω_∞ . Isso só será possível quando o integrando se anular identicamente.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} g(|x_i - y_i|) + \frac{\partial}{\partial y_i} g(|x_i - y_i|) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial x_i} g(|x_i - y_i|) &= -\frac{\partial}{\partial y_i} g(|x_i - y_i|). \end{aligned} \quad (3.6)$$

A segunda propriedade que iremos demonstrar é a filtragem envolvendo as derivadas parciais das variáveis desejadas:

$$\int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \frac{\partial \phi}{\partial y_i} dV_y = \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon_l \bar{\phi}) - \sum_d^{N_d} \int_{S_d} g(|x_i - y_i|) \phi \hat{n}_i dS_y. \quad (3.7)$$

Para provar a propriedade 3.7, tomemos a derivada espacial da equação 3.1:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon_l \bar{\phi}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \phi(y_i, t) dV_y \right] \\ \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon_l \bar{\phi}) &= \int_{\Omega_l(t)} \frac{\partial g(|x_i - y_i|)}{\partial x_i} \phi(y_i, t) dV_y \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon_l \bar{\phi}) = - \int_{\Omega_l(t)} \frac{\partial g(|x_i - y_i|)}{\partial y_i} \phi(y_i, t) dV_y, \quad (3.8)$$

na qual foi utilizada a propriedade demonstrada na equação 3.6. Com base na regra do produto da derivada de duas funções, temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y_i} [g(|x_i - y_i|) \phi(y_i, t)] &= g(|x_i - y_i|) \frac{\partial \phi(y_i, t)}{\partial y_i} + \phi(y_i, t) \frac{\partial g(|x_i - y_i|)}{\partial y_i} \\ \phi(y_i, t) \frac{\partial g(|x_i - y_i|)}{\partial y_i} &= \frac{\partial}{\partial y_i} [g(|x_i - y_i|) \phi(y_i, t)] - g(|x_i - y_i|) \frac{\partial \phi(y_i, t)}{\partial y_i}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Substituindo a equação 3.9 na equação 3.8, e utilizando o teorema de Gauss-Ostrogradsky:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon_l \bar{\phi}) &= \int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \frac{\partial \phi(y_i, t)}{\partial y_i} dV_y - \int_{\Omega_l(t)} \frac{\partial}{\partial y_i} [g(|x_i - y_i|) \phi(y_i, t)] dV_y \\ &= \int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \frac{\partial \phi(y_i, t)}{\partial y_i} dV_y - \int_{\Gamma_d(t)} g(|x_i - y_i|) \phi(y_i, t) \check{n}_i dS_y \end{aligned}$$

em que n_i representa a normal à interface, sendo que \hat{n}_i aponta para a fase contínua, \check{n}_i aponta para a fase dispersa, e na superfície das partículas dispersas $\hat{n}_i = -\check{n}_i$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon_l \bar{\phi}) &= \int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \frac{\partial \phi(y_i, t)}{\partial y_i} dV_y + \int_{\Gamma_d(t)} g(|x_i - y_i|) \phi(y_i, t) \hat{n}_i dS_y \\ &= \int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \frac{\partial \phi(y_i, t)}{\partial y_i} dV_y + \sum_d^{N_d} \int_{S_d} g(|x_i - y_i|) \phi(y_i, t) \hat{n}_i dS_y \end{aligned}$$

que era a demonstração desejada da equação 3.7. Vale ressaltar que a última integral é realizada sobre a superfície de todas as partículas que estão no domínio.

Outra importante propriedade que iremos demonstrar é a filtragem da derivada temporal de uma função.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_l \bar{\phi}) = \int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \frac{\partial \phi(y_i, t)}{\partial t} dV_y - \sum_d^{N_d} \int_{S_d} g(|x_i - y_i|) \phi(y_i, t) v_{\Gamma_d}(y_i, t) \hat{n}_i dS_y \quad (3.10)$$

Para demonstrar a equação acima, tomemos a derivada temporal na equação 3.1.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_l \bar{\phi}) = \frac{\partial}{\partial t} \left[\int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \phi(y_i, t) dV_y \right]$$

Considerando o teorema de Leibniz apresentado em Aris (2012), temos que a passagem da derivada temporal para dentro da integral, resulta:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_l \bar{\phi}) = \int_{\Omega_l(t)} \left[\frac{\partial}{\partial t} (g\phi) + \frac{\partial}{\partial x_i} (g\phi u_i) \right] dV_y$$

Como a função núcleo não depende do tempo, e com a utilização novamente do teorema de Gauss-Ostrogradski no termo com o divergente, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_l \bar{\phi}) &= \int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \frac{\partial \phi(y_i, t)}{\partial t} dV_y + \int_{\Gamma_d(t)} g(|x_i - y_i|) \phi(y_i, t) v_{\Gamma_d}(y_i, t) \check{n}_i(y_i, t) dS_y \\ &= \int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \frac{\partial \phi(y_i, t)}{\partial t} dV_y - \sum_d^{N_d} \int_{S_d} g(|x_i - y_i|) \phi(y_i, t) v_{\Gamma_d}(y_i, t) \hat{n}_i dS_y \end{aligned}$$

sendo a última integral, tomada sobre toda a superfície de todas as partículas existentes no domínio.

Por fim, outra importante filtragem que será utilizada ao longo dessa metodologia é a filtragem de Favre para escoamentos com variação da massa específica, sendo $a(x_i, t) = \tilde{a}(x_i, t) + a''(x_i, t)$.

$$\tilde{a}_i = \frac{\varepsilon_l \overline{\rho_l a_i}}{\varepsilon_l \overline{\rho_l}}.$$

3.3.2.2 Dedução da equação da continuidade

Para a dedução da equação da continuidade da fase contínua, devemos inicialmente multiplicar toda a equação da continuidade pela função núcleo e posteriormente integra-la por todo o domínio da fase contínua.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_l) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_l u_i) = 0$$

$$\int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \frac{\partial \rho_l}{\partial t} dV_y + \int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_l u_i) dV_y = 0 \quad (3.11)$$

O primeiro termo da equação 3.11 será aplicado à propriedade apresentada em 3.10. Já o segundo termo da equação 3.11 será aplicado a propriedade 3.7.

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \frac{\partial \rho_l}{\partial t} dV_y &= \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_l \overline{\rho_l}) + \sum_d^{N_d} \int_{S_d} g(|x_i - y_i|) \rho_l v_k \hat{n}_k dS_y. \\ \int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \frac{\partial \rho_l u_i}{\partial y_i} dV_y &= \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon_l \overline{\rho_l u_i}) - \sum_d^{N_d} \int_{S_d} g(|x_i - y_i|) \rho_l u_k \hat{n}_k dS_y \end{aligned}$$

Substituindo as equações acima, na equação 3.11, obtemos

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_l \bar{\rho}_l) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon_l \bar{\rho}_l \overline{u_i}) = -s_{\rho_l} \quad (3.12)$$

onde $s_{\rho_l} = \sum_d^{N_d} \int_{S_d} g(|x_i - y_i|) \rho_l \hat{n}_k (v_k - u_k) \hat{n}_i dS_y$; e v_k , a velocidade da interface entre as duas fases.

Agora precisamos realizar a filtragem de Favre ponderada pela fração volumétrica e pela massa específica, para substituir o segundo termo do lado esquerdo da equação 3.12.

$$\begin{aligned} \tilde{u}_i &= \frac{\varepsilon_l \bar{\rho}_l \overline{u_i}}{\varepsilon_l \bar{\rho}_l}, \\ \varepsilon_l \bar{\rho}_l \overline{u_i} &= \varepsilon_l \bar{\rho}_l \tilde{u}_i. \end{aligned}$$

Após aplicar a propriedade de filtragem, obtemos a forma desejada da equação da continuidade para um caso geral, onde pode ocorrer um escoamento bifásico com mudança de fase. Podemos reparar que é o mesmo resultado encontrado por Drew (1983), de uma forma diferente.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_l \bar{\rho}_l) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon_l \bar{\rho}_l \tilde{u}_i) = -s_{\rho_l}$$

3.3.2.3 Dedução da equação do balanço da quantidade de movimento linear filtrada

Inicialmente, tomamos a equação de Navier-Stokes na forma divergente.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_l u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_l u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho_l g_i + f_{\sigma_i}, \quad (3.13)$$

onde τ_{ij} , é o tensor de tensões viscosas, ρ_l é a densidade da fase contínua, g_i o campo gravitacional e f_{σ_i} é a força de tensão interfacial.

Multiplicamos a equação 3.13 pela função núcleo e integramos sobre todo o domínio da fase contínua; cada termo integrado será filtrado da seguinte forma:

- Termo da aceleração local:

$$\int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \frac{\partial \rho_l u_i}{\partial t} dV_y = \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_l \bar{\rho}_l \overline{u_i}) + \sum_d^{N_d} \int_{S_d} g(|x_i - y_i|) \rho_l u_i v_k \hat{n}_k dS_y;$$

- Termo da aceleração espacial:

$$\int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \frac{\partial \rho_l u_i u_j}{\partial x_i} dV_y = \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon_l \overline{\rho_l u_i u_j}) - \sum_d^{N_d} \int_{S_d} g(|x_i - y_i|) \rho_l u_i u_j \hat{n}_k dS_y;$$

- Termo do gradiente de pressão:

$$\int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \frac{\partial p}{\partial x_i} dV_y = \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon_l \bar{p}) - \sum_d^{N_d} \int_{S_d} g(|x_i - y_i|) p \delta_{ij} \hat{n}_j dS_y.$$

- Termo difusivo:

$$\int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} dV_y = \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon_l \bar{\tau}_{ij}) - \sum_d^{N_d} \int_{S_d} g(|x_i - y_i|) \tau_{ij} \hat{n}_j dS_y;$$

- Termo gravitacional:

$$\int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) \rho_l g_i dV_y = \varepsilon_l \bar{\rho}_l g_i;$$

- Termo da força de tensão interfacial:

$$\int_{\Omega_l(t)} g(|x_i - y_i|) f_{\sigma_i} dV_y = \varepsilon_l \bar{f}_{\sigma_i}.$$

Logo, temos que a soma das equações (40) até a equação (45), resulta em:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_l \overline{\rho_l u_i}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon_l \overline{\rho_l u_i u_j}) = -\frac{\partial \varepsilon_l \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \varepsilon_l \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} + \varepsilon_l \bar{\rho}_l g_i + \varepsilon_l \bar{f}_{\sigma_i} + M_i - s_{\rho_l u_i},$$

onde:

$$s_{\rho_l u_i} = \sum_d^{N_d} \int_{S_d} g(|x_i - y_i|) \rho_l u_i \frac{dR_{dj}}{dt} \hat{n}_j dS_y;$$

$$M_i = \sum_d^{N_d} \int_{S_d} g(|x_i - y_i|) (p \delta_{ij} - \tau_{ij}) \hat{n}_j dS_y;$$

$$\bar{\tau}_{ij} = \mu \left[\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right].$$

Agora, utilizando a filtragem Favre

$$\begin{aligned}\varepsilon_l \overline{\rho_l u_i} &= \varepsilon_l \overline{\rho_l} \tilde{u}_i \\ \varepsilon_l \overline{\rho_l u_i u_j} &= \varepsilon_l \tilde{\rho}_l \tilde{u}_i \tilde{u}_j,\end{aligned}$$

temos finalmente a equação do balanço de quantidade de movimento linear para escoamentos bifásicos utilizando a metodologia apresentada em Capecelatro e Desjardins (2013):

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_l \overline{\rho_l} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon_l \overline{\rho_l} u_i \tilde{u}_j) &= -\frac{\partial \varepsilon_l \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon_l \overline{\tau_{ij}}) + \varepsilon_l \overline{\rho_l} g_i + \varepsilon_l \overline{f_{\sigma_i}} + M_i - s_{\rho_l u_i} \\ M_i &= \sum_d^{N_d} \int_{S_d} g(|x_i - y_i|) (p \delta_{ij} - \tau_{ij}) \hat{n}_j dS_y\end{aligned}$$

3.3.3 Modelagem proposta pelo Evrard, Denner e Wachen

Nesta seção, iremos apresentar a modelagem desenvolvida por Evrard, Denner e Wachen (2019). Neste trabalho, as fases envolvidas no escoamento são diferentes da seção anterior. Agora trata-se de um escoamento bifásico envolvendo gotas de água e gás; sendo o gás a fase contínua (no referencial euleriano), e a gota a fase dispersa (no referencial lagrangiano). As propriedades de filtragem utilizadas por Evrard, Denner e Wachen (2019), são exatamente as mesmas desenvolvidas na seção anterior, porém, o artigo supracitado despreza a modelagem de fechamento da turbulência.

As equações para o campo lagrangeano, tanto no trabalho proposto por Capecelatro e Desjardins (2013) quanto no trabalho proposto por Evrard, Denner e Wachen (2019), podem ser as mesmas. Tais equações são fornecidas pela aplicação da segunda lei de Newton sobre cada uma das partículas do escoamento.

$$m_d \frac{d\vec{u}_d}{dt} = m_d (1 - \rho_g / \rho_l) \vec{g} + \vec{f}_d$$

Sendo o termo, $m_d (1 - \rho_g / \rho_l) \vec{g}$, a força de peso-empuxo que atua sobre a partícula e \vec{f}_d , a força de arrasto sobre partícula.

3.3.3.1 Equação da continuidade para a fração volumétrica

Uma simplificação das equações anteriores foi apresentada por Evrard, Denner e Wachen (2019). Neste estudo, foi considerado um caso bifásico sem

mudança de fase e incompressível. Para esta situação, a equação da continuidade se resume em

$$\frac{\partial \varepsilon_g}{\partial t} + \frac{\partial (\varepsilon_g \bar{u}_j)}{\partial x_j} = 0,$$

onde ε_g é a fração volumétrica da fase gasosa, que é a fase representada no referencial euleriano neste caso.

3.3.3.2 Equação do balanço de quantidade de movimento linear sem mudança de fase

Utilizando as mesmas hipóteses da seção anterior, Evrard, Denner e Wachem (2019) deduziram a equação para o balanço de quantidade de movimento linear da forma a seguir:

$$\rho \left[\frac{\partial (\varepsilon_g \bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\varepsilon_g \bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} \right] = -\varepsilon_g \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial (\varepsilon_g \tau_{ij})}{\partial x_j} + \varepsilon_g \rho \bar{g}_i + \varepsilon_g \bar{f}_i + M_i.$$

Na decomposição do termo não linear, Evrard, Denner e Wachem (2019), por motivos de simplificação do problema, não consideraram a modelagem de fechamento da turbulência.

Nosso interesse de pesquisa é justamente investigar e propor uma forma de modelagem para o fechamento da turbulência em escoamentos bifásicos. No capítulo seguinte apresentaremos a metodologia desenvolvida para essa modelagem.

Nesta seção descreveremos a metodologia utilizada para a dedução detalhada das principais equações da termo-fluido dinâmica. Apresentaremos uma nova modelagem para escoamentos bifásicos turbulentos em regime denso.

3.3.4 Modelagem proposta por Deen, Solberg e Hjertager (2001)

Nesta seção apresentaremos de forma simplificada, a teoria matemática apresentada por Deen, Solberg e Hjertager (2001). É a teoria que serviu de base para a simulação do experimento material da seção 4.2. As equações para os balanços de massa e quantidade de movimento seguem abaixo:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon^k \bar{\rho}^k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\varepsilon^k \bar{\rho}^k \bar{u}_j) = 0, \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i \bar{u}_j) = -\varepsilon^k \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j}(\varepsilon^k \tilde{\tau}_{ij}) + \varepsilon^k \tilde{\rho}^k g_i + M_i^d, \quad (3.15)$$

onde o lado direito da equação 3.15 representa respectivamente os gradientes de pressão, os fluxos de tensões, ao peso e as trocas de quantidade de movimento média entre as fases devida as forças interfaciais. O campo de velocidade das equações 3.14 e 3.15 é:

$$\bar{u}_i = u_i - u'_i. \quad (3.16)$$

Aqui, \bar{u}_i é o campo de velocidade médio da fase contínua calculado pela simulação computacional. u_i é o campo de velocidade instantâneo e u'_i é a flutuação do campo. Na equação 3.15, o tensor de tensões é modelado da seguinte forma:

$$\tilde{\tau}_{ij} = -\mu_{eff} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right), \quad (3.17)$$

onde $\mu_{eff} = \mu_M + \mu_T + \mu_{IB}$. A viscosidade molecular μ_M é pertencente a fase contínua. A viscosidade turbulenta μ_T é modelada de acordo com o modelo de fechamento da turbulência escolhido. O cálculo da viscosidade induzida pelas bolhas μ_{IB} foi realizado com base no modelo proposto por Sato e Sekoguchi (1975), onde

$$\mu_{IB} = \rho^k C_{IB} \varepsilon^k d_B |\bar{u}_d - \bar{u}|, \quad (3.18)$$

sendo ρ^k a densidade da fase contínua k ; C_{IB} uma constante para o caso do escoamento de bolhas em água; ε^k é a fração volumétrica da fase contínua k ; d_B é o diâmetro da bolha; \bar{u}_d é o campo médio de velocidade da fase dispersa e \bar{u} é o campo médio da velocidade da fase contínua.

A equação 3.18 é fundamentalmente diferente da nossa proposta de modelagem para a presente tese. Discussões sobre a diferença e os impactos de cada modelagem será apresentado na seção 4.3.8.

Outra importante diferença teórica entre as modelagens propostas na presente tese e o artigo dos autores Deen, Solberg e Hjertager (2001), está na modelagem da força de arrasto. A força de arrasto dos citados autores é dada por:

$$F_D = -\frac{3}{4} \varepsilon^k \rho^k \frac{C_D}{d_B} |\bar{u}_d - \bar{u}| (\bar{u}_d - \bar{u}), \quad (3.19)$$

onde $C_D = 2/3 E_o^{1/2}$, e E_o é o número adimensional de Eötvös (DEEN; SOLBERG; HJERTAGER, 2001).

3.3.5 Metodologia adotada

Nesta seção apresentaremos a metodologia que iremos adotar na presente tese. Indicaremos uma forma metódica para a modelagem de escoamentos bifásicos turbulentos em regime denso.

3.3.5.1 Função indicadora e propriedades de filtragem

Em escoamentos bifásicos, a função indicadora χ , é definida como um parâmetro que mapeia todo o domínio e tem valor igual a 1 na fase k e 0 na segunda fase (DREW, 1983).

$$\chi^k(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{se } \mathbf{x} \in \text{fase } k \text{ no tempo } t \\ 0 & \text{se } \mathbf{x} \in \text{demais fases,} \end{cases}$$

onde t é o tempo e o vetor \mathbf{x} tem componentes x_1 , x_2 e x_3 .

A filtragem de uma função corresponde a uma integral de convolução realizada sobre todo o domínio, entre uma função núcleo de Dirac g (com suporte compacto) e a função a ser filtrada, $\langle f \rangle(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega_\infty} g(\mathbf{x} - \mathbf{y})f(\mathbf{y}, t)d^3\mathbf{y}$. A filtragem da função indicadora, que será representada por “ $\langle \chi^k \rangle$ ”, é igual à fração volumétrica (ε^k) da fase selecionada.

$$\langle \chi^k \rangle(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega_\infty} g(\mathbf{x} - \mathbf{y})\chi^k(\mathbf{y}, t)d^3\mathbf{y} = \varepsilon^k(\mathbf{x}, t), \quad (3.20)$$

onde \mathbf{y} é um vetor com componentes y_1 , y_2 , y_3 ; $d^3\mathbf{y}$ é um elemento de volume $dy_1dy_2dy_3$ e Ω_∞ é o domínio de integração tridimensional.

Para seguirmos com o processo de filtragem das equações, é importante apresentar as propriedades de filtragem que utilizaremos para o desenvolvimento das equações subsequentes (DREW, 1983; ISHII; HIBIKI, 2010; SAGAUT, 2006):

$$\langle \chi^k a \rangle(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega_\infty} g(\mathbf{x} - \mathbf{y})\chi^k(\mathbf{y}, t)a(\mathbf{y}, t)d^3\mathbf{y}, \quad (3.21)$$

$$\tilde{a} = \frac{\langle \chi^k a \rangle}{\varepsilon^k}, \quad (3.22)$$

$$\bar{a} = \frac{\langle \chi^k f a \rangle}{\varepsilon^k \tilde{f}^k}, \quad (3.23)$$

$$\langle a + g \rangle = \langle a \rangle + \langle g \rangle, \quad (3.24)$$

$$\langle \langle a \rangle g \rangle = \langle a \rangle \langle g \rangle, \quad (3.25)$$

$$\left\langle \frac{\partial a}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle a \rangle}{\partial t}, \quad (3.26)$$

$$\left\langle \frac{\partial a}{\partial x_i} \right\rangle = \frac{\partial \langle a \rangle}{\partial x_i}, \quad (3.27)$$

onde o símbolo $\langle a \rangle$ representa a filtragem da variável a , e f é alguma propriedade física do fluido, como por exemplo a viscosidade (μ) ou a massa específica (ρ). Vale ressaltar que a comutação entre as derivadas e integral em 3.26 e 3.27, só podem ser aplicadas quando a variável $\langle a \rangle$ estiver em regime estatisticamente independente em relação ao tempo e ao espaço, respectivamente.

Neste trabalho será utilizada a notação indicial juntamente com a convenção de soma de Einstein. A notação x_i simboliza os componentes do vetor posição no espaço tridimensional, com $i = 1, 2$ ou 3 .

3.3.5.2 Filtragem da equação da continuidade

A equação da continuidade para escoamentos bifásicos em regime denso é modificada com a fração volumétrica da fase contínua. Este procedimento é realizado por meio da identificação da posição de cada partícula lagrangiana presente no domínio avaliado. Portanto, nesta etapa é necessária a aplicação do conceito da função indicadora e de sua derivada material, que é nula (DREW, 1983).

Podemos começar a imaginar um fluido inicialmente sem a presença de partículas. Assim, começando pela equação da continuidade para escoamentos monofásicos, temos:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0. \quad (3.28)$$

A partir do instante em que partículas são inseridas no sistema euleriano, é preciso identificar a posição das partículas. Para isso, inicialmente é preciso

multiplicar a equação (3.28) pela função indicadora e adicionar um termo (que é nulo) do lado esquerdo para possibilitar escrever a nova equação em sua forma divergente,

$$\begin{aligned} \chi^k \frac{\partial \rho}{\partial t} + \chi^k \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) + \rho \left[\frac{\partial \chi^k}{\partial t} + v_i \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right] &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\chi^k \rho) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\chi^k \rho u_i) &= \rho (u_i - v_i) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i}, \end{aligned} \quad (3.29)$$

onde v_i são os componentes de velocidade da interface entre as fases.

Agora a equação (3.29) está no formato adequado para podermos realizar a filtragem passa baixa. Multiplicando toda a equação (3.29) por uma função núcleo g , posteriormente integrando a equação sobre todo o domínio Ω_∞ , e utilizando as propriedades de filtragem,

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \chi^k \rho \rangle + \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \chi^k \rho u_i \rangle = \left\langle \rho (u_i - v_i) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right\rangle. \quad (3.30)$$

Por fim, é preciso utilizar as propriedades (3.22) e (3.23) na equação (3.30).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i) &= \left\langle \rho (u_i - v_i) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right\rangle \\ &= \int_{\Omega_\infty} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \left([\rho (u_i - v_i)] \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right) d^3 \mathbf{y} \\ &= - \int_{\Omega_\infty} \chi^k \frac{\partial}{\partial x_i} (g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) [\rho (u_i - v_i)]) d^3 \mathbf{y} \\ &= - \int_{\Omega^k} \frac{\partial}{\partial x_i} (g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) [\rho^k (u_i - v_i)^k]) d^3 \mathbf{y} \\ &= - \int_{\partial \Omega^k} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho^k (u_i - v_i)^k n_i d^2 \mathbf{y} \\ &= -\Gamma, \end{aligned} \quad (3.31)$$

onde, $\Gamma = \int_{\partial \Omega^k} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho^k (u_i - v_i)^k n_i d^2 \mathbf{y}$ e n_i são os componentes do vetor normal à interface. Esta integral de superfície é realizada sobre um contorno fechado ($\partial \Omega^k$) em todas as partículas presentes no domínio.

A equação (3.31) irá representar a equação da continuidade para escoamentos bifásicos com a presença de uma distribuição contínua da fração volumétrica. Para

mais detalhes sobre as identidades matemáticas utilizadas no desenvolvimento da equação (3.31), a bibliografia recomendada é Drew e Passman (2006).

Para escoamentos incompressíveis, com a massa específica constante sobre uma linha de corrente, onde $\frac{D\tilde{\rho}^k}{Dt} = 0$, podemos simplificar a equação (3.31) como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i) &= -\Gamma \\ \varepsilon^k \left(\frac{\partial \tilde{\rho}^k}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \tilde{\rho}^k}{\partial x_i} \right) + \tilde{\rho}^k \left(\frac{\partial \varepsilon^k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon^k \bar{u}_i) \right) &= -\Gamma \\ \varepsilon^k \frac{D\tilde{\rho}^k}{Dt} + \tilde{\rho}^k \left(\frac{\partial \varepsilon^k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon^k \bar{u}_i) \right) &= -\Gamma \\ \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon^k \bar{u}_i) &= -\frac{\Gamma}{\tilde{\rho}^k}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

3.3.5.3 Filtragem das equações de Navier-Stokes

Inicialmente, apresentaremos as equações de N-S em sua forma geral, sem nenhuma hipótese simplificadora,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}, \quad (3.33)$$

onde σ_{ij} são os componentes do tensor de tensões.

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= -p\delta_{ij} + \tau_{ij} \\ &= -p\delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ij} \right) \\ &= -p\delta_{ij} + 2\mu S_{ij}^d, \end{aligned} \quad (3.34)$$

sendo p o campo de pressão, δ_{ij} os componentes do tensor delta de Kronecker, μ a viscosidade dinâmica molecular, $\tau_{ij} = 2\mu S_{ij}^d$ são os componentes do tensor viscoso e $S_{ij}^d = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ij} \right)$ são os componentes do tensor taxa de deformação deviatório.

Analogamente ao método utilizado para a equação da continuidade, quando partículas são inseridas no escoamento, também é preciso filtrar as equações de NS a fim de determinar a posição de cada partícula presente no domínio. Inicialmente é preciso multiplicar toda a equação (3.33) pela função indicadora (χ^k)

e posteriormente adicionar um termo (que é nulo) no lado esquerdo da equação, possibilitando escreve-la na forma divergente.

$$\chi^k \frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \chi^k \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) + \rho u_i \left[\frac{\partial \chi^k}{\partial t} + v_j \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right] = \chi^k \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}, \quad (3.35)$$

que após utilizar a regra de produto das derivadas, temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\chi^k \rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\chi^k \rho u_i u_j) &= \chi^k \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + u_i \rho (u_j - v_j) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \\ \frac{\partial}{\partial t}(\chi^k \rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\chi^k \rho u_i u_j) &= \frac{\partial}{\partial x_j}(\chi^k \sigma_{ij}) - \sigma_{ij} \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} + u_i \rho (u_j - v_j) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Agora podemos aplicar a filtragem na Eq. (3.36) e utilizar as propriedades de filtragem listadas na Sec. 3.3.5.1:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \chi^k \rho u_i \rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \chi^k \rho u_i u_j \rangle &= \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \chi^k \sigma_{ij} \rangle - \left\langle \sigma_{ij} \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle + \left\langle u_i \rho (u_j - v_j) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle \\ \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i u_j) &= \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\sigma}_{ij}) - \left\langle \sigma_{ij} \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle + \left\langle u_i \rho (u_j - v_j) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Os dois últimos termos que aparecem no lado direito da Eq. (3.37) precisam

passar por um procedimento adequado. Começando pelo penúltimo termo,

$$\begin{aligned}
\left\langle \sigma_{ij} \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle &= \left\langle (-p\delta_{ij} + \tau_{ij}) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle \\
&= \left\langle (-p\delta_{ij} + p_s\delta_{ij} - p_s\delta_{ij} + \tau_{ij}) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle \\
&= \left\langle [(p_s - p)\delta_{ij} - p_s\delta_{ij} + \tau_{ij}] \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle \\
&= -p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} + \left\langle [(p_s - p)\delta_{ij} + \tau_{ij}] \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle \\
&= -p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} + \int_{\Omega_\infty} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \left([(p_s - p)\delta_{ij} + \tau_{ij}] \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right) d^3\mathbf{y} \quad (3.38) \\
&= -p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} - \int_{\Omega_\infty} \chi^k \frac{\partial}{\partial x_j} (g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) [(p_s - p)\delta_{ij} + \tau_{ij}]) d^3\mathbf{y} \\
&= -p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} - \int_{\Omega^k} \frac{\partial}{\partial x_j} (g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) [(p_s - p)\delta_{ij} + \tau_{ij}]^k) d^3\mathbf{y} \\
&= -p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} - \int_{\partial\Omega^k} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) [(p_s - p)\delta_{ij} + \tau_{ij}]^k n_j d^2\mathbf{y} \\
&= -p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} - M_i^d.
\end{aligned}$$

onde p_s é a pressão média interfacial (EVRARD; DENNER; WACHEM, 2019; DREW, 1983). O último termo da Eq. (3.38) é a densidade de força interfacial, $M_i^d = \int_{\partial\Omega^k} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) [(p_s - p)\delta_{ij} + \tau_{ij}]^k n_j d^2\mathbf{y}$, cuja integração ocorre sobre todas as partículas presentes no domínio e representa a transferência de quantidade de movimento linear entre as duas fases presentes (DREW, 1983).

Com respeito ao último termo da Eq. (3.37), também é necessário um tratamento adequado para a devida avaliação. Para tal, a integral volumétrica definida sobre todo o domínio do escoamento, passa a ser calculada apenas na

interface entre as duas fases.

$$\begin{aligned}
\left\langle u_i \rho (u_j - v_j) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle &= \int_{\Omega_\infty} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \left(u_i \rho (u_j - v_j) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right) d^3 \mathbf{y} \\
&= - \int_{\Omega_\infty} \chi^k \frac{\partial}{\partial x_j} (g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) u_i \rho (u_j - v_j)) d^3 \mathbf{y} \\
&= - \int_{\Omega^k} \frac{\partial}{\partial x_j} (g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) u_i^k \rho^k (u_j - v_j)^k) d^3 \mathbf{y} \quad (3.39) \\
&= - \int_{\partial \Omega^k} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) u_i^k \rho^k (u_j - v_j)^k n_j d^2 \mathbf{y} \\
&= - u_{s,i} \int_{\partial \Omega^k} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho^k (u_j - v_j)^k n_j d^2 \mathbf{y} \\
&= - u_{s,i} \Gamma,
\end{aligned}$$

onde $u_{s,i}$ são os componentes da média da velocidade interfacial da fase k .

Por fim, adicionando as Eqs. (3.38) e (3.39) em Eq. (3.37) e realizando algumas manipulações algébricas, temos a seguinte equação:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i u_j) &= \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\sigma}_{ij}) + p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} + M_i^d - u_{s,i} \Gamma \\
&= - \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon^k \tilde{p}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\tau}_{ij}) + p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} + M_i^d - u_{s,i} \Gamma \quad (3.40)
\end{aligned}$$

A Eq. (3.40) pode ser interpretada como a filtragem das equações de NS para escoamentos bifásicos. Entretanto, nós precisamos decompor o termo não linear, que implicará no problema de fechamento da turbulência - que trata o termo adicional que irá surgir devido a decomposição - tornando o sistema de equações possível de ser resolvido. Agora, como estamos tratando de escoamentos bifásicos, a simples presença das partículas altera a viscosidade do escoamento como um todo e essa característica adicional precisa ser modelada (EINSTEIN, 1906; GIBILARO et al., 2007; ISHII; HIBIKI, 2010; CAPECELATRO; DESJARDINS, 2013).

A presença de partículas, gotas e bolhas, em escoamentos bifásicos em regime denso, afetará significativamente a dinâmica não linear da transferência de informações entre as estruturas turbilhonares que compõe o espectro de energia cinética turbulenta. Modelar esse processo de transferência de informação deve

ser analisado com cuidado, quando comparado com o que ocorre em escoamentos diluídos ou mesmo monofásicos. Na próxima seção esse problema será discutido.

3.3.5.4 Decomposição do campo de velocidade

Vários estudos corroboram com a ideia sobre a decomposição tripla dos campos de velocidade e temperatura (SATO; SEKOGUCHI, 1975; SATO; SADATOMI; SEKOGUCHI, 1981a; SATO; SADATOMI; SEKOGUCHI, 1981b; LANCE; BATAILLE, 1991; BALACHANDAR; EATON, 2010). Nesta seção será proposto como o campo de velocidade será decomposto e o significado atribuído para cada um dos termos.

No que diz respeito às correlações envolvendo o campo de velocidade, a abordagem aplicada no presente trabalho - que lida com o problema de fechamento em escoamento bifásico - é análoga à metodologia utilizada para escoamento monofásico; mas traz alguns aspectos complementares muito importantes. A principal diferença é que agora queremos considerar a influência da fase lagrangiana no campo euleriano - devido ao movimento relativo entre as duas fases presentes. A ideia proposta é que essa influência seja percebida tanto no campo de velocidade quanto no campo de temperatura. Supõe-se que esse campo seja dividido em três componentes. Para os componentes do campo de velocidade completo (u_i) do escoamento bifásico, propomos:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i + u''_i, \quad (3.41)$$

onde:

- \bar{u}_i : é o campo de velocidade euleriana filtrado;
- u'_i : corresponde à flutuação do campo de velocidade euleriana promovida pela própria turbulência. Essa flutuação pode existir mesmo se não houver partículas no escoamento;
- u''_i : é a flutuação do campo de velocidade euleriana promovida pelo movimento relativo entre a fase lagrangiana e o campo de velocidade euleriana.

O primeiro (u'_i) é diferente de zero, apenas se o escoamento for turbulento. O segundo (u''_i) pode existir tanto em escoamentos laminares quanto em escoamentos turbulentos. Passamos agora a discutir a origem do problema de fechamento de turbulência em escoamentos bifásicos. Inicialmente, a Eq. (3.41) é introduzida na Eq. (3.40), e após algumas manipulações, temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i \bar{u}_j) &= -\frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon^k \tilde{p}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\varepsilon^k \tilde{\tau}_{ij}) - \frac{\partial}{\partial x_j}[\varepsilon^k \tilde{T}_{ij}] + p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} + \\ &+ M_i^d - u_{s,i} \Gamma, \end{aligned} \quad (3.42)$$

onde $\tilde{T}_{ij} = \tilde{\rho}^k (\overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j)$, que pode ser convenientemente reescrito como a soma dos termos:

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{ij} &= \tilde{\rho}^k [\overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j] \\ we &= \tilde{\rho}^k \left[\overline{(\bar{u}_i + u'_i + u''_i)(\bar{u}_j + u'_j + u''_j)} - \bar{u}_i \bar{u}_j \right] \\ &= R_{ij}^p + L_{ij} + C_{ij} + R_{ij}^t \\ &= R_{ij}^p + \tau_{ij}^t, \end{aligned} \quad (3.43)$$

onde,

- $R_{ij}^p = \tilde{\rho}^k \overline{u''_i u''_j}$ são os componentes do tensor de tensões gerado pelas flutuações do campo de velocidades euleriana promovida pelas partículas. Seus componentes serão modelados de forma a representar a influência que as partículas promovem no campo euleriano;
- $L_{ij} = \tilde{\rho}^k [\overline{u'_i u'_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j]$ são os componentes do tensor de Leonard para escoamentos bifásicos;
- $C_{ij} = \tilde{\rho}^k [\overline{u_i u'_j} + \overline{u'_i u_j} + \overline{u''_i u''_j} + \overline{u_i u''_j} + \overline{u'_i u''_j} + \overline{u''_i u'_j}]$ são os componentes do tensor cruzado para os escoamentos bifásicos. Com ele representam-se todas as combinações possíveis para as interações entre as flutuações do campo euleriano, flutuações promovidas pela partícula e o campo euleriano calculado;
- $R_{ij}^t = \tilde{\rho}^k \overline{u'_i u'_j}$ são os componentes do tensor submalha para escoamentos bifásicos;

- $\tau_{ij}^t = L_{ij} + C_{ij} + R_{ij}^t$ são os componentes do tensor global submalha de Boussinesq-Reynolds.

Assim, substituindo os termos da Eq. (3.43) na Eq. (3.42), resulta a seguinte equação "aberta":

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i \bar{u}_j) = & -\frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon^k \tilde{p}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\varepsilon^k \tilde{\tau}_{ij}) - \frac{\partial}{\partial x_j}[\varepsilon^k \tilde{R}_{ij}^p] - \frac{\partial}{\partial x_j}[\varepsilon^k \tilde{\tau}_{ij}^t] + \\ & + p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} + M_i^d - u_{s,i} \Gamma. \end{aligned} \quad (3.44)$$

As modelagens dos componentes dos tensores R_{ij}^p e τ_{ij}^t devem ser diferentes porque desempenham papéis distintos do ponto de vista físico. Na seção a seguir, apresentaremos em detalhes o problema de fechamento dos tensores \mathbf{R}^p e $\boldsymbol{\tau}^t$.

3.3.5.5 Fechamento dos componentes de R_{ij}^p

Antes de apresentarmos o fechamento do tensor \mathbf{R}^p , propomos a decomposição desse tensor em uma parte isotrópica e deviatórica. Em outras palavras, temos

$$R_{ij}^p = \frac{1}{3} R_{kk}^p \delta_{ij} + (R_{ij}^p)^d, \quad (3.45)$$

onde $\frac{1}{3} R_{kk}^p \delta_{ij}$ é a parte isotrópica e $(R_{ij}^p)^d$ é a parte deviatórica (traço nulo).

Portanto, precisamos propor dois tipos de fechamento. Um para a parte isotrópica e outro para a parte deviatórica do tensor \mathbf{R}^p . Para a parte deviatórica, uma hipótese matemática útil é que os componentes do tensor $(R_{ij}^p)^d$ sejam proporcionais aos componentes do tensor taxa de deformação deviatórico, conforme mostrado na seguinte equação:

$$(R_{ij}^p)^d = -2\mu' \bar{S}_{ij}^d, \quad (3.46)$$

onde μ' estamos definindo como a **modificação da viscosidade molecular**. Já para a parte isotrópica de \mathbf{R}^p , definimos que

$$R_{kk}^p = \tilde{\rho}^k \overline{u_k'' u_k''} = 2\tilde{\rho}^k k', \quad (3.47)$$

onde k' definimos como a **energia cinética específica submalha promovida pela fase dispersa**. Desta forma, propomos um novo tensor para o fechamento de escoamentos bifásicos:

$$R_{ij}^p = -2\mu' \bar{S}_{ij}^d + \frac{2}{3} \tilde{\rho}^k k' \delta_{ij}. \quad (3.48)$$

Conforme já demonstrado por Einstein (1906), a presença de partículas de alguma forma afeta a viscosidade do fluido. Então necessitamos de uma fórmula para o cálculo de μ' . A modelagem proposta será com a intenção de representar a modificação da viscosidade do fluido gerada unicamente pela presença de uma fase discreta. Além disso, a modificação da viscosidade também varia de acordo com os componentes presentes no escoamento bifásico, conforme mostrado por Ishii e Hibiki (2010) e Ishii e Zuber (1979). Assim, propomos uma fórmula analítica para modelar a modificação da viscosidade devido à presença da fase discreta:

$$\mu' = \mu^k [(\varepsilon^k)^{-n-1} - 1], \quad (3.49)$$

sendo $n = 2,5 \left(\frac{\mu_d + 0,4\mu^k}{\mu_d + \mu^k} \right)$, onde μ^k é a viscosidade molecular da fase contínua, μ_d é a viscosidade da fase dispersa, temos

$$n = \begin{cases} 1 & \text{para escoamento de bolhas em água} \\ 1.75 & \text{para gotas em líquido} \\ 2.5 & \text{para gotas em gás ou escoamentos particulados.} \end{cases}$$

A fórmula que propomos para o cálculo de μ' é baseada em uma fórmula analítica com base experimental, proposta pelo Ishii e Zuber (1979). Veremos mais adiante que μ' se relaciona com a viscosidade modificada proposta pelo Ishii e Hibiki (2010), onde

$$\frac{\mu_m}{\mu^k} = \left(1 - \frac{\varepsilon_d}{\varepsilon_{dm}} \right)^{-2,5\varepsilon_{dm} \left(\frac{\mu_d + 0,4\mu^k}{\mu_d + \mu^k} \right)}, \quad (3.50)$$

sendo, μ_m é a viscosidade molecular modificada, μ^k é a viscosidade molecular da fase contínua, μ_d é a viscosidade da fase dispersa, ε_d é a fração volumétrica da fase dispersa, e ε_{dm} é o fator de empacotamento máximo da fase discreta. O valor de ε_{dm} , varia de acordo com o tipo de partícula lagrangeana. Por exemplo, para sistemas com partículas sólidas e esféricas, $0,5 < \varepsilon_{dm} < 0,74$. Para escoamentos

com bolhas ou gotas, ε_{dm} pode ser maior por conta da deformação da bolha. Para escoamentos densos onde a fase lagrangiana é bolha ou gota, podemos escolher $\varepsilon_{dm} = 1$ (ISHII; HIBIKI, 2010)(ROSCOE, 1952). Desta forma, lembrando que $\varepsilon^k = 1 - \varepsilon_d$, podemos reescrever a equação anterior para escoamentos densos.

$$\frac{\mu_m}{\mu^k} = (\varepsilon^k)^{-2,5} \left(\frac{\mu_d + 0,4\mu^k}{\mu_d + \mu^k} \right). \quad (3.51)$$

De forma mais simplificada, podemos escrever a viscosidade molecular modificada como: $\mu_m = \mu^k (\varepsilon^k)^{-n}$, com $n = 2,5 \left(\frac{\mu_d + 0,4\mu^k}{\mu_d + \mu^k} \right)$, variando segundo as propriedades viscosas das duas fases. Essa viscosidade molecular modificada representa a viscosidade de todo o sistema bifásico. Porém, **para o fechamento da turbulência, é conveniente modelar a influência da viscosidade molecular modificada em duas parcelas; a viscosidade que depende da presença das partículas e a viscosidade do fluido da fase contínua.** Matematicamente, a forma que será representada a viscosidade molecular modificada será $\mu_m = \varepsilon^k (\mu^k + \mu')$. Sendo μ' a **modificação da viscosidade molecular** introduzida pela presença da fase discreta.

Na próxima seção apresentaremos o problema de fechamento para a turbulência em escoamentos bifásicos em regime denso.

3.3.5.6 Fechamento dos componentes de τ_{ij}^t

De forma análoga à seção anterior, antes de apresentarmos o fechamento do tensor $\boldsymbol{\tau}^t$, propomos a decomposição desse tensor em uma parte isotrópica e deviatórica. Em outras palavras, temos

$$\tau_{ij}^t = \frac{1}{3} \tau_{kk}^t \delta_{ij} + (\tau_{ij}^t)^d. \quad (3.52)$$

onde $\frac{1}{3} \tau_{kk}^t \delta_{ij}$ é a parte isotrópica e $(\tau_{ij}^t)^d$ é a parte deviatórica (traço nulo).

Portanto, novamente precisamos propor dois tipos de fechamento. Um para a parte isotrópica e outro para a parte deviatórica do tensor $\boldsymbol{\tau}^t$. Para a parte deviatórica, uma hipótese matemática útil é que os componentes do tensor $(\tau_{ij}^t)^d$ sejam proporcionais aos componentes do tensor taxa de deformação deviatórico,

conforme o modelo clássico de fechamento de Smagorinsky (SMAGORINSKY, 1963):

$$(\tau_{ij}^t)^d = -2\mu_t \bar{S}_{ij}^d, \quad (3.53)$$

onde μ_t é a tradicional viscosidade turbulenta. Por outro lado, para a parte isotrópica de $\boldsymbol{\tau}^t$, definimos que

$$\tau_{kk}^t = \tilde{\rho}^k \overline{u_k' u_k'} = 2\tilde{\rho}^k k_t, \quad (3.54)$$

onde k_t definimos como a **energia cinética específica turbulenta submalha**. Desta forma, propomos um novo tensor para o fechamento de escoamentos bifásicos:

$$\tau_{ij}^t = -2\mu_t \bar{S}_{ij}^d + \frac{2}{3} \tilde{\rho}^k k_t \delta_{ij}. \quad (3.55)$$

3.3.5.7 Equações para o balanço de quantidade de movimento linear para escoamentos turbulentos bifásicos em regime denso

Após o fechamento dos tensores \mathbf{R}^p e $\boldsymbol{\tau}^t$, precisamos substituí-los na equação 3.44. As modelagens que propomos para os componentes R_{ij}^p e τ_{ij}^t diferem dos componentes do tensor taxa de deformação \bar{S}_{ij}^d , apenas em seu coeficiente. Esta característica permite ter a equação para escoamento turbulento bifásico no regime denso em uma forma mais compacta:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i \bar{u}_j) = & -\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\varepsilon^k \left(\tilde{p} + \frac{2}{3} \tilde{\rho}^k k' + \frac{2}{3} \tilde{\rho}^k k_t \right) \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[2\varepsilon^k (\mu^k + \mu' + \mu_t) \bar{S}_{ij}^d \right] + p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} + M_i^d - u_{s,i} \Gamma. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Em resumo, a modelagem que propomos para escoamentos turbulentos bifásicos em regime denso terá uma viscosidade efetiva μ_{ef} e uma pressão modificada p^* . A viscosidade efetiva pode ser interpretada como a soma da viscosidade molecular da fase k (μ^k), a parcela da modificação da viscosidade pela presença da fase discreta (μ'), e a viscosidade turbulenta (μ_t). Colocando de outra forma: $\mu_{ef} = \mu^k + \mu' + \mu_t$. Já a pressão modificada, podemos escrever como $p^* = \tilde{p} + \frac{2}{3} \tilde{\rho}^k k' + \frac{2}{3} \tilde{\rho}^k k_t$; ou seja:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i \bar{u}_j) &= -\varepsilon^k \frac{\partial p^*}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} [2\varepsilon^k \mu_{ef} \bar{S}_{ij}^d] + (p_s - p^*) \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} + \\ &+ M_i^d - u_{s,i} \Gamma. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Com o desenvolvimento desta nova equação representam-se novas informações que não foram identificadas nos modelos existentes na literatura de escoamentos turbulentos multifásicos. Exemplificando:

- Mesmo para o caso laminar, onde a viscosidade turbulenta é zero, ainda é necessário modelar a flutuação promovida pela fase lagrangiana, e isso é feito com o modelo proposto;
- Se o escoamento se aproxima do regime diluído, cujo $\varepsilon^k \rightarrow 1$, a importância da modificação da viscosidade pela presença das partículas diminui, $\mu' \rightarrow 0$, como esperado;
- Caso o escoamento seja turbulento e monofásico, temos $\varepsilon^k = 1$ e $\mu' = 0$. Portanto, recaímos na tradicional equação filtrada para a metodologia LES.

3.3.5.8 Resumo do problema de fechamento para escoamentos bifásicos turbulentos em regime denso

Apresentaremos a seguir um resumo para uma compreensão metódica da essência do problema de fechamento para as equações do campo euleriano. A metodologia de fechamento que estamos propondo segue a mesma lógica de fechamento proposta originalmente por Stokes (1845) e por Boussinesq (1877). Em textos mais modernos, podemos conferir o problema de fechamento do tensor de tensões de Cauchy ($\boldsymbol{\sigma}$) em Batchelor (2000) e o problema de fechamento do tensor de Boussinesq-Reynolds ($\boldsymbol{\tau}^t$) em Schmitt (2007). Em outras palavras, queremos evidenciar que modelamos os tensores ($\boldsymbol{\sigma}$), ($\boldsymbol{\tau}^t$) e (\mathbf{R}^p), decompondo-os em uma parte isotrópica e deviatórica. Ou seja:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= \frac{1}{3} \sigma_{kk} \delta_{ij} + \sigma_{ij}^d \\ &= -p \delta_{ij} + 2\mu S_{ij}^d, \end{aligned} \quad (3.58)$$

$$\begin{aligned}\tau_{ij}^t &= \frac{1}{3}\tau_{kk}^t\delta_{ij} + (\tau_{ij}^t)^d \\ &= \frac{2}{3}\tilde{\rho}^k k_t \delta_{ij} - 2\mu_t \bar{S}_{ij}^d,\end{aligned}\tag{3.59}$$

$$\begin{aligned}R_{ij}^p &= \frac{1}{3}R_{kk}^p\delta_{ij} + (R_{ij}^p)^d \\ &= \frac{2}{3}\tilde{\rho}^k k' \delta_{ij} - 2\mu' \bar{S}_{ij}^d.\end{aligned}\tag{3.60}$$

Desta forma, quando substituimos os termos anteriores nas equações filtradas 3.44, compatibilizamos os termos isotrópicos numa pressão modificada p^* , e os termos deviatóricos em uma viscosidade efetiva μ_{ef} .

3.3.5.9 Filtragem da equação de energia térmica

De acordo com Batchelor (2000), a equação de energia térmica para escoamentos monofásicos é:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_p T) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho c_p u_i T) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \beta T \frac{DP}{Dt} + \Phi,\tag{3.61}$$

onde $\Phi = 2\mu \left(S_{ij}S_{ij} - \frac{1}{3}S_{ii}S_{jj} \right)$ é a função “potência específica de transformação viscosa de energia cinética em energia térmica”, c_p é a capacidade térmica, β é o coeficiente de expansão térmica e K é o coeficiente de condução térmica.

Para escoamentos bifásicos em regime denso, devemos modificar a equação da energia térmica realizando um procedimento de filtragem. Primeiramente, é necessário identificar cada fase em toda região de escoamento com o auxílio de uma função indicadora (χ^k).

Portanto, para definir a posição de cada fase presente no domínio, é necessário multiplicar a Eq. (3.61) pela função χ^k , e então colocá-la na forma divergente:

$$\begin{aligned}
\chi^k \frac{\partial}{\partial t}(\rho c_p T) + \chi^k \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho c_p u_i T) &= \chi^k RHS \\
\chi^k \frac{\partial}{\partial t}(\rho c_p T) + \chi^k \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho c_p u_i T) + \rho c_p T \left(\frac{\partial \chi^k}{\partial t} + v_i \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right) &= \chi^k RHS \\
\frac{\partial}{\partial t}(\chi^k \rho c_p T) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\chi^k \rho c_p u_i T) + \rho c_p T v_i \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} &= \rho c_p T u_i \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} + \chi^k RHS \\
\frac{\partial}{\partial t}(\chi^k \rho c_p T) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\chi^k \rho c_p u_i T) &= \rho c_p T (u_i - v_i) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} + \chi^k RHS.
\end{aligned} \tag{3.62}$$

onde v_i é a velocidade da interface entre as duas fases, e RHS é o lado direito da Eq. (3.61).

Aplicando a filtragem na Eq. (3.62), e usando as propriedades listadas na Sec. 3.3.5.1, temos:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \langle \chi^k \rho c_p T \rangle + \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \chi^k \rho c_p u_i T \rangle &= \left\langle \rho c_p T (u_i - v_i) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right\rangle + \langle \chi^k RHS \rangle \\
\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \overline{c_p T}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \overline{c_p u_i T}) &= \left\langle \rho c_p T (u_i - v_i) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right\rangle + \langle \chi^k RHS \rangle,
\end{aligned} \tag{3.63}$$

onde

$$\begin{aligned}
\langle \chi^k RHS \rangle &= \left\langle \chi^k \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \beta T \chi^k \frac{DP}{Dt} + \chi^k \Phi \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K \frac{\partial T}{\partial x_i} \chi^k \right) - K \frac{\partial T}{\partial x_i} \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} + \beta T \chi^k \frac{DP}{Dt} + \chi^k \Phi \right\rangle \\
&= \left\langle \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K \frac{\partial T}{\partial x_i} \chi^k \right) \right\rangle - \left\langle K \frac{\partial T}{\partial x_i} \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right\rangle + \left\langle \beta T \frac{D(\chi^k P)}{Dt} \right\rangle + \langle \chi^k \Phi \rangle \\
&= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon^k \tilde{K} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_i} \right) + \varepsilon^k \tilde{\Phi} + \left\langle \beta T \frac{D(\chi^k P)}{Dt} \right\rangle - \left\langle K \frac{\partial T}{\partial x_i} \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right\rangle \\
&= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon^k \tilde{K} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_i} \right) + \varepsilon^k \tilde{\Phi} + \left\langle \beta T \frac{D(\chi^k P)}{Dt} \right\rangle + \int_{\partial \Omega^k} K \frac{\partial T}{\partial x_i} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) n_i d^2 \mathbf{y}.
\end{aligned} \tag{3.64}$$

Portanto,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \overline{c_p T}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \overline{c_p u_i T}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon^k \tilde{K} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_i} \right) + \varepsilon^k \tilde{\Phi} + \left\langle \beta T \frac{D(\chi^k P)}{Dt} \right\rangle + \\
&+ J - (c_p T)_s \Gamma,
\end{aligned} \tag{3.65}$$

onde $(c_p T)_s$ é o valor médio calculado na interface; $\Gamma = \int_{\partial\Omega^k} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho^k (u_j - v_j)^k n_j d^2\mathbf{y}$; e $J = \int_{\partial\Omega^k} K \frac{\partial T}{\partial x_i} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) n_i d^2\mathbf{y}$ é a soma do fluxo de densidade de energia térmica sobre cada partícula. Assim, a Eq. (3.65) é uma forma de filtrar a equação de energia térmica em escoamento bifásico.

3.3.5.10 Simplificação da equação da energia térmica

Para casos onde o coeficiente de expansão térmica é modelado como um gás ideal, ou seja, $\beta = \frac{1}{T}$, e o escoamento é incompressível com ρ constante sobre uma linha de corrente ($\frac{D\rho}{Dt} = 0$):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \overline{c_p T}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \overline{c_p u_i T}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon^k \tilde{K} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_i} \right) + \varepsilon^k \tilde{\Phi} + \frac{D}{Dt}(\varepsilon^k P) + J - (c_p T)_s \Gamma. \quad (3.66)$$

Os últimos quatro termos que aparecem na Eq. (3.66) serão chamados de termo de transformação A .

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \overline{c_p T}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \overline{c_p u_i T}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon^k \tilde{K} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_i} \right) + A. \quad (3.67)$$

3.3.5.11 Decomposição dos campos de temperatura e velocidade

O primeiro passo para decompor o campo de temperatura e velocidade na Eq. (3.67), é realizar uma filtragem de Favre nos termos $(\overline{c_p T})$ e $(\overline{c_p u_i T})$ (WILLIAMS, 2018). Porém, a capacidade térmica (c_p) será modelada como uma mistura que obedece ao princípio de superposição da capacidade térmica da fase k , (ε^k) e da segunda fase ($1 - \varepsilon^k$). Para a filtragem do termo temporal e espacial da equação 3.67, definimos as duas decomposições abaixo:

$$\tilde{c}_p = \frac{\overline{c_p T}}{T} = \varepsilon^k c_{pk} + (1 - \varepsilon^k) c_{sp}. \quad (3.68)$$

$$\tilde{c}_p = \frac{\overline{c_p u_i T}}{u_i T} = \varepsilon^k c_{pk} + (1 - \varepsilon^k) c_{sp}. \quad (3.69)$$

- \tilde{c}_p : capacidade térmica da mistura;

- c_{pk} : capacidade térmica da fase k ;
- c_{sp} : capacidade térmica da segunda fase.

Como próximo passo, também é necessário decompor o campo de temperatura do escoamento bifásico (T) em três componentes.

$$T = \bar{T} + T' + T'' \quad (3.70)$$

- \bar{T} : é a filtragem do campo de temperatura euleriana;
- T' : corresponde à flutuação do campo de temperatura euleriana promovida pela turbulência;
- T'' : é a flutuação do campo de temperatura euleriana promovida pela presença da fase lagrangiana.

A substituição das Eq. (3.68) até (3.70) na Eq. (3.67), e a aplicação das propriedades de filtragem listadas na Sec. (3.3.5.1), dá origem a dois novos termos que requerem modelagem. Um deles representa o transporte de energia térmica para escoamento bifásico devido à presença das partículas (R_i^d). O segundo representa o transporte de energia térmica turbulento no escoamento bifásico (R_i^t).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \tilde{c}_p \bar{T}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \tilde{c}_p \bar{u}_i \bar{T}) = -\frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k R_i^d) - \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k R_i^t) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon^k \tilde{K} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \right) + A. \quad (3.71)$$

A proposta de fechamento dos novos termos será baseada na hipótese do gradiente de temperatura. Para o termo que não depende das flutuações da turbulência (R_i^d), a modelagem será proporcional ao coeficiente de condução térmica modificado pela presença da fase discreta (K'), vezes o gradiente da temperatura calculada. O termo que depende das flutuações do campo euleriano (R_i^t), será modelado proporcionalmente ao coeficiente de condução térmica turbulenta vezes o gradiente da temperatura calculada.

$$-\tilde{\rho}^k R_i^d = -\tilde{\rho}^k \tilde{c}_p \overline{u_i'' T''} = K' \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i}, \quad (3.72)$$

$$-\tilde{\rho}^k R_i^t = -\tilde{\rho}^k \tilde{c}_p (\overline{u_i' T'} + C_i + L_i) = K_t \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_i}, \quad (3.73)$$

onde:

- $C_i = \overline{\bar{u}_i T'} + \overline{u_i' \bar{T}} + \overline{u_i'' \bar{T}} + \overline{\bar{u}_i T''} + \overline{u_i' T''} + \overline{u_i'' T''}$;
- $L_i = \overline{\bar{u}_i \bar{T}} - \bar{u}_i \bar{T}$;
- $K' = K [(\varepsilon^k)^{-n-1} - 1]$;
- $K_t =$ coeficiente de condução térmica turbulenta.

Os componentes C_i e L_i , são os componentes dos fluxos turbulentos de energia térmica “cruzado e de Leonard”, respectivamente. Estes termos são análogos ao tensor cruzado e ao tensor de Leonard, que aparecem na modelagem do fechamento para as equações filtradas de NS. O termo $K' = K [(\varepsilon^k)^{-n-1} - 1]$ é uma proposta para o coeficiente de condução térmica modificado devido à presença da fase dispersa; e, n , é o mesmo valor constante utilizado na seção anterior, que depende do componente da fase lagrangiana.

Portanto, substituindo os termos (3.72) e (3.73) na Eq. (3.71), e destacando os termos difusivos e a fração volumétrica, temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \tilde{c}_p \bar{T}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \tilde{c}_p \bar{u}_i \bar{T}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon^k [\tilde{K} + K' + K_t] \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \right) + A. \quad (3.74)$$

Para a modelagem de K' e K_t , segue a proposta. O coeficiente de condução térmica modificado pela presença das partículas, K' , será uma função do número de Prandtl da fase contínua (Pr_c). Para o coeficiente de condução térmica turbulenta, K_t , sua modelagem será proporcional ao número de Prandtl (Pr_t) turbulento.

$$K' = \frac{\mu' \tilde{c}_p}{Pr_c}, \quad (3.75)$$

$$K_t = \frac{\mu_t \tilde{c}_p}{Pr_t}, \quad (3.76)$$

onde $\mu' = \mu^k [(\varepsilon^k)^{-n-1} - 1]$, é a modificação da viscosidade molecular devida à presença das partículas e μ_t a viscosidade turbulenta.

Finalmente, definimos um coeficiente efetivo de condutividade térmica para o escoamento bifásico, como $K_{ef} = \varepsilon^k (K + K' + K_t)$. Em outras palavras, a equação da energia térmica para escoamento bifásico em regime turbulento denso e incompressível, é apresentada.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \tilde{c}_p \bar{T}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \tilde{c}_p \bar{u}_i \bar{T}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ef} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \right) + A, \quad (3.77)$$

onde:

$$A = \varepsilon^k \tilde{\Phi} + \frac{D}{Dt}(\varepsilon^k P) + J - (c_p T)_s \Gamma.$$

É possível usar a equação final (3.77) em regimes denso e diluído. No entanto, a modificação da viscosidade (μ') e o coeficiente de condução térmica (K'), possuem modelos diferentes dependendo do valor da fração volumétrica da fase lagrangiana (CROWE, 2005). Podemos observar a generalidade da equação, fazendo o limite de $\varepsilon^k \rightarrow 1$, ou seja, com as abordagens de escoamento bifásico tendendo assintoticamente ao regime diluído. Esta mesma análise permite concluir que a equação deduzida também pode ser usada para o caso monofásico, pois quando $\varepsilon^k = 1$, a equação proposta torna-se a equação de energia térmica para um regime monofásico.

3.3.5.12 Equações lagrangianas

Nas seções anteriores, apresentamos a formulação matemática da fase contínua. Agora, em suma, é necessário estabelecer as equações de movimento e energia térmica para a fase lagrangiana.

3.3.5.13 Equação de movimento para as partículas lagrangianas

O movimento das partículas é modelado com a segunda lei de Newton. Para regimes densos, podemos desprezar as forças de gradiente de pressão, força de massa adicionada e força de Basset (ISHII; ZUBER, 1979; EVRARD; DENNER;

WACHEM, 2019). No cálculo da força de arrasto no escoamento bifásico que será proposto consideram-se partículas esféricas e um regime viscoso (regime de partículas sem distorção), onde a forma das partículas não muda devido a instabilidades interfaciais (ISHII; HIBIKI, 2010). Partindo da conhecida força de arrasto e das definições desenvolvidas por (ISHII; ZUBER, 1979), apresentamos uma nova forma para os componentes da força de arrasto (F_{Di}) em escoamentos bifásicos, onde a força de arrasto depende da viscosidade molecular modificada μ_m .

$$\begin{aligned}
 F_{Di} &= \frac{1}{2} C_D A \rho^k |u_i - v_i| (u_i - v_i) \\
 &= \frac{1}{8} C_D \pi d_p^2 (u_i - v_i) \rho^k |u_i - v_i| \\
 &= \frac{1}{8} C_D \pi d_p \mu_m (u_i - v_i) \frac{\rho^k |u_i - v_i| d_p}{\mu_m} \\
 &= 3\pi d_p \mu_m (u_i - v_i) \frac{R_{ep} C_D}{24},
 \end{aligned} \tag{3.78}$$

onde C_D , R_{ep} , A , d_p , ρ^k , u_i , v_i e μ_m são o coeficiente de arrasto, o Número de Reynolds da partícula, a área projetada de uma partícula, o diâmetro da partícula, a massa específica da fase k, a velocidade do campo euleriano, a velocidade da partícula e a viscosidade molecular modificada, respectivamente. As definições de $C_D = 24/R_{ep} [1 + 0.1R_{ep}^{0.75}]$, $R_{ep} = \frac{\rho^k |u_i - v_i| d_p}{\mu_m}$ e $\mu_m = \tilde{\mu}^k (\varepsilon^k)^{-n}$ são encontrados em (ISHII; ZUBER, 1979; DREW; PASSMAN, 2006).

Assim, a segunda lei de Newton para a partícula é:

$$m_p \frac{dv_i}{dt} = F_{Di} + (\rho_p - \rho^k) V_p g_i, \tag{3.79}$$

onde ρ_p e V_p , são a massa específica e o volume da partícula, respectivamente. O último termo do lado direito é força de peso-empuxo (ELGHOBASHI; TRUESDELL, 1992).

Uma forma importante de escrever a Eq. (3.78), para incorporar o tempo

característico (τ_p) da partícula, pode ser vista como:

$$\begin{aligned}
 F_{Di} &= 3\pi d_p \mu_m (u_i - v_i) \frac{R_{ep} C_D}{24} \\
 \frac{F_{Di}}{m_p} &= \frac{3\pi}{m_p} d_p \mu_m (u_i - v_i) \frac{R_{ep} C_D}{24} \\
 &= \frac{3\pi}{\rho_p V_p} d_p \mu_m (u_i - v_i) \frac{R_{ep} C_D}{24} \\
 &= \frac{18\mu_m}{\rho_p d_p^2} (u_i - v_i) \frac{R_{ep} C_D}{24} \\
 &= \frac{(u_i - v_i)}{\tau_p} \frac{R_{ep} C_D}{24},
 \end{aligned} \tag{3.80}$$

onde $\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_m}$.

Observe que as equações Eq. (3.78) e Eq. (3.80) são válidas para escoamentos bifásicos em regime viscoso com partículas esféricas. Além disso, essas equações são aplicadas a qualquer número de Reynolds e são válidas para o regime denso e diluído. É bom lembrar que o valor de n , presente na viscosidade molecular modificada, sempre depende das propriedades da fase lagrangiana.

3.3.5.14 Equação da energia térmica para partículas lagrangianas

As hipóteses apresentadas por Michaelides e Feng (1994) permitem que a equação da energia térmica para a fase lagrangiana possa ser consideravelmente simplificada. Reescrevendo a mesma equação em função do número de Nusselt (Nu), temos (CROWE et al., 2011):

$$m_p c_p \frac{dT}{dt} = Nu \pi K^k d_p (T^k - T_d), \tag{3.81}$$

onde m_p , c_p , K^k , T^k e T_d são a massa da partícula, a capacidade térmica da partícula, a condutividade térmica de fase contínua, a temperatura da fase contínua e a temperatura da partícula, respectivamente.

Para escoamentos turbulentos, Clift, Grace e Weber (2005) desenvolveram uma correlação para o número de Nusselt (Nu_c) que varia dependendo do número de Reynolds da partícula. Assim, propomos escrever a equação da energia térmica

para a fase lagrangiana como:

$$\begin{aligned}
 m_p c_p \frac{dT}{dt} &= Nu_c \pi K^k d_p (T^k - T_d) \\
 \frac{dT}{dt} &= \frac{6Nu_c \pi K^k d_p}{\rho_p \pi d_p^3 c_p} (T^k - T_d) \\
 &= \frac{12K^k}{\rho_p c_p d_p^2} (T^k - T_d) \frac{Nu_c}{2} \\
 &= \frac{(T^k - T_d) Nu_c}{\tau_p} \frac{1}{2}
 \end{aligned} \tag{3.82}$$

onde $\tau_c = \frac{\rho_p c_p d_p^2}{12K^k}$, $Nu_c = Nu_0(1 + 4.8 + 10^{-4} Re_p^{0.57})$, $Re_p = \frac{\rho^k |u_i - v_i| d_p}{\mu_m}$ e Nu_0 é o número de Nusselt na ausência de turbulência.

3.3.5.15 Método para a escolha da função núcleo de suporte compacto

O método que utilizaremos para mapear o campo lagrangiano, necessita de uma filtragem para computar as posições e velocidades das partículas. Visando um baixo custo computacional, escolhemos a função núcleo g baseada na função de Wendland $\phi_1^w : \mathbb{R}_+ \rightarrow [0, 1]$ (com suporte compacto em uma esfera S_1 de raio 1 e classe C^2), dada por (EVRARD; DENNER; WACHEM, 2019)

$$\phi_1^w(x) = \begin{cases} (4x + 1)(1 - x)^4 & \text{se } 0 \leq x \leq 1 \\ 0 & \text{se } x > 1 \end{cases}$$

que pode ser estendido para uma esfera S_δ de raio δ , com $\phi_\delta^w(x) = \phi_1^w(x/\delta)$. Para satisfazer a condição de normalização, temos

$$g(r) = \frac{21}{2\pi\delta^3} \phi_\delta^w(r). \tag{3.83}$$

A função núcleo Eq.(3.83) possui importantes propriedades que traduzem uma lógica física do problema. Quando procuramos a fase dispersa no domínio físico, a posição do centro de massa da partícula tem que corresponder à fração volumétrica máxima. Podemos representar matematicamente essa situação com

$$\varepsilon_{dm} = g(0)V_d. \tag{3.84}$$

A Eq.(3.84) pode ser entendida como uma espécie de **Fator de Empacotamento**. É o mesmo conceito visto em cristalografia (HAMMOND, 2015). Com a Eq.(3.84), estamos propondo uma fusão entre a ideia da viscosidade molecular modificada proposta pelo Ishii e Zuber (1979) com a proposta numérica do Evrard, Denner e Wachem (2019) de como calcular a fração volumétrica máxima. Ou seja, propomos

$$\frac{\mu_m}{\mu^k} = \left(1 - \frac{\varepsilon_d}{\varepsilon_{dm}}\right)^{-2,5\varepsilon_{dm} \left(\frac{\mu_d + 0,4\mu^k}{\mu_d + \mu^k}\right)}, \quad (3.85)$$

sendo

$$\begin{aligned} \varepsilon_{dm} &= g(0)V_d \\ &= \frac{21}{2\pi\delta^3}V_d. \end{aligned} \quad (3.86)$$

Para exemplificar o conceito, imaginemos uma esfera sólida contida num volume de controle cúbico cujo comprimento da célula corresponde ao diâmetro da esfera. Consideramos o diâmetro da esfera como 1 m — caso simulando com o Software MFSim e visualizado com o Software Paraview (figura 4). A esfera representa a fase dispersa e o restante do volume de controle está preenchido com água. Logo, o ε_{dm} desse caso é calculado como a razão entre o volume da esfera e o volume do cubo, ou seja $\varepsilon_{dm} = \pi/6$, que corresponde ao valor sugerido pelo Ishii e Hibiki (2010) na configuração de uma esfera inserida em uma célula cúbica. Sabemos que outras configurações podem ser alcançadas, como na configuração cúbica de face centrada, que acarreta $\varepsilon_{dm} = 0,74$ (HAMMOND, 2015; ISHII; HIBIKI, 2010). A legenda da figura 4 representa a fração volumétrica da fase contínua, assim o valor apresentado corresponde a $1 - \pi/6$.

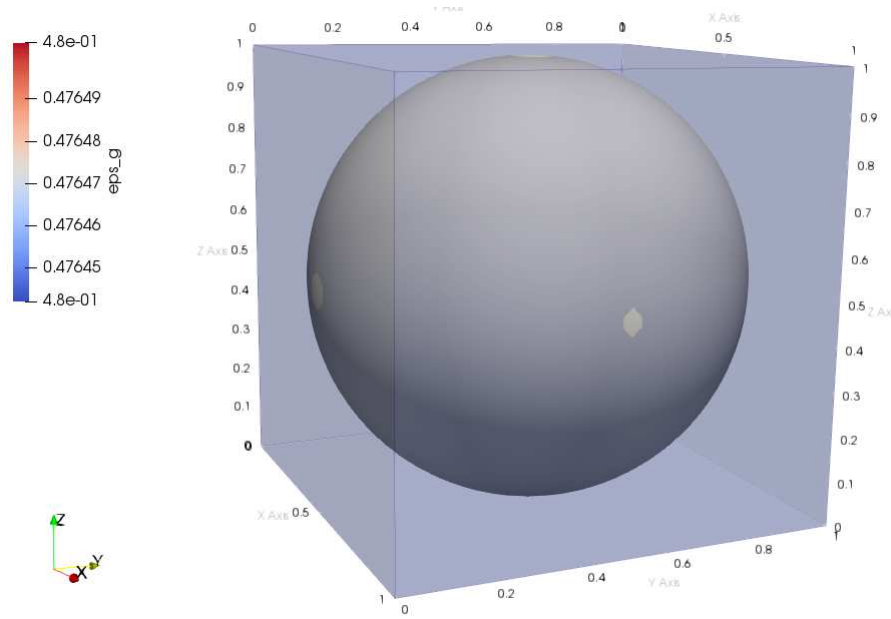


Figura 4 – Fração volumétrica máxima da fase contínua para uma partícula lagrangiana inserida em um cubo de volume 1 m^3 .

É importante observarmos que existe uma relação entre a malha computacional e a função δ . A relação pode ser obtida quando reescrevemos a equação 3.84 da seguinte maneira:

$$\varepsilon_{dm} = \frac{V_d}{V_t}, \quad (3.87)$$

onde $V_t = \Delta^3$ é o volume da célula cúbica para o caso de uma malha uniforme. Se igualarmos a equação 3.84 com a equação 3.87, obtemos uma fórmula para o comprimento δ como função do volume da célula computacional

$$\begin{aligned} \frac{V_d}{V_t} &= \frac{21}{2\pi\delta^3} V_d \\ \delta &= \Delta \left(\frac{21}{2\pi} \right)^{\frac{1}{3}}. \end{aligned} \quad (3.88)$$

Outra importante relação que devemos fazer para a fração volumétrica máxima ε_{dm} , é analisar como se comporta a razão entre o comprimento δ e o raio da partícula lagrangiana r_d . Podemos reescrever a equação 3.84 da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{dm} &= g(0)V_d \\
&= \frac{21}{2\pi\delta^3} \frac{4\pi r_d^3}{3} \\
&= 14 \left(\frac{r_d}{\delta} \right)^3.
\end{aligned} \tag{3.89}$$

O gráfico da equação acima está representado na Figura 5. A fração volumétrica máxima em função da razão δ/r_d , exige um valor crítico δ_c/r_m para ser satisfeita a condição de valor máximo da fração volumétrica, que tem que ser $\varepsilon_{dm} = 1$. Ou seja, nessa condição limite temos $\delta_c/r_m = 14^{1/3}$.

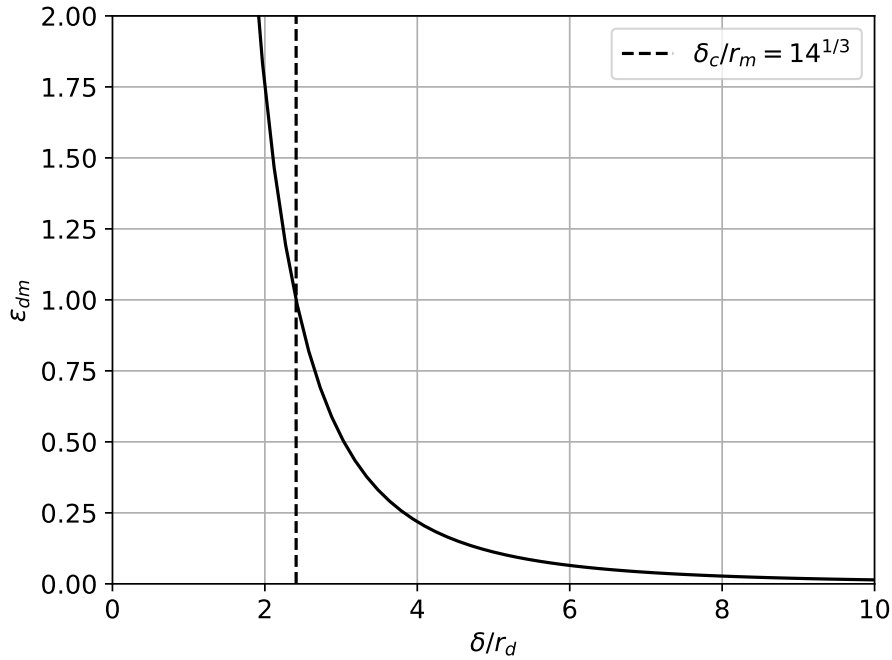


Figura 5 – Fração volumétrica máxima para uma partícula lagrangeana em função da razão entre o tamanho do filtro δ e do raio máximo r_m .

A análise sobre o comportamento da curva 3.89 foi proposta inicialmente por Evrard, Denner e Wachem (2019). A restrição da escolha da razão $\delta/r_d \geq 14^{1/3}$, tem fortes implicações na modelagem física e numérica. Saber que o critério de escolha do tamanho do δ da função núcleo de suporte compacto não é arbitrário, é

fundamental para respeitar o critério de $\varepsilon_{dm} \leq 1$, e por conseguinte, não acarretar problemas relacionados a divergências nos cálculos numéricos.

Porém, no presente trabalho, uma análise adicional foi realizada sobre restrições na escolha dos parâmetros do problema. Realizaremos uma análise semelhante a anterior, porém partiremos da equação 3.87.

$$\begin{aligned}\varepsilon_{dm} &= \frac{V_d}{V_t} \\ &= \frac{\frac{4\pi}{3}}{\left(\frac{\Delta}{r_d}\right)^3}.\end{aligned}\quad (3.90)$$

Na figura 6 apresentamos o gráfico da fração volumétrica máxima da fase dispersa em função da razão entre a malha computacional e o raio da partícula esférica.

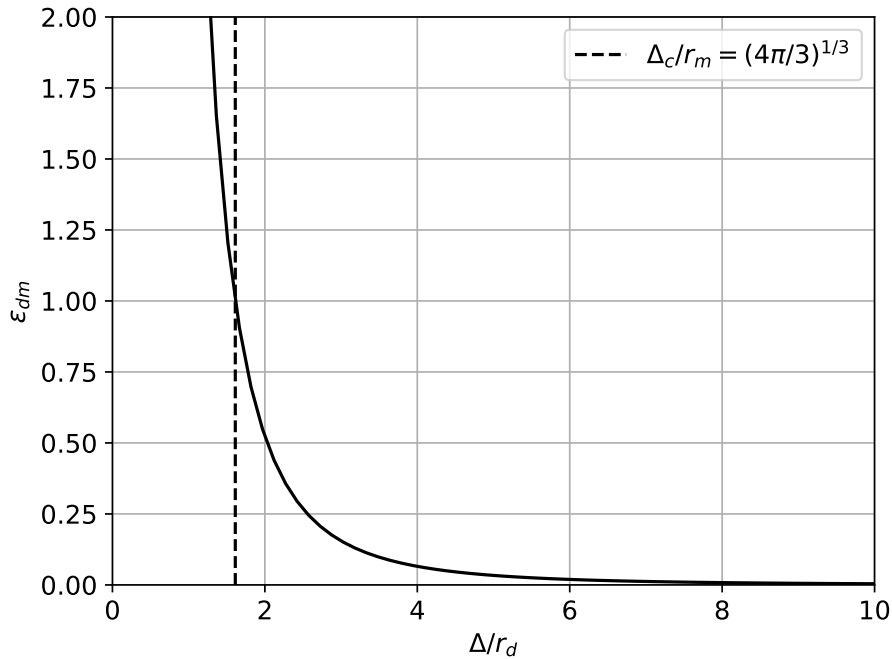


Figura 6 – Fração volumétrica máxima para uma partícula lagrangiana em função da razão entre a malha computacional Δ e do raio máximo r_m .

O refinamento da malha computacional também está atrelado ao raio da partícula. Analisando o caso limite onde $\varepsilon_{dm} = 1$, obtemos da equação 3.90 que

$\Delta_c/r_m = (4\pi/3)^{(1/3)}$, que determina uma relação mínima entre uma malha de corte Δ_c e um raio máximo de partícula r_m . Essa análise teórica se mostra de extrema importância para podermos saber qual será o limite entre os parâmetros do problema que será simulado. Com a análise proposta, podemos estabelecer a relação entre o raio da partícula esférica, a malha computacional e o tamanho do filtro da função núcleo.

3.3.6 Um resumo para o sistema completo de equações matemáticas para escoamentos bifásicos densos incompressíveis e turbulentos

- Equações eulerianas

Para casos onde envolvem a gravidade e a tensão interfacial do fluido, acrescentamos os termos $(\varepsilon^k \rho g_i + \varepsilon^k f_{\sigma_i})$ no fim da equação de balanço de quantidade de movimento linear.

— Equação para o balanço de massa:

$$\frac{\partial \varepsilon^k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon^k \bar{u}_i) = -\frac{\Gamma}{\tilde{\rho}^k}. \quad (3.91)$$

— Equação para o balanço de quantidade de movimento linear:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i \bar{u}_j) = & -\varepsilon^k \frac{\partial p^*}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (2\varepsilon^k \mu_{ef} \bar{S}_{ij}^d) + M_i^d - u_{s,i} \Gamma + \\ & + \varepsilon^k \rho g_i + \varepsilon^k f_{\sigma_i}. \end{aligned} \quad (3.92)$$

— Equação para o transporte da interface, (EVRARD; DENNER; WACHEM, 2019):

$$\frac{\partial \gamma}{\partial t} + u_i \frac{\partial \gamma}{\partial x_i} = 0, \quad (3.93)$$

sendo γ uma função coloração, dada por $\gamma = (1/V_K) \iiint_K \chi(x_i, t) dx_i$, onde V_K é o volume da célula K .

— Equação para a força de tensão interfacial:

$$f_{\sigma_i} = \sigma \kappa \frac{\partial \gamma}{\partial x_i}. \quad (3.94)$$

— Termo de arrasto generalizado e a fração de volume da partícula

$$M_i^d = - \sum_d g(x_i - x_i^d) f_{di} \quad (3.95)$$

$$\varepsilon^k = 1 - \sum_d g(x_i - x_i^d) V_d, \quad (3.96)$$

onde \sum_d representa a soma sobre todas as partículas do domínio, f_{di} é a força de arrasto, x_i^d é a posição da partícula e V_d é o volume da partícula.

— Equação de balanço de energia térmica

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \tilde{c}_p \bar{T}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \tilde{c}_p \bar{u}_i \bar{T}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ef} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \right) + A. \quad (3.97)$$

- Equações lagranginas

$$\frac{dv_i}{dt} = \frac{(u_i - v_i) R_{ep} C_D}{\tau_p} + \frac{(\rho_p - \rho^k)}{\rho_p} g_i. \quad (3.98)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{(T^k - T_d) Nu_c}{\tau_c}. \quad (3.99)$$

3.4 Modelagem discreta e computacional

3.4.1 MFSim

O MFSim é uma plataforma de modelagem computacional multifísica, que possibilita um grande leque de simulações e é desenvolvido no Laboratório

de Mecânica dos Fluidos da UFU (MFLab) em parceria com a Petrobras. Com essa plataforma podem ser resolvidos problemas de interação fluido-estrutura, escoamentos multifásicos, compressíveis e incompressíveis, escoamentos reativos, entre outros.

O algoritmo implementado na plataforma MFSim é baseado no Método dos Volumes Finitos. A descrição dos métodos de discretização utilizados, assim como os métodos de acoplamento pressão-velocidade podem ser revisitados na dissertação dos autores da presente tese (CATTA-PRETA; SILVEIRA-NETO, 2018).

Nesta seção serão apresentados os detalhes numéricos da configuração dos campos eulerianos e lagrangianos e um pseudo algoritmo utilizado para a implementação da modelagem do denso, ou seja, o método 3-vias. O passo a passo do algoritmo é encontrado no artigo dos autores Evrard, Denner e Wachem (2019).

3.4.2 Formulação euleriana

As equações do campo euleriano são resolvidas com a célula deslocada do esquema MAC (Marker and Cell), baseadas no trabalho de Harlow e Welch (1965). Para as componentes vetoriais u_i , gradiente de pressão e termos forçantes, as componentes verticais são definidas no meio das faces horizontais e as componentes horizontais, no meio das faces verticais. Já as variáveis escalares (ρ , ε , p , γ e μ), são definidas no centro das células (ver Figura 7). Utilizamos uma malha uniforme para o espaço. Para todos os casos, o que tem em comum entre os “setups” para o campo euleriano são: passo fracionado para o acoplamento pressão-velocidade; esquema de discretização temporal SBDF (Semi-implicit Backward Differentiation Formula) (CATTA-PRETA; SILVEIRA-NETO, 2018; DAMASCENO et al., 2018) e CFL = 0,5; utilizamos o modelo Barton para a discretização do termo advectivo. Por fim, para a resolução dos sistemas lineares, utilizamos o método multigrid (VILLAR et al., 2007) e a biblioteca PETSC (ABHYANKAR et al., 2018; BALAY et al., 2019).

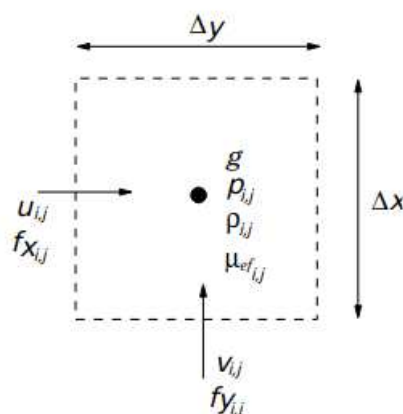


Figura 7 – Localização das variáveis na célula de MAC (VILLAR, 2007).

Para as condições de contorno do campo euleriano, adotamos Dirichlet igual a zero para as velocidades na parte inferior e lateral do reservatório; já na interface (região superior que separa o líquido do ar), adotamos condição de contorno de Neumann. Para o campo de pressão, adotamos Neuman para a parte inferior e lateral do reservatório (ver Figura 17); já na interface, adotamos condição de contorno de Dirichlet igual a zero. Todas as modelagens numéricas citadas acima, podem ser revisitadas na Dissertação de mestrado do autor da presente tese (CATTA-PRETA; SILVEIRA-NETO, 2018).

Para o “setup” da VOF (Volume of Fluid) utilizamos condições de contorno de Neumann; compatibilidade massa-momento, e configuramos para a região da VOF indicar líquido até a altura de 0,45 m. Da altura de 0,45 até 0,6 m, indica ar. Para mais detalhes da metodologia VOF, consultar o trabalho de Villar et al. (2007).

3.4.3 Formulação lagrangiana

Para o campo lagrangiano, as configurações foram: uma vazão constante indicada no artigo (DEEN; SOLBERG; HJERTAGER, 2001). Esta vazão compreende a passagem de bolhas na parte inferior do reservatório, por uma área de seção quadrada de $0,038 \times 0,038 \text{ m}^2$ a uma velocidade constante de $0,078 \text{ m/s}^2$; bolhas com diâmetro de 4 mm; condições de contorno de livre deslizamento entre

as partículas, e deleção, quando atinge altura de 0,42 m. Consideramos as forças peso, empuxo, força de sustentação, arrasto e massa virtual, para a dinâmica das bolhas.

Na próxima seção, apresentaremos o pseudo algoritmo implementado para a modelagem da fluidodinâmica de escoamentos em regime denso.

3.4.4 Pseudo algoritmo

O pseudo algoritmo que utilizamos para o desenvolvimento do código envolvendo a modelagem do regime denso, foi proposto pelos autores Evrard, Denner e Wachem (2019). Em cada nível de tempo da simulação, a função de coloração (γ) e as partículas Lagrangianas são primeiro transportadas com base em suas respectivas equações de movimento. Apesar de não utilizarmos os critérios de conversão Euler-Lagrange na simulação do canal vertical, foi implementado no MFSim as converções Euler-Lagrange e e Lagrange-Euler. As gotículas que atendem aos critérios de conversão são então transferidas do quadro Euleriano para o quadro Lagrangiano, e vice-versa. Na malha Euleriana, o termo fonte de momento devido à força de tensão superficial atuante na interface resolvida é atualizado, assim como as contribuições de fração de volume e momento devido à presença das partículas Lagrangianas. Por fim, as equações dos campos Eulerianas são resolvidas. A execução das abordagens é resumida no Algoritmo 1.

Algorithm 1 Modelagem do denso

```

if Acomplamento duas vias then
  | O campo de fração de volume  $\varepsilon^k = 1$ 
else
end
for para cada nível de tempo t do
  Resolva a equação 3.93.
  for cada partícula P do
    | Interpola a velocidade do campo euleriano para P.
    | Computa a força de arrasto (eq. 3.95) atuando em P.
    | Mova P utilizando o esquema de integração de Verlet para resolver a eq.
    | (3.98).
  end
  for cada estrutura euleriana do
    | if satisfazer o critério de conversão Eul  $\rightarrow$  Lag then
    |   Remova a estrutura euleriana
    |   Injete a partícula lagrangeana
    |   Adapte o campo de velocidade euleriano para a velocidade sem perturba-
    |   ção
    | else
    | end
  for cada partícula P do
    | if satisfazer o critério de conversão Lag  $\rightarrow$  Eul then
    |   Remova a partícula lagrangeana
    |   Injete uma partícula euleriana esférica
    |   Adapte o campo de velocidade euleriano para conservar o momento da
    |   partícula
    | else
    | end
  end
  Atualize a tensão superficial utilizando a equação 3.94
  for cada partícula P do
    | Atualize a contribuição do momento da partícula P por meio da eq. 3.95
    | if Acomplamento três vias then
    |   | Atualize a contribuição da fração de volume da partícula P na malha
    |   | euleriana utilizando a eq. 3.96
    | else
    | end
  end
  Resolva as equações de balanço 3.91 e 3.92.
  Mova para o próximo passo de tempo  $t = t + \Delta t$ 
end

```

4 Resultados e Discussões

O problema abordado na presente tese de doutorado é a análise da influência da modelagem da turbulência em escoamentos bifásicos densos, mais especificamente o escoamento de uma coluna de bolhas em um reservatório de seção quadrada. As simulações foram realizadas utilizando a plataforma de modelagem computacional MFSim. Os resultados das simulações estão descritos a partir da seção 4.2.

No entanto, antes de discutir os resultados das simulações, foi realizada uma análise da viscosidade molecular modificada (seção 4.1) utilizando um código separado, desenvolvido em Python com o conceito de orientação a objetos. O código a seguir possibilita uma análise rápida e prática dos principais conceitos relacionados ao tipo e à viabilidade da viscosidade molecular modificada para o caso do estudo em questão. O código que pode ser acessado em <https://github.com/ricardocatta/modifiedViscosity>, permite analisar as restrições inerentes aos parâmetros do raio da partícula (r_d), da malha euleriana (Δ) e do raio da função núcleo de suporte compacto (δ).

4.1 Análise computacional da viscosidade molecular modificada

Uma etapa importante na simulação de escoamentos bifásicos em regime denso é o cálculo da viscosidade molecular modificada. Para isso, utilizamos a fórmula proposta por (ISHII; ZUBER, 1979), que nos fornece um valor analítico baseado em experimentos. A viscosidade molecular modificada

$$\frac{\mu_m}{\mu^k} = \left(1 - \frac{\varepsilon_d}{\varepsilon_{dm}}\right)^{-2.5\varepsilon_{dm} \left(\frac{\mu_d + 0.4\mu_c}{\mu_d + \mu_c}\right)}, \quad (4.1)$$

cuja explicação foi realizada na seção 3.3.5.4, foi implementada com as seguintes classes:

```

class Diameter(object):
    """Construction of different lengths of delta"""
    def __init__(self, diameter):
        self.diameter = diameter
        self.r_bubble = self.diameter / 2
    def equal(self, n):
        return n * self.r_bubble

```

A classe *Diameter* nos possibilita a partir do diâmetro da bolha, saber qual será o critério adotado do tamanho do δ . Ou seja, nessa classe escolhemos quantas vezes o δ será maior do que o raio da partícula.

```

class Disperse(object):
    """Return the maximum value for disperse phase"""
    def __init__(self, ratio, delta):
        self.ratio = ratio
        self.delta = delta

    def Max(self):
        return 14 * ( self.ratio / self.delta) ** 3

```

Na classe *Disperse*, podemos acessar qual é o valor máximo da fração volumétrica da fase dispersa. E na classe *Phase* escolhemos o tipo de fluido que constitui a fase dispersa.

```

class Phase(object):
    """Viscosity of phase [N.s/m²] at T = 20 °C"""
    gas = 1.72e-5
    water = 1.002e-3

```

Por fim, a equação da viscosidade molecular modificada pode ser acessada com a classe *Viscosity*. Nessa classe podemos acessar o caso geral da viscosidade molecular modificada do escoamento, inserindo apenas as viscosidades e a fração

volumétrica máxima como parâmetros de entrada. Nessa classe também podemos acessar o caso particular da equação da presente tese.

```
class Viscosity(object):
    """Modified viscosity"""
    def __init__(self, mud, muc, eps_dm, eps_d):
        self.mud = mud
        self.muc = muc
        self.eps_dm = eps_dm
        self.eps_d = eps_d
        self.viscosityRatio = np.round((self.mud + 0.4 * self.muc) /
                                        (self.mud + self.muc), decimals = 2)
        self.exponent = np.round((-2.5 * self.eps_dm *
                                   self.viscosityRatio), decimals = 2)

    def ishii(self):
        return self.muc * (1 - (self.eps_d / self.eps_dm)) ** self.exponent

    def catta(self):
        return self.muc * (1 - (self.eps_d))** np.round(
            (2.5 * self.viscosityRatio), decimals = 2)
```

Todas essas classes são chamadas em um arquivo principal, como pode ser visto no código abaixo.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import viscosity as visc
import delta as d
import epsilonMax as eps
import plot_muRatio_epsRatio as plotEps
import modified_viscosity as modified
```

```
mu_d = visc.Phase.gas
mu_c = visc.Phase.water

delta = d.Diameter(0.004)

r_bubble = d.Diameter(0.004).r_bubble

eps_min = eps.Disperse(r_bubble, delta.equal(14 ** (1/3)))
eps_d3 = eps.Disperse(r_bubble, delta.equal(3))
eps_d5 = eps.Disperse(r_bubble, delta.equal(5))
eps_d7 = eps.Disperse(r_bubble, delta.equal(7))
eps_d10 = eps.Disperse(r_bubble, delta.equal(10))

eps_dm_min = eps_min.Max()
eps_dm3 = eps_d3.Max()
eps_dm5 = eps_d5.Max()
eps_dm7 = eps_d7.Max()
eps_dm10 = eps_d10.Max()

epsilon_d = np.linspace(0, 1, 1000)

mu_m3 = modified.Viscosity(mu_d, mu_c, eps_dm3, epsilon_d).ishii()
mu_ratio3 = mu_m3 / mu_c

mu_m5 = modified.Viscosity(mu_d, mu_c, eps_dm5, epsilon_d).ishii()
mu_ratio5 = mu_m5 / mu_c

mu_m7 = modified.Viscosity(mu_d, mu_c, eps_dm7, epsilon_d).ishii()
mu_ratio7 = mu_m7 / mu_c

mu_m10 = modified.Viscosity(mu_d, mu_c, eps_dm10, epsilon_d).ishii()
mu_ratio10 = mu_m10 / mu_c
```

```
plotEps.epsd_mu_ratio(epsilon_d2, munt_mut, epsilon_d, eps_dm3, mu_ratio3,
eps_dm5, mu_ratio5, eps_dm7, mu_ratio7, eps_dm10, mu_ratio10)
```

A partir do código acima, podemos analisar e compreender de forma qualitativa e quantitativa o impacto da escolha de diferentes valores para δ . Para visualizar graficamente o comportamento da viscosidade molecular modificada, foi criado o gráfico apresentado na Figura 8.

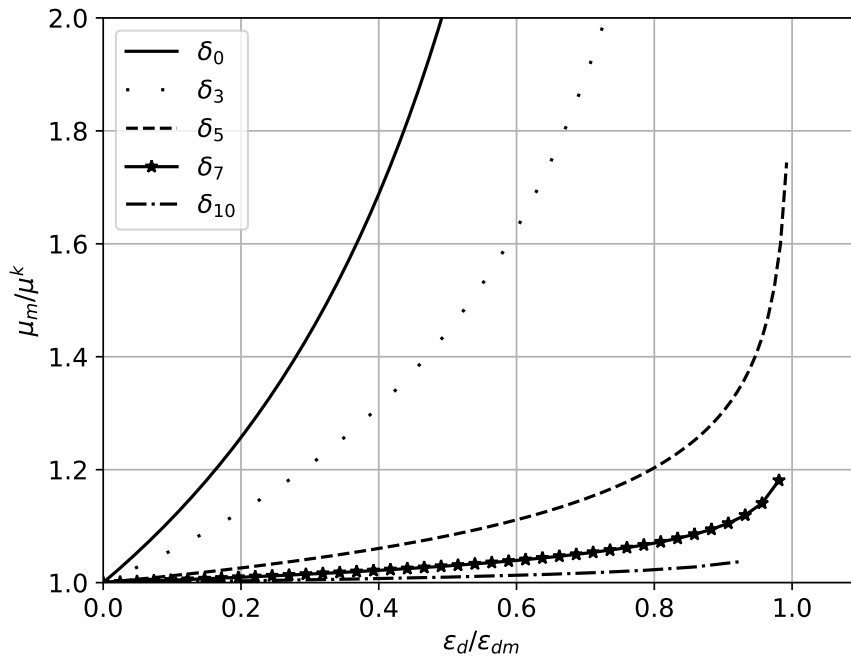


Figura 8 – Razão da viscosidade molecular modificada com a viscosidade molecular da fase contínua (μ_m/μ^k) em função da razão entre a fração volumétrica da fase dispersa com a fração volumétrica máxima. Sendo $\delta_n = nr_d$, com $n = 0, 3, 5, 7, 10$ e r_d é o raio da partícula.

Sugerimos uma atenção minuciosa ao resultado apresentado na Figura 8. É nesse resultado que identificamos a **importância** da modelagem envolvendo a viscosidade molecular modificada para escoamentos densos. Portanto, vamos entendê-lo. Começamos pelos extremos: no extremo inferior, temos δ_{10} ($\delta = 10r_d$), em que a viscosidade molecular modificada é muito pequena, próxima de 1, e o fator

de empacotamento $\varepsilon_{dm} = 0,014$. Já no extremo superior, temos δ_0 ($\delta = (14)^{1/3}r_d$), que é o tamanho mínimo possível para δ , que corresponde $\varepsilon_{dm} = 1,0$. Nesse caso, ocorre a máxima viscosidade molecular modificada devida à presença das partículas.

Uma analogia é bem-vinda para exemplificar a situação. Imagine um conjunto de 100 pessoas. Se esse conjunto for a um determinado local que possui capacidade máxima de lotação de 10 mil pessoas, esse local estará vazio (com apenas 1% de sua capacidade). Por outro lado, se esse conjunto de pessoas for para outro local com capacidade máxima de 100 pessoas, o local estará com sua máxima capacidade. O local vazio é análogo ao escoamento diluído e o local cheio é análogo ao escoamento denso.

Podemos observar que a escolha de δ tem influência direta e impactante na viscosidade molecular modificada. Isso se deve ao fato de que a fração volumétrica máxima depende do valor de δ . Constatamos uma relação inversamente proporcional: quanto menor o valor de δ , maior será a viscosidade molecular modificada; quanto maior o valor de δ , menor será a viscosidade molecular modificada.

Na Figura 9 podemos observar 4 faixas diferentes de variação da razão da viscosidade molecular modificada com a viscosidade molecular. Concluímos que a modificação da viscosidade aumenta drasticamente à medida que o escoamento tende ao máximo regime denso (δ_0).

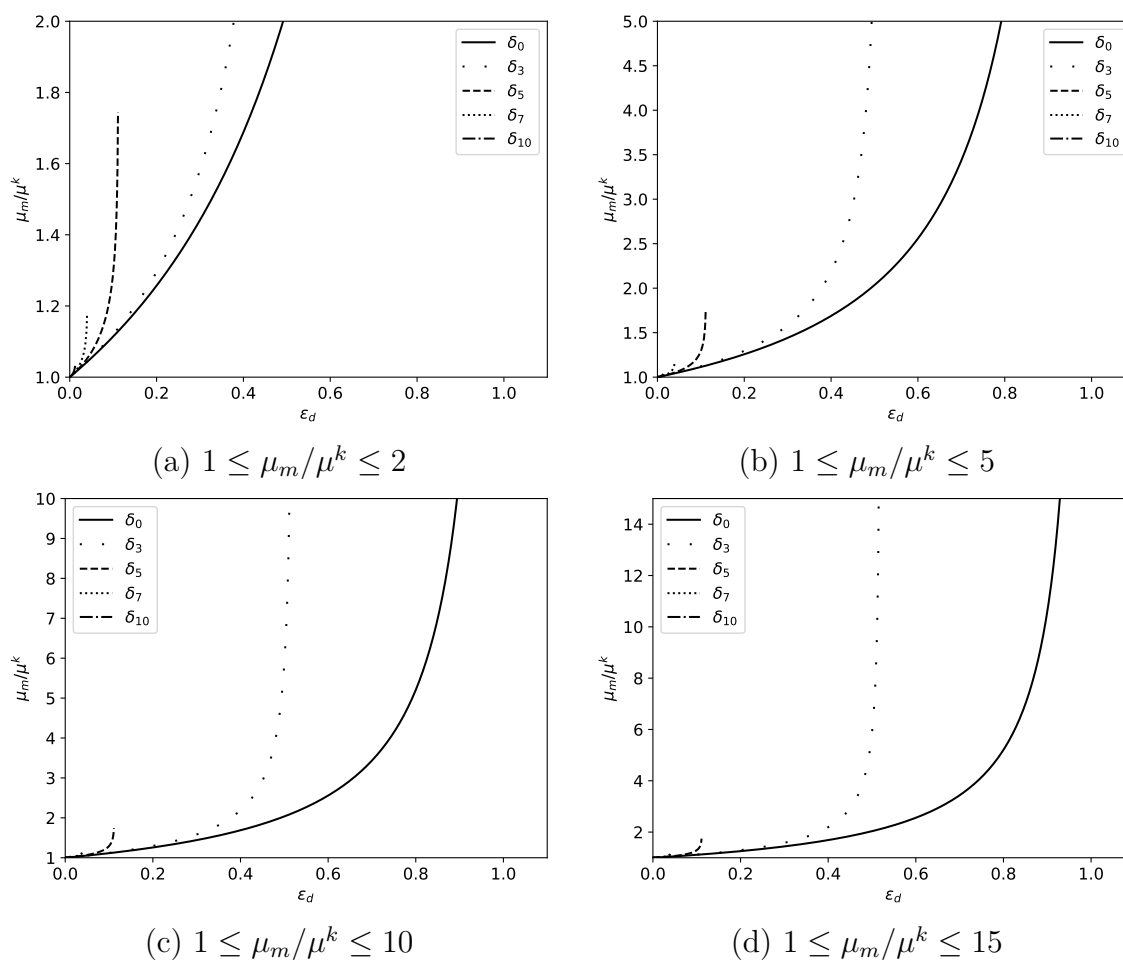


Figura 9 – Razão da viscosidade molecular modificada com a viscosidade da fase contínua (μ_m/μ^k) em função da fração volumétrica da fase dispersa. Sendo $\delta_n = nr_d$, com $n = 0, 3, 5, 7, 10$ e r_d é o raio da partícula.

Para completarmos a análise gráfica, apresentaremos um gráfico com cinco assíntotas verticais, cada uma correspondendo a um δ específico. Pela Figura 10, constatamos que os fatores máximos de empacotamento representam as assíntotas do gráfico da viscosidade molecular modificada.

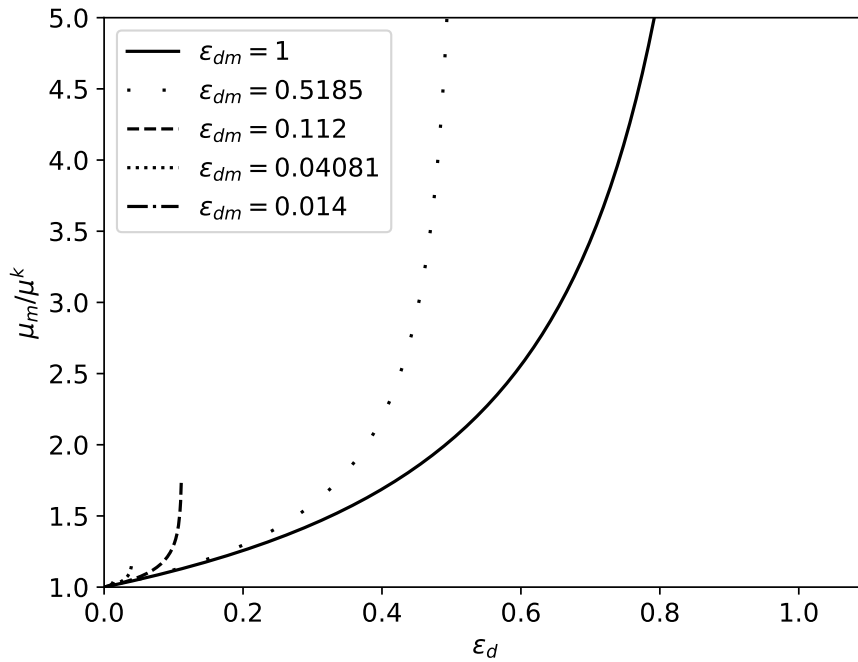


Figura 10 – Razão da viscosidade molecular modificada com a viscosidade da fase contínua (μ_m/μ^k) em função da fração volumétrica da fase dispersa. Sendo ε_{dm} , assíntotas das curvas da viscosidade molecular modificada.

Os resultados anteriores sobre a viscosidade molecular modificada reforçam o acerto de uma hipótese adotada na seção 3.3.5.4. Nessa seção consideramos a decomposição tripla do campo de velocidade. Sendo u_i'' , os componentes das flutuações do campo euleriano causadas pelo movimento relativo entre as partículas lagrangianas que estão interagindo com o campo euleriano. Ou seja, podemos observar esse comportamento nas Figuras 8 e 10, pois concluímos que quanto mais denso for o escoamento, maior será a viscosidade molecular modificada.

Terminada a primeira parte dos resultados, onde apresentamos uma validação da teoria sobre a viscosidade molecular modificada, iniciamos uma validação da teoria com um experimento material canônico na literatura de escoamentos multifásicos. A seguir, apresentamos o caso do canal vertical com injeção de bolhas.

4.2 Experimento material

Deen, Hjertager e Solberg (2000), Deen, Solberg e Hjertager (2001) realizaram experimentos materiais e computacionais de uma coluna de bolhas preenchida com água destilada. Para evitar a coalescência das bolhas, uma pequena quantidade de sal foi dissolvida na água. A coluna tem seção transversão quadrada com dimensões ($W \times D$) $0,15 \times 0,15 \text{ m}^2$ e altura (L) igual a $0,45\text{m}$. A placa, localizada na parte inferior da coluna, contém 49 orifícios, com diâmetro de 1 mm , posicionados na parte central da coluna com um espaçamento quadrado de $6,25 \text{ mm}$. A velocidade de injeção das bolhas foi de $0,078 \text{ m/s}$.

4.3 Simulação computacional

Foram simuladas várias configurações para o mesmo problema físico. Avaliamos diferentes tipos de modelos de fechamento da turbulência, assim como a influência da modelagem da viscosidade molecular modificada pela presença das bolhas.

Apresentaremos modelos para o fechamento da turbulência, com os modelos de Smagorinsky (SMAGORINSKY, 1963), Germano-Lilly (GERMANO et al., 1991) e Smagorinsky com Van Driest (função de amortecimento nas paredes). A diferença básica entre os modelos de Smagorinsky e de Germano-Lilly está na forma de se calcular a viscosidade turbulenta. No modelo de Smagorinsky, temos a viscosidade turbulenta $\mu_t = C_s \rho^k \bar{\Delta}^2 \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}}$, onde C_s é a constante de Smagorinsky, ρ^k é a densidade da fase contínua, $\bar{\Delta}^2$ é o quadrado da malha euleriana e \bar{S}_{ij} é o tensor taxa de deformação filtrado. Para o modelo de Germano-Lilly, a diferença é que C_s não é mais constante, sendo calculado por um método de mínimos quadrados, e passa ser função do espaço. Para mais detalhes dos dois modelos, recomendo a leitura da dissertação de mestrado do autor Catta-Preta e Silveira-Neto (2018).

Os modelos de Smagorinsky e de Germano são resumidos na tabela abaixo:

| Modelo | Casos |
|--------------------------|--------|
| Smagorinsky $C_s = 0,15$ | Caso 1 |
| Smagorinsky $C_s = 0,1$ | Caso 2 |
| Smagorinsky $C_s = 0,2$ | Caso 3 |
| Germano-Lilly | Caso 4 |

Tabela 1 – Modelos de fechamento da turbulência que foram simulados.

Para os casos 1, 2, 3 e 4, utilizamos a malha de $32 \times 32 \times 128$. A modificação da viscosidade molecular devida a presença da fase discreta foi implementada como $\mu' = \mu^k [(\varepsilon^k)^{-n-1} - 1]$, tendo em vista que quando $n = 1$, é o valor adotado quando a fase dispersa é gasosa.

4.3.1 Caso 1 ($C_s = 0,15$):

No primeiro caso avaliamos o modelo de fechamento da turbulência de Smagorinsky com constante de 0,15.

O pós-processamento do caso constitui em duas etapas. A primeira é a análise qualitativa dos campos de velocidade, viscosidade e densidade do campo euleriano por meio do Software Paraview. A segunda etapa, constitui numa análise quantitativa dos campos de velocidade e energia cinética turbulenta. Também é realizada uma comparação entre os resultados da simulação computacional e os resultados obtidos através do experimento material.

A injeção de bolhas no interior do canal faz com que as bolhas criem no campo euleriano um padrão típico de difração, e cria uma configuração de cogumelo antes de tocar a interface líquido-gás situada na altura de 0,45 m (ver figura 16). A interface foi modelada com o método VOF (Volume of Fluid) desenvolvido por Sussman, Smereka e Osher (1994). Para garantir o balanço das frações volumétricas, as bolhas são deletadas duas células abaixo da interface líquido gás, como foi descrito pelos autores Jain, Kuipers e Deen (2014). Na figura 11, apresentada na próxima seção, após a injeção de bolhas no canal, existe um momento em que as bolhas chegam na interface entre o líquido e o gás. Nesse momento, é aplicada a condição de contorno de eliminação das bolhas.

4.3.1.1 Análise qualitativa

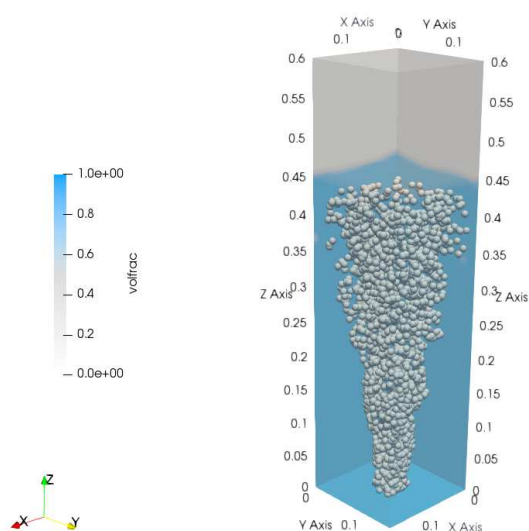


Figura 11 – Imagens da interação entre as bolhas deletadas e o movimento da VOF (Volume of Fluid) no instante da eliminação. Na legenda, volfrac representa a fração volumétrica da função coloração, marcando 1 onde é líquido e 0 onde é gás.

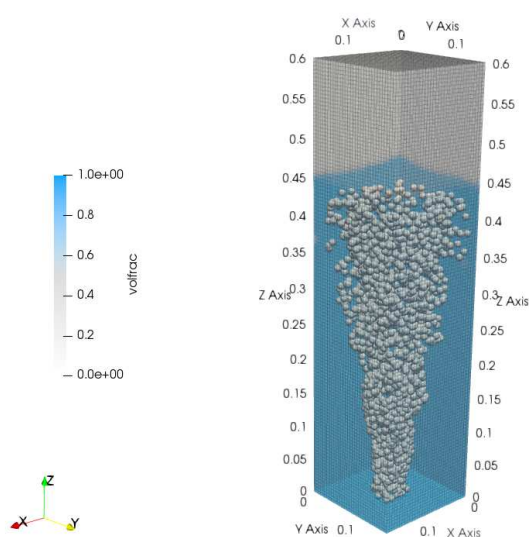


Figura 12 – Malha do campo euleriano da figura acima

A distribuição espacial das bolhas introduz a noção de escoamentos multifásicos em regime denso. Podemos notar uma distribuição quase homogênea das bolhas nas figuras abaixo.

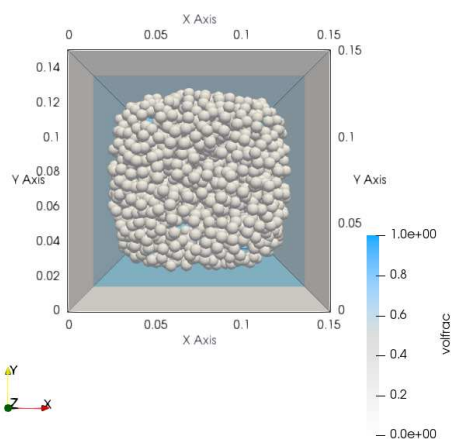


Figura 13 – Visão superior da injeção e movimento de bolhas na coluna de água.

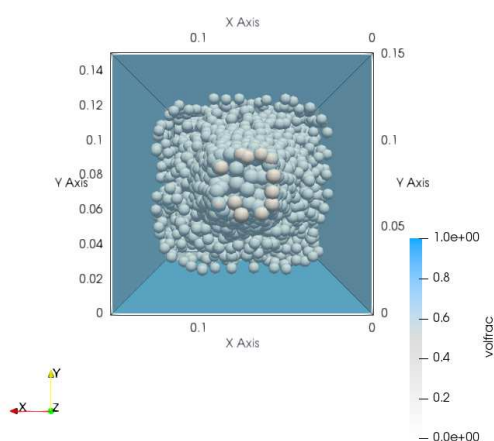


Figura 14 – Visão inferior da injeção e movimento de bolhas na coluna de água.

Por meio das figuras 13 e 14, podemos notar uma densa distribuição de bolhas ao longo do canal. Analisaremos o papel da turbulência nessa categoria de escoamentos multifásicos.

Pela figura 15, é possível analisar a dinâmica das bolhas em três momentos distintos: nos instantes 2, 12 e 100 segundos. Em $t = 2$ segundos, as bolhas ainda não alcançaram a interface líquido-ar em $z = 0,45$ metros. Nesse momento, é perceptível que o campo de vetores gerado pelo software Paraview ainda apresenta uma organização considerável. Contudo, nos instantes $t = 12$ segundos e $t = 100$ segundos, as flutuações causadas pelas partículas no campo euleriano já demonstram uma tendência qualitativa para um escoamento turbulento.

A interface líquido-ar é modelada através do método Volume of Fluid (VOF), a qual oscila em resposta à interação entre as partículas ao alcançarem a região onde as condições de contorno de eliminação são aplicadas. Com o intuito de evidenciar os efeitos qualitativos, apresentamos na Figura 16 momentos antes ($t = 2$), durante ($t = 3$) e após ($t = 4$ e $t = 12$) a eliminação das partículas do domínio. A referida interface oscila em torno da altura $z = 0,45$, gerando ondas que podem ser observadas com alto grau de detalhamento na Figura 17.

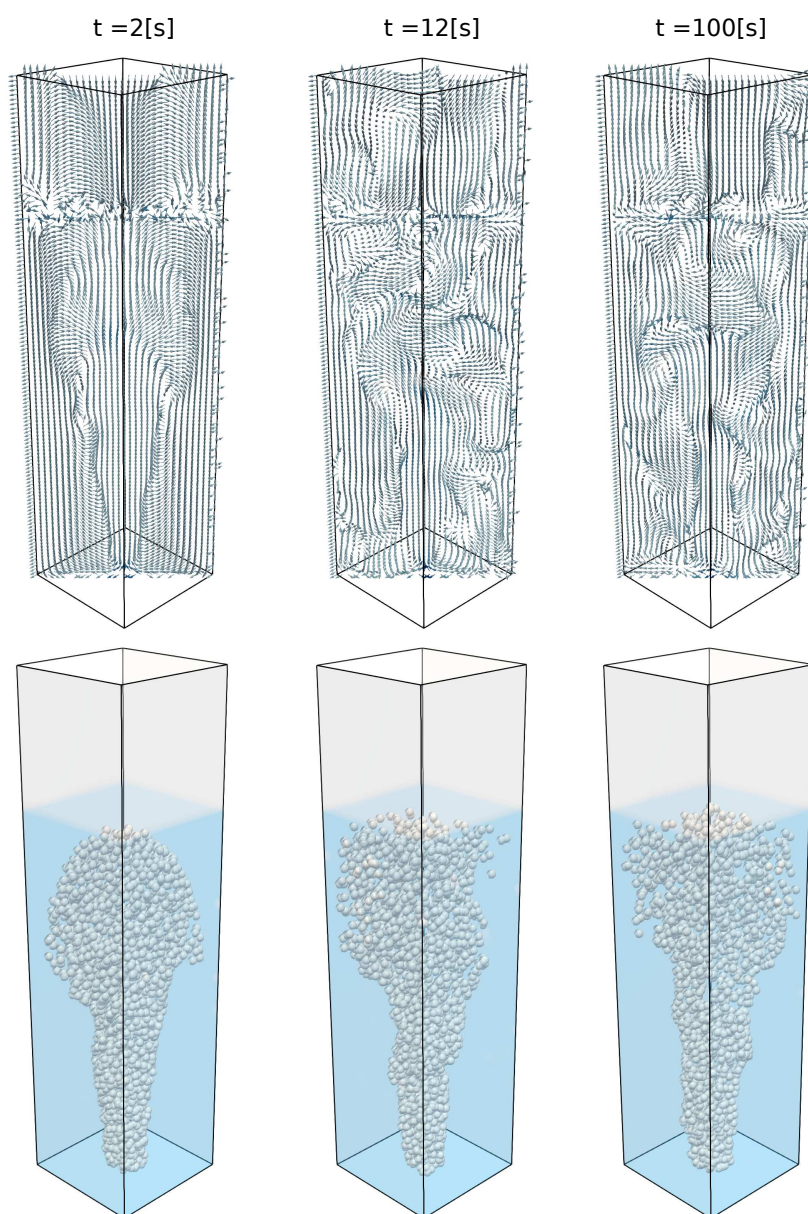


Figura 15 – Injeção de bolhas de ar num canal vertical preenchido com água em instantes diferentes. Em cada coluna, temos o tempo da simulação e as respectivas imagens dos campos de isoQ (Critério Q), e a dinâmica das bolhas. Imagens feitas com o Software Paraview.

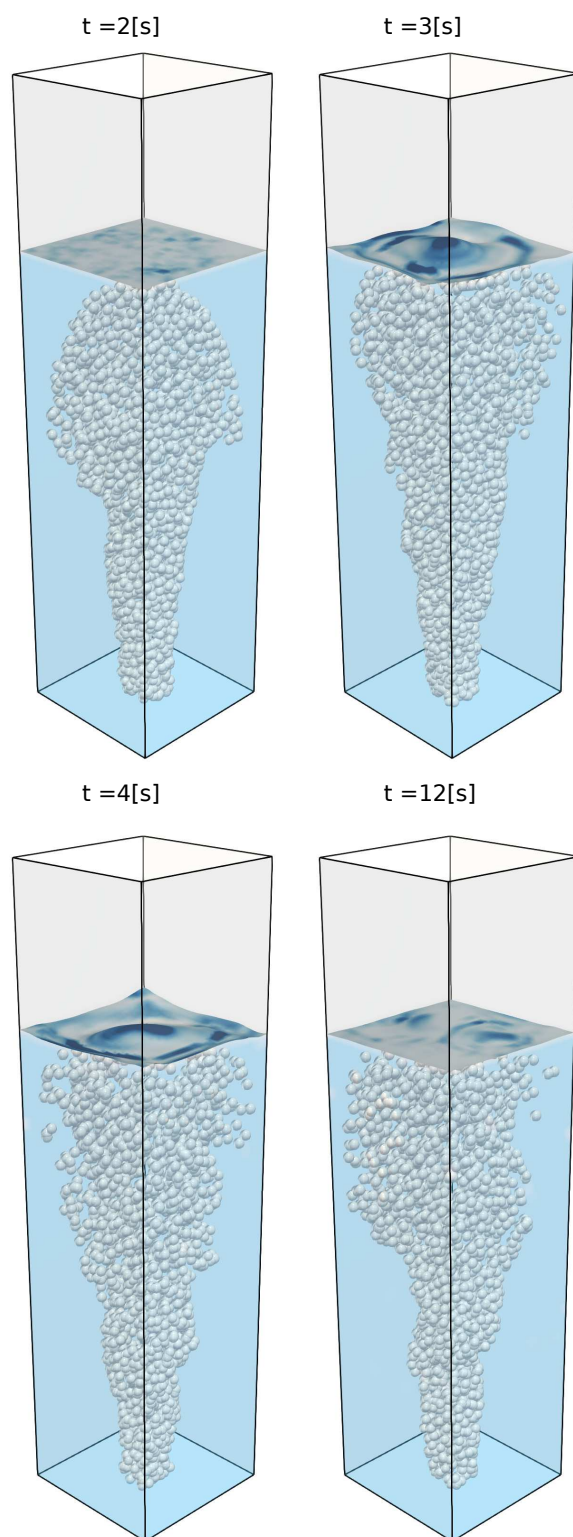


Figura 16 – Imagens instantâneas da coluna de bolhas. Mostramos a interação entre as bolhas e a interface livre água-ar modelada com o método VOF.

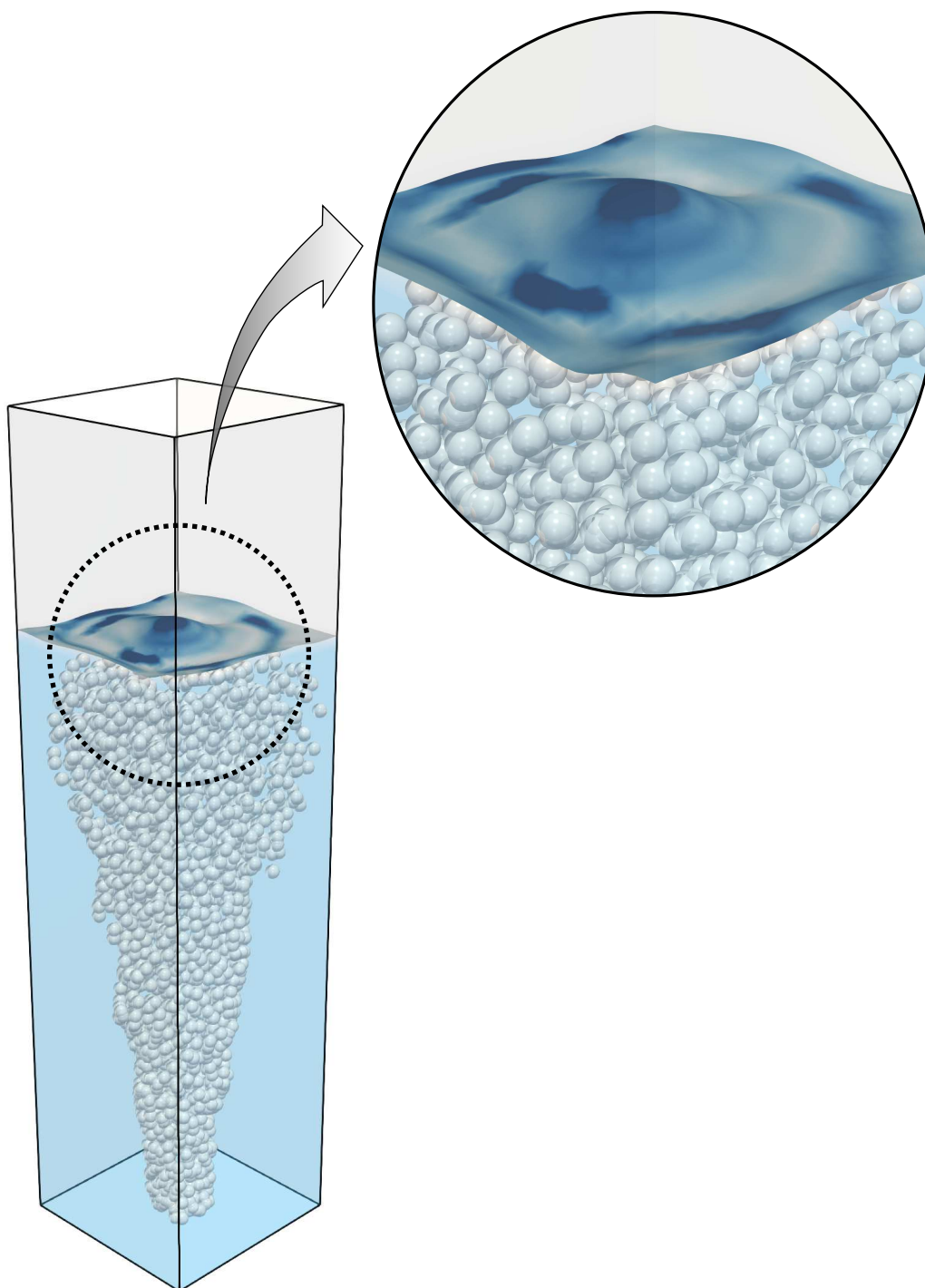


Figura 17 – A imagem é no instante onde as bolhas são deletadas na interface. Podemos observar a interação entre as bolhas e a interface livre água-ar modelada pelo método VOF.

Tendo apresentado o modelo icônico resultado do pós-processamento no Para-view, também apresentaremos alguns planos dos campos médios e de desvio padrão para observar a simetria do escoamento quando está em regime estatisticamente permanente.

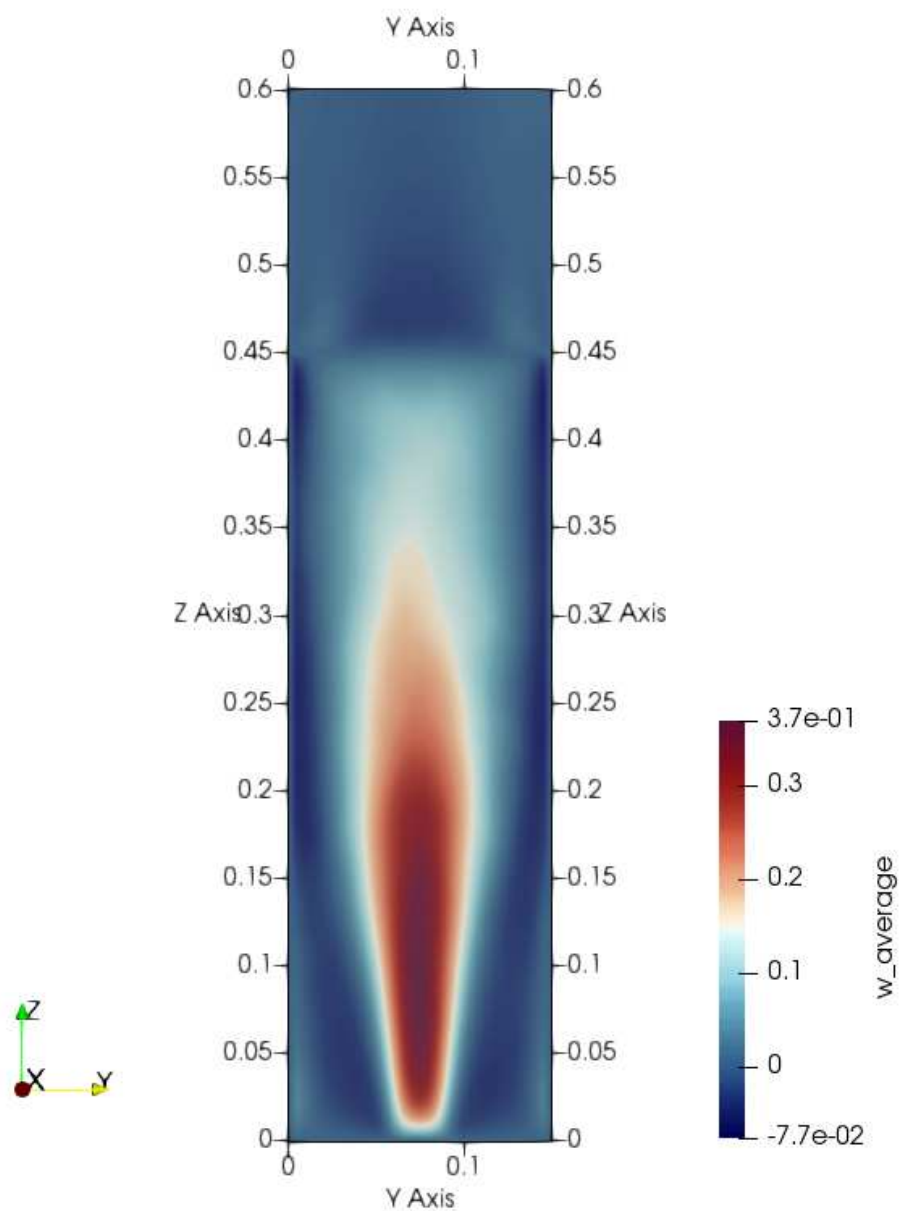


Figura 18 – Velocidade média na direção z.

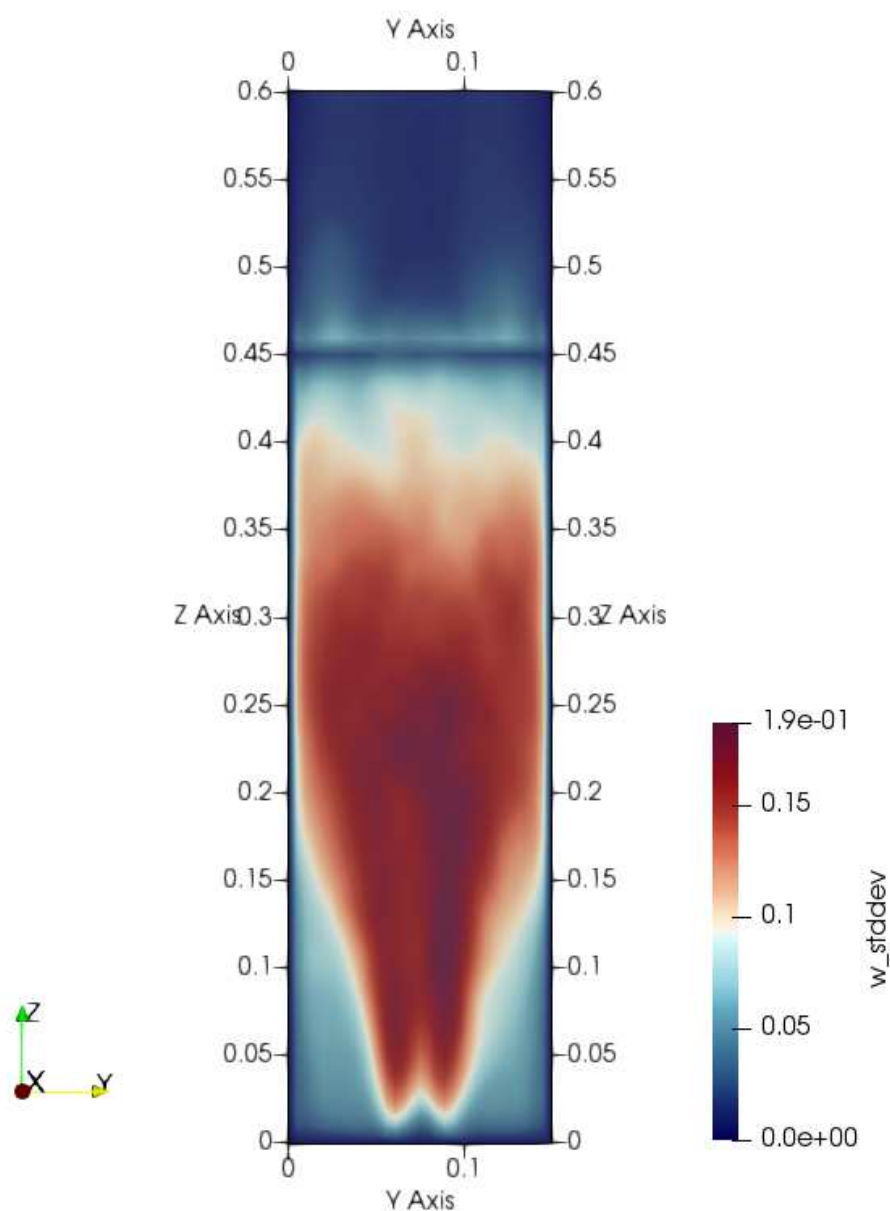


Figura 19 – Desvio padrão da velocidade na direção z

Podemos observar que a velocidade média na direção z e o desvio padrão seguem uma simetria intrínseca da dinâmica do caso avaliado. É importante notar que em torno da altura de 0,45 m, existe uma nítida descontinuidade. Isso ocorre devido à condição de contorno de eliminação das bolhas quando se aproximam da interface

entre o líquido e a coluna de ar. Também podemos notar que as velocidades e o desvio padrão se anulam nas paredes. Esse resultado é esperado, devida às condições de contorno de Dirichlet impostas como velocidades nulas nas paredes.

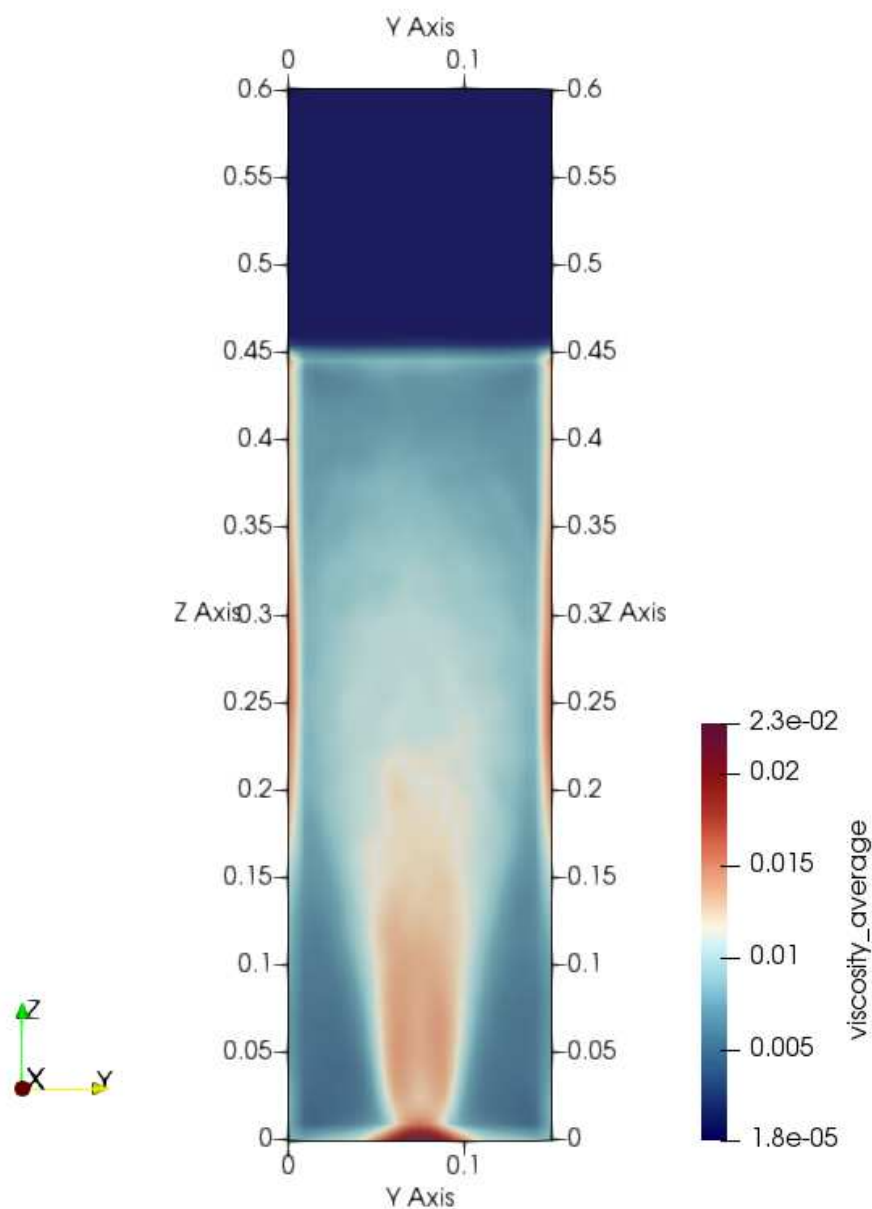


Figura 20 – Modificação da viscosidade molecular (μ') média do campo euleriano.

Sobre a figura 20, podemos notar como a modificação da viscosidade molecular pela presença das bolhas tem um comportamento médio com uma simetria espacial em torno do eixo z. A viscosidade média é maior no bocal de injeção.

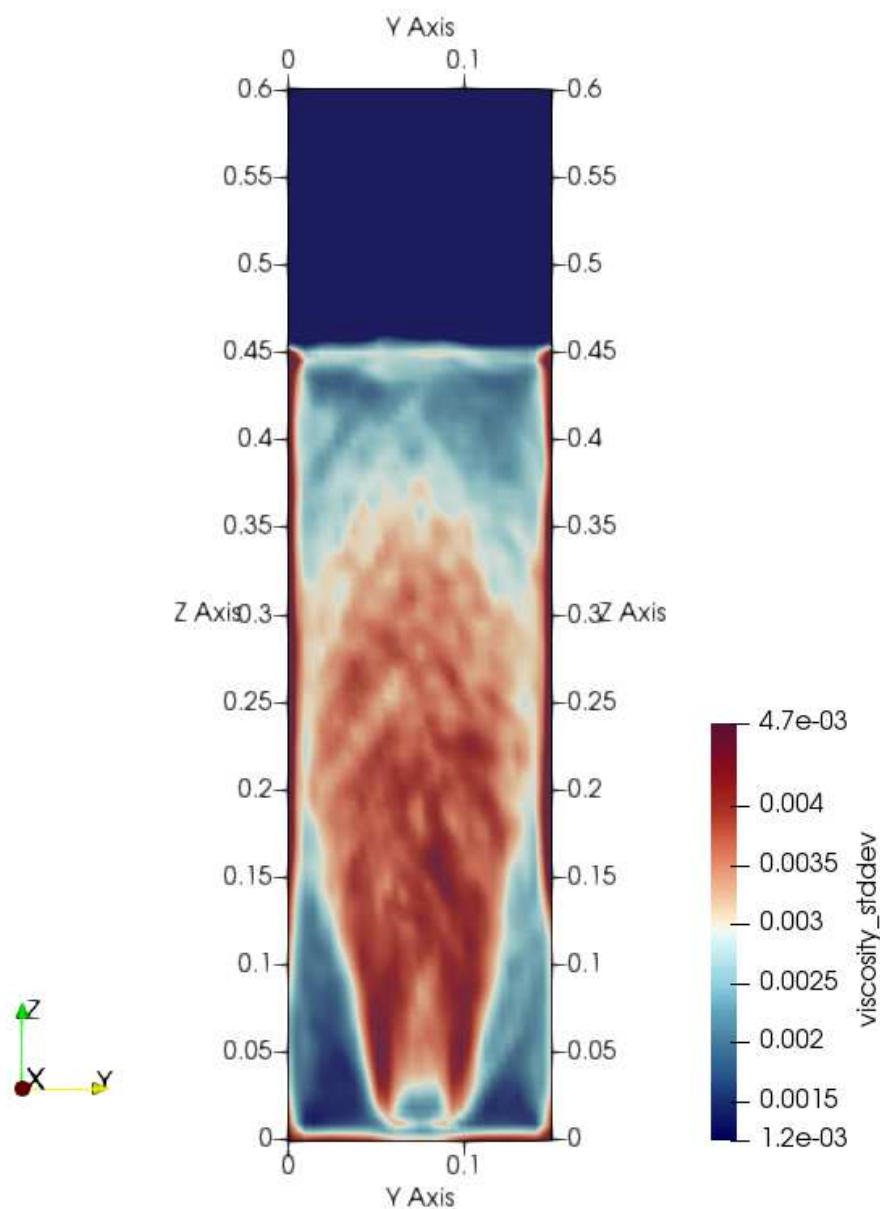


Figura 21 – Desvio padrão modificação da viscosidade molecular (μ') do campo euleriano.

O resultado para o desvio padrão observado em 21, segue um padrão com maiores valores na região central e nas paredes do canal. Porém, na altura próxima à região de eliminação das partículas (0,42 m), podemos observar que o desvio padrão da modificação da viscosidade molecular é menos intenso na região central do canal. Ou seja, a intensidade desse campo vai decrescendo próxima da condição de contorno imposta para a fase lagrangiana.

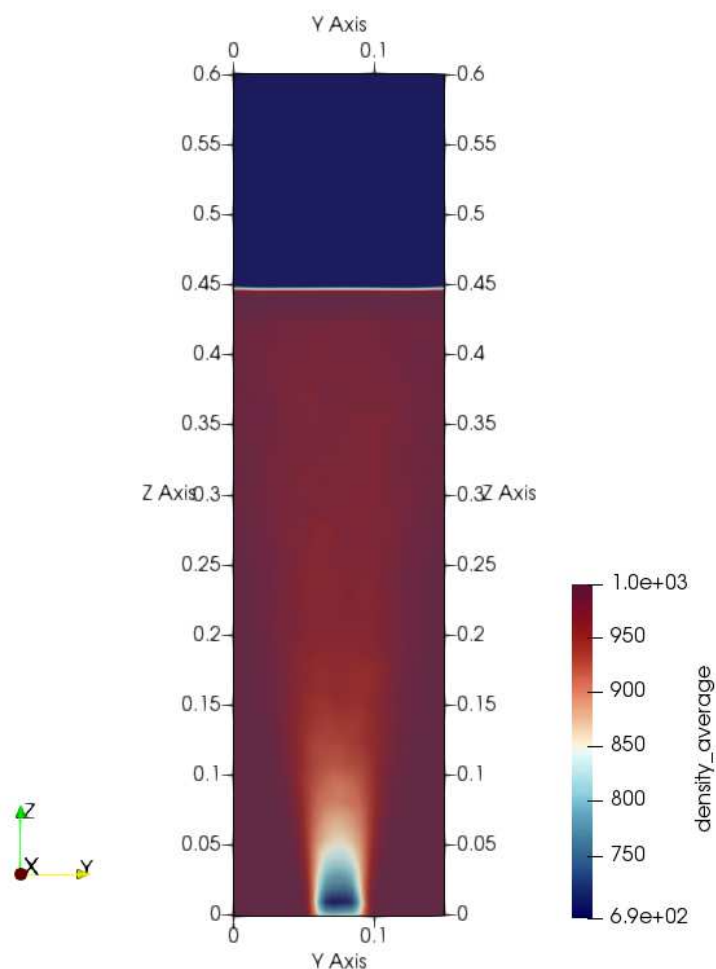


Figura 22 – Densidade média do campo euleriano.

Na figura 22, temos o campo de densidade média. A visualização desse campo nos permite distinguir onde é líquido e onde é gás. Mas precisamos observar que existe um intervalo de valores que está entre as massas específicas do líquido e do

gás. Isso ocorre pelo fato das bolhas mudarem de velocidade ao longo do tempo e do espaço. Ou seja, tem que ter uma faixa de valores médios para as massas específicas das duas fases.

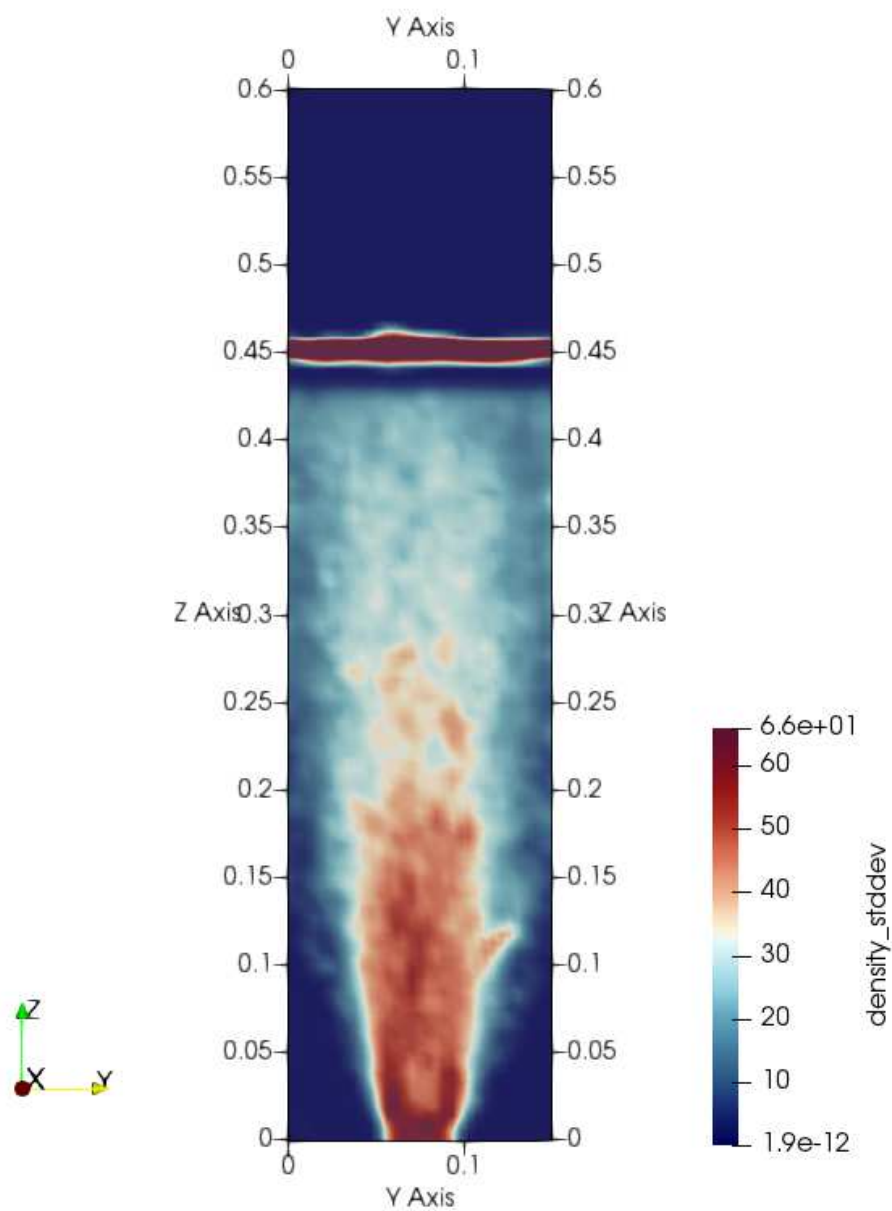


Figura 23 – Desvio padrão da densidade do campo euleriano.

Nas figuras 22 e 23, está representado qualitativamente o comportamento do campo de massa específica da fase euleriana. A densidade média e o desvio padrão são nitidamente mais intensos próximo à região de injeção das bolhas. Pelo desvio padrão, percebemos instabilidades na região de separação entre a coluna de ar e o líquido, o que já era esperado, pois a massa específica do líquido é cerca de mil vezes maior do que a do ar e nessa região ocorre a eliminação das bolhas.

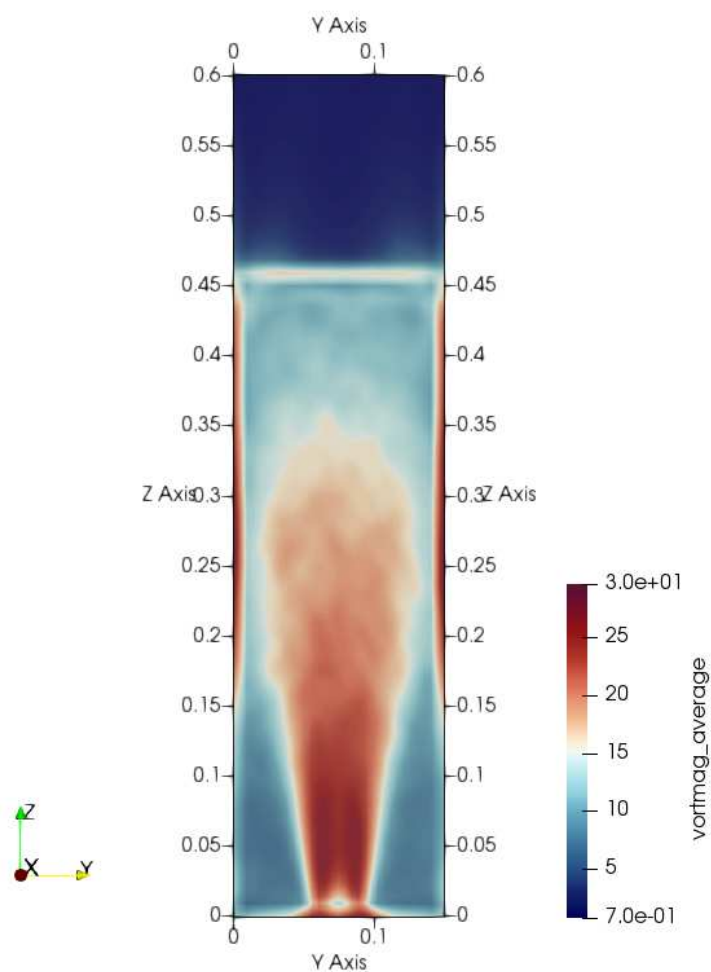


Figura 24 – Valor da vorticidade média do campo euleriano.

O campo médio da magnitude da vorticidade, apresentado na figura 24, tem valores mais acentuados na região central do canal, nas paredes e no bocal de

injeção das bolhas. Podemos observar que as instabilidades fluidodinâmicas são mais acentuadas no jato de bolhas.

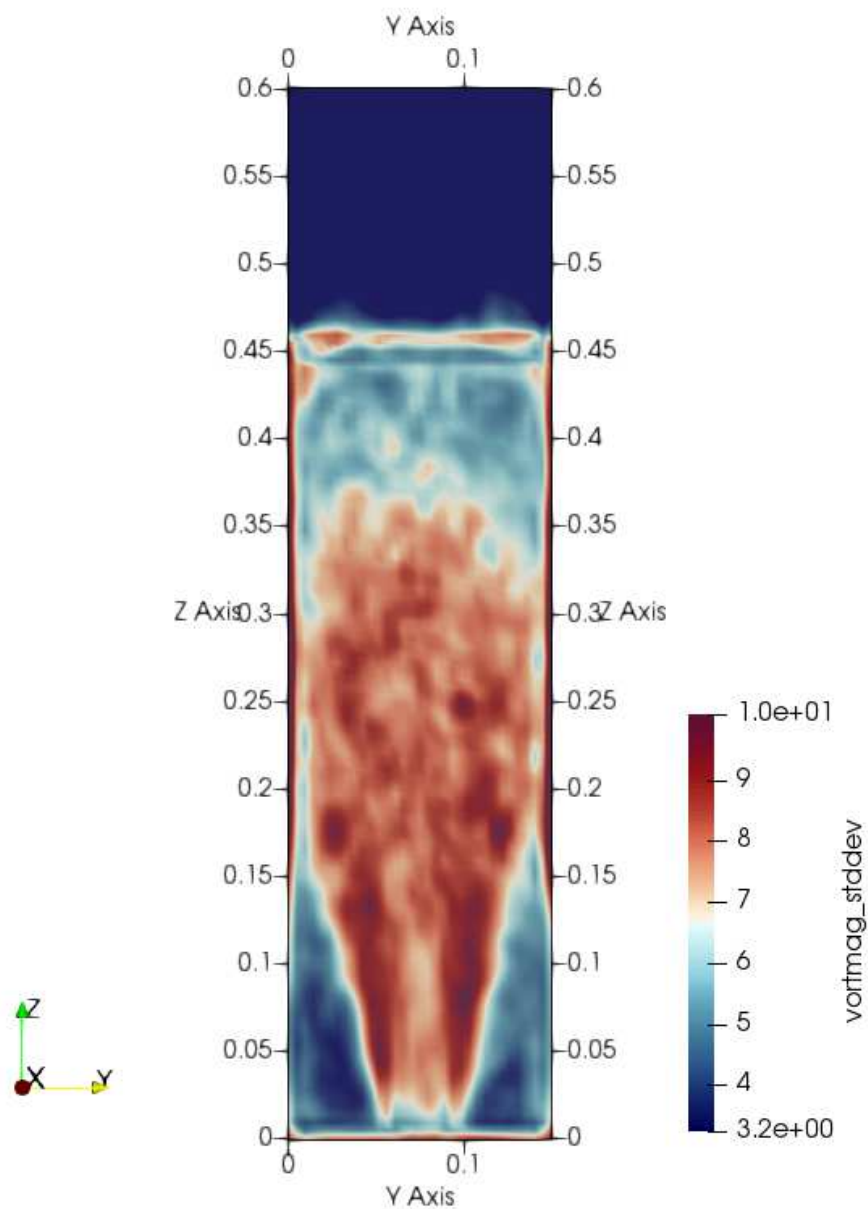


Figura 25 – Desvio padrão da vorticidade do campo euleriano.

Temos uma importante constatação qualitativa com relação à interpretação das

figuras 24 e 25. Podemos observar que a magnitude da vorticidade segue o mesmo padrão da modificação da viscosidade molecular devida a presença das bolhas. As regiões de maior vorticidade, ocorre justamente nas regiões de maior viscosidade. Isso leva a entender que a presença das bolhas induz a modificação da viscosidade molecular.

As imagens dos campos obtidas com o Paraview, indicam uma forte tendência à simetria dos campos analisados. Em um regime estatisticamente permanente é natural observamos tal resultado. Tanto para os valores médios, quanto para os desvios padrões, temos uma tendência à simetria.

Para finalizar as análises qualitativas, apresentaremos o campo médio da fração volumétrica da fase contínua. Na figura 26, constatamos que a faixa de coloração da fração volumétrica corresponde ao que a literatura considera como regime denso de partículas, como apresentado na figura 1. Podemos observar que na média, a região de injeção é a região mais densa. Esse resultado demonstra que o caso estudado oferece todas as características necessárias para a avaliação da teoria proposta.

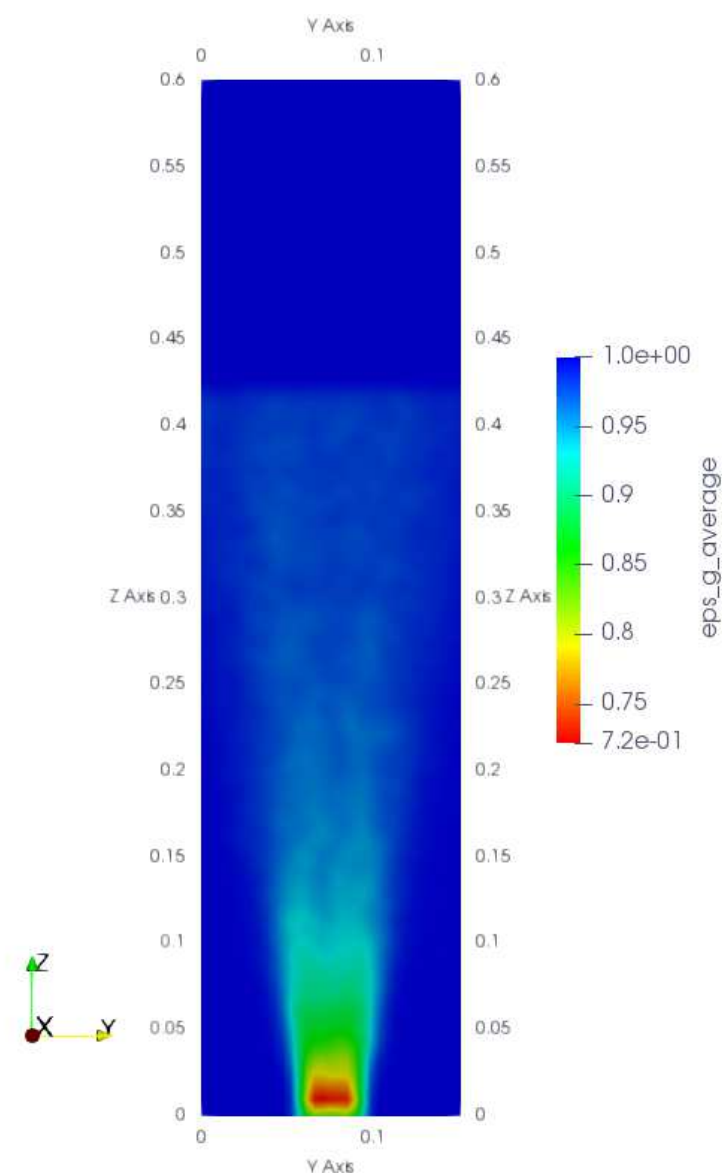


Figura 26 – Fração volumétrica média da fase contínua.

4.3.1.2 Análise quantitativa

Para essa etapa foi criado um módulo de pós-processamento na linguagem Python. Tal código pode ser obtido pelo link <https://github.com/ricardocatta/post-processing_MFSim>.

Os resultados a seguir serão os mais importantes. Compararemos os resultados

da simulação computacional, usando a modelagem da turbulência para escoamentos densos. Em seguida mostraremos as diferenças com os resultados da tradicional simulação de duas vias (quando o escoamento afeta a partícula e a partícula afeta o escoamento). Lembrando que a modelagem do regime denso, é a duas vias com o acréscimo da influência da fração volumétrica do campo contínuo, o que caracteriza a modelagem 3 vias (EVRARD; DENNER; WACHEM, 2019).

Nas figuras 27, 28, 29 e 30, obtivemos resultados com boa aproximação entre os experimentos computacional e material. Ao longo desta seção, serão apresentadas análises quantitativas comparando esses resultados com diferentes configurações e comparações com a literatura. Em especial, a observação da figura 30, permite inferir a importância da modelagem do regime denso proposta na presente tese. Os resultados para a velocidade média, desvios padrões e energia cinética turbulenta, segue abaixo.

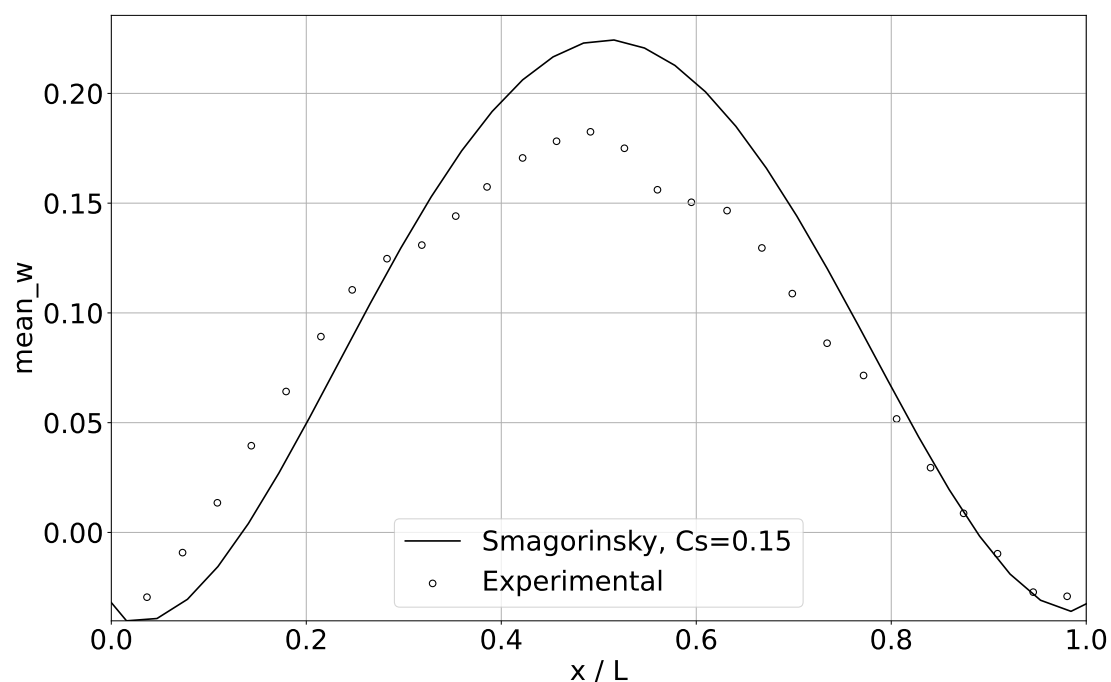


Figura 27 – Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

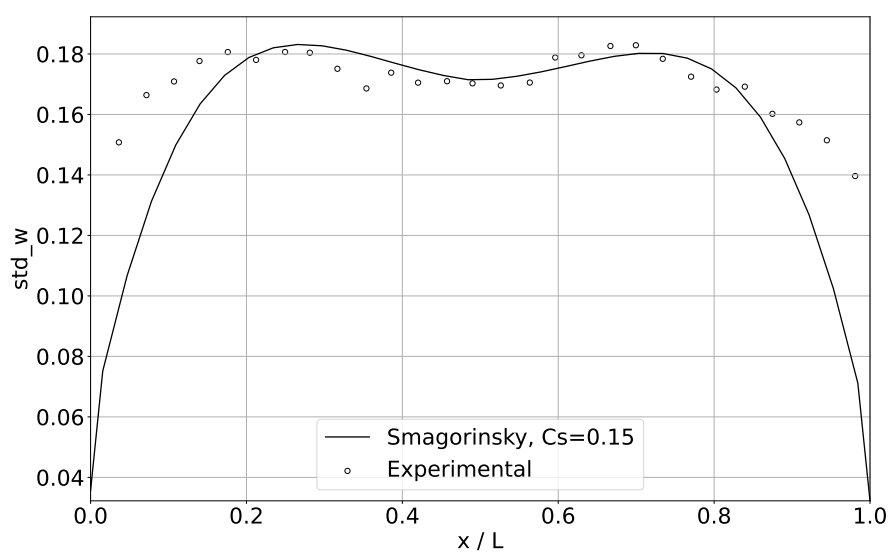


Figura 28 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

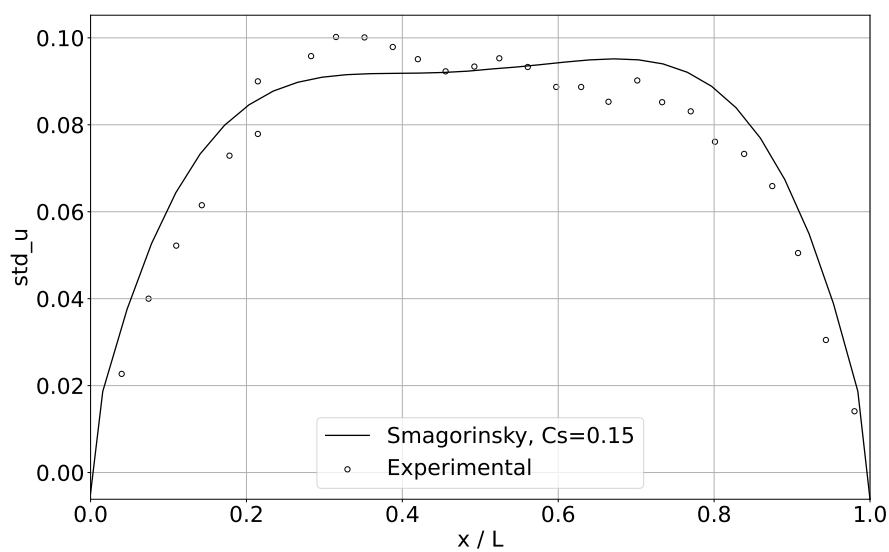


Figura 29 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

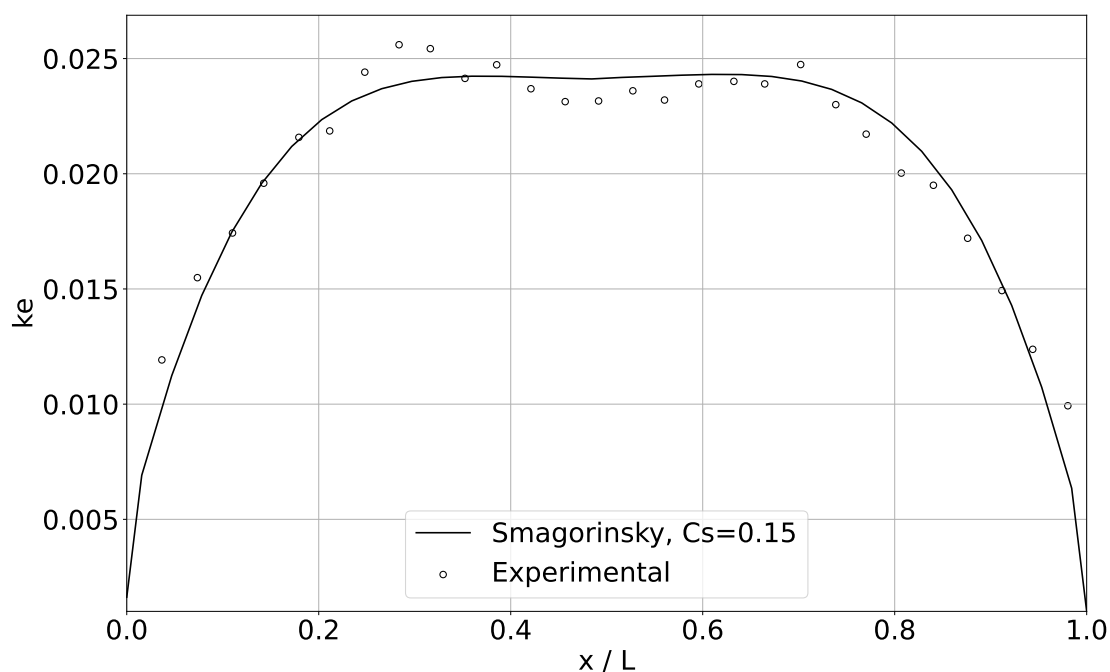


Figura 30 – Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

Outra representação importante para avaliar a energia cinética turbulenta, está no espaço de Fourier. Após realizarmos uma transformada de Fourier das flutuações da velocidade, plotamos o gráfico (em log na base 10) da densidade espectral de energia cinética turbulenta em função da frequência. Com isso comparamos a inclinação da reta na região inercial, com a teoria de Kolmogorov.

Podemos observar que a região inercial tende a uma inclinação que está próxima de $-5/3$. Mesmo sabendo que a teoria original do Kolmogorov foi elaborada para escoamentos monofásicos, a região inercial da densidade de energia cinética turbulenta para escoamento bifásico em regime denso, coincidiu de ter a inclinação prevista pela teoria de Kolmogorov. Esse resultado não é consenso na literatura, existem trabalhos que estimam uma inclinação de $-25/3$, na região avaliada (LIU; LI, 2018).

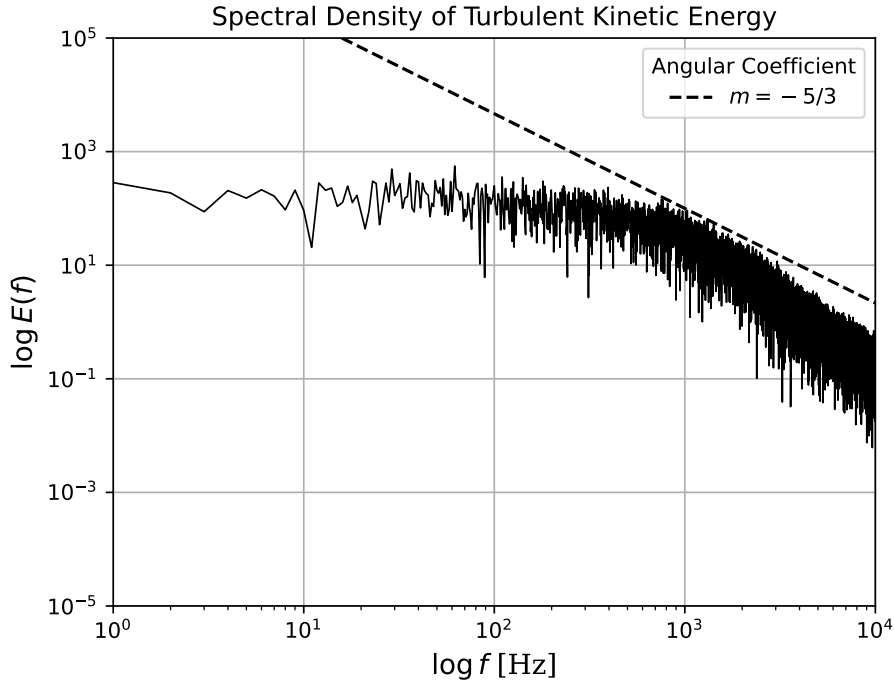


Figura 31 – Densidade espectral de energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana e a reta com inclinação de $-5/3$.

Para termos uma ideia ainda mais quantitativa, através da diferença entre os dados do experimento material e computacional, calculamos a norma L_2 e L_∞ . Fixamos o valor da posição e realizamos a diferença entre os valores do resultado do experimento computacional e material. Utilizamos esse procedimento para todos os gráficos. Os erros calculados são dados pelas seguintes fórmulas:

- $L_2 = (\sum |y_{comp} - y_{exp}|^2)^{1/2} / N$;
- $L_\infty = \max |y_{comp} - y_{exp}|$,

onde y_{comp} são os resultados do experimento computacional, y_{exp} são os valores do experimento material e N é o número de pontos da amostra calculada.

A seguir, temos as tabelas com os valores dos erros calculados. Na tabela 2 temos as normas L_2 e L_∞ para a velocidade média na direção z .

| L_2 | L_∞ |
|-------|------------|
| 0.006 | 0.05 |

Tabela 2 – Cálculo dos erros para velocidade média w .

- De forma análoga, temos os valores quantitativos para o gráfico 28 (desvio padrão em w).

| L_2 | L_∞ |
|--------|------------|
| 0.0042 | 0.071 |

Tabela 3 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de w .

- Para o gráfico 29 (desvio padrão em u), os erros calculados são dados na tabela abaixo:

| L_2 | L_∞ |
|--------|------------|
| 0.0013 | 0.012 |

Tabela 4 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de u .

- Para o gráfico 30 (energia cinética turbulenta), os erros calculados são:

| L_2 | L_∞ |
|---------|------------|
| 0.00019 | 0.0030 |

Tabela 5 – Cálculo dos erros para k_e .

Podemos observar que quantitativamente, os valores das normas L_2 e L_∞ foram pequenos em todos os casos. Para irmos direto ao ponto da importância da modelagem do regime denso nos escoamentos bifásicos, compararemos os resultados anteriores com a tradicional formulação duas vias. Com esse tipo de análise, conseguiremos perceber quais são as vantagens da modelagem do regime denso e qual é sua importância para modelagem da turbulência. Em ambas as simulações foram estabelecidas sondas fixas na altura z de 0,25 m, y igual a 0,75 m, e variado os valores na direção x .

A influência da modelagem do regime denso para a turbulência pode ser percebida principalmente nos gráficos expostos nas Figuras 33, 34 e 35, onde são comparados com os resultados da formulação duas vias, e com o modelo de Smagorinsky com $C_s = 0,15$. Tal resultado é devido à turbulência estar relacionada com intensidades dos campos de flutuações de velocidade, como explicaremos mais a frente.

Na Figura 32, podemos observar a influência da modelagem do regime denso para o campo médio de velocidade na direção z .

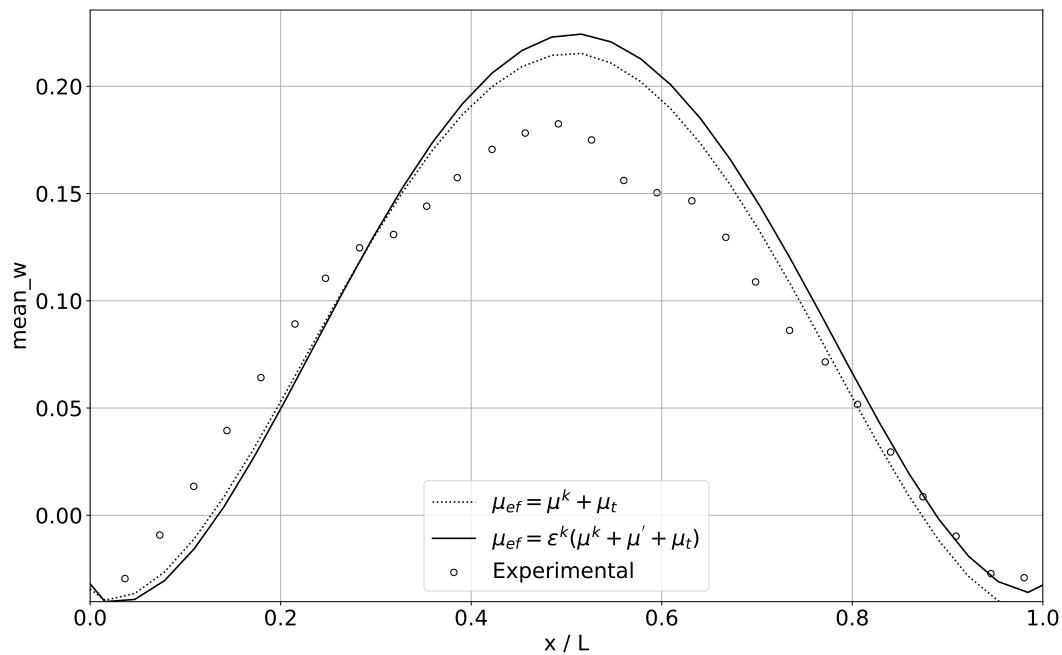


Figura 32 – Velocidade média dos campos eulerianos da formulação de duas vias (com viscosidade efetiva $\mu_{ef} = \mu^k + \mu_t$) e três vias (com viscosidade efetiva $\mu_{ef} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu' + \mu_t)$) comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

Os perfis do campo médio de velocidade do experimento material e o computacional seguem uma curva parecida. Porém, existe uma pequena diferença de fase entre os picos das curvas de duas e três vias. Uma possível interpretação para esse resultado, está no fato de considerar a fase lagrangiana como densidades de pontos. Contabilizar a influência da fração volumétrica afetou o valor máximo do campo de

velocidade média e introduziu a diferença entre as posições dos picos das curvas.

Na figura 33, que será apresentada a seguir, podemos detectar como a modelagem do regime denso contribuiu para a acurácia da simulação computacional, quando comparada com os resultados experimentais.

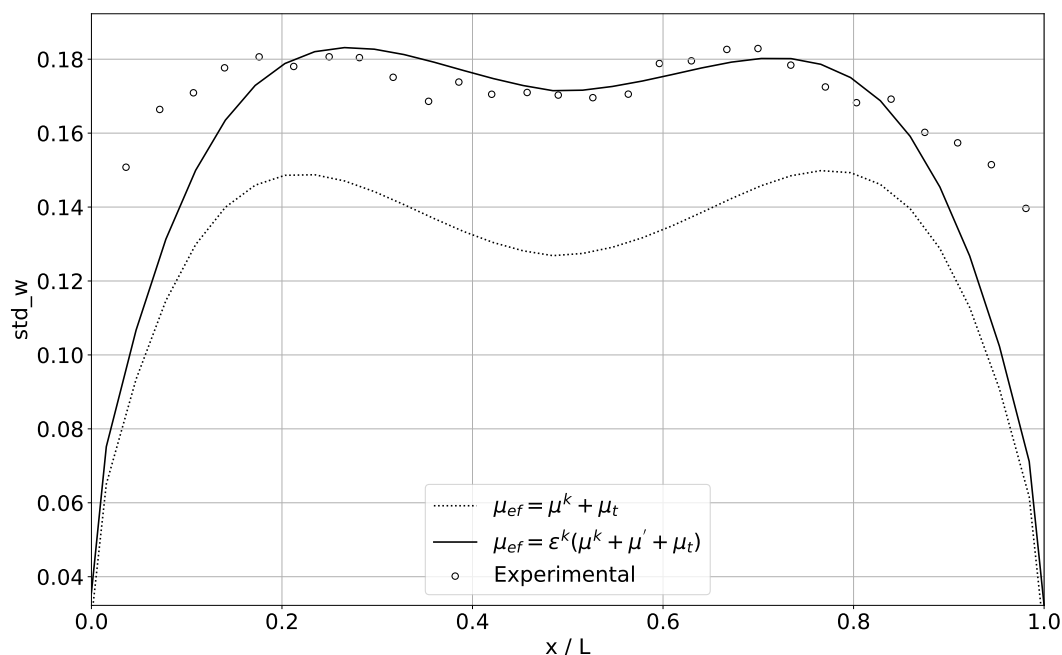


Figura 33 – Desvio padrão dos campos eulerianos da formulação de duas vias (com viscosidade efetiva $\mu_{ef} = \mu^k + \mu_t$) e três vias (com viscosidade efetiva $\mu_{ef} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu' + \mu_t)$) comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

Os perfis das curvas da Figura 33, também seguem a mesma tendência, sendo que a curva da formulação três vias, proporcionam os melhores resultados. O desvio padrão do campo w , tem uma melhora ao longo de todos os pontos da simulação computacional.

Na Figura 34, temos os resultados para as simulações envolvendo o desvio padrão do campo u .

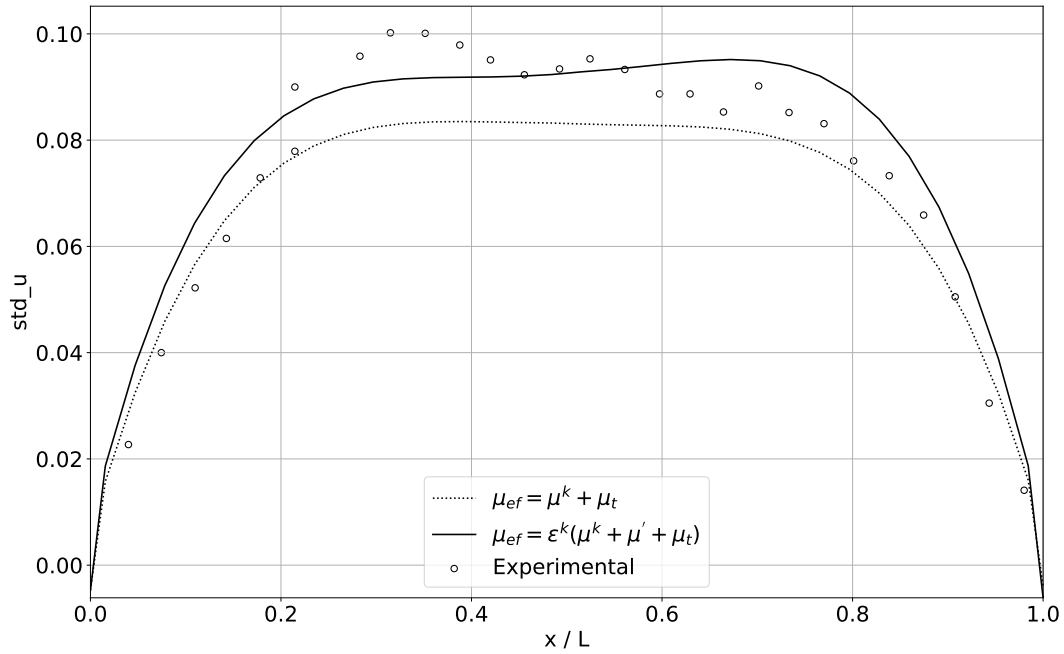


Figura 34 – Desvio padrão dos campos eulerianos da formulação de duas vias (com viscosidade efetiva $\mu_{ef} = \mu^k + \mu_t$) e três vias (com viscosidade efetiva $\mu_{ef} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu' + \mu_t)$) na direção x , comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

O desvio padrão do campo u oferece uma melhora significativa entre os pontos no centro do reservatório de água. Curiosamente, é justamente na região central do reservatório que a influência do regime denso pode ser mais observada. Fisicamente falando, nas regiões próximas à parede, a fração volumétrica de bolhas é bem menor do que na região central. Isso explica a melhora dos resultados da formulação duas vias na região próxima à parede na direção x , pois a formulação duas vias é mais indicada para escoamentos diluídos. Para mais detalhes da influência do regime denso nas direções transversais, faremos uma análise quantitativa.

Logo abaixo, na Figura 35, apresentaremos as curvas de comparação entre as formulações de duas e três vias para a energia cinética turbulenta. Esse resultado é o principal, do ponto de vista de traduzir o efeito da modelagem do regime denso que está sendo proposta na presente tese.

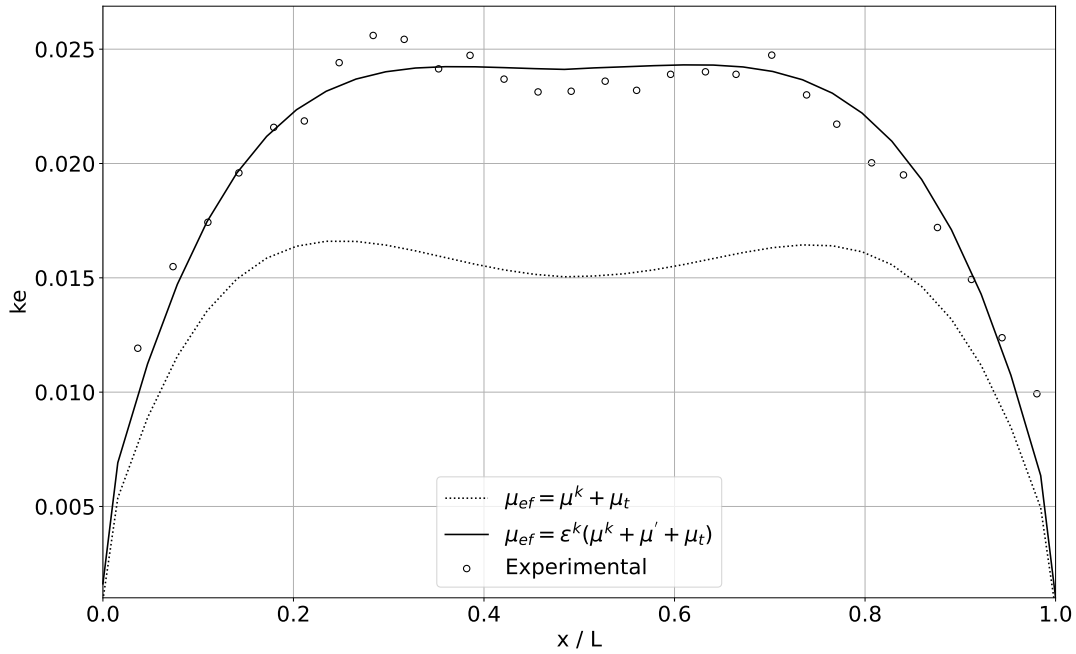


Figura 35 – Energia cinética turbulenta dos campos eulerianos da formulação de duas vias (com viscosidade efetiva $\mu_{ef} = \mu^k + \mu_t$) e três vias (com viscosidade efetiva $\mu_{ef} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu' + \mu_t)$), comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

A formulação do regime denso propicia uma melhora em todos os pontos quando comparamos as simulações computacionais com os resultados do experimento material.

Comparando quantitativamente os resultados da simulação duas vias com os resultados do experimento físico material, temos que para a velocidade média w , as normas calculadas são:

| | Duas vias | Três vias |
|------------|-----------|-----------|
| L_2 | 0.003 | 0.006 |
| L_∞ | 0.03 | 0.05 |

Tabela 6 – Cálculo dos erros para velocidade média w .

Ou seja, quantitativamente falando, podemos observar que as normas para a velocidade média w são próximas. A diferença principal da influência da formulação

3 vias ocorre nas normas envolvendo as flutuações da velocidade e na energia cinética turbulenta, como veremos adiante.

- Para o gráfico do desvio padrão em w na formulação duas vias:

| | Duas vias | Três vias |
|------------|-----------|-----------|
| L_2 | 0.008 | 0.004 |
| L_∞ | 0.074 | 0.071 |

Tabela 7 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de w .

- Para o gráfico do desvio padrão em u na formulação duas vias:

| | Duas vias | Três vias |
|------------|-----------|-----------|
| L_2 | 0.0021 | 0.0013 |
| L_∞ | 0.018 | 0.012 |

Tabela 8 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de u .

- Para o gráfico da energia cinética turbulenta na formulação duas vias:

| | Duas vias | Três vias |
|------------|-----------|-----------|
| L_2 | 0.0012 | 0.00019 |
| L_∞ | 0.010 | 0.0030 |

Tabela 9 – Cálculo dos erros para k_e .

As normas L_2 e L_∞ dos desvios padrões na direção x e z são melhoradas com a formulação 3 vias, mas mantém a mesma ordem de grandeza. Porém, a energia cinética turbulenta nos revela a diminuição de uma ordem de grandeza, quando comparamos as duas formulações. Esse é um bom indicativo que favorece a validação da modelagem apresentada na presente tese.

Quando buscamos a resposta para a pergunta sobre a influência da modelagem do regime denso em escoamentos bifásicos em regime turbulento, precisamos avaliar o tensor submalha. Sabemos que os componentes do tensor pode ser decomposto em sua parte isotrópica e outra deviatórica (ou anisotrópica).

$$T_{ij} = T_{ij}^d + \frac{1}{3}T_{pp}\delta_{ij} \quad (4.2)$$

$$= T_{ij}^d + \frac{2}{3}k\delta_{ij}, \quad (4.3)$$

onde $k = T_{pp} = \frac{1}{2}\overline{u'_p u'_p}$ é a energia cinética turbulenta submalha.

Para regimes estatisticamente independentes $T_{ij}^d \ll k$ e $T_{ij}^d \rightarrow 0$ (SAGAUT, 2006). Isso é um importante fator para avaliar se o escoamento tende à turbulência homogênea e isotrópica.

Assumindo o resultado experimental como o ideal, por meio de uma análise a posteriori, podemos extrair a informação da energia cinética turbulenta ideal para o caso estudado. Podemos observar pela figura 35 que a energia cinética turbulenta do modelo computacional foi próxima do encontrado com o experimento material. Ao mesmo tempo, evidencia como a modelagem do regime denso melhora a concordância da informação obtida com o experimento material.

Como última análise quantitativa, podemos plotar o tensor submalha que foi modelado (\mathbf{T}), e verificar se a hipótese de escoamento isotrópico está bem estabelecida. Para o Caso 1 ($C_s = 0,15$) com 3 vias, temos que o tensor \mathbf{T} adimensionalizado pelo maior valor é

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} 2,50 \times 10^{-1} & 5,86 \times 10^{-4} & 3,79 \times 10^{-3} \\ 5,86 \times 10^{-4} & 2,98 \times 10^{-1} & 4,51 \times 10^{-3} \\ 3,79 \times 10^{-3} & 4,51 \times 10^{-3} & 1,00 \end{bmatrix}.$$

Além da evidente simetria do tensor, podemos observar que os termos fora da diagonal principal, ou seja, os componentes da parte de viatórica do tensor, são 3 e 4 ordens de grandeza menor do que o traço do tensor. Esse fato é um forte indício de que a hipótese de regime estatisticamente permanente está bem fundamentada (LANDAU; LIFSHITZ, 2013a).

Por fim, podemos realizar a última comparação entre a formulação duas vias e três vias. Segue abaixo o tensor de Reynolds submalha de duas vias, adimensionalizado pelo maior valor.

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} 2,26 \times 10^{-1} & 5,69 \times 10^{-3} & 1,29 \times 10^{-2} \\ 5,69 \times 10^{-3} & 3,57 \times 10^{-1} & 4,15 \times 10^{-3} \\ 1,29 \times 10^{-2} & 4,15 \times 10^{-3} & 1,00 \end{bmatrix}.$$

Dois pontos importantes surgem quando comparamos os dois tensores submalha. O primeiro é que os componentes fora da diagonal principal do tensor de duas vias (os componentes da parte deviatória), são no máximo 3 ordens de grandeza menores do que o traço do tensor. O segundo, é que desses 6 componentes da parte deviatória, 4 são uma ordem de grandeza maior do que os respectivos componentes do tensor do modelo de 3 vias. Precisamos lembrar que o tempo físico de simulação foi igual para cada um dos casos: 237 s.

4.3.1.3 Discussão sobre o impacto das diferentes formas de modelar a viscosidade efetiva

Discutiremos nesta seção diferentes formas de modelar a viscosidade efetiva. Para modelarmos a influência da fração volumétrica das fases presentes no escoamento (formulação 3-vias), apresentaremos três diferentes formas; a primeira, com a viscosidade molecular modificada sem o tratamento que propusemos na tese, $\mu_{ef_1} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu_t)$. A segunda forma é com a modelagem envolvendo a modificação da viscosidade molecular μ' , porém sem fechamento da turbulência; $\mu_{ef_2} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu')$. Por fim, apresentaremos a terceira forma de modelar a viscosidade efetiva para escoamentos turbulentos bifásicos em regime denso. Em outras palavras, temos $\mu_{ef_3} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu' + \mu_t)$.

As diferenças entre μ_{ef_1} , μ_{ef_2} e μ_{ef_3} merecem atenção. Primeiro faremos uma análise sobre a modelagem da viscosidade efetiva para escoamentos densos envolvendo o fechamento da turbulência, ou seja, discutiremos as diferenças entre μ_{ef_1} e μ_{ef_3} . Alguns autores quando tratam da modelagem de escoamentos bifásicos, negligenciam o problema de fechamento do tensor submalha \mathbf{R}^p (responsável pelas flutuações do campo euleriano provocado pela presença das partículas), e modelam a viscosidade efetiva como μ_{ef_1} (EVRARD; DENNER; WACHEM, 2019; MASTEROV; BALTUSSEN; KUIPERS, 2018; JAIN; KUIPERS; DEEN, 2014; BAI; DEEN; KUIPERS, 2011). Porém, negligenciar o problema de fechamento

desse tensor não é o único problema. Estamos investigando qual é a melhor forma de tratar o fechamento do tensor \mathbf{R}^p . Autores como Deen, Solberg e Hjertager (2001), Masood e Delgado (2014), Ma et al. (2015), Ničeno, Dhotre e Deen (2008), Darmana (2006), seguem uma proposta de fechamento que teve origem com os autores Sato e Sekoguchi (1975). Porém, nossa proposta de fechamento do tensor \mathbf{R}^p tem como respaldo a fórmula analítica proposta por Ishii e Zuber (1979), que é baseada em dados de experimentos materiais.

Mostraremos a seguir as diferenças entre as viscosidades efetivas. Evidenciaremos as diferenças do ponto de vista da definição matemática de cada uma e do ponto de vista qualitativo. Do ponto de vista matemático, podemos reescrever μ_{ef_3} como

$$\begin{aligned}
 \mu_{ef_3} &= \varepsilon^k (\mu^k + \mu' + \mu_t) \\
 &= \varepsilon^k \mu^k + \varepsilon^k \mu' + \varepsilon^k \mu_t \\
 &= \varepsilon^k \mu^k + \varepsilon^k (\mu^k [(\varepsilon^k)^{-2} - 1]) + \varepsilon^k \mu_t \\
 &= (\varepsilon^k)^{-1} \mu^k + \varepsilon^k \mu_t.
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

Podemos observar que a diferença entre a equação 4.4 e μ_{ef_1} está na viscosidade molecular modificada. A contribuição do termo envolvendo a viscosidade turbulenta é mesma. Como $0 < \varepsilon^k < 1$, temos que a modificação da viscosidade molecular proposta na tese, tende a amplificar os resultados da viscosidade nas regiões mais densas. No caso em questão, a região central tem uma concentração maior de bolhas, ou seja, ε^k tende a ser menor do que nas regiões próximas às paredes laterais do canal.

A nossa proposta tem impacto significativo para os resultados médios quando não temos o fechamento da turbulência, como na figura 36. Porém, para a modelagem da turbulência, que depende dos valores dos desvios padrões do campo de velocidade, a melhora é vizivelmente significativa, como podemos ver nas figuras 37, 38 e 39.

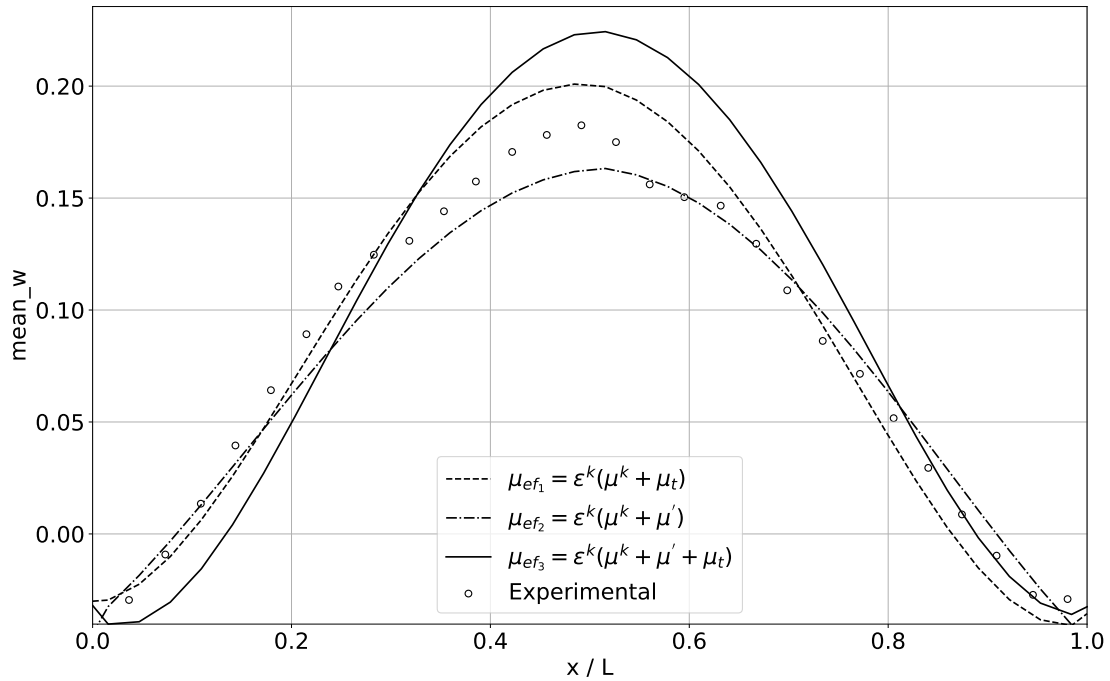


Figura 36 – Velocidade média dos campos eulerianos da formulação 3-vias tradicional (com viscosidade efetiva $\mu_{ef1} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu_t)$) e nossa formulação 3-vias, sem e com fechamento da turbulência (com viscosidades efetivas $\mu_{ef2} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu')$ e $\mu_{ef3} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu' + \mu_t)$) comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

Os resultados plotados na figura 36 indicam que a modelagem proposta com μ_{ef2} representa de forma satisfatória os dados experimentais para a velocidade média na direção z . Em contrapartida, quando acrescentamos a modelagem da viscosidade turbulenta em μ_{ef3} , ocorreu uma piora nos resultados próximos à parede. Acreditamos que isso ocorreu devido o modelo de fechamento de Smagorinsky não ter a modelo de lei de parede. Com o acréscimo do modelo de fechamento, também houve um aumento do valor máximo do perfil médio de velocidade. Já a modelagem realizada com μ_{ef1} teve bons resultados para o perfil médio. Porém, como veremos a seguir, o desempenho da modelagem de μ_{ef1} apresenta um desempenho inferior nos desvios padrões dos campos de velocidade.

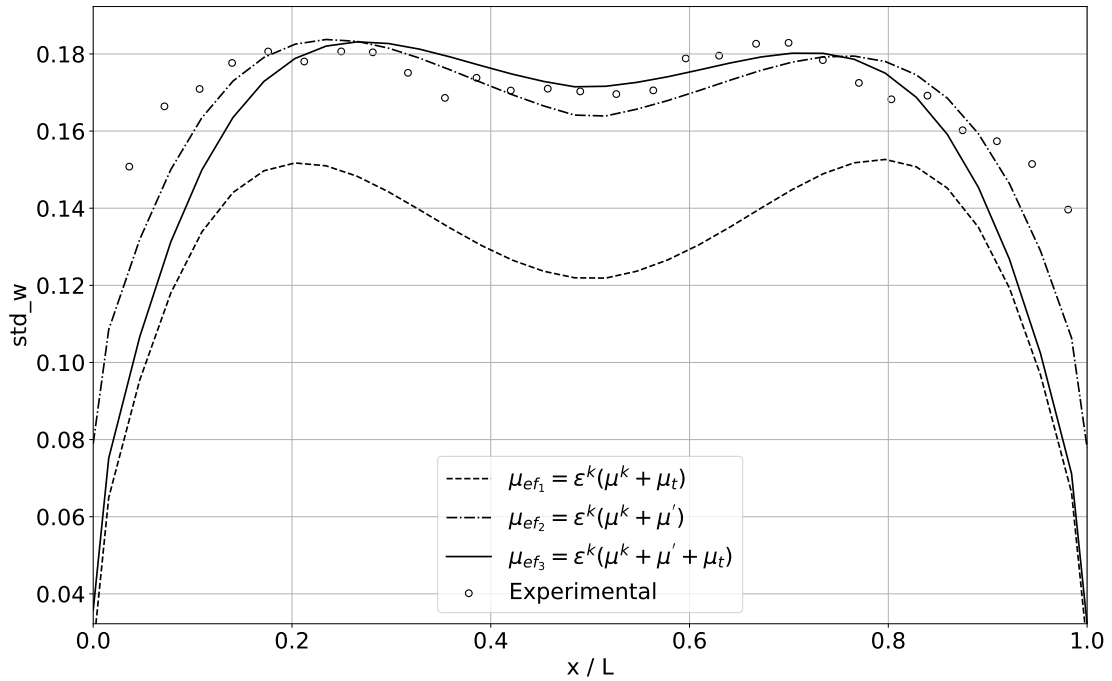


Figura 37 – Desvio padrão de w dos campos eulerianos da formulação 3-vias tradicional (com viscosidade efetiva $\mu_{ef1} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu_t)$) e nossa formulação 3-vias, sem e com fechamento da turbulência (com viscosidades efetivas $\mu_{ef2} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu')$ e $\mu_{ef3} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu' + \mu_t)$) comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

Pela figura 37, podemos observar que a modelagem proposta com μ_{ef2} oferece os melhores resultados nas regiões próximas da parede. Ao inserirmos o fechamento da turbulência, obtivemos uma melhora nos resultados na região central. A modelagem envolvendo μ_{ef3} coincidiu com os resultados experimentais no centro do canal. Por outro lado, o modelo proposto sem a modificação da viscosidade, μ_{ef1} , ficou com um desempenho consideravelmente inferior para o desvio padrão da velocidade na direção z .

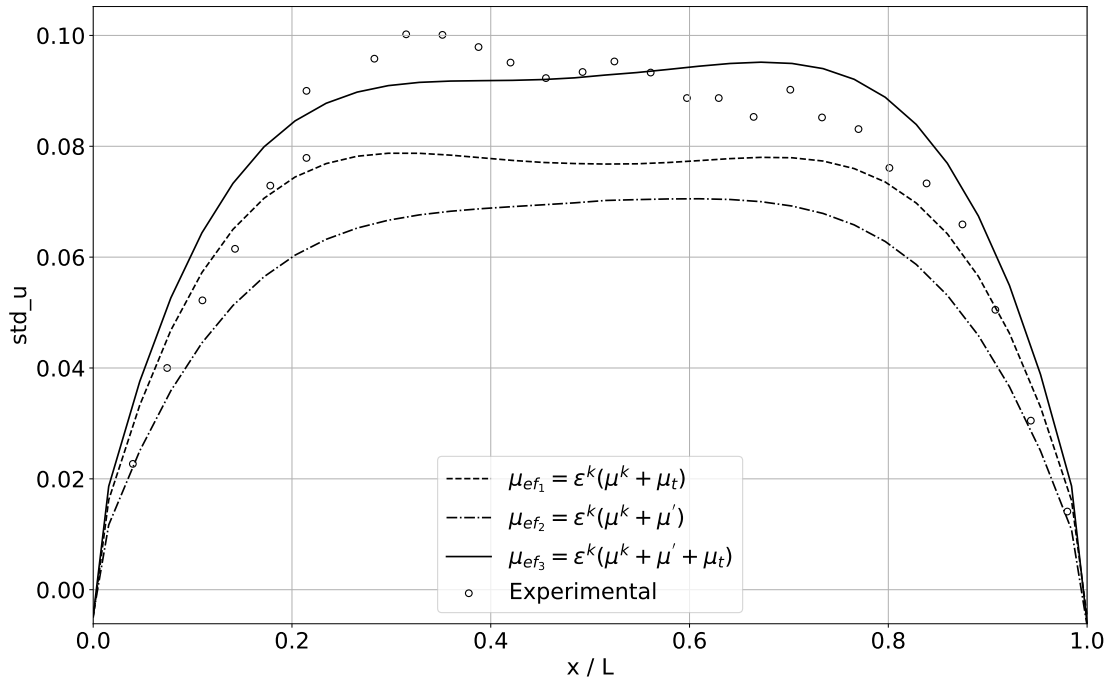


Figura 38 – Desvio padrão de u dos campos eulerianos da formulação 3-vias tradicional (com viscosidade efetiva $\mu_{ef1} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu_t)$) e nossa formulação 3-vias, sem e com fechamento da turbulência (com viscosidades efetivas $\mu_{ef2} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu')$ e $\mu_{ef3} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu' + \mu_t)$) comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

Para o desvio padrão do campo de velocidade na direção x , a inclusão da modificação da viscosidade, juntamente com o fechamento da turbulência, permitiu os melhores resultados. Para o campo de velocidade na direção x , o fechamento da turbulência teve um papel mais importante do que a modificação da viscosidade.

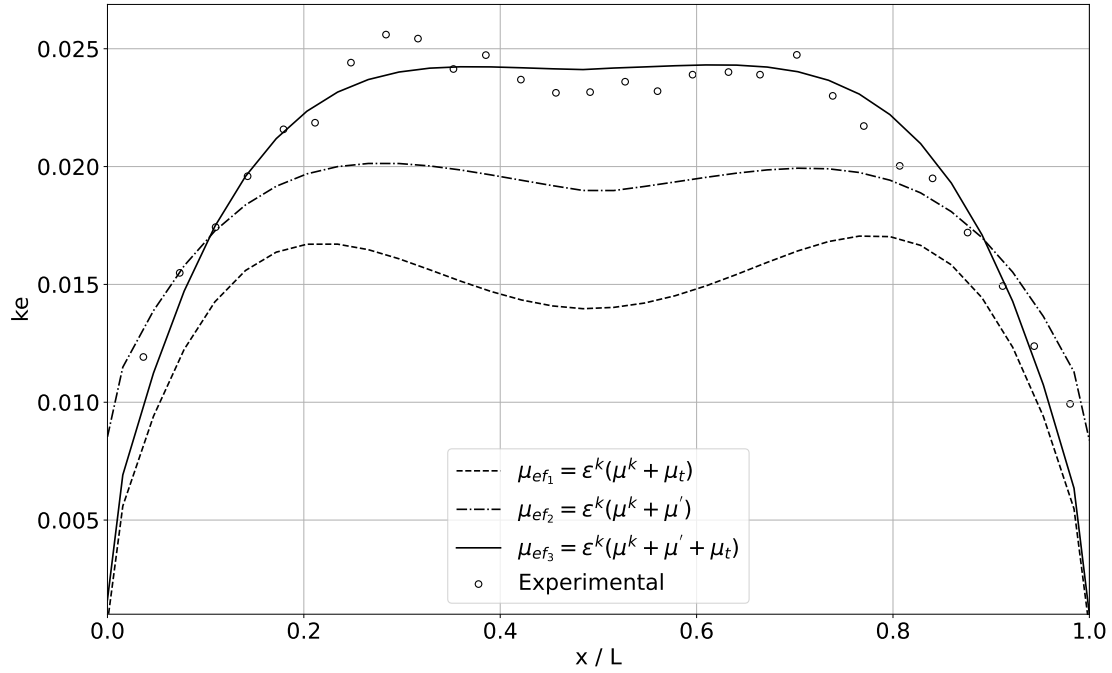


Figura 39 – Energia cinética turbulenta dos campos eulerianos da formulação 3-vias tradicional (com viscosidade efetiva $\mu_{ef_1} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu_t)$) e nossa formulação 3-vias, sem e com fechamento da turbulência (com viscosidades efetivas $\mu_{ef_2} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu')$ e $\mu_{ef_3} = \varepsilon^k(\mu^k + \mu' + \mu_t)$) comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

A viscosidade efetiva μ_{ef_2} já modela bem a velocidade média na direção z e representa melhor a energia cinética turbulenta do que a viscosidade μ_{ef_1} . Porém, de forma geral, o fechamento da turbulência com μ_{ef_3} se mostrou importante para capturar melhor a física da energia cinética turbulência. Desta forma, escolhemos μ_{ef_3} para o modelo completo dos casos simulados no presente trabalho.

Na seção 4.3.8 iremos comparar o desempenho da nossa proposta de modelagem da turbulência em escoamentos bifásicos em regime denso, com outros autores.

Nas próximas duas seções, apresentaremos os casos 2 (constante de Smagorinsky 0,1 na seção 4.3.2) e 3 (constante de Smagorinsky 0,2 na seção 4.3.3). Logo após, na seção 4.3.4, mostraremos a influência das diferentes constantes de Smagorinsky nos resultados do problema avaliado.

4.3.2 Caso 2 ($C_s = 0, 1$):

A partir do caso 2, não apresentaremos a análise qualitativa, ou seja, não apresentaremos mais os campos plotados com o software Paraview. Consideramos que as diferenças encontradas qualitativamente não são perceptíveis a ponto de fornecer novas informações.

A diferença do “setup” do caso 2 para o Caso 1 ($C_s = 0, 15$) está no valor da constante de Smagorinsky. O caso 2 é para o valor de **constante** $C_s = 0.1$.

4.3.2.1 Análise quantitativa

Os resultados com a análise a posteriori nos fornece os seguintes gráficos.

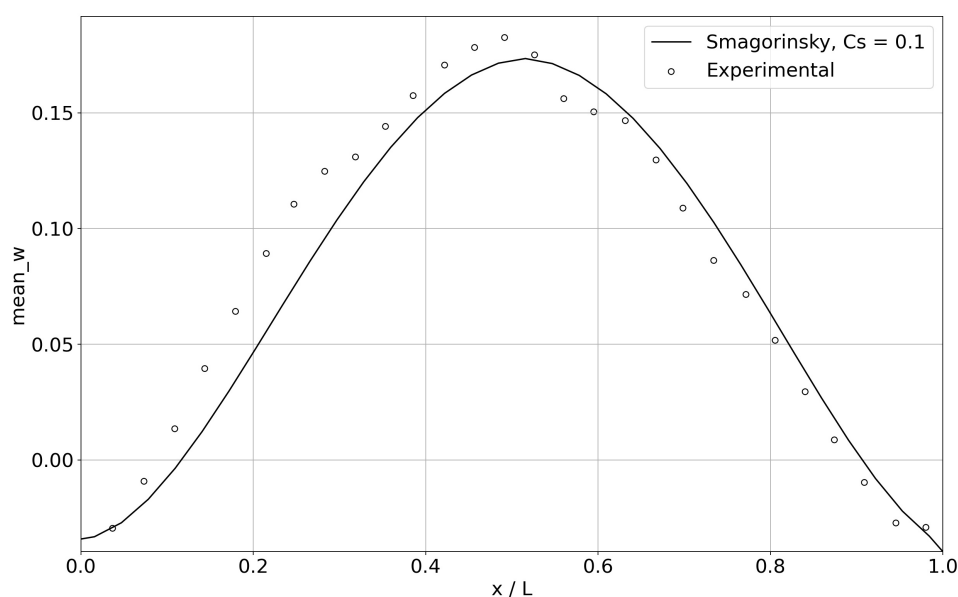


Figura 40 – Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

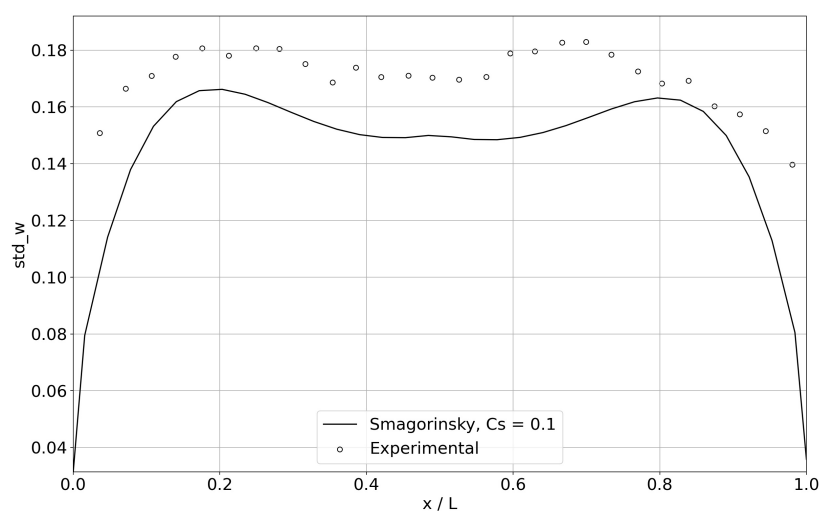


Figura 41 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

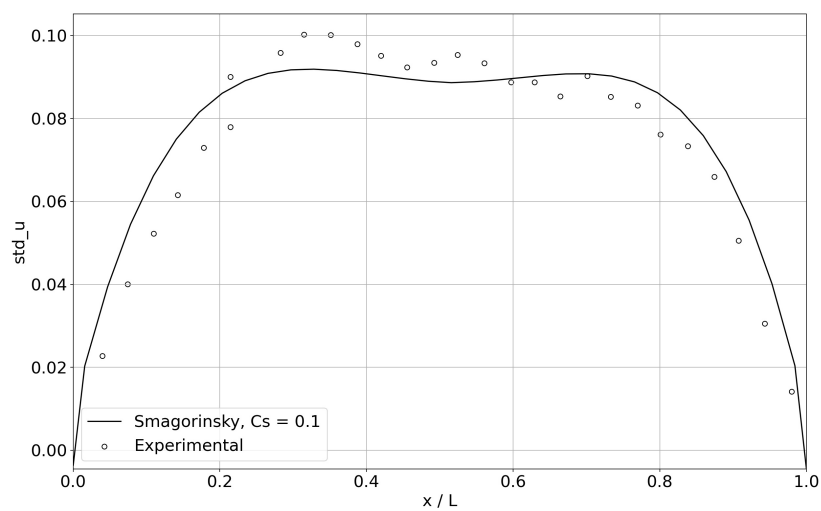


Figura 42 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

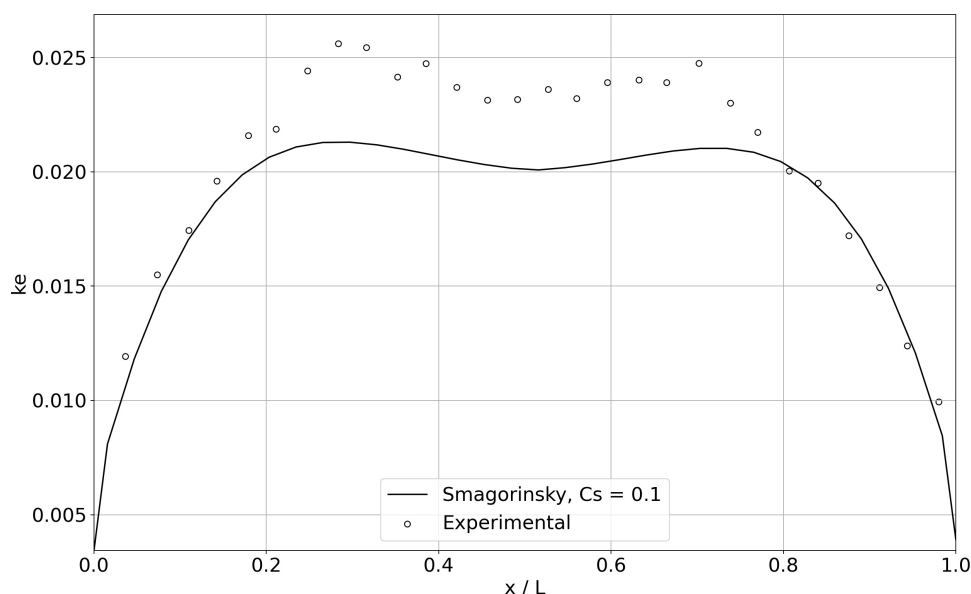


Figura 43 – Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

Na seção 4.3.4 conseguiremos observar de forma nítida a influência da constante de Smagorinsky para a modelagem. A diminuição da constante proporciona um amortecimento nos campos calculados. Quantitativamente, por meio das normas L_2 e L_∞ temos os seguintes valores comparando o Caso 1 ($C_s = 0.15$) com o Caso 2 ($C_s = 0.1$):

| | $C_s = 0,15$ | $C_s = 0,1$ |
|------------|--------------|-------------|
| L_2 | 0.006 | 0.003 |
| L_∞ | 0.05 | 0.03 |

Tabela 10 – Cálculo dos erros para a velocidade média de w .

— De forma análoga, temos os valores quantitativos para o gráfico 41 (desvio padrão em w):

| | $C_s = 0,15$ | $C_s = 0,1$ |
|------------|--------------|-------------|
| L_2 | 0.004 | 0.005 |
| L_∞ | 0.071 | 0.061 |

Tabela 11 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de w .

— Para o gráfico 42 (desvio padrão em u):

| | $C_s = 0,15$ | $C_s = 0,1$ |
|------------|--------------|-------------|
| L_2 | 0.0013 | 0.0014 |
| L_∞ | 0.012 | 0.014 |

Tabela 12 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de u .

— Para o gráfico 43 (energia cinética turbulenta):

| | $C_s = 0,15$ | $C_s = 0,1$ |
|------------|--------------|-------------|
| L_2 | 0.00019 | 0.00045 |
| L_∞ | 0.0030 | 0.0039 |

Tabela 13 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de k_e .

Podemos constatar através dos resultados encontrados com as normas, que para a velocidade média na direção z e os desvios padrões nas direções x e z , pouca diferença ocorre entre os casos 1 e 2. A diferença das duas constantes se mostram mais influentes quando comparadas as normas para a energia cinética turbulenta. As normas indicam que o melhor resultado para a modelagem da turbulência é o Caso 1 ($C_s = 0,15$).

A seguir, apresentaremos os resultados para outro valor de constante de Smagorinsky.

4.3.3 Caso 3 ($C_s = 0,2$):

A diferença do caso 3 para o caso 2 está no valor da constante de Smagorinsky. O valor imposto foi de $C_s = 0,2$. O aumento da constante C_s , superestima os

valores do experimento computacional, quando comparado com o experimento material.

4.3.3.1 Análise quantitativa

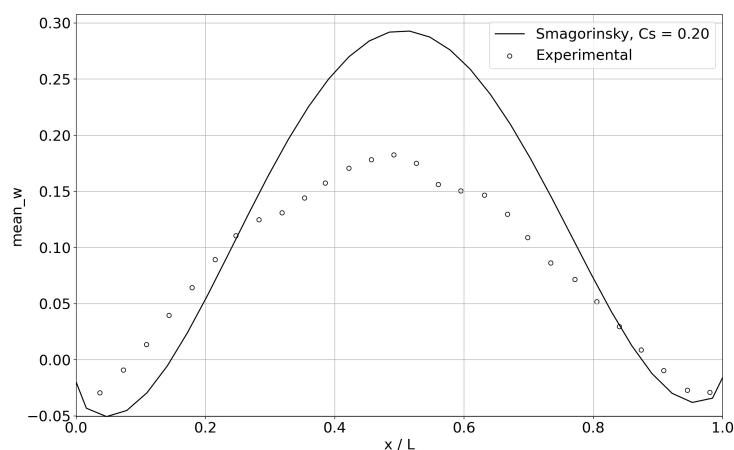


Figura 44 – Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

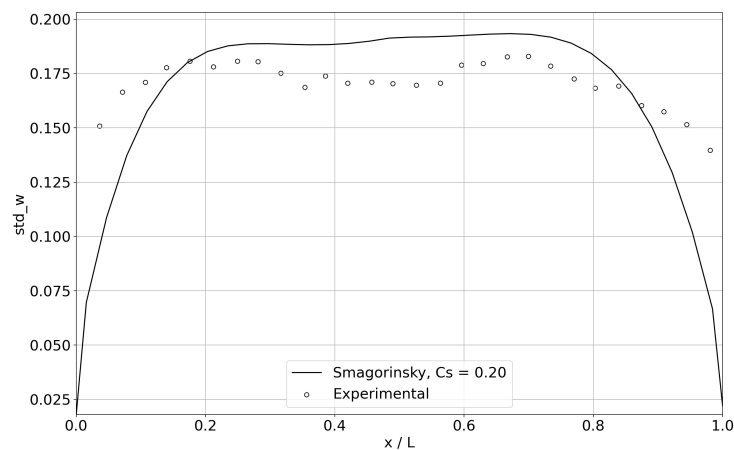


Figura 45 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

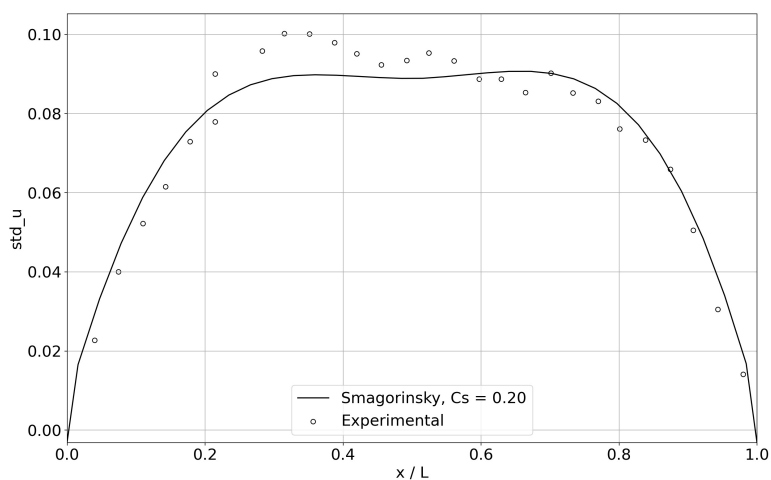


Figura 46 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x , comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

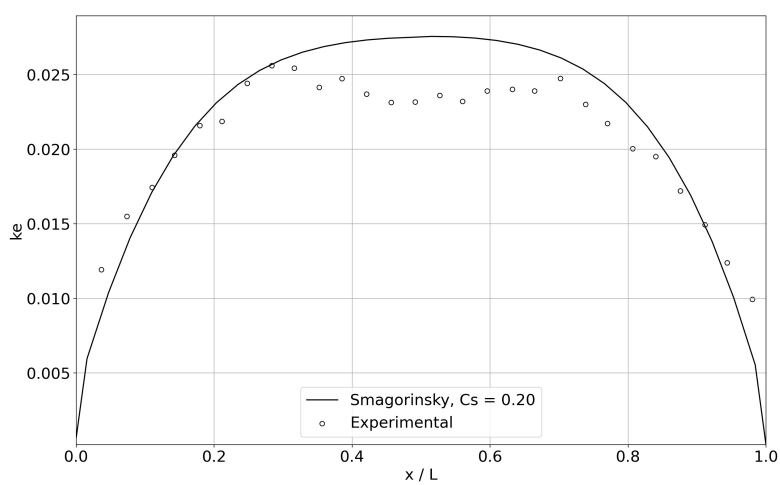


Figura 47 – Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

Novamente, resumimos os valores dos erros calculados com os pontos dos gráficos acima, já estabelecendo uma tabela de comparação entre os casos 1, 2 e 3. Para a velocidade média na direção z , temos:

| | $C_s = 0,15$ | $C_s = 0,1$ | $C_s = 0,2$ |
|------------|--------------|-------------|-------------|
| L_2 | 0.006 | 0.003 | 0.012 |
| L_∞ | 0.05 | 0.03 | 0.12 |

Tabela 14 – Cálculo dos erros para a velocidade média de w .

— De forma análoga, temos os valores quantitativos para o gráfico 45 (desvio padrão em w):

| | $C_s = 0,15$ | $C_s = 0,1$ | $C_s = 0,2$ |
|------------|--------------|-------------|-------------|
| L_2 | 0.004 | 0.005 | 0.0049 |
| L_∞ | 0.071 | 0.061 | 0.074 |

Tabela 15 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de w .

— Para o gráfico 46 (desvio padrão em u):

| | $C_s = 0,15$ | $C_s = 0,1$ | $C_s = 0,2$ |
|------------|--------------|-------------|-------------|
| L_2 | 0.0013 | 0.0014 | 0.00085 |
| L_∞ | 0.012 | 0.014 | 0.0097 |

Tabela 16 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de u .

— Para o gráfico 47 (energia cinética turbulenta):

| | $C_s = 0,15$ | $C_s = 0,1$ | $C_s = 0,2$ |
|------------|--------------|-------------|-------------|
| L_2 | 0.00019 | 0.00045 | 0.00048 |
| L_∞ | 0.0030 | 0.0039 | 0.0037 |

Tabela 17 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de k_e .

Podemos observar que as informações comparadas dos campos, sugerem que o aumento da constante de Smagorinsky para um valor acima de $C_s = 0,15$,

superestima os valores dos campos calculados. Outro fato importante é que o aumento da constante para $C_s = 0,2$, captou melhores resultados para o desvio padrão na direção x . Porém, continuou com resultados inferiores aos casos 1 e 2, quando se trata da energia cinética turbulenta.

Na próxima seção faremos uma comparação entre os resultados das três constantes avaliadas. Assim, poderemos avaliar o impacto do valor da constante para a modelagem da turbulência.

4.3.4 Comparação entre os casos 1, 2 e 3:

4.3.4.1 Análise quantitativa

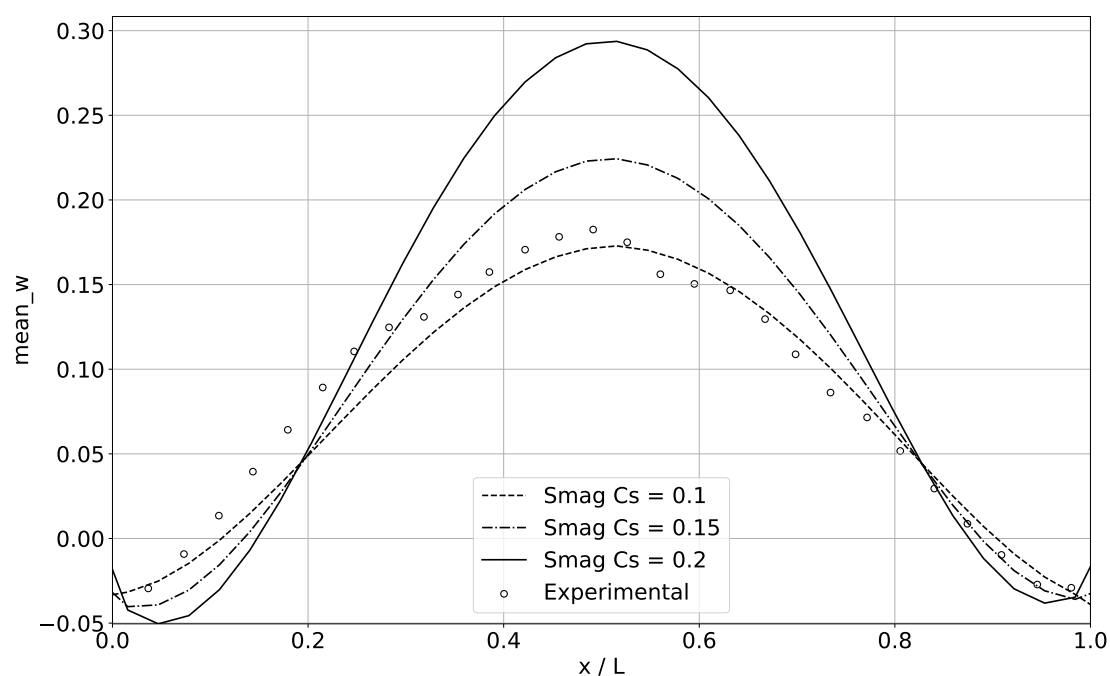


Figura 48 – Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

Podemos observar um interessante padrão na Figura 48. A diferença entre os máximos valores das curvas do caso 1 e 2 ($C_s = 0,15$ e $C_s = 0,1$) e entre os casos 1 e 3 ($C_s = 0,15$ e $C_s = 0,2$), correspondem aproximadamente às diferenças entre os valores das constantes de Smagorinsky utilizadas na simulação, que é de 0,05.

Percebemos pela análise das curvas do desvio padrão na direção z , Figura 49, que a influência da constante de Smagorinsky tem pouca importância nas regiões mais próximas da parede. Na região central, onde o escoamento é mais denso, temos que a constante $C_s = 0,15$, é a que melhor segue os pontos do experimento material.

Para a Figura 50, observamos pouca diferença na influência do valor da constante de Smagorinsky. Nesse caso, as regiões mais próximas da parede e a região central são bem semelhantes.

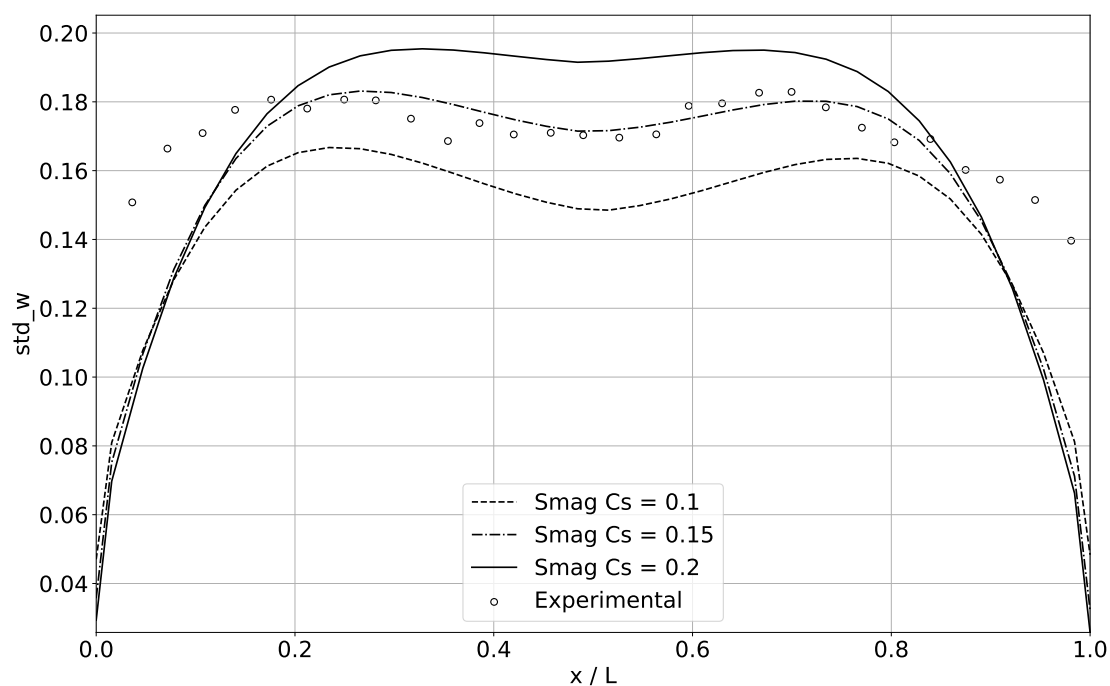


Figura 49 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z , comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

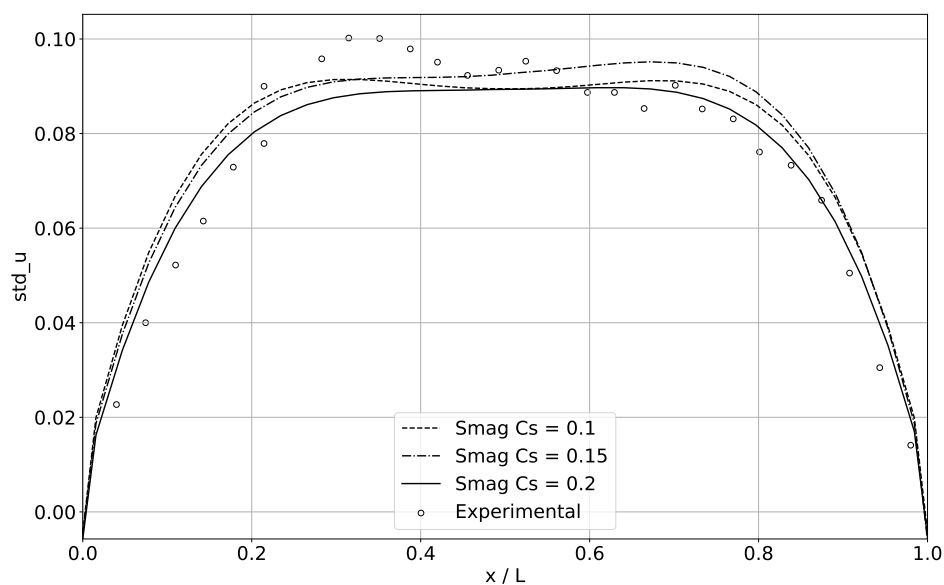


Figura 50 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

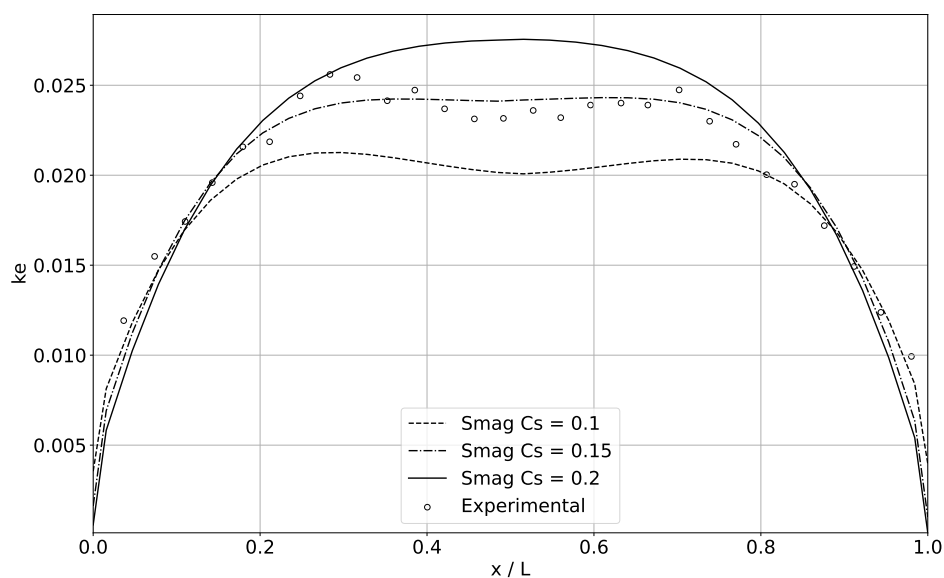


Figura 51 – Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

Outros importantes padrões dos resultados com diferentes valores da constante, ocorrem na direção axial (direção z) e na a energia cinética turbulenta. Através da Figura 51, percebemos que o valor da constante igual a 0,15, se aproxima mais dos resultados do experimento material. Comparando com o experimento material, $C_s = 0,2$ superestima o valor do experimento material, e $C_s = 0,1$ subestima o valor dos dados do experimento material. Na direção x e y , esse padrão não é percebido.

Tendo terminado a avaliação de três valores para a constante de Smagorinsky, agora avaliaremos outro modelo de turbulência. A seguir apresentaremos os resultados para o modelo de Germano-Lilly.

4.3.5 Caso 4 (Germano-Lilly):

A única diferença do caso 4 para o caso 3, está no modelo de fechamento para a turbulência. Nesta etapa, consideramos o modelo de fechamento de Germano, onde não assumimos mais um valor constante para C_s e sim um valor que depende do espaço e do tempo, calculado com o modelo proposto por Germano et al. (1991).

4.3.5.1 Análise quantitativa

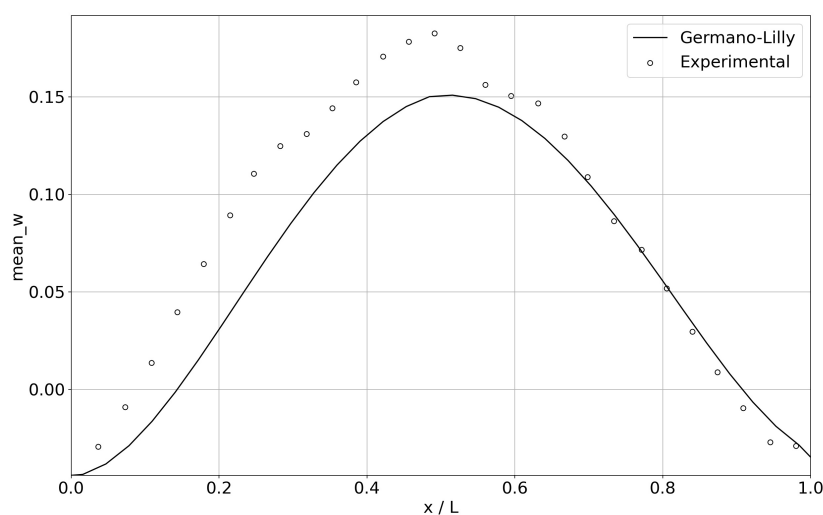


Figura 52 – Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

Os valores tabelados dos erros dos pontos do gráfico acima, são resumidos a seguir juntamente com os resultados dos outros modelos de fechamento da turbulência. Para a velocidade média na direção z , da figura 52 temos:

| | $C_s = 0,15$ | $C_s = 0,1$ | $C_s = 0,2$ | Germano-Lilly |
|------------|--------------|-------------|-------------|---------------|
| L_2 | 0.006 | 0.003 | 0.012 | 0.0050 |
| L_∞ | 0.05 | 0.03 | 0.12 | 0.045 |

Tabela 18 – Cálculo dos erros para a velocidade média de w .

Por meio dos resultados das normas para os 4 casos, observamos que o modelo de Germano-Lilly tem resultados bem próximos do melhor caso simulado (Caso 1). Essa é uma grande vantagem para esse modelo, pois o cálculo do coeficiente é feito de forma dinâmica, sem precisar impor o valor da constante.

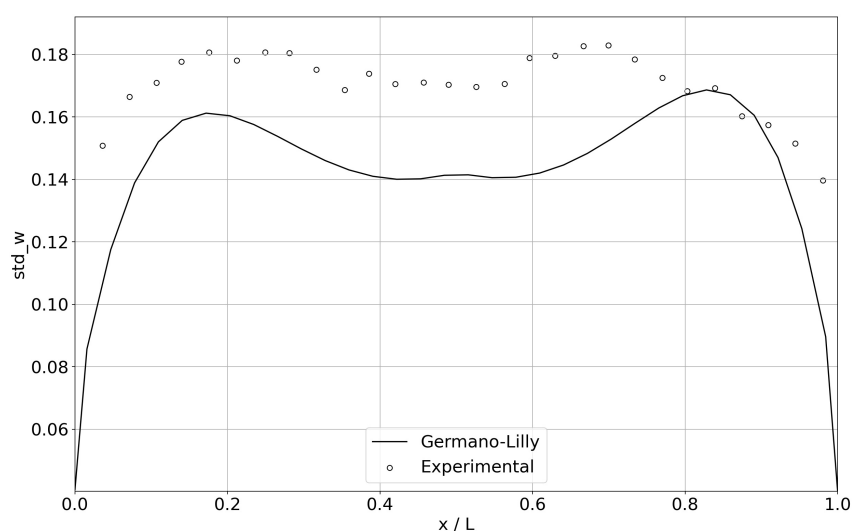


Figura 53 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z , comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

— De forma análoga, temos os valores quantitativos para o gráfico 53 (desvio padrão em w):

| | $C_s = 0,15$ | $C_s = 0,1$ | $C_s = 0,2$ | Germano-Lilly |
|------------|--------------|-------------|-------------|---------------|
| L_2 | 0.004 | 0.005 | 0.0049 | 0.0053 |
| L_∞ | 0.071 | 0.061 | 0.074 | 0.056 |

Tabela 19 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de w .

Novamente, para o desvio padrão do campo de velocidade na direção z , o desempenho do modelo de Germano-Lilly ficou bem próximo do melhor caso simulado (Caso 1).

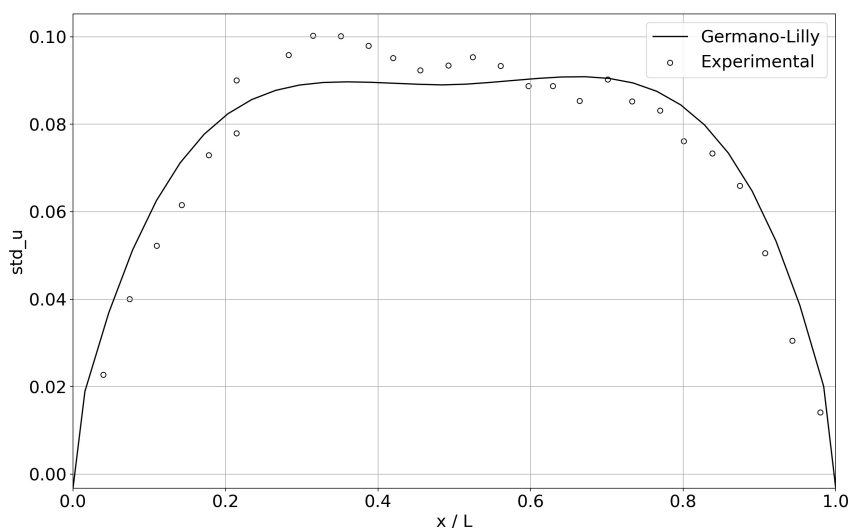


Figura 54 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x , comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

— Para o gráfico 54 (desvio padrão em u):

| | $C_s = 0,15$ | $C_s = 0,1$ | $C_s = 0,2$ | Germano-Lilly |
|------------|--------------|-------------|-------------|---------------|
| L_2 | 0.0013 | 0.0014 | 0.00085 | 0.0011 |
| L_∞ | 0.012 | 0.014 | 0.0097 | 0.012 |

Tabela 20 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de u .

Para o desvio padrão do campo de velocidade na direção x, os cálculos das normas nos revela que o modelo de Germano-Lilly é superior ao Caso 1.

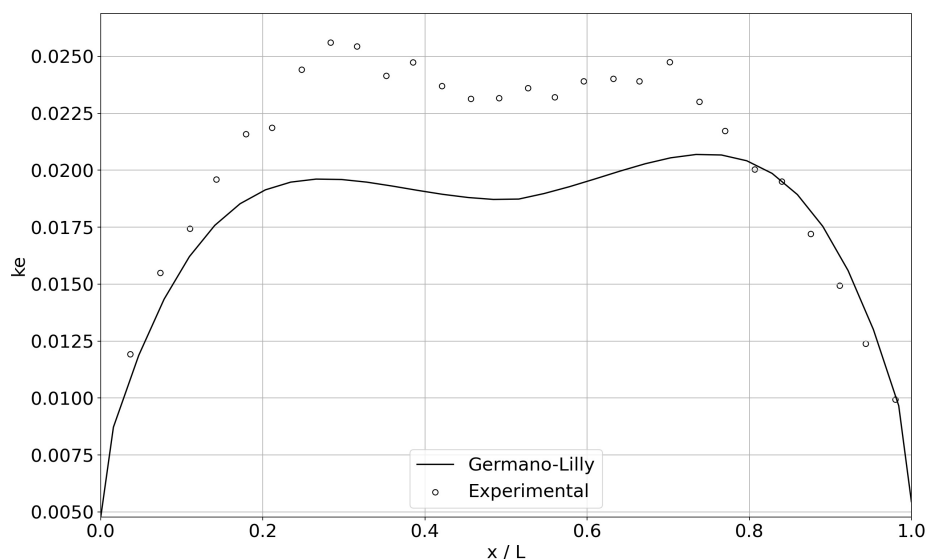


Figura 55 – Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

— Para o gráfico 55 (energia cinética turbulenta):

| | $C_s = 0,15$ | $C_s = 0,1$ | $C_s = 0,2$ | Germano-Lilly |
|------------|--------------|-------------|-------------|---------------|
| L_2 | 0.00019 | 0.00045 | 0.00048 | 0.00065 |
| L_∞ | 0.0030 | 0.0039 | 0.0037 | 0.0054 |

Tabela 21 – Cálculo dos erros para o desvio padrão de k_e .

Para a energia cinética turbulenta, o modelo de Germano-Lilly não representou tão bem quanto os anteriores, porém, sua vantagem ainda está no fato de calcular o coeficiente de forma dinâmica.

Por fim, na seção seguinte, podemos comparar a influência das diferentes constantes de Smagorinsky e o modelo de Germano-Lilly, para o problema avaliado.

4.3.6 Comparação entre os casos 1, 2, 3 e 4:

4.3.6.1 Análise quantitativa

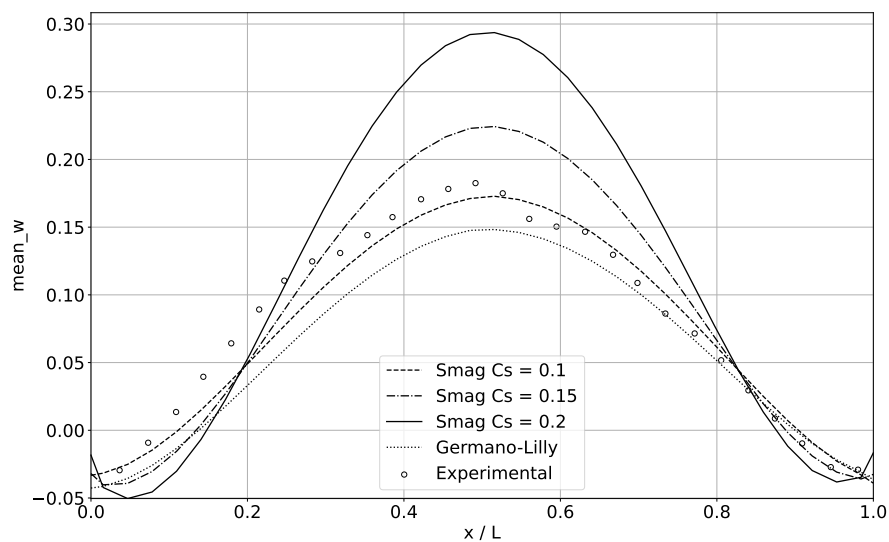


Figura 56 – Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

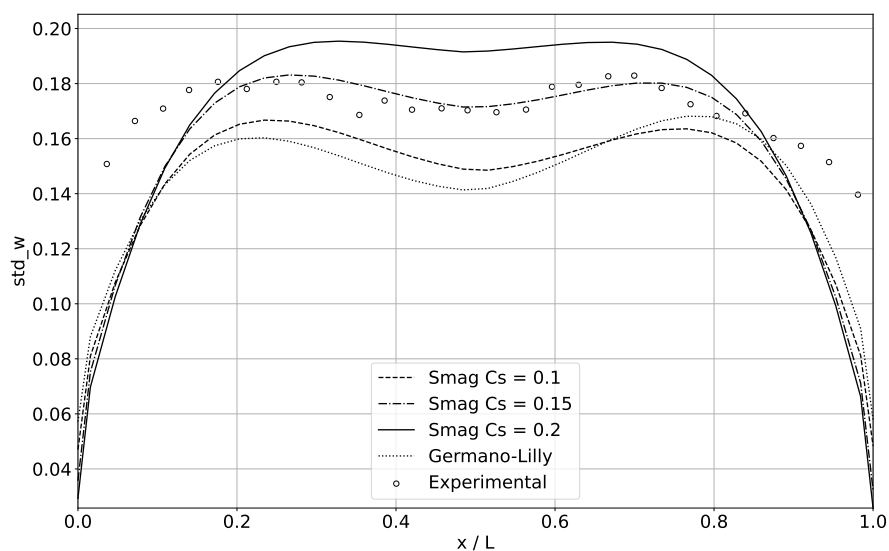


Figura 57 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

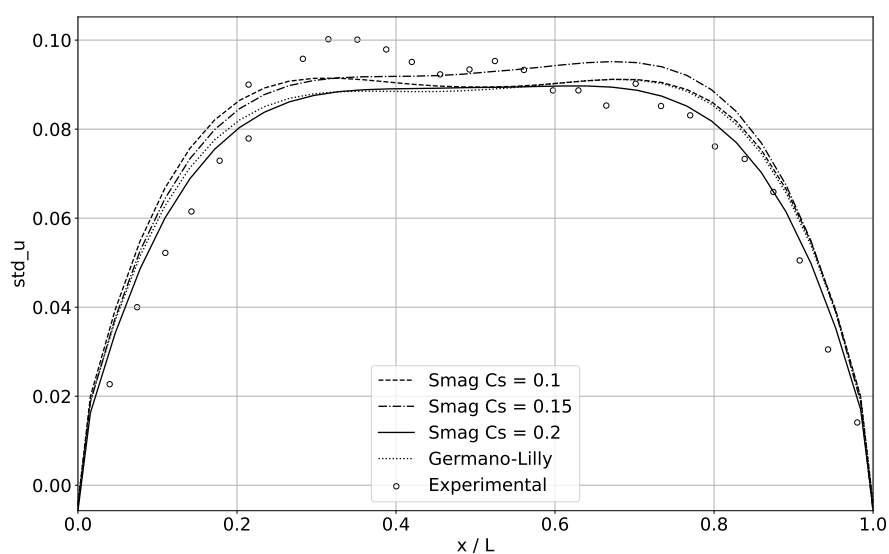


Figura 58 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

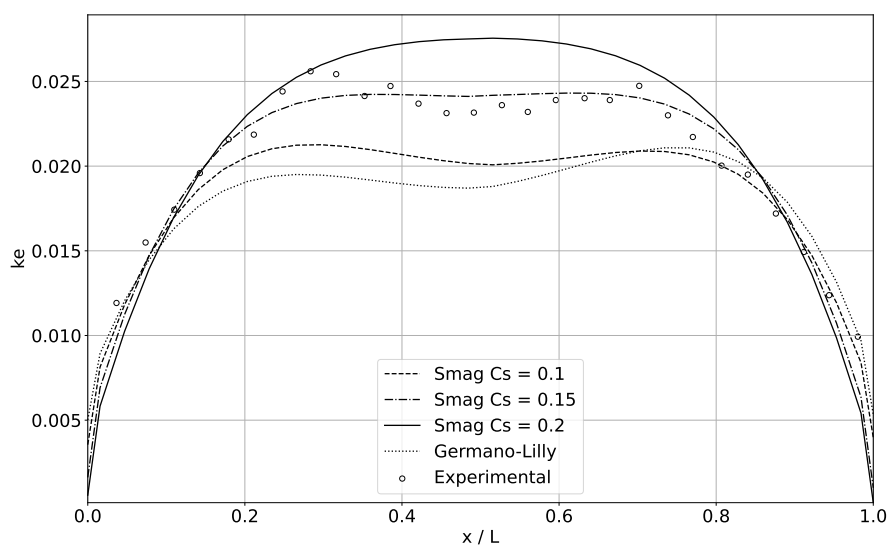


Figura 59 – Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

Entendemos que o modelo de germano, devido à diferença no cálculo de C_s , oferece bons resultados para o ponto de vista de simulações a nível industrial. Por

mais que os resultados para a energia cinética turbulenta ficaram com uma qualidade inferior ao modelo de Smagorinsky dos casos 1, 2 e 3, os outros campos ficaram bons, tendo em vista que não precisamos realizar 3 simulações com coeficientes distintos e impostos. A constante de Smagorinsky é ajustada, enquanto o modelo dinâmico não tem ajuste. Daí a sua superioridade para aplicações indistintas.

4.3.7 Caso 5:

Para o caso 5, a única diferença para o Caso 4 (Germano-Lilly) está no modelo de fechamento da turbulência. Para este caso, utilizamos o modelo com função de parede de Van Driest e constante de Smagorinsky $C_s = 0,2$.

4.3.7.1 Análise quantitativa

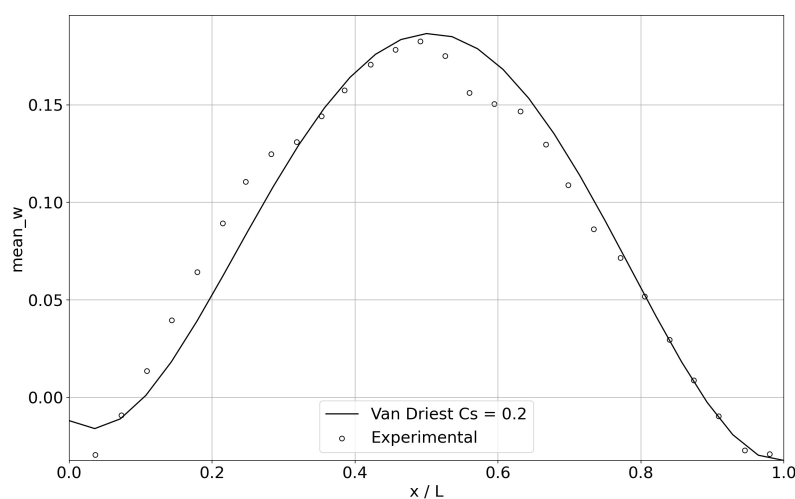


Figura 60 – Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

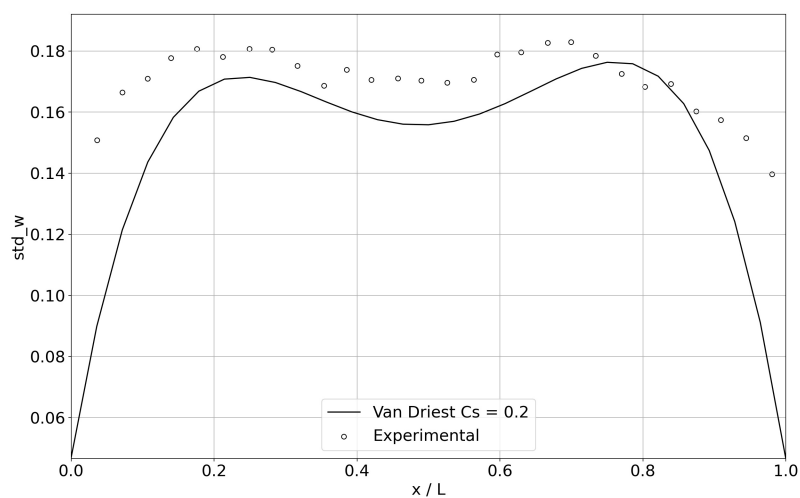


Figura 61 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

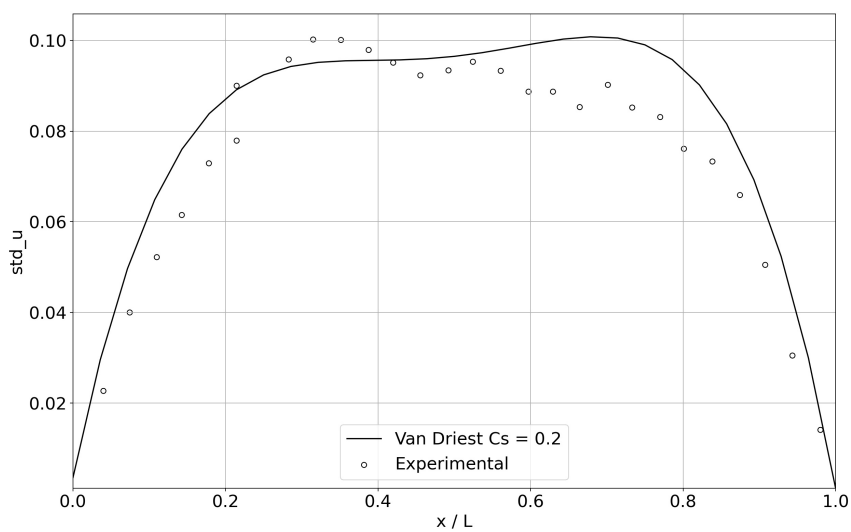


Figura 62 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

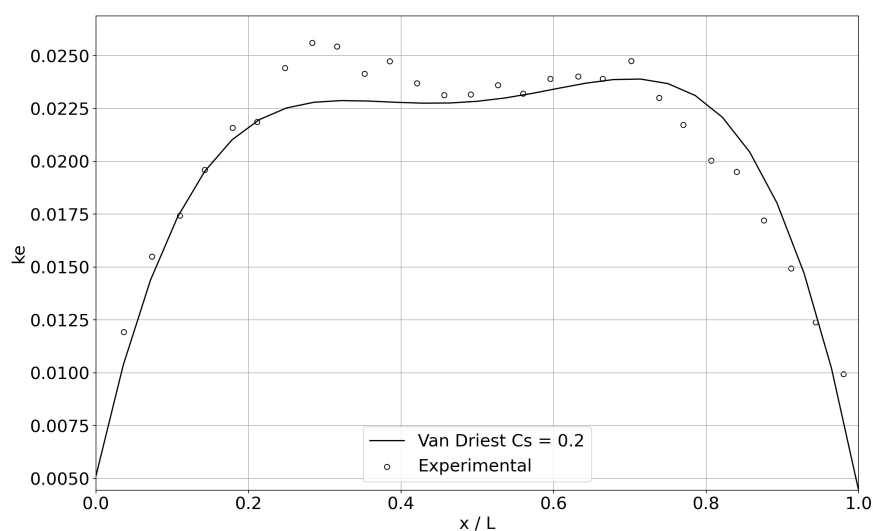


Figura 63 – Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

O modelo de Van driest comparado com o Caso 3 ($C_s = 0,2$), apresenta uma atenuação dos campos calculados. A inclusão de um termo de amortecimento para o campo de velocidade próximo à parede, impacta diretamente nessa atenuação.

4.3.8 Comparação com modelos de outros autores

Nesta etapa, iremos comparar nossos resultados computacionais com os resultados obtidos na literatura. Para avaliar se a nossa modelagem proposta representa adequadamente a física do problema, buscamos realizar duas validações principais: 1) comparação com resultados conhecidos obtidos por meio de experimentos materiais; 2) comparação com simulações computacionais de outros autores.

4.3.8.1 Comparação com Deen, Solberg e Hjertager (2001)

Os autores Deen, Solberg e Hjertager (2001) realizaram simulações computacionais para comparar com os resultados experimentais obtidos por eles mesmos.

As principais diferenças entre os resultados obtidos nesta tese e os resultados dos autores mencionados nesta seção estão nas modelagens discreta e diferencial. Nós realizamos a modelagem discreta e computacional do problema no software MFSim. Quanto à modelagem diferencial, as principais diferenças teóricas estão nas formulações da modificação da viscosidade molecular pela presença das partículas e da força de arrasto.

Tabela 22 – Comparação das forças de arrasto e viscosidade

| Experimento | Força de Arrasto (N) e Viscosidade (Pa·s) |
|----------------------------------|---|
| Deen, Solberg e Hjertager (2001) | $F_D = -\frac{3}{4}\varepsilon^k \rho^k \frac{C_D}{d_B} \bar{u}_d - \bar{u} (\bar{u}_d - \bar{u})$ $\mu_{IB} = \rho^k C_{IB} \varepsilon^k d_B \bar{u}_d - \bar{u} $ |
| MFSim | $F_D = 3\pi d_p \mu_m (\bar{u}_i - \bar{v}_i) \frac{Re_p C_D}{24}$ $\mu' = \mu^k [(\varepsilon^k)^{-n-1} - 1]$ |

Todas as fórmulas da tabela acima foram explicadas na seção de Metodologia. Lembrando que, na nossa modelagem, $\mu_m = \varepsilon^k (\mu^k + \mu')$. A força de arrasto proposta na seção de Metodologia é uma fórmula que possui um coeficiente n calculado de forma analítica (ISHII; ZUBER, 1979). Por outro lado, a força de arrasto que estamos comparando depende de um ajuste de parâmetros, da densidade da fase contínua, da fração volumétrica da fase contínua, do diâmetro da fase dispersa e da velocidade relativa entre as fases contínua e dispersa.

Agora discutiremos os resultados obtidos no Caso 1 ($C_s = 0,15$) em comparação com os resultados dos autores mencionados acima.

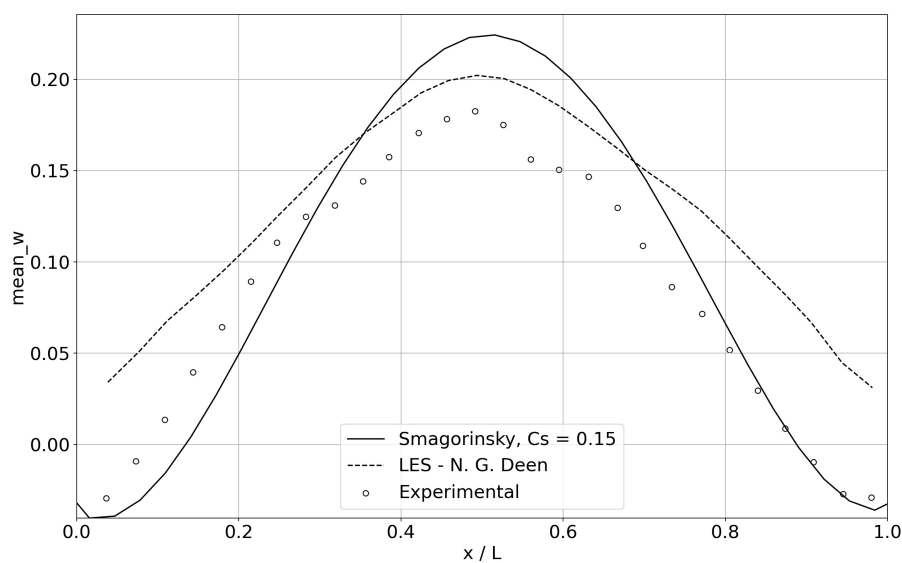


Figura 64 – Velocidade média do campo euleriano comparada com o resultado experimental de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

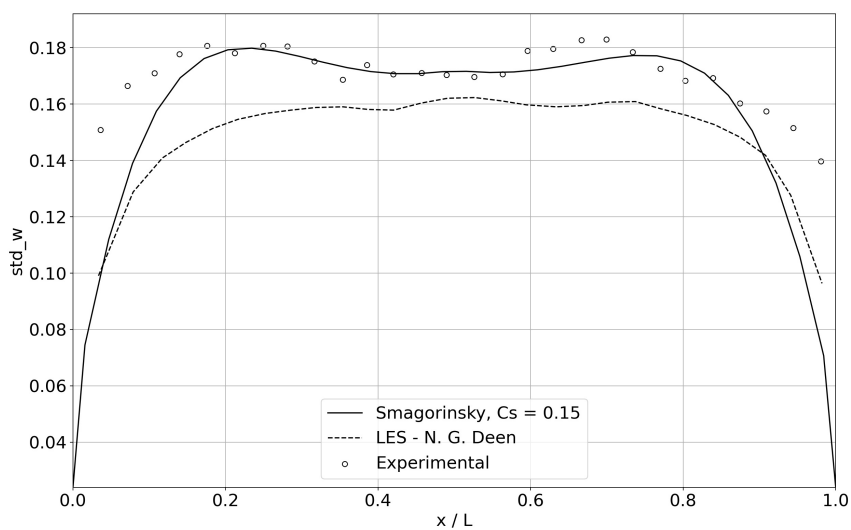


Figura 65 – Desvio padrão do campo de flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado experimental de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

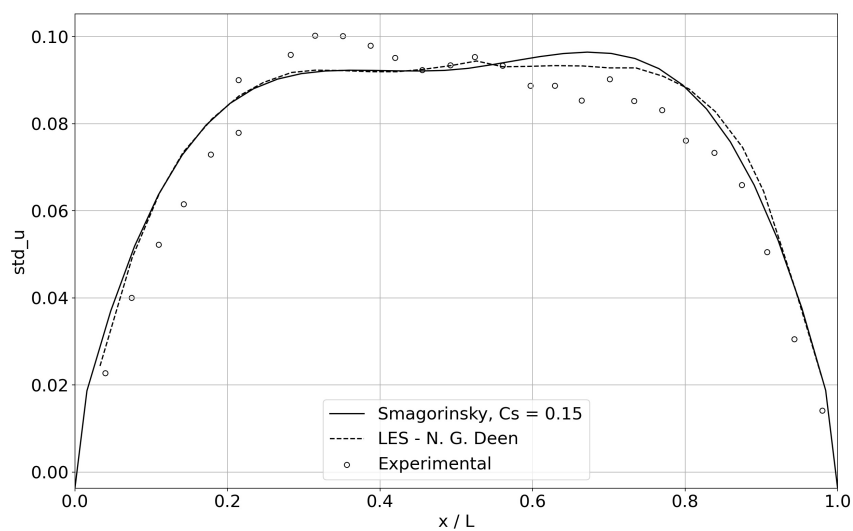


Figura 66 – Desvio padrão do campo de flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado experimental de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

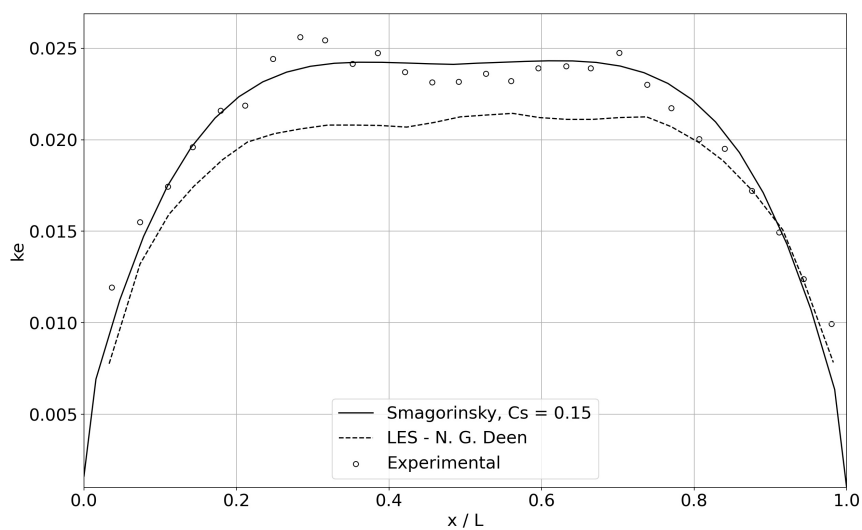


Figura 67 – Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparada com o resultado experimental de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

A comparação dos resultados das simulações computacionais com os resultados experimentais revela detalhes da importância da modelagem da viscosidade modificada e da força de arrasto. Os resultados mais precisos do nosso modelo sugerem que a modelagem proposta é promissora. Mais detalhes sobre o modelo de comparação podem ser encontrados com os autores Deen, Solberg e Hjertager (2001).

4.3.9 Comparação com o modelo de Zhang, Deen e Kuipers (2006)

Também encontramos modelos na literatura para o caso estudado, com constantes $C_s = 0,1$ e $C_s = 0,2$. Os autores Zhang, Deen e Kuipers (2006) utilizaram a mesma formulação teórica utilizada por Deen, Solberg e Hjertager (2001). Comparando com os resultados do experimento material e os resultados obtidos com o software MFSim, obtemos os resultados abaixo.

Para o caso com $C_s = 0,1$ temos:

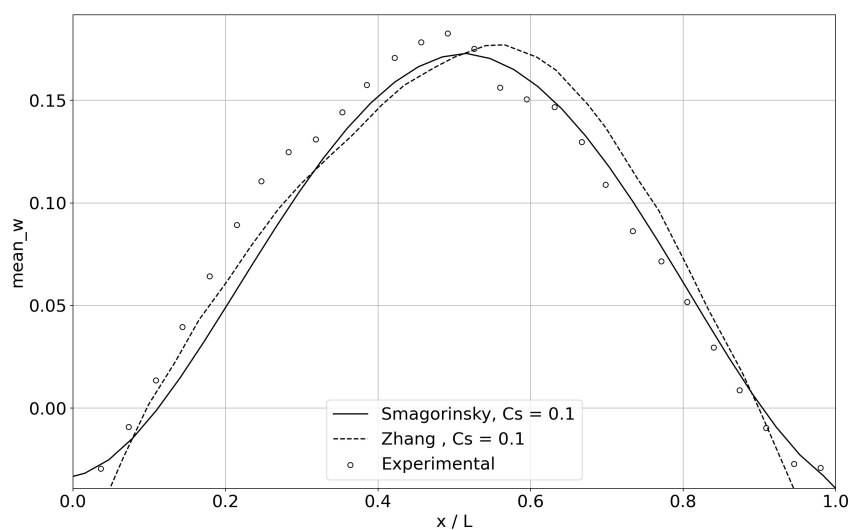


Figura 68 – Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

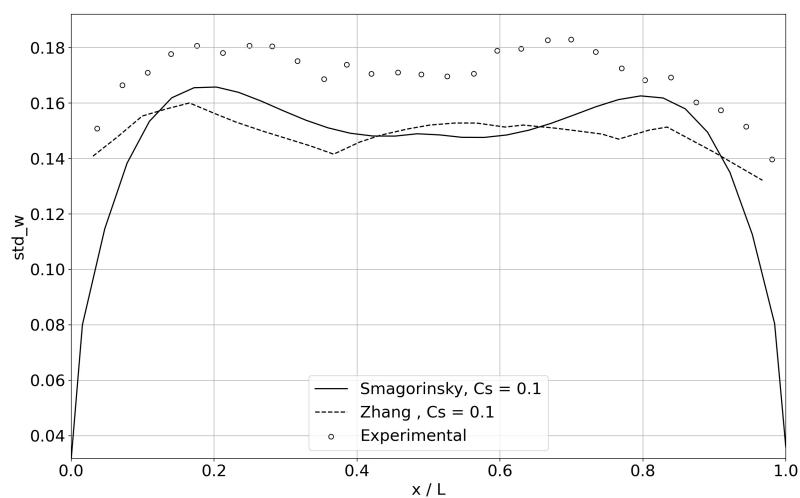


Figura 69 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

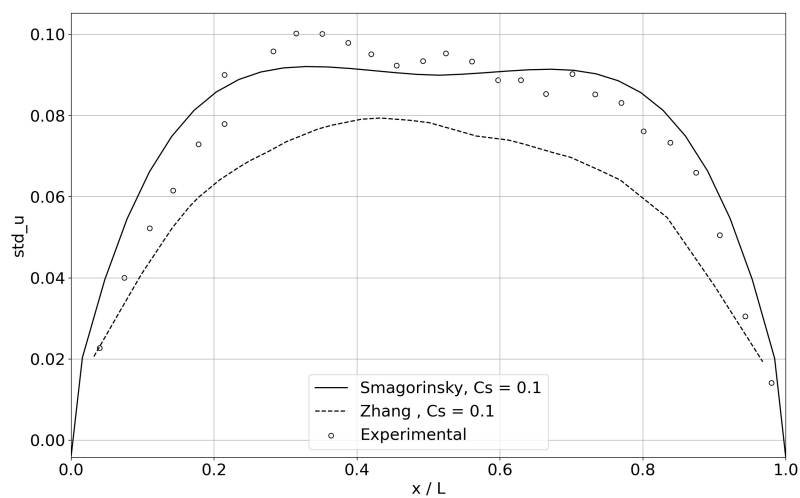


Figura 70 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

Podemos observar que ambas as simulações obtiveram o mesmo comportamento

na direção z do escoamento (direção axial do canal). Sobre mesmo comportamento, nos referimos ao fato de ambas as simulações no perfil médio de velocidade (w_{mean}) e no desvio padrão de w , subestimaram os valores dos resultados do experimento material. Na direção x , a modelagem do regime denso também evidenciou uma melhora significativa.

Para o caso com $C_s = 0,2$ temos:

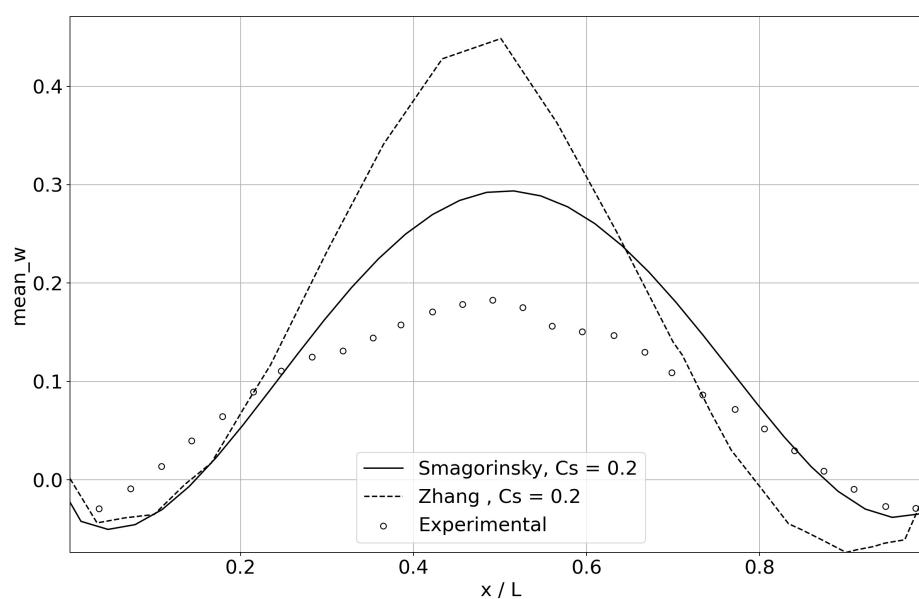


Figura 71 – Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

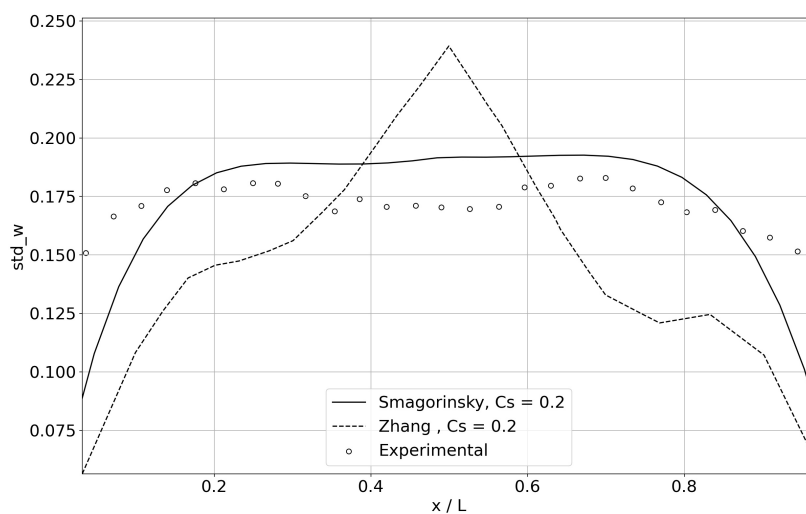


Figura 72 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

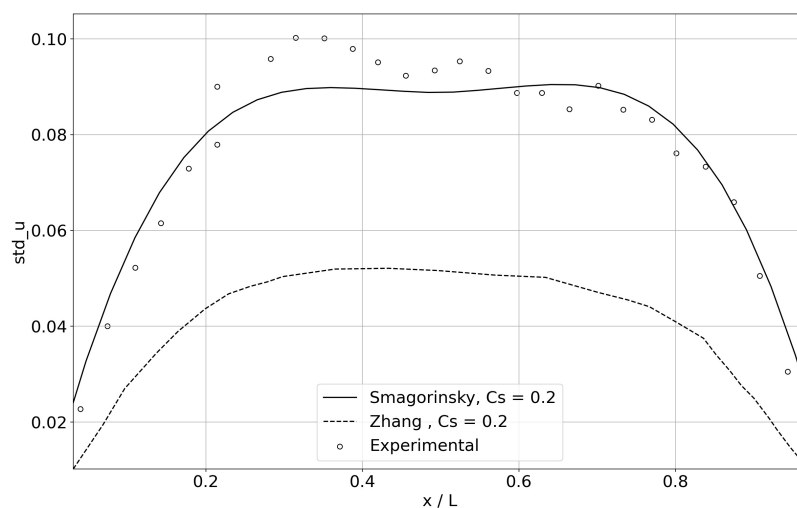


Figura 73 – Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de Deen, Solberg e Hjertager (2001).

As simulações computacionais para a constante 0,2 também mantiveram um padrão semelhante. Ambas simulações superestimaram os valores dos dados experimentais na direção z . Esse fato é importante para observar que outros pesquisadores também obtiveram o mesmo padrão de comportamento com o modelo de fechamento de Smagorinsky. O escoamento parece ter uma constante preferencial que tende ao valor de 0,15.

Últimas considerações sobre o caso do canal vertical com injeção de bolhas: Não parece ser coincidência que os resultados com a modelagem proposta melhorou em todos casos na região central do escoamento. Na região central, a densidade de bolhas é muito maior do que nas regiões próximas às paredes. Nossa modelagem do regime denso, capta melhor essa física, pois a fórmula proposta pelo Ishii e Zuber (1979) que nos baseamos, contempla que para escoamentos densos envolvendo bolhas, $\varepsilon_{dm} = 1$. Com base nisso, propomos uma modificação da viscosidade molecular μ' que já possui essa informação.

A acurácia do nosso modelo em relação ao simulado por Zhang, Deen e Kuipers (2006) foi superior em todas as comparações. Os cálculos de desvio padrão da velocidade em x e z , já dão um bom indicativo de que a modelagem do regime denso proposta na presente tese está mais precisa.

5 Conclusão

Nesta tese apresenta-se uma abordagem sistemática para modelar escoamentos turbulentos densos, partindo de escoamentos diluídos. Foram propostas quatro novas fórmulas, das quais duas foram testadas e validadas, abrangendo o balanço de quantidade de movimento linear, a força de arrasto e o balanço de energia térmica nas formulações euleriana e lagrangiana. A incorporação da fração volumétrica da fase dispersa na descrição matemática da turbulência em escoamentos densos permitiu uma melhora significativa na modelagem do fenômeno turbulento nessas regiões.

As simulações computacionais foram comparadas com resultados experimentais, resultando em aproximações consistentes. A viscosidade molecular modificada devido à presença da fase dispersa demonstrou ter um impacto significativo na simulação dos escoamentos em regime denso. Analisando a viscosidade molecular modificada, estabelecemos um importante critério entre os parâmetros que relacionam a malha e o tamanho do raio das partículas, oferecendo uma contribuição fundamental para a compreensão desses escoamentos.

Ao examinar o tensor deviatórico em regime estatisticamente estacionário, realizamos análises qualitativas e quantitativas, destacando a importância da análise topológica do escoamento. A introdução da fração volumétrica como parte da modelagem da força de arrasto resultou em uma maior concordância entre os resultados experimentais e computacionais. A abordagem Euler-Lagrange adotada permitiu um acoplamento entre as equações de cada referencial, trazendo mais física para a modelagem do fechamento da turbulência e melhorando a descrição dos escoamentos turbulentos densos.

Comparando as formulações de 2 e 3 vias, observamos que a formulação de 3 vias, voltada para escoamentos densos, apresenta resultados superiores na modelagem do fechamento da turbulência. Enquanto a formulação de 3 vias tende a se aproximar da formulação de 2 vias em escoamentos diluídos, principalmente nas regiões próximas à parede, ela se destaca significativamente na região central, onde há

maior concentração de bolhas. A análise dos desvios padrões do campo de velocidade e da energia cinética turbulenta reforçou a superioridade da formulação de 3 vias nessas regiões.

A modelagem de fechamento da turbulência revelou sua relação com os valores de desvio padrão e a variância do campo de velocidade, sendo a energia cinética turbulenta um reflexo direto do impacto dessa modelagem. Além disso, destacamos a importância do valor da constante de Smagorinsky, que influencia o processo difusivo nas equações do campo euleriano. Embora tenha sido observada uma tendência para o coeficiente ideal de 0,15, o modelo de Germano-Lilly também apresentou resultados promissores, com a vantagem de não exigir ajuste da constante, o que o torna mais adequado para aplicações industriais devido ao menor custo computacional.

6 Atividades Futuras

Embora a proposta de modelagem para as equações do campo de temperatura tenha sido apresentada nesta tese, a validação dos resultados será objeto de futuros trabalhos. Além disso, pretende-se investigar a termo-fluidodinâmica de escoamentos turbulentos densos como continuação deste estudo, proporcionando uma compreensão mais abrangente e aprofundada desse fenômeno complexo.

Referências

ABHYANKAR, S. et al. Petsc/ts: A modern scalable ode/dae solver library. *arXiv preprint arXiv:1806.01437*, 2018. DOI: 10.48550/arXiv.1806.01437. Citado na página 83.

ANDERSON, T. B.; JACKSON, R. Fluid mechanical description of fluidized beds. equations of motion. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, ACS Publications, v. 6, n. 4, p. 527–539, 1967. DOI: 10.1021/i160024a007. Citado 4 vezes nas páginas 26, 30, 31 e 45.

BAI, W.; DEEN, N. G.; KUIPERS, J. Numerical analysis of the effect of gas sparging on bubble column hydrodynamics. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, ACS Publications, v. 50, n. 8, p. 4320–4328, 2011. DOI: 10.1021/ie1017805. Citado na página 124.

BALACHANDAR, S.; EATON, J. K. Turbulent dispersed multiphase flow. *Annual review of fluid mechanics*, Annual Reviews, v. 42, p. 111–133, 2010. Citado 4 vezes nas páginas 20, 26, 30 e 61.

BALACHANDAR, S. et al. Host-to-host airborne transmission as a multiphase flow problem for science-based social distance guidelines. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 132, p. 103439, 2020. DOI: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2020.103439. Citado na página 23.

BALAY, S. et al. *630 K. Rupp, P. Sanan, BF Smith, S. Zampini, H. Zhang, PETSc Web page*. 2019. Citado na página 83.

BATCHELOR, G. The effect of brownian motion on the bulk stress in a suspension of spherical particles. *Journal of fluid mechanics*, Cambridge University Press, v. 83, n. 1, p. 97–117, 1977. DOI: 10.1017/S0022112077001062. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 31.

BATCHELOR, G. *An introduction to fluid dynamics*. [S.l.]: Cambridge university press, 2000. Citado 5 vezes nas páginas 20, 31, 41, 67 e 68.

BATCHELOR, G. K.; GREEN, J. T. The determination of the bulk stress in a suspension of spherical particles to order c^2 . *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 56, n. 3, p. 401–427, 1972. DOI: 10.1017/S0022112072002435. Citado na página 20.

- BHAGAT, R. K. et al. Effects of ventilation on the indoor spread of covid-19. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 903, 2020. DOI: 10.1017/jfm.2020.720. Citado na página 23.
- BIRD, R. B. Transport phenomena. *Appl. Mech. Rev.*, v. 55, n. 1, p. R1–R4, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 31.
- BOUSSINESQ, J. *Essai sur la théorie des eaux courantes*. [S.l.]: Impr. nationale, 1877. Citado na página 67.
- CAPECELATRO, J.; DESJARDINS, O. An euler–lagrange strategy for simulating particle-laden flows. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 238, p. 1–31, 2013. DOI: 10.1016/j.jcp.2012.12.015. Citado 5 vezes nas páginas 26, 32, 45, 51 e 60.
- CATTA-PRETA, R. T. O.; SILVEIRA-NETO, A. Implementação, comparação e avaliação de modelos submalhas não lineares. Universidade Federal de Uberlândia, 2018. DOI: 10.14393/ufu.di.2018.1199. Citado 4 vezes nas páginas 29, 83, 84 e 95.
- CHONG, K. L. et al. Extended lifetime of respiratory droplets in a turbulent vapor puff and its implications on airborne disease transmission. *Physical review letters*, APS, v. 126, n. 3, p. 034502, 2021. DOI: 10.1103/PhysRevLett.126.034502. Citado na página 23.
- CLIFT, R.; GRACE, J. R.; WEBER, M. E. *Bubbles, drops, and particles*. [S.l.]: Courier Corporation, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 75.
- CROWE, C. *Multiphase Flow Handbook*. CRC Press, 2005. (Mechanical and Aerospace Engineering Series). ISBN 9781420040470. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=M0MrBgAAQBAJ>>. Citado 3 vezes nas páginas 27, 30 e 73.
- CROWE, C. T. et al. *Multiphase flows with droplets and particles*. [S.l.]: CRC press, 2011. Citado 4 vezes nas páginas 21, 27, 30 e 75.
- DAMASCENO, M. M. R. et al. Desenvolvimento de uma modelagem para escoamentos reativos em malhas adaptativas do tipo bloco-estruturada. Universidade Federal de Uberlândia, 2018. DOI: 10.14393/ufu.te.2018.771. Citado na página 83.
- DARMANA, D. On the multiscale modelling of hydrodynamics, mass transfer and chemical reactions in bubble columns. 2006. Citado na página 125.

- DEEN, N. G.; HJERTAGER, B. H.; SOLBERG, T. Comparison of piv and lda measurement methods applied to the gas-liquid flow in a bubble column. *10th international symposium on applications of laser techniques to fluid mechanics*, 2000. Citado 4 vezes nas páginas 8, 35, 36 e 95.
- DEEN, N. G.; SOLBERG, T.; HJERTAGER, B. H. Large eddy simulation of the gas-liquid flow in a square cross-sectioned bubble column. *Chemical engineering science*, Elsevier, v. 56, n. 21-22, p. 6341-6349, 2001. DOI: 10.1016/S0009-2509(01)00249-4. Citado 49 vezes nas páginas 9, 10, 11, 12, 13, 14, 17, 18, 36, 52, 53, 84, 95, 113, 114, 115, 118, 119, 120, 121, 125, 126, 127, 128, 129, 130, 131, 132, 134, 135, 137, 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 146, 147, 148, 149, 150, 151, 152, 153, 154 e 155.
- DENN, M. M.; MORRIS, J. F. Rheology of non-brownian suspensions. *Annual review of chemical and biomolecular engineering*, Annual Reviews, v. 5, p. 203-228, 2014. DOI: 10.1146/annurev-chembioeng-060713-040221. Citado na página 20.
- DREW, D. A. Mathematical modeling of two-phase flow. *Annual review of fluid mechanics*, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, 1983. Citado 9 vezes nas páginas 26, 30, 31, 38, 39, 44, 54, 55 e 59.
- DREW, D. A.; PASSMAN, S. L. *Theory of multicomponent fluids*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2006. v. 135. Citado 4 vezes nas páginas 30, 40, 57 e 74.
- EINSTEIN, A. A new determination of molecular dimensions. *Ann. Phys.*, v. 19, p. 289-306, 1906. Citado 4 vezes nas páginas 20, 30, 60 e 64.
- ELGHOBASHI, S.; TRUESDELL, G. Direct simulation of particle dispersion in a decaying isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 242, p. 655-700, 1992. DOI: 10.1017/S0022112092002532. Citado na página 74.
- EVARD, F.; DENNER, F.; WACHEM, B. van. A multi-scale approach to simulate atomisation processes. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, 2019. DOI: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2019.07.005. Citado 18 vezes nas páginas 26, 31, 32, 37, 45, 51, 52, 59, 73, 74, 76, 77, 79, 81, 83, 85, 113 e 124.
- GERMANO, M. et al. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A*, v. 3, n. 7, p. 1760-1765, 1991. DOI: 10.1063/1.857955. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/pofa/3/7/10.1063/1.857955>>. Citado 2 vezes nas páginas 95 e 140.

- GIBILARO, L. et al. On the apparent viscosity of a fluidized bed. *Chemical engineering science*, Elsevier, v. 62, n. 1-2, p. 294–300, 2007. DOI: 10.1016/j.ces.2006.08.030. Citado na página 60.
- GUTH, E. On the hydrodynamical theory of the viscosity of suspensions. *Phys. Rev*, v. 53, p. 322–325, 1938. Citado na página 20.
- HAMMOND, C. *The basics of crystallography and diffraction*. [S.l.]: International Union of Crystallography texts on crystallography, 2015. v. 21. Citado na página 77.
- HARLOW, F. H.; WELCH, J. E. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *The physics of fluids*, American Institute of Physics, v. 8, n. 12, p. 2182–2189, 1965. DOI: 10.1063/1.1761178. Citado na página 83.
- ISHII, M.; HIBIKI, T. *Thermo-fluid dynamics of two-phase flow*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2010. Citado 9 vezes nas páginas 20, 30, 31, 54, 60, 64, 65, 74 e 77.
- ISHII, M.; ZUBER, N. Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows. *AIChE journal*, Wiley Online Library, v. 25, n. 5, p. 843–855, 1979. DOI: 10.1002/aic.690250513. Citado 11 vezes nas páginas 26, 30, 32, 64, 73, 74, 77, 87, 125, 149 e 156.
- JAIN, D.; KUIPERS, J.; 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*, Elsevier, v. 119, p. 134–146, 2014. DOI: 10.1016/j.ces.2014.08.026. Citado 2 vezes nas páginas 96 e 124.
- KARNIADAKIS, G.; BESKOK, A.; ALURU, N. *Microflows and nanoflows: fundamentals and simulation*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2006. v. 29. Citado na página 27.
- KATRE, P. et al. Fluid dynamics of respiratory droplets in the context of covid-19: Airborne and surfaceborne transmissions. *Physics of Fluids*, AIP Publishing LLC, v. 33, n. 8, p. 081302, 2021. DOI: 10.1063/5.0063475. Citado na página 23.
- KRIEGER, I. M.; DOUGHERTY, T. J. A mechanism for non-newtonian flow in suspensions of rigid spheres. *Transactions of the Society of Rheology*, The Society of Rheology, v. 3, n. 1, p. 137–152, 1959. Citado na página 20.
- KUTZ, J. N. *Data-driven modeling & scientific computation: methods for complex systems & big data*. [S.l.]: Oxford University Press, 2013. Citado na página 33.

LANCE, M.; BATAILLE, J. Turbulence in the liquid phase of a uniform bubbly air–water flow. *Journal of fluid mechanics*, Cambridge University Press, v. 222, p. 95–118, 1991. DOI: 10.1017/S0022112091001015. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 61.

LANDAU, L.; LIFSHITZ, E. *Course of Theoretical Physics - Statistical Physics, Third Edition: Volume 5*. Elsevier Science, 2013. ISBN 9781483103372. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=LuBbAwAAQBAJ>>. Citado 2 vezes nas páginas 32 e 123.

LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. *Fluid Mechanics: Landau and Lifshitz: Course of Theoretical Physics, Volume 6*. [S.l.]: Elsevier, 2013. v. 6. Citado na página 31.

LIU, Z.; LI, B. Scale-adaptive analysis of euler-euler large eddy simulation for laboratory scale dispersed bubbly flows. *Chemical Engineering Journal*, Elsevier, v. 338, p. 465–477, 2018. DOI: 10.1016/j.cej.2018.01.051. Citado na página 115.

LOTH, E. et al. *13.1 Overview of Multiphase Modeling*. 2006. Citado 2 vezes nas páginas 26 e 29.

MA, T. et al. Scale-adaptive simulation of a square cross-sectional bubble column. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 131, p. 101–108, 2015. Citado na página 125.

MASOOD, R.; DELGADO, A. Numerical investigation of the interphase forces and turbulence closure in 3d square bubble columns. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 108, p. 154–168, 2014. DOI: 10.1016/j.ces.2014.01.004. Citado na página 125.

MASTEROV, M.; BALTUSSEN, M.; KUIPERS, J. Numerical simulation of a square bubble column using detached eddy simulation and euler–lagrange approach. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 107, p. 275–288, 2018. DOI: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2018.06.006. Citado na página 124.

MESSA, G. V. et al. Computational fluid dynamics modelling of liquid–solid slurry flows in pipelines: State-of-the-art and future perspectives. *Processes*, MDPI, v. 9, n. 9, p. 1566, 2021. DOI: 10.3390/pr9091566. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 28.

MICHAELIDES, E. E.; FENG, Z. Heat transfer from a rigid sphere in a nonuniform flow and temperature field. *International journal of heat and mass transfer*, Elsevier, v. 37, n. 14, p. 2069–2076, 1994. DOI: 10.1016/0017-9310(94)90308-5. Citado na página 75.

MITTAL, R.; NI, R.; SEO, J.-H. The flow physics of covid-19. *Journal of fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 894, 2020. DOI: 10.1017/jfm.2020.330. Citado na página 23.

MONIN, A.; YAGLOM, A. *Statistical Fluid Mechanics, Volume II: Mechanics of Turbulence*. Dover Publications, 2013. (Dover Books on Physics). ISBN 9780486318141. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=6xPEAgAAQBAJ>>. Citado na página 32.

MONIN, A. S.; YAGLOM, A. *Statistical fluid mechanics, Volume I*. [S.l.]: Dover Publications, 2007. Citado na página 32.

MORAN, M. J. et al. *Fundamentals of engineering thermodynamics*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2010. Citado na página 23.

MORAN, M. J. et al. *Introduction to thermal systems engineering: thermodynamics, fluid mechanics, and heat transfer*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2002. Citado na página 23.

NIČENO, B.; DHOTRE, M.; DEEN, N. One-equation sub-grid scale (sgs) modelling for euler–euler large eddy simulation (eees) of dispersed bubbly flow. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 63, n. 15, p. 3923–3931, 2008. DOI: 10.1016/j.ces.2008.04.050. Citado na página 125.

PITAEVSKII, L.; LIFSHITZ, E.; SYKES, J. *Course of Theoretical Physics: Physical Kinetics*. Elsevier Science, 2017. (COURSE OF THEORETICAL PHYSICS). ISBN 9781483285412. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=uq-cDAAAQBAJ>>. Citado na página 32.

REIF, F. *Fundamentals of statistical and thermal physics*. [S.l.]: Waveland Press, 2009. Citado na página 32.

ROSCOE, R. The viscosity of suspensions of rigid spheres. *British journal of applied physics*, IOP Publishing, v. 3, n. 8, p. 267, 1952. DOI: 10.1088/0508-3443/3/8/306. Citado na página 65.

ROSTI, M. E.; BRANDT, L.; MITRA, D. Rheology of suspensions of viscoelastic spheres: deformability as an effective volume fraction. *Physical Review Fluids*, APS, v. 3, n. 1, p. 012301, 2018. DOI: 10.1103/PhysRevFluids.3.012301. Citado na página 20.

SAGAUT, P. Large eddy simulation for incompressible flows: an introduction. 2006. Citado 2 vezes nas páginas 54 e 123.

- SATO, Y.; SADATOMI, M.; SEKOGUCHI, K. Momentum and heat transfer in two-phase bubble flow—i. theory. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 7, n. 2, p. 167–177, 1981. Citado na página 61.
- SATO, Y.; SADATOMI, M.; SEKOGUCHI, K. Momentum and heat transfer in two-phase bubble flow—ii. a comparison between experimental data and theoretical calculations. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 7, n. 2, p. 179–190, 1981. DOI: 10.1016/0301-9322(81)90004-5. Citado na página 61.
- SATO, Y.; SEKOGUCHI, K. Liquid velocity distribution in two-phase bubble flow. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 2, n. 1, p. 79–95, 1975. DOI: 10.1016/0301-9322(75)90030-0. Citado 3 vezes nas páginas 53, 61 e 125.
- SCHMITT, F. G. About boussinesq's turbulent viscosity hypothesis: historical remarks and a direct evaluation of its validity. *Comptes Rendus Mécanique*, Elsevier, v. 335, n. 9-10, p. 617–627, 2007. DOI: 10.1016/j.crme.2007.08.004. Citado na página 67.
- SCOPATZ, A.; HUFF, K. D. *Effective computation in physics: Field guide to research with python*. [S.l.]: "O'Reilly Media, Inc.", 2015. Citado na página 33.
- SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations: I. the basic experiment. *Monthly weather review*, v. 91, n. 3, p. 99–164, 1963. DOI: 10.1175/1520-0493(1963)091<0099:GCEWTP>2.3.CO;2. Citado 2 vezes nas páginas 66 e 95.
- SOMMERFELD, M. Numerical methods for dispersed multiphase flows. In: . [S.l.]: Springer, 2017. p. 327–396. DOI: 10.1007/978-3-319-60282-0_6. Citado 2 vezes nas páginas 26 e 27.
- STOKES, G. On the theories of the internal friction of fluids in motion, and of the equilibrium and motion of pendulums. *Trans. Camb. Phil. Soc*, 1845. Citado na página 67.
- SUSSMAN, M.; SMEREKA, P.; OSHER, S. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational physics*, Elsevier, v. 114, n. 1, p. 146–159, 1994. DOI: 10.1006/jcph.1994.1155. Citado na página 96.
- TREVELYAN, B.; MASON, S. Particle motions in sheared suspensions. i. rotations. *Journal of Colloid Science*, Elsevier, v. 6, n. 4, p. 354–367, 1951. DOI: 10.1016/0095-8522(51)90005-0. Citado na página 20.

TRYGGVASON, G.; SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. *Direct numerical simulations of gas–liquid multiphase flows*. [S.l.]: Cambridge university press, 2011. Citado na página 30.

VAND, V. Viscosity of solutions and suspensions. i. theory. *The Journal of Physical Chemistry*, ACS Publications, v. 52, n. 2, p. 277–299, 1948. DOI: 10.1021/j150458a001. Citado na página 20.

VILLAR, M. *Análise numérica detalhada de escoamentos multifásicos bidimensionais*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 84.

VILLAR, M. M. et al. *Análise numérica detalhada de escoamentos multifásicos bidimensionais*. Universidade Federal de Uberlândia, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 83 e 84.

WILLIAMS, F. A. *Combustion theory*. [S.l.]: CRC Press, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 70.

ZHANG, D.; DEEN, N.; KUIPERS, J. Numerical simulation of the dynamic flow behavior in a bubble column: a study of closures for turbulence and interface forces. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 61, n. 23, p. 7593–7608, 2006. DOI: 10.1016/j.ces.2006.08.053. Citado 3 vezes nas páginas 18, 152 e 156.

ZUO, Y. Y.; USPAL, W. E.; WEI, T. Airborne transmission of covid-19: aerosol dispersion, lung deposition, and virus-receptor interactions. *ACS nano*, ACS Publications, v. 14, n. 12, p. 16502–16524, 2020. DOI: 10.1021/acsnano.0c08484. Citado na página 23.

Apêndices

.1 Deduções das equações

.1.1 Dedução da equação 3.31

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i) &= \left\langle \rho(u_i - v_i) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right\rangle \\
&= \int_{\Omega_\infty} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \left([\rho(u_i - v_i)] \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right) d^3 \mathbf{y} \\
&= - \int_{\Omega_\infty} \chi^k \frac{\partial}{\partial x_i} (g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) [\rho(u_i - v_i)]) d^3 \mathbf{y} \\
&= - \int_{\Omega^k} \frac{\partial}{\partial x_i} (g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) [\rho^k(u_i - v_i)^k]) d^3 \mathbf{y} \\
&= - \int_{\partial \Omega^k} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho^k(u_i - v_i)^k n_i d^2 \mathbf{y} \\
&= -\Gamma,
\end{aligned} \tag{1}$$

.1.2 Dedução da equação 3.38

$$\begin{aligned}
\left\langle \sigma_{ij} \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle &= \left\langle (-p \delta_{ij} + \tau_{ij}) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle \\
&= \left\langle (-p \delta_{ij} + p_s \delta_{ij} - p_s \delta_{ij} + \tau_{ij}) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle \\
&= \left\langle [(p_s - p) \delta_{ij} - p_s \delta_{ij} + \tau_{ij}] \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle \\
&= -p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} + \left\langle [(p_s - p) \delta_{ij} + \tau_{ij}] \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle \\
&= -p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} + \int_{\Omega_\infty} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \left([(p_s - p) \delta_{ij} + \tau_{ij}] \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right) d^3 \mathbf{y} \\
&= -p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} - \int_{\Omega_\infty} \chi^k \frac{\partial}{\partial x_j} (g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) [(p_s - p) \delta_{ij} + \tau_{ij}]) d^3 \mathbf{y} \\
&= -p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} - \int_{\Omega^k} \frac{\partial}{\partial x_j} (g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) [(p_s - p) \delta_{ij} + \tau_{ij}]^k) d^3 \mathbf{y} \\
&= -p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} - \int_{\partial \Omega^k} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) [(p_s - p) \delta_{ij} + \tau_{ij}]^k n_j d^2 \mathbf{y}.
\end{aligned} \tag{2}$$

.1.3 Dedução da equação 3.39

$$\begin{aligned}
\left\langle u_i \rho (u_j - v_j) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right\rangle &= \int_{\Omega_\infty} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \left(u_i \rho (u_j - v_j) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_j} \right) d^3 \mathbf{y} \\
&= - \int_{\Omega_\infty} \chi^k \frac{\partial}{\partial x_j} (g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) u_i \rho (u_j - v_j)) d^3 \mathbf{y} \\
&= - \int_{\Omega^k} \frac{\partial}{\partial x_j} (g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) u_i^k \rho^k (u_j - v_j)^k) d^3 \mathbf{y} \quad (3) \\
&= - \int_{\partial \Omega^k} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) u_i^k \rho^k (u_j - v_j)^k n_j d^2 \mathbf{y} \\
&= - u_{s,i} \int_{\partial \Omega^k} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho^k (u_j - v_j)^k n_j d^2 \mathbf{y} \\
&= - u_{s,i} \Gamma.
\end{aligned}$$

.1.4 Dedução da equação 3.40

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i u_j) &= \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\sigma}_{ij}) + p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} + M_i^d - u_{s,i} \Gamma \\
&= - \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon^k \tilde{p}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\tau}_{ij}) + p_s \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} + M_i^d - u_{s,i} \Gamma \\
&= - \varepsilon^k \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\tau}_{ij}) + (p_s - \tilde{p}) \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial x_i} + M_i^d - u_{s,i} \Gamma \quad (4)
\end{aligned}$$

.1.5 Dedução da equação 3.62

$$\begin{aligned}
\chi^k \frac{\partial}{\partial t} (\rho c_p T) + \chi^k \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho c_p u_i T) &= \chi^k RHS \\
\chi^k \frac{\partial}{\partial t} (\rho c_p T) + \chi^k \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho c_p u_i T) + \rho c_p T \left(\frac{\partial \chi^k}{\partial t} + v_i \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right) &= \chi^k RHS \quad (5) \\
\frac{\partial}{\partial t} (\chi^k \rho c_p T) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\chi^k \rho c_p u_i T) + \rho c_p T v_i \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} &= \rho c_p T u_i \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} + \chi^k RHS \\
\frac{\partial}{\partial t} (\chi^k \rho c_p T) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\chi^k \rho c_p u_i T) &= \rho c_p T (u_i - v_i) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} + \chi^k RHS.
\end{aligned}$$

.1.6 Dedução da equação 3.65

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \chi^k \rho c_p T \rangle + \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \chi^k \rho c_p u_i T \rangle &= \left\langle \rho c_p T (u_i - v_i) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right\rangle + \langle \chi^k RHS \rangle \\ \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \overline{c_p T}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \overline{c_p u_i T}) &= \left\langle \rho c_p T (u_i - v_i) \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right\rangle + \langle \chi^k RHS \rangle, \end{aligned} \quad (6)$$

onde

$$\begin{aligned} \langle \chi^k RHS \rangle &= \left\langle \chi^k \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \beta T \chi^k \frac{DP}{Dt} + \chi^k \Phi + \chi^k \kappa S_{ii}^2 \right\rangle \\ &= \left\langle \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K \frac{\partial T}{\partial x_i} \chi^k \right) - K \frac{\partial T}{\partial x_i} \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} + \beta T \chi^k \frac{DP}{Dt} + \chi^k \Phi + \chi^k \kappa S_{ii}^2 \right\rangle \\ &= \left\langle \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K \frac{\partial T}{\partial x_i} \chi^k \right) \right\rangle - \left\langle K \frac{\partial T}{\partial x_i} \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right\rangle + \left\langle \beta T \frac{D(\chi^k P)}{Dt} \right\rangle + \langle \chi^k \Phi \rangle + \langle \chi^k \kappa S_{ii}^2 \rangle \\ &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon^k \tilde{K} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \right) + \varepsilon^k \tilde{\Phi} + \varepsilon^k \tilde{\kappa} S_{ii}^2 + \left\langle \beta T \frac{D(\chi^k P)}{Dt} \right\rangle - \left\langle K \frac{\partial T}{\partial x_i} \frac{\partial \chi^k}{\partial x_i} \right\rangle \\ &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon^k \tilde{K} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \right) + \varepsilon^k \tilde{\Phi} + \varepsilon^k \tilde{\kappa} S_{ii}^2 + \left\langle \beta T \frac{D(\chi^k P)}{Dt} \right\rangle + \int_{\partial \Omega^k} K \frac{\partial T}{\partial x_i} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) n_i d^2 \mathbf{y}. \end{aligned} \quad (7)$$

Então,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \overline{c_p T}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \overline{c_p u_i T}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon^k \tilde{K} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \right) + \varepsilon^k \tilde{\Phi} + \varepsilon^k \tilde{\kappa} S_{ii}^2 + \\ &+ \left\langle \beta T \frac{D(\chi^k P)}{Dt} \right\rangle + \int_{\partial \Omega^k} K \frac{\partial T}{\partial x_i} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) n_i d^2 \mathbf{y} - (c_p T)_s \Gamma, \end{aligned} \quad (8)$$

onde $(c_p T)_s$ é o valor médio do cálculo na interface e $\Gamma = \int_{\partial \Omega^k} g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho^k (u_j - v_j)^k n_j d^2 \mathbf{y}$.

.1.7 Dedução da equação 3.80

$$\begin{aligned}
F_{D,i} &= 3\pi d_p \mu_m (u_i - v_i) \frac{R_{ep} C_D}{24} \\
\frac{F_{D,i}}{m_p} &= \frac{3\pi}{m_p} d_p \mu_m (u_i - v_i) \frac{R_{ep} C_D}{24} \\
&= \frac{3\pi}{\rho_p V_p} d_p \mu_m (u_i - v_i) \frac{R_{ep} C_D}{24} \\
&= \frac{18\mu_m}{\rho_p d_p^2} (u_i - v_i) \frac{R_{ep} C_D}{24} \\
&= \frac{(u_i - v_i)}{\tau_p} \frac{R_{ep} C_D}{24},
\end{aligned} \tag{9}$$

.1.8 Dedução da equação 3.82

$$\begin{aligned}
m_p c_p \frac{dT}{dt} &= Nu_c \pi K^k d_p (T^k - T_d) \\
\frac{dT}{dt} &= \frac{6Nu_c \pi K^k d_p}{\rho_p \pi d_p^3 c_p} (T^k - T_d) \\
&= \frac{12K^k}{\rho_p c_p d_p^2} (T^k - T_d) \frac{Nu_c}{2} \\
&= \frac{(T^k - T_d)}{\tau_p} \frac{Nu_c}{2}
\end{aligned} \tag{10}$$

.1.9 Dedução da equação 3.32

Para $\frac{D\tilde{\rho}^k}{Dt} = 0$, nós temos:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i) &= -\Gamma \\
 \varepsilon^k \left(\frac{\partial \tilde{\rho}^k}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \tilde{\rho}^k}{\partial x_i} \right) + \tilde{\rho}^k \left(\frac{\partial \varepsilon^k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon^k \bar{u}_i) \right) &= -\Gamma \\
 \varepsilon^k \frac{D\tilde{\rho}^k}{Dt} + \tilde{\rho}^k \left(\frac{\partial \varepsilon^k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon^k \bar{u}_i) \right) &= -\Gamma \tag{11} \\
 \frac{\partial \varepsilon^k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon^k \bar{u}_i) &= -\frac{\Gamma}{\tilde{\rho}^k} \\
 \frac{D\varepsilon^k}{Dt} + \varepsilon^k \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} &= -\frac{\Gamma}{\tilde{\rho}^k}
 \end{aligned}$$