

Ricardo Vicente de Paula Rezende

**MODELO DE FECHAMENTO PARA O TENSOR DE INTERFACE
NO MODELO DE DOIS FLUIDOS:
MODELAGEM MATEMÁTICA E SIMULAÇÃO NUMÉRICA**

Tese de Doutorado submetida ao
Programa de Pós-graduação em
Engenharia Química da
Universidade Federal de Santa
Catarina para a obtenção do Grau
Doutor em Engenharia Química.

Orientadora: Prof^a. Dr^a. Selene
Maria de Arruda Guelli Ulson de
Souza

Coorientador: Prof. Dr. Antônio
Augusto Ulson de Souza

Florianópolis
2014

Rezende, Ricardo Vicente de Paula, 1977 -

Modelo de fechamento para o Tensor de Interface no Modelo de Dois Fluidos: Modelagem Matemática e Simulação Numérica / Ricardo Vicente de Paula Rezende; orientador, Selene Maria de Arruda Guelli Ulson de Souza; coorientador, Antônio Augusto Ulson de Souza. - Florianópolis, SC, 2014.

xxxvi, 255 p.: il. color; 21 cm

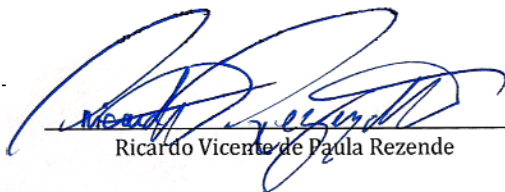
Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química.

Inclui referências

1. Engenharia Química. 2. Modelo de Dois Fluidos. 3. Escoamento Multifásico. 4. Modelagem Matemática. 5. Fluidodinâmica Computacional. I. Ulson de Souza, Selene Maria de Arruda Guelli. II. Ulson de Souza, Antônio Augusto. III. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química. IV. Título.

Autorizo apenas para fins acadêmicos e/ou científicos a reprodução total ou parcial desta Tese desde que citada a fonte.

One authorizes only for academic and/or scientific purposes the reproduction in whole or part of this thesis since cited the source.



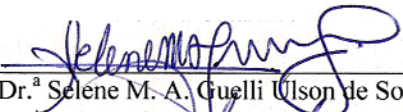
Ricardo Vicente de Paula Rezende

Modelo de Fechamento para o Tensor de Interface no Modelo de Dois Fluidos: Modelagem Matemática e Simulação Numérica

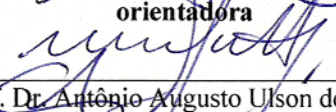
por

Ricardo Vicente de Paula Rezende

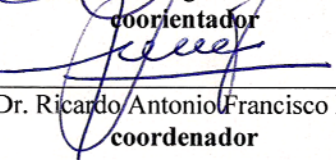
Tese julgada para obtenção do título de **Doutor em Engenharia Química**, área de Concentração de **Desenvolvimento de Processos Químicos e Biotecnológicos** e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pos-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Santa Catarina.



Prof.^a Dr.^a Selene M. A. Guelli Ulson de Souza
orientadora



Prof. Dr. Antônio Augusto Ulson de Souza
coorientador



Prof. Dr. Ricardo Antonio Francisco Machado
coordenador

Banca Examinadora:




Prof. Dr. Marinho Bastos Quadri



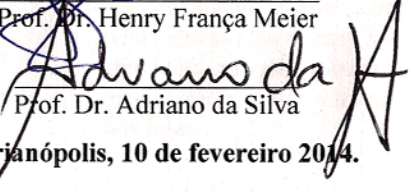
Prof. Dr. José Vladimir de Oliveira



Prof. Dr. Jader Riso Barbosa Junior



Prof. Dr. Henry França Meier



Prof. Dr. Adriano da Silva

Florianópolis, 10 de fevereiro 2014.

Dedico este trabalho a todos que de alguma forma fazem parte ou passaram pela minha vida e, com suas experiências, erros ou acertos, ajudaram a moldar o meu caráter, e a me tornar o homem que sou hoje.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus, por me fazer sempre querer saber mais sobre o que Ele fez quando o nada era o tudo.

Agradeço aos meus orientadores Professora Selene M. A. Guelli Ulson de Souza e ao Professor Antônio Augusto Ulson de Souza, por me apoiarem, e sempre estarem dispostos a me encaminhar na minha carreira, e principalmente à Professora Selene, a quem devo a paixão pelo campo que escolhi atuar.

Agradeço à Regiani Almeida, minha companheira, por ver em mim mais do que eu mesmo posso ver, por estar sempre comigo haja o que houver, e por me amar mesmo nos momentos difíceis e me mostrar a luz e o caminho apenas com um sorriso, eu te amo!

À Josi Américo, minha irmã, minha amiga, um motivo de alegria que sempre me faz sorrir.

À Liz Michels, por seu carinho amizade e admiração. Minha amiga confiante que adoro.

À Elaine, que sempre esteve do meu lado e me apoiou naquilo que lhe foi capaz e me ajudou a chegar até aqui. Você sempre esta comigo.

Aos meus amigos que fazem da minha vida uma diversão: Adriana da Luz, Anne Caroline, Ana Teresa, Angela Sakamoto, Cleuzir da Luz, Carol Calseveriano, Cátia Lange, Denival Américo, Eniz Mazzuco, Erasmo Mancusi, Eduardo LeCrêt, Flávia Reitz, Ivan Georg, Ieda Maria, Josiane Mello, Janaína Andreazza, Josi Américo, Liz Michaels, Lucile Peruzzo, Luciana Pereira, Lucimar Ladewig, Margareth Fröelich, e Valdirene dos Santos, só citando alguns. Perdoem-me os demais, vocês felizmente são muitos.

Agradeço a todos que encontrei no caminho.

Quanto mais aprendo sobre o Universo que me encanta desde a tenra infância, mais me dou conta de o quanto sou pequeno e insignificante, e, ao mesmo tempo, fico maravilhado em como um simples grão de poeira pode ser capaz de desvendar as leis da essência da Criação.

RESUMO

O tema central desta tese é a proposição de modelos de fechamento para a densidade de força interfacial necessária à solução do modelo de dois fluidos empregado amplamente na descrição de escoamentos multifásicos. Os modelos de fechamento empregados até então fazem uso da decomposição dos diversos fenômenos que ocorrem na interação das fases como o arrasto, tração, desenvolvimento de camadas limites hidrodinâmicas, gradientes adversos de pressão e vorticidade, possuindo cada um sua própria descrição matemática e correlações para seus respectivos parâmetros empíricos. Estes últimos são dependentes de uma série de números adimensionais, entre eles o Número de Reynolds, Eötvos e Morton, sendo estes os principais. As correlações geralmente são dependentes do regime e do grau de interação das fases, bem como da sua dispersão ou não no seio fluido do escoamento. Esta descrição particular e as diversas correlações criam novas formas de se resolver problemas até então mal resolvidos e/ou mesmo sem solução; contudo, elas não são genéricas e sua aplicabilidade fora dos limites em que foram calibradas deve ser bem avaliada e nem sempre os resultados após um longo tempo de tentativas e erros são satisfatórios. O presente trabalho trata de forma diferenciada o problema de fechamento da densidade de força interfacial modelando como o tensor tensão atua sobre a interface de uma forma global, sem separar os efeitos categorizando-os nos tipos supracitados, e, ao invés de um somatório de efeitos e o uso de uma série de correlações, deve-se apenas responder à questão de como descrever matematicamente o tensor sobre a interface, e deixar ao cargo do próprio escoamento “decidir” que forças atuam sobre a interface dos fluidos. A metodologia aqui proposta é descrita em seus pormenores físicos e matemáticos e alguns casos de teste, “benchmarks” numéricos, são escolhidos para o seu emprego. O modelo foi implementado no simulador comercial ANSYS CFX. Os resultados obtidos demonstraram a eficácia da abordagem em problemas onde a interface é bem definida, como os de superfície livre, mesmo com mudança local de morfologia, sem, todavia, apresentar o mesmo desempenho em escoamentos dispersos e com baixas frações volumétricas. Não obstante, a atuação conjunta de ambas as abordagens (a clássica e a proposta) neste último caso, mostrou-se muito eficiente na captura do comportamento físico de um problema complexo como uma coluna de bolhas.

Palavras Chave: Modelo de Dois Fluidos, Escoamentos Multifásicos, Modelagem Matemática, Fluidodinâmica Computacional, Modelo de Fechamento.

ABSTRACT

The focus of this work is to propose a model for the closure problem of the interfacial force density required for solution of the two-fluid model widely used in the description of multiphase flows. The closure models employed so far do use of the decomposition of the various phenomena that occur in the interaction among the phases as drag, drift, the development of hydrodynamic boundary layers, adverse pressure gradients and vorticity forces as Lift and Magnus force, just to name a few. Each one has its own mathematics description and correlations to calculate its coefficients for their respective settings. The latter are dependent on a series of dimensionless numbers as Reynolds number, and Morton, Eötvös, these being the principal. Generally, the correlations are dependent upon the system and degree of interaction of the phases as well as their dispersion within the fluid flow. This particular description and the wide range of correlations create new ways of solving problems so far unsolved and/or even unsolved, however, they are not generic and its applicability beyond the limits that were calibrated is an approach that must be evaluated and not always the results, after a long time of trial and error, are satisfactory. The work aims to deal with the closure problem of interfacial force density in a distinct way, modeling how the stress tensor acts on the interface without separating the effects categorizing them on the types mentioned above, and, let the flow itself "takes a decision" that forces act on the interface of fluids. The proposed methodology is detailed described in their physical and mathematical aspects and some benchmarks are chosen to do that. The coding has been made in the commercial code ANSYS CFX. The results demonstrate the effectiveness of the approach to problems where the interface is well defined, such as free surface flows, even with local change of morphology, without, however, to present the same performance in dispersed flow with low void fractions. Nevertheless, the joint action of both approaches (the classical and the proposal) in the latter case has proved to be very efficient in capturing the physical behavior of a complex flow as a bubble column.

Key-words: Two-Fluid Model, Multiphase Flow, Mathematical Modeling, Computational Fluid Dynamics, Closure Model.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1. EXEMPLOS DE MORFOLOGIAS DA INTERFACE QUE SEPARA DUAS FASES EM SISTEMAS MULTIFÁSICOS.....	3
FIGURA 2. ALGUNS PADRÕES DE ESCOAMENTO GÁS-LÍQUIDO EM ENCONTRADOS DUTOS VERTICAIS.....	4
FIGURA 3. EXEMPLO DE ESCOAMENTO COM SUPERFÍCIE LIVRE EM TORNO DE UM OBSTÁCULO. FONTE: HTTP://WWW.TAFSM.ORG/PROJ/FSF/CYLFLOW.HTML	5
FIGURA 4. GRÁFICO DO NÚCLEO DE INTERPOLAÇÃO BIDIMENSIONAL DE W_{AB} DADO NA EQUAÇÃO (5) CONSIDERANDO $h=1$ E A PARTÍCULA CENTRADA EM $(0,0)$	16
FIGURA 5. CONTORNOS NA FUNÇÃO LEVEL SET PARA UMA GOTA GRANDE. EM (A) TEM-SE O RESULTADO COM A ROTINA REINICIALIZAÇÃO, E EM (B) O RESULTADO SEM ELA. FONTE: SUSSMAN, SMEREKA E OSHER (1994).....	18
FIGURA 6. VISTA ESQUEMÁTICA DA MALHA CARTESIANA IMPOSTA A UM DOMÍNIO FLUIDO COM FORMA ELIPSOIDAL, E OS PONTOS MARCADORES QUE REPRESENTAM A FRONTEIRA DO DOMÍNIO. APAPTADO DE JI, LIEN E YEE (2009).....	21
FIGURA 7. RECONSTRUÇÃO BEZIER DE UMA FRONTEIRA MÓVEL. APADTADO DE JI, LIEN E YEE (2009)	21
FIGURA 8. PROBLEMA DO ROMPIMENTO DE BARREIRA RESOLVIDO PELO MÉTODO CUT-CELL. EM (A) E (B) TEM-SE A COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS NUMÉRICOS DE CHUNG (2013) COM OS RESULTADOS EXPERIMENTAIS DE MARTIN E MOYCE (1952). À ESQUERDA, O COMPORTAMENTO DA MALHA COM A MOVIMENTAÇÃO DA INTERFACE.....	22
FIGURA 9. IMPACTO DE UM CILINDRO SÓLIDO SOBRE UMA SUPERFÍCIE QUIESCENTE. EM CORES, A COMPONENTE NORMAL AO PLANO DO CAMPO DE VORTICIDADE (CHUNG, 2013).	23
FIGURA 10. ILUSTRAÇÃO DO COMPORTAMENTO DE PARTÍCULAS E DE COMO SUAS TRAJETÓRIAS SÃO INFLUENCIADAS FRENTE A DIFERENTE NÚMEROS DE STOKES.	32
FIGURA 11. APROXIMAÇÃO NUMÉRICA DA INTEGRAL DE $f(x)$	34
FIGURA 12. APROXIMAÇÃO NUMÉRICA DA INTEGRAL DE $f(x)$ APLICANDO UM POLINÔMIO INTERPOLADOR.	35
FIGURA 13. MODELO MUSIG PADRÃO OU HOMOGÊNEO. UM ÚNICO GRUPO DE VELOCIDADE É DIVIDIDO EM CLASSES DE TAMANHOS (KREPPER <i>ET AL.</i> , 2008).	39

FIGURA 14. MODELO MUSIG NÃO HOMOGÊNIO COM OS SUBGRUPOS DE VELOCIDADE (KREPPER <i>ET AL.</i> , 2008).	39
FIGURA 15. DIAGRAMA DE REGIMES DE FORMA DE BOLHAS (THOMAS E ZHANG, 2001).	42
FIGURA 16. MALHA MULTIBLOCOS CARTESIANA, E A MALHA TRIANGULAR NÃO ESTRUTURADA DA SUPERFÍCIE DA BOLHA.....	42
FIGURA 17. REFINO ADAPTATIVO LOCAL DA MALHA CARTESIANA ENTORNO DA MALHA SUPERFICIAL MOSTRANDO OS ESTÁGIOS DOS NÍVEIS DE REFINAMENTO.	43
FIGURA 18. DETALHE DO PASSO DE REFINAMENTO DA MALHA DA INTERFACE. (A) SEM REFINAMENTO ADAPTATIVO, (B) COM REFINAMENTO ADAPTATIVO.	45
FIGURA 19. REDE HEXAGONAL SUAS PARTÍCULAS E DIREÇÕES DE PROPAGAÇÃO. SANTOS (2000).	46
FIGURA 20. EVOLUÇÃO DO PROCESSO DE COALESCÊNCIA PELO MÉTODO LATTICE BOLTZMANN, (SANTOS, 2000).	49
FIGURA 21. CAMPO DE VELOCIDADE EM TORNO DE UMA CÁPSULA DEFORMADA, (SUI ET AL. 2010).	50
FIGURA 22 GRÁFICO COMPARATIVO NUMÉRICO- EXPERIMENTAL DA SIMULAÇÃO DE UMA BOLHA ASCENDENTE.	52
FIGURA 23. VELOCIDADE TERMINAL E VARIAÇÃO DA FORÇA DE ARRASTO COM A FORMA DA BOLHA (REZENDE, GEORG E MALISKA, 2008).	54
FIGURA 24. VOLUME DE CONTROLE CONTENDO DUAS FASES IMISCÍVEIS E SEPARADOS PELA INTERFACE.....	60
FIGURA 25. EXEMPLO DE COMO O VOLUME MATERIAL PODE APRESENTAR VELOCIDADES COM MAGNITUDES E DIREÇÕES DISTINTAS NA INTERFACE E NO SEU BARICENTRO, RESULTANDO NA DEFORMAÇÃO DESTES VOLUME.	62
FIGURA 26. EXEMPLO DE CONJUNTO COMPACTO REAL EM UMA DIMENSÃO.	64
FIGURA 27. EXEMPLOS DE CONJUNTOS COMPACTOS EM DUAS (A) E TRÊS (B) DIMENSÕES. A INTERSECÇÃO Λ ESTÁ SEMPRE DELIMITADA E CONTIDA DENTRO DA UNIÃO DOS CONJUNTOS ABERTOS λ_i	66
FIGURA 28. GRÁFICO DA FUNÇÃO TESTE DADA PELA EQUAÇÃO (69).	67
FIGURA 29. ESPAÇAMENTO DE MALHA E ESPESSURA DE INTERFACE NO MODELO DE FORÇA CONTÍNUA.	88
FIGURA 30. ESCOAMENTO LENTO ENTORNO DE UMA ESFERA ILUSTRANDO O BALANCEAMENTO ENTRE A FORÇA DE ARRASTO F_D E A FORÇA GRAVITACIONAL F_G	90
FIGURA 31. EVOLUÇÃO TEMPORAL DAS FORÇAS SOBRE UMA PARTÍCULA DE PÓLEN. A CURVA MAIS ABAIXO REPRESENTA A FORÇA DE BASSET E O DETALHE APRESENTA A CONTRIBUIÇÃO DA MASSA VIRTUAL, IMPORTANTE NOS	

PRIMEIROS INSTANTES DE ACELERAÇÃO DA PARTÍCULA (ISHII E HIBIKI, 2006).....	93
FIGURA 32. EXEMPLO DE DESENVOLVIMENTO DE CAMADA LIMITE SOBRE UMA PARTÍCULA QUE ARRASTA PARTE DO FLUIDO QUE A CIRCUNDA.....	94
FIGURA 33. DECOMPOSIÇÃO DOS PERÍODOS DE ACELERAÇÃO PARA UMA PARTÍCULA SUJEITA À FORÇA DE BASSET.....	96
FIGURA 34. ILUSTRAÇÃO DO CONCEITO DE MASSA ADICIONADA OU MASSA VIRTUAL.	98
FIGURA 35. EXEMPLOS DE SISTEMAS MASSA-MOLA COM MASSAS DIFERENTE. A MASSA MENOR APRESENTA FREQUÊNCIA MAIOR E UM AMORTECIMENTO MAIS RÁPIDO QUE O MESMO SISTEMA COM O DOBRO DE MASSA.	99
FIGURA 36. RAZÃO ENTRE AS FORÇAS EM FUNÇÃO DA DISTÂNCIA ENTRE BOLHAS. AS DEMAIS FORÇAS PERDEM IMPORTÂNCIA À MEDIDA QUE A SEPARAÇÃO AUMENTA ENQUANTO A DE ARRASTO SE TORNA DOMINANTE (PASSMAN, 1989).....	100
FIGURA 37. RESULTADO DA EQUAÇÃO(179) PARA O COEFICIENTE DE A ARRASTO.	103
FIGURA 38. COMPOSIÇÃO DE FORÇAS DE SUSTENTAÇÃO E ARRASTO EM UMA PARTÍCULA ESFÉRICA SENDO ARRASTADA POR UM FLUIDO.	107
FIGURA 39. POSIÇÃO RELATIVA DOS VETORES DE FORÇA DE SUSTENTAÇÃO, VORTICIDADE E VELOCIDADE RELATIVA PRESENTES NA EQUAÇÃO (193).	108
FIGURA 40. FORÇA DE SUSTENTAÇÃO AGINDO SOBRE PARTÍCULAS JUNTO À PAREDE DEVIDO AO GRADIENTE DE VELOCIDADE NORMAL A ESTA E O CONSEQUENTE ESCOAMENTO ROTACIONAL NESTA REGIÃO.	108
FIGURA 41. MUDANÇA DE SISTEMA DE REFERÊNCIA.	115
FIGURA 42. REPRESENTAÇÃO DAS FORÇAS SOBRE A INTERFACE CONSIDERANDO AS PROJEÇÕES DOS TENSORES DE AMBAS AS FASES NAS DIREÇÕES NORMAIS E A FORÇA DE TRAÇÃO NA SUPERFÍCIE.....	123
FIGURA 43. DIAGRAMA DAS PRINCIPAIS DIFERENÇAS DOS MÉTODOS NUMÉRICOS. ADAPTADO DE CORDAZZO (2006).....	134
FIGURA 44. REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DA DISCRETIZAÇÃO E DA CONSISTÊNCIA DE UM MÉTODO NUMÉRICO.	135
FIGURA 45. EXEMPLO BIDIMENSIONAL DA DISCRETIZAÇÃO DE UM DOMÍNIO E OS ESQUEMAS DE MONTAGEM DOS VOLUMES DE CONTROLE.	136
FIGURA 46. BALANÇO DE UMA GRANDEZA QUALQUER EM UM VOLUME DE CONTROLE.	137
FIGURA 47. ACIMA: EXEMPLO DE MONTAGEM DO VOLUME DE CONTROLE A PARTIR DE ELEMENTOS TRIANGULARES E QUADRANGULAR; ABAIXO E À ESQUERDA: DETALHE DO VOLUME DE CONTROLE RESULTANTE; ABAIXO E À DIREITA: DETALHE DE UM ELEMENTO QUADRANGULAR MOSTRANDO SEUS PONTOS DE INTEGRAÇÃO, NÓS E SUBVOLUMES DE CONTROLE.....	138

FIGURA 48. REPRESENTAÇÃO DO ELEMENTO HEXAÉDRICO USADO NESTE TRABALHO, BEM COMO A ENUMERAÇÃO DOS SEUS NÓS DENTRO DO SISTEMA DE REFERÊNCIA LOCAL ONDE s , t E u VARIAM DE 0 ATÉ 1.....	142
FIGURA 49. EXEMPLO DA AGLOMERAÇÃO APLICADA A UMA MALHA INICIALMENTE REFINADA.....	150
FIGURA 50. COMPORTAMENTO DA FUNÇÃO DE TRANSIÇÃO PARA VÁRIOS ESPESSURAS DE TRANSIÇÃO.....	156
FIGURA 51. ILUSTRAÇÃO DO PROCESSO DE PARTICIONAMENTO DE UM DOMÍNIO COMPUTACIONAL EM DOIS PROCESSOS. OS NÓS DESTACADOS REPRESENTAM A REGIÃO DE OVERLAPING.....	160
FIGURA 52. ESQUEMA DO PROBLEMA DE ESCOAMENTO CISALHANTE VERTICAL ENTRE DOIS FLUIDOS.....	166
FIGURA 53. CONFIGURAÇÃO DO PROBLEMA DE RAYLEIGH-TAYLOR SUJEITO A UMA PERTURBAÇÃO INICIAL PRESCRITA.....	168
FIGURA 54. ESQUEMA DO APARATO EXPERIMENTAL EMPREGADO POR MARTIN E MOYCE (1952). O DIAFRAGMA É CORTADO INSTANTANEAMENTE PELO CALOR DA PASSAGEM DE UMA CORRENTE EM UM CONDUTOR POSICIONADO NAS JUNÇÕES.....	169
FIGURA 55. CONFIGURAÇÃO DO DOMÍNIO DE CÁLCULO PARA O PROBLEMA DE QUEBRA DE BARREIRA CLÁSSICO (JAHANBAKHS, PANABI E SEIF, 2007).....	170
FIGURA 56. ESQUEMA DE UMA COLUNA DE BOLHAS EMPREGADA NO TRABALHO DE ZHANG, DEEN E KIUPERS (2006).....	171
FIGURA 57 RESULTADOS NUMÉRICOS OBTIDOS POR (A) VIKAS (2011), E (B) DELNOIJ (1997), E EM (C) MOSTRA-SE O ESQUEMA DO DOMÍNIO DE CÁLCULO.....	172
FIGURA 58. CONFIGURAÇÃO DO DOMÍNIO DE CÁLCULO DA COLUNA DE BOLHAS ESTUDADA POR BECH (2005B).....	174
FIGURA 59. DOMÍNIO DE CÁLCULO DO ESCOAMENTO CISALHANTE VERTICAL ONDE $L=1,00m$ E $H=0,15m$	178
FIGURA 60. COMPARAÇÃO DO CAMPO DE FRAÇÃO VOLUMÉTRICA APRESENTANDO A EVOLUÇÃO DA POSIÇÃO DA INTERFACE COM O TEMPO. EM (A) MODELO PROPOSTO E EM (B) BAKKER (2002).....	181
FIGURA 61. (CONTINUAÇÃO) COMPARAÇÃO DO CAMPO DE FRAÇÃO VOLUMÉTRICA APRESENTANDO A EVOLUÇÃO DA POSIÇÃO DA INTERFACE COM O TEMPO. EM (A) MODELO PROPOSTO E EM (B) BAKKER (2002).....	182
FIGURA 62. GRÁFICO COMPARATIVO DO AVANÇO DA INTERFACE E ÂNGULO DE CONTATO JUNTO À PAREDE.....	183
FIGURA 63. DETALHE APRESENTANDO A RESOLUÇÃO DA MALHA E UM VÓRTICE DA INTERFACE.....	183

FIGURA 64. VETORES DA DENSIDADE DE FORÇA INTERFACIAL SOBRE A INTERFACE.	184
FIGURA 65. DETALHE APRESENTANDO DESPRENDIMENTO E RECAPTA DE GOTAS	185
FIGURA 66. SHADOWGRAPH DA INTERFACE MOSTRANDO SUA ESTRUTURA ENOVELADA.	186
FIGURA 67 COMPARAÇÃO ENTRE O MODELO TENSORIAL E O PADRÃO EMPREGANDO FORÇA DE ARRASTO E A DIFERENÇA ENTRE OS MODELOS MAIS ABAIXO.	186
FIGURA 68. CASO DE CISALHAMENTO VERTICAL. COMPARAÇÃO DO COEFICIENTE DE ARRASTO SOBRE A INTERFACE OBTIDO POR MEIO DO MODELO TENSORIAL PROPOSTO NESTE TRABALHO E O MODELO DE ARRASTO PADRÃO EXISTENTE DO ANSYS CFX.	189
FIGURA 69. DETALHE DA DIVERGÊNCIA DA SOLUÇÃO SOBRE A FRONTEIRA DE UMA PARTIÇÃO, E O RESULTADO CORRETO APÓS ALTERAR A POSIÇÃO ADICIONAR MAIS UMA PARTIÇÃO.....	189
FIGURA 70. EVOLUÇÃO TEMPORAL DO CAMPO DE VORTICIDADE.	190
FIGURA 71. COMPARAÇÃO DE RESULTADO PARA A INSTABILIDADE DE RAYLEIGH TAYLOR EM DOIS TEMPOS DISTINTOS. EM (A) OS RESULTADOS DE POR JAHANBAKSH, PANAHÍ E SEIF (2007), E EM (B) OS DESTE TRABALHO. ...	193
FIGURA 72. COMPARAÇÃO DE RESULTADOS OBTIDOS COM O MODELO DE DOIS FLUIDOS ENTRE (A) MODELO DE ARRASTO PADRÃO DO CFX (B) MODELO TENSORIAL DESTE TRABALHO NO TEMPO $T = 0.90s$	194
FIGURA 73. CASO DA INSTABILIDADE DE RAYLEIGH-TAYLOR. COMPARAÇÃO DO COEFICIENTE DE ARRASTO NA INTERFACE OBTIDO POR MEIO DO MODELO TENSORIAL PROPOSTO NESTE TRABALHO E O MODELO DE ARRASTO PADRÃO EXISTENTE DO ANSYS CFX.....	195
FIGURA 74. DOMÍNIO DE CÁLCULO DO PROBLEMA DE ROMPIMENTO DE BARREIRA, ONDE $a = 0,05715m$	196
FIGURA 75. GRÁFICO COMPARATIVO DE RESULTADOS DA VARIAÇÃO DA POSIÇÃO DA FRENTE DE LÍQUIDO COM O TEMPO.....	199
FIGURA 76 GRÁFICO COMPARATIVO DE RESULTADOS DA VARIAÇÃO DA ALTURA DA COLUNA DE LÍQUIDO COM O TEMPO.	199
FIGURA 77. IMAGENS DO EXPERIMENTO DE MARTIN E MOYCE (1952). O SEPTO DE PAPEL RETARDA PARTE DA COLUNA DE LÍQUIDO.	200
FIGURA 78. EVOLUÇÃO TEMPORAL DO ROMPIMENTO DE BARREIRA OBTIDO POR ESTE TRABALHO (NUMÉRICO ST REF4X).	201
FIGURA 79. OSCILAÇÕES DA INTERFACE NA FRENTE DE AVANÇO DA COLUNA DE LÍQUIDO OBTIDAS NUMERICAMENTE EMPREGANDO MODELO URANS COM INTENSIDADE TURBULENTA DE 20% PARK <i>ET AL.</i> (2012).	202
FIGURA 80. AUMENTO DA RESOLUÇÃO DA INTERFACE COM O REFINO DE MALHA.	202

FIGURA 81. RUPTURA DA INTERFACE INICIADA EM $T = 0,112s$ E MAGNITUDE DO CAMPO DE VORTICIDADE.....	204
FIGURA 82. COLISÃO DA FRENTE DE LÍQUIDA COM A PAREDE. – CASO ST REF4X.	204
FIGURA 83. EVOLUÇÃO DO CAMPO DE VORTICIDADE CASO ST REF4X – PARTE 1.	206
FIGURA 84. EVOLUÇÃO DO CAMPO DE VORTICIDADE CASO ST REF4X – PARTE 2.	207
FIGURA 85. EVOLUÇÃO DO CAMPO DE VORTICIDADE CASO ST REF4X – PARTE 3.	208
FIGURA 86. CONFIGURAÇÃO DA COLUNA DE BOLHAS. AS LINHAS TRACEJADAS INDICAM OS LOCAIS DE AMOSTRAGEM, BEM COMO A POSIÇÃO DO PONTO DE MONITORAMENTO.....	210
FIGURA 87. APARATO EXPERIMENTAL DA COLUNA DE BOLHAS (PLEGER <i>ET AL.</i> , 1999).	211
FIGURA 88. AMOSTRAGEM EM 2Hz DE UM SINAL COM FREQUÊNCIA DE 1Hz.	213
FIGURA 89. AMOSTRAGEM ABAIXO DO CRITÉRIO DE NYQUIST, A 1,5Hz. EM (A) O SINAL DE 1Hz E EM (B) UM SINAL DE 3Hz. NÃO SE PODE DISTINGUIR UM DO OUTRO PELA AMOSTRAGEM	214
FIGURA 90. MALHA DE INICIALIZAÇÃO DE COLUNA DE BOLHAS. A REGIÃO CENTRAL É MAIS REFINADA EM DECORRÊNCIA DA REGIÃO DE ENTRADA.....	219
FIGURA 91. RESULTADO PARA O MODELO HOMOGÊNEO EM REGIME PERMANENTE. EM (A) O CAMPO DE FRAÇÃO VOLUMÉTRICA DE AR, E EM (B) O CAMPO DE VELOCIDADE SUPERFICIAL DE ÁGUA.	220
FIGURA 92. PADRÃO DE DISPERSÃO DA PLUMA DE GÁS EMPREGANDO O MODELO HOMOGÊNEO COM TERMO FONTE E CONDIÇÃO DE ABERTURA. A COR NEGRA INDICA UMA FRAÇÃO DE 1% DE AR E A BRANCA SUA AUSÊNCIA.....	222
FIGURA 93. COMPARAÇÃO ENTRE O MODELO DE MISTURA COM TURBULÊNCIA ALGÉBRICA EMPREGADO POR BECH (2005A) E PELO MODELO HOMOGÊNEO COM TERMO FONTE TENSORIAL DESTE TRABALHO.	223
FIGURA 94. COMPARAÇÃO ENTRE O MODELO DE MISTURA COM TURBULÊNCIA ALGÉBRICA EMPREGADO POR BECH (2005A) E PELO MODELO HETEROGÊNEO COM TERMO FONTE TENSORIAL DESTE TRABALHO.	224
FIGURA 95. DETALHE INFERIOR DA MALHA EMPREGADA NO MODELO HETEROGÊNEO.	225
FIGURA 96. INÍCIO DA CIRCULAÇÃO DE LÍQUIDO COMO A ALTERAÇÃO DA CONDIÇÃO DE CONTORNO DA SUPERFÍCIE LIVRE ABERTURA PARA DESGASEIFICAÇÃO...	227
FIGURA 97. EXEMPLO DE CAMPOS DE FRAÇÃO VOLUMÉTRICA E VELOCIDADE SUPERFICIAL DE ÁGUA PARA O MODELO ASSOCIADO.	228
FIGURA 98. FRAÇÃO DE SEGUNDOS APÓS O INÍCIO DO AUMENTO DA VAZÃO. A ESCALA DE CONTORNOS É LINEAR.	229
FIGURA 99. AUMENTO DO DINÂMICA DA PLUMA DE GÁS E DAS CORRENTES DE RECIRCULAÇÃO DE LÍQUIDO COM O AUMENTO DA VAZÃO.....	230

FIGURA 100. EVOLUÇÃO TRANSIENTE DA COLUNA DE BOLHAS EM INTERVALOS DE 10S, E A MÉDIA DE LONGO TEMPO (LTA) DE 220 S OBTIDOS POR PFLEGER <i>ET AL.</i> (1999).....	232
FIGURA 101. COMPARAÇÃO ENTRE OS RESULTADOS EXPERIMENTAIS DE BECKER, DE BIE E SWEENEY (1999) E OS DESTES TRABALHOS.....	233
FIGURA 102. COMPARAÇÃO DA PLUMA DE GÁS OBTIDA COM ESTE TRABALHO (ESQ.) E O DE BECH (2005A) (DIR.) A ESCALA É LOGARÍTMICA.....	234
FIGURA 103. AMOSTRAGEM TEMPORAL DE LONGA DURAÇÃO (100S) DA COMPONENTE VERTICAL DE VELOCIDADE SUPERFICIAL DE LÍQUIDO	235
FIGURA 104. FFT DO SINAL AMOSTRADO DA COMPONENTE VERTICAL DE VELOCIDADE APRESENTANDO DUAS FREQUÊNCIAS CARACTERÍSTICAS COM INTENSIDADES SIMILARES.	236
FIGURA 105. AMOSTRAGEM DE 60S. APENAS O PICO DE 0,05HZ É CAPTURADO.	237
FIGURA 106. COMPARAÇÃO DOS PERFIS MÉDIOS DE VELOCIDADE NA ALTURA DE 13CM.....	238
FIGURA 107. COMPARAÇÃO DOS PERFIS MÉDIOS DE VELOCIDADE NA ALTURA DE 25CM.....	238
FIGURA 108. GRÁFICO COMPARATIVO DOS PERFIS MÉDIOS DE VELOCIDADE NA ALTURA DE 37CM.	239
FIGURA 109. CAMPO VETORIAL MÉDIO DE VELOCIDADE SUPERFICIAL DE ÁGUA. .	240
FIGURA 110. CAMPO MÉDIO DE FRAÇÃO VOLUMÉTRICA DE AR ASSOCIADO AO DE VETORIAL DE VELOCIDADE SUPERFICIAL DE ÁGUA.....	241
FIGURA 111. INTEGRAL DA CURVA DE VELOCIDADE NA LINHA 13CM DESTES TRABALHOS.....	242
FIGURA 112. INTEGRAL DA CURVA DE VELOCIDADE NA LINHA 13CM DA LITERATURA.....	243
FIGURA 113. PERFIS MÉDIOS DE FRAÇÃO DE VAZIOS NAS LINHAS DE AMOSTRAGEM.	245
FIGURA 114. CORRENTES DE CIRCULAÇÃO EM CONJUNTO COM O PERFIL SINUOSO DA PLUMA.	246
FIGURA 115. COMPORTAMENTO TRANSIENTE DO MODELO TENSORIAL SEM O TERMO DE ARRASTO PADRÃO.	247

LISTA DE TABELAS

TABELA 1. VARIÁVEIS DAS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO	75
TABELA 2. PROPRIEDADES FÍSICAS DOS FLUIDOS DO ESCOAMENTO CISALHANTE VERTICAL.....	178
TABELA 3. PARÂMETROS DE SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO CISALHANTE VERTICAL.	180
TABELA 4. PARÂMETROS DE SIMULAÇÃO DA INSTABILIDADE DE RAYLEIGH-TAYLOR.	192
TABELA 5. PROPRIEDADES FÍSICAS DOS FLUIDOS DA INSTABILIDADE DE RAYLEIGH- TAYLOR.....	192
TABELA 6. PROPRIEDADES FÍSICAS DOS FLUIDOS DO ROMPIMENTO DE BARREIRA.	197
TABELA 7. PARÂMETROS DE SIMULAÇÃO DO ROMPIMENTO DE BARREIRA	197
TABELA 8. PROPRIEDADES FÍSICAS DOS FLUIDOS DA COLUNA DE BOLHAS	217
TABELA 9. PARÂMETROS DE SIMULAÇÃO DA COLUNA DE BOLHAS.....	226
TABELA 10. RESULTADOS DA INTEGRAÇÃO DA LINHA DE AMOSTRAGEM H=13CM.	242
TABELA 11. RESULTADOS DA INTEGRAÇÃO DA LINHA DE AMOSTRAGEM H=23CM.	244
TABELA 12. RESULTADOS DA INTEGRAÇÃO DA LINHA DE AMOSTRAGEM H=37CM.	244

SUMÁRIO

RESUMO.....	XI
ABSTRACT.....	XIII
LISTA DE FIGURAS.....	XV
LISTA DE TABELAS.....	XXIII
SIMBOLOGIA.....	XXIX
ACRÔNIMOS.....	XXXV
1 INTRODUÇÃO.....	1
1.1 ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS.....	1
1.2 MOTIVAÇÃO E OBJETIVOS.....	6
1.2.1 Científica.....	6
1.2.2 Tecnológica.....	6
1.2.3 Objetivos.....	7
1.3 JUSTIFICATIVAS.....	7
1.4 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO.....	8
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	11
2.1 INTRODUÇÃO.....	11
2.2 MÉTODO DE VOLUME DE FLUIDO – VOF METHOD.....	11
2.3 HIDRODINÂMICA SUAVIZADA DE PARTÍCULAS – SPH METHOD.....	14
2.4 MÉTODO LEVEL SET.....	17
2.5 MÉTODO DE FRONTEIRA IMERSA – IMMersed BOUNDARY.....	19
2.6 MÉTODO CUT-CELL.....	20
2.7 MODELO ALGÉBRICO DE DENSIDADE DE ÁREA INTERFACIAL -AIAD....	23
2.8 MODELO DE TRANSPORTE DE ÁREA INTERFACIAL - IAET.....	25
2.9 MÉTODO DOS MOMENTOS- MOM.....	30
2.10 MODELO DE MÚLTIPLOS GRUPOS DE TAMANHO - MUSIG.....	37
2.11 MÉTODO DE RASTREAMENTO DE FRENTE – FRONT TRACKING.....	40
2.12 MÉTODOS LATTICE BOLTZMANN.....	45
2.13 MODELOS CONSTITUTIVOS DE FECHAMENTO.....	50
2.14 CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	55
3 MODELAGEM MATEMÁTICA.....	59
3.1 INTRODUÇÃO.....	59
3.2 METODOLOGIA DE VOLUMES DE CONTROLE.....	59

3.3	ABORDAGEM EULERIANA	62
3.3.1	<i>Variável Característica ou Indicadora de Fase</i>	63
3.3.2	<i>Promediação</i>	69
3.3.3	<i>Promediação Temporal Local (Time Average)</i>	69
3.3.4	<i>Promediação Espacial Instantânea (Volume Average)</i>	70
3.3.5	<i>Promediação Conjunta ou de Realizações (Ensemble Average)</i>	72
3.3.6	<i>Propriedades da Promediação</i>	73
3.3.7	<i>Equações Locais de Balanço</i>	74
3.3.8	<i>Variáveis Promediadas</i>	78
3.3.9	<i>Modelo Heterogêneo (Two-Fluid Model)</i>	85
3.3.10	<i>Modelo Homogêneo</i>	86
3.3.11	<i>Modelo de Força Contínua de Superfície</i>	87
3.4	MODELAGEM DA DENSIDADE DE FORÇA INTERFACIAL	89
3.4.1	<i>Força de Basset-Boussinesq</i>	93
3.4.2	<i>Força de Massa Virtual</i>	96
3.4.3	<i>Força de Arrasto</i>	101
3.4.4	<i>Força de Sustentação</i>	106
3.4.5	<i>Força de Dispersão Turbulenta</i>	110
3.4.6	<i>Invariância com o Sistema de Referência</i>	113
3.5	MODELO DE FECHAMENTO PARA O TENSOR DE INTERFACE	117
3.5.1	<i>Força de Pressão</i>	127
3.6	CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	128
4	MÉTODO NUMÉRICO.....	131
4.1	INTRODUÇÃO	132
4.2	DISCRETIZAÇÃO DO DOMÍNIO DE CÁLCULO	136
4.3	DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES	139
4.4	FUNÇÕES DE FORMA	141
4.5	CAMPO DE PRESSÃO	144
4.6	TERMO ADVECTIVO.....	144
4.7	ACOPLAMENTO MASSA - PRESSÃO -VELOCIDADE.....	145
4.8	SOLUÇÃO DO SISTEMA LINEAR.....	147
4.9	CONDIÇÕES DE CONTOURNO E INICIAIS	151
4.9.1	<i>Condição de Entrada com Velocidade Prescrita (Inlet)</i> ..	152
4.9.2	<i>Condição de Abertura (Opening)</i>	152
4.9.3	<i>Condição de Parede (Wall)</i>	153
4.9.4	<i>Condição de Degaseificação (Degassing)</i>	154
4.9.5	<i>Condição de Simetria</i>	154
4.9.6	<i>Condições Iniciais</i>	154

4.10	FORÇA DE EMPUXO	156
4.11	TRATAMENTO DOS TERMOS FONTES INTERFACIAIS	157
4.12	PASSO DE TEMPO E CICLOS ITERATIVOS.....	158
4.13	PROCESSAMENTO PARALELO.....	159
5	METODOLOGIA.....	163
5.1	INTRODUÇÃO.....	163
5.2	ESCOAMENTO CISALHANTE VERTICAL - CV.....	165
5.3	INSTABILIDADE DE RAYLEIGH-TAYLOR - RT	167
5.4	ROMPIMENTO DE BARREIRA - RB.....	168
5.5	COLUNA DE BOLHAS - CB	170
5.6	CONSIDERAÇÕES FINAIS	175
6	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	177
6.1	INTRODUÇÃO.....	177
6.2	ESCOAMENTO CISALHANTE VERTICAL – CV	177
6.3	INSTABILIDADE DE RAYLEIGH-TAYLOR – RT.....	191
6.4	ROMPIMENTO DE BARREIRA – RB	195
6.5	COLUNA DE BOLHAS – CB	209
6.5.1	<i>Parâmetros Físicos</i>	<i>217</i>
6.5.2	<i>Inicialização.....</i>	<i>218</i>
6.5.3	<i>Abordagem Transiente.....</i>	<i>220</i>
6.5.4	<i>Modelo Associado</i>	<i>225</i>
6.5.5	<i>Modelo Tensorial.....</i>	<i>245</i>
6.6	CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	248
7	CONCLUSÕES.....	253
7.1	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	255
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	257
	ANEXOS.....	273

SIMBOLOGIA

ESCALARES

a_i	densidade de área interfacial média [1/m]
$A_{\alpha\beta}$	densidade de área interfacial [1/m]
C	número de Courant
C_D	coeficiente de arrasto
C_L	coeficiente de sustentação
C_{VM}	coeficiente de massa virtual
C_T	coeficiente do modelo tensorial
c_i	velocidade de uma partícula [celulas/s]
D_{ij}	componentes do tensor taxa de deformação [Pa]
dt	intervalo diferencial de tempo [s]
dS	elemento diferencial de área [m ²]
dV	elemento diferencial de volume [m ³]
E	conjunto das realizações
Eo	número de Eötvös
$f(\bar{x}, v, t)$	função de distribuição
h	espaçamento de malha da Eq. (54)
h^o	altura inicial de líquido [m]
$h(x, t)$	altura da superfície livre [m]
k	energia cinética turbulenta por unidade de massa [m ² /s ²]
\dot{m}_{pi}	vazão mássica avaliada no ponto de integração [kg/s]
M_α	massa da fase α [kg]
N	número de realizações
N_f	número de fases
N_i	função de forma do nó i
Kn	número de Knudsen
P	campo médio de pressão [Pa]

p	pressão [Pa]
p'	flutuação do campo instantâneo de pressão [Pa]
p_α	pressão da fase α [Pa]
p_{abs}	pressão absoluta [Pa]
p_{ref}	pressão de referência [Pa]
Re	número de Reynolds
R_α	fração volumétrica da fase α
r_α	fração volumétrica da fase α
St	número de Stokes
S_i^ϕ	termo fonte da variável ϕ sobre a interface
S_ϕ	termo fonte da variável ϕ
s, t, u	coordenadas no sistema de referência local do elemento
T	intervalo de promediação [s]
t	tempo [s]
T_{ij}	componentes do tensor tensão [Pa]
U	campo médio de velocidade [m/s]
U_i	componente i do campo médio de velocidade [m/s]
u_i	componente i do vetor velocidade [m/s]
u, v, w	componentes cartesianas do vetor velocidade [m/s]
$u_\alpha, v_\alpha, w_\alpha$	componentes cartesianas do vetor velocidade da fase α [m/s]
V	volume do volume material, de controle, ou de promediação [m ³]
∂V	fronteiras que delimitam o volume V
V_α	Volume ocupado pela fase α [m ³]
	distância adimensional à parede

Gregos

α_i	fração volumétrica média
Γ_α	taxa de transferência de massa interfacial por unidade de volume [kg/m ³ .s]
$\delta_{\alpha\beta}$	função delta de interface [1/m]

δ_{ij}	delta de Kröenecker
δ_i	espessura da interface [m]
ε	taxa de dissipação da energia cinética turbulenta por unidade de massa [m ² /s ³]
ε_α	taxa de dissipação da energia cinética turbulenta da fase α por unidade de massa [m ² /s ³]
λ	caminho livre médio [m]
ϕ	propriedade ou variável qualquer
ϕ_{ph}	termo fonte médio da Eq. (33)
ν	viscosidade cinemática [m/s ²]
μ_{mix}	viscosidade de mistura [Pa.s]
η	escala espacial de Kolmogorov [m]
ν	viscosidade cinemática [m ² /s]
μ_α	viscosidade dinâmica da fase α [Pa.s]
μ_T	viscosidade turbulenta [Pa.s]
$\langle \mu \rangle$	viscosidade dinâmica de mistura [Pa.s]
ρ_α	massa específica da fase α [kg/m ³]
$\langle \rho \rangle$	massa específica de mistura [kg/m ³]
ρ_{ref}	massa específica de referência [kg/m ³]
$\sigma_{\alpha\beta}$	coeficiente de tensão superficial [N/m]
σ_T	número de Pradtl-Schmidt turbulento
τ	escala temporal de Kolmogorov [s]
τ_{ij}	componentes do tensor tensão de Reynolds
$\kappa_{\alpha\beta}$	curvatura da interface entre as fases α e β [1/m]
χ_α	função indicadora da fase α
ω_i	operador de colisão

VETORIAIS

\mathbf{e}_i	vetor de base unitário covariante
\mathbf{g}	aceleração da gravidade [m/s ²]

$\hat{\mathbf{i}}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{\mathbf{k}}$	vetores de base unitários do sistema cartesiano ortogonal
\mathbf{J}	fluxo difusivo da variável ϕ
\mathbf{m}_i^σ	força de tensão interfacial [N/m ³]
\mathbf{M}_α	densidade de força interfacial [N/m ³]
$\hat{\mathbf{n}}_{\alpha\beta}$	vetor normal unitário a interface entre as fases α e β [1/m]
$\hat{\mathbf{n}}$	vetor normal unitário
\mathbf{t}_α	tração ou força da fase α exercida sobre a interface por unidade de volume [N/m ³]
$\langle \mathbf{u} \rangle$	campo médio do vetor velocidade [m/s]
\mathbf{u}_α	velocidade baricêntrica da fase α [m/s]
$\mathbf{u}_{\alpha i}$	velocidade interfacial da fase α [m/s]
$\bar{\mathbf{v}}_p$	velocidade de partícula [m/s]
$\bar{\mathbf{v}}_{pm}$	velocidade média de partículas [m/s]
$\bar{\mathbf{v}}_i$	velocidade média de interface [m/s]
\mathbf{x}	vetor de coordenadas do ponto x [m]

TENSORIAIS

$\bar{\mathbf{D}}$	tensor taxa de deformação [Pa]
$\bar{\mathbf{D}}_\alpha$	tensor taxa de deformação da fase α [Pa]
$\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j$	díade
$\bar{\mathbf{I}}$	tensor identidade
$\bar{\mathbf{T}}$	tensor tensão [Pa]
$\bar{\mathbf{T}}_i$	tensor de interface [Pa]
$\bar{\mathbf{T}}_\alpha$	tensor tensão da fase α [Pa]
$\bar{\mathbf{T}}^{\text{Re}}$	tensor tensão de Reynolds [Pa]
$\bar{\mathbf{T}}_\alpha^{\text{Re}}$	tensor tensão de Reynolds da fase α [Pa]
$\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}$	produto diádico entre dois vetores

MATRICIAIS

$[A]$	matriz dos coeficientes
$[L]$	matriz diagonal inferior
$[U]$	matriz diagonal superior
$\{B\}$	vetor de termos constantes do sistema linear
$\{R\}$	vetor de resíduo do sistema linear
$\{\delta\}$	vetor diferença entre níveis dois iterativos da variável ϕ
$\{\phi\}$	vetor solução da variável ϕ

OPERADORES

Δ	variação discreta
$\frac{D(\)}{Dt}$	derivada material
$\nabla(\)$	operador vetorial gradiente
$\nabla_s(\)$	operador gradiente sobre uma superfície material qualquer
$\nabla \cdot (\)$	operador vetorial divergente
$\langle \rangle, \overline{\quad}$	operadores integrais de média
$\llbracket \rrbracket$	
\otimes	operador diádico
$:$	produto escalar tensorial
$[\]$	matriz quadrada
$\{ \}$	vetor coluna
$ $	módulo ou norma de um vetor

SUBÍNDICES

<i>c</i>	referente à fase contínua
<i>d</i>	referente à fase dispersa
<i>f</i>	referente a um fluido
<i>p</i>	referente à partículas
α, β	índices relativos à fase
<i>i, j, k</i>	subíndices da notação indicial de Einstein
<i>i</i>	relativo à interface
<i>loss</i>	referente à perda de carga
<i>min</i>	referente a um valor mínimo
<i>mix</i>	referente à mistura
<i>n</i>	referente à direção normal
<i>ref</i>	referente a um valor de referência
<i>open</i>	referente à abertura
<i>t</i>	relativo à direção tangencial
<i>stat</i>	referente à condição estática
<i>w</i>	relativo à parede
∞	referente ao escoamento externo à camada limite

SUPERÍNDICES

<i>cap</i>	referente ao regime “cap”
<i>dist</i>	referente ao regime distorcido
<i>D</i>	referente à força de arrasto
<i>elip</i>	referente ao regime elipsoidal
<i>L</i>	referente à força de sustentação
<i>k</i>	referente ao nível iterativo do solver
<i>n</i>	relativo ao nível iterativo
<i>nb</i>	referente aos nós vizinhos
<i>o</i>	referente ao passo de tempo anterior
<i>VM</i>	referente à força de massa virtual

ACRÔNIMOS

CFD – Fluido Dinâmica Computacional

VOF – Método de Volume de Fluido

LBM – Método Lattice Boltzmann

HPC – Computação de Alta Performance

PBE – Equação de Balanço Populacional

AIAD- Modelo Algébrico de Densidade de Área Interfacial

IAET – Modelo de Transporte de área Interfacial

MUSIG – Modelo de Múltiplos Grupos de Tamanhos

MOM – Método dos Momentos

QMOM – Método de Quadratura de Momentos

DQMOM – Método Discreto de Quadratura de Momentos

FVM – Método de Volumes Finitos

EbFVM – Método de Volumes Finitos Baseado em Elementos

LDA – Anemometria Laser por Efeito Doppler

PTV - Velocimetria por Rastreamento de Partículas

PIV – Velocimetria por Imagem de Partículas

SMC – Modelo de Fechamento para Momentos de Segunda Ordem

LTA – Análise Temporal Longa

FFT – Transformada Rápida de Fourier

CAPÍTULO

1

INTRODUÇÃO

1.1 Escoamentos Multifásicos

Escoamentos multifásicos são uma classe de escoamentos onde há a presença de mais de uma fase como, por exemplo, água e óleo, ar e água ou ar e poeira; sendo estes exemplos de sistemas líquido-líquido, gás-líquido e gás-sólido, respectivamente e encontrados facilmente na Natureza.

Esta classe de escoamentos permanece ainda como um dos problemas sem solução no campo da mecânica dos fluidos, não que várias metodologias não tenham sido e estejam sendo exaustivamente tentadas. Estes escoamentos apresentam uma natureza muito diversa, possuindo várias escalas de tempo e espaço características, submetidos a uma variedade de leis e princípios que os governam e quase sempre fortemente acoplados entre si.

Tanto uma série de equações constitutivas quanto métodos de simulação têm sido desenvolvidos com o intuito de apresentar uma solução satisfatória, mas ainda com parcial sucesso na descrição macroscópica dos escoamentos multifásicos. E ainda assim, tais modelos requerem uma calibração cuidadosa com o aporte experimental, o que é outro ponto sensível em toda esta abordagem. A via da simulação também é uma alternativa nesta calibragem, uma vez que a computação de alto desempenho (HPC) vem se tornando acessível nas universidades e até mesmo computadores pessoais possuem muitas vezes capacidade de lidar com problemas considerados até há alguns anos computacionalmente custosos.

A simulação tem por vantagem permitir escrutinar detalhes do escoamento que por via experimental apenas nos dizem o comportamento médio como, por exemplo, calcular dinamicamente o coeficiente de arrasto de uma bolha em toda a sua superfície, tensões e camada limite sem interferência de sondas e na escala que se quiser - desde que haja um hardware capaz de tal processamento -, o que não é mais tão raro (MALISKA e DE VASCONCELLOS, 2000; GEORG, REZENDE e MALISKA, 2008a; 2008b; MALISKA *et al.*, 2008; REZENDE, GEORG e MALISKA, 2008).

O senso comum nos diz à primeira vista que a via experimental é a natural na obtenção de relações constitutivas para se tratar realisticamente as interações induzidas pelo escoamento e pelo comportamento das fases. Não obstante a este fato, diante do que se tem feito e visto neste campo, há uma vertente em se considerar a via numérica um meio de reforçar o ferramental de análise, visto a escalabilidade dos computadores vir aumentando de maneira rápida e as técnicas numéricas estarem sendo exaustivamente aprimoradas, tanto por uma pressão do conhecimento acadêmico quanto por motivos de competição comercial no que tange ao uso de simuladores comerciais.

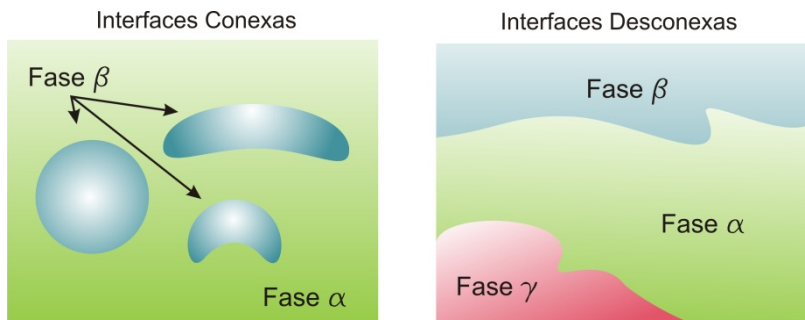
E quando falamos em simulação, entenda-se claramente a solução numérica de algum modelo matemático que descreva a física do escoamento multifásico, e, em relação a este ponto, a principal dificuldade do tratamento matemático de escoamentos multifásicos se dá devido ao comportamento complexo das interfaces. Localmente, um escoamento multifásico consiste em certo número de regiões preenchidas por uma única fase limitada por meio da interface que a separa das demais.

As diferentes fases interagem por meio da interface que as separa. Esta pode ser uma interface conexa (e.g. bolhas e gotas) e/ou desconexa (e.g. interface ar-água em um copo), como ilustra a Figura 1. É através da interface que há a troca de calor, transferência de massa, arrasto e etc., ou seja, a interface é a região do espaço onde as diferentes fases trocam informação, ou, mais propriamente, a região pela qual ocorrem transferência de calor, massa e quantidade de movimento.

E para lidar com esta complexidade, o tratamento matemático de escoamentos multifásico, sob uma ótica Euleriana, é geralmente feito através da descrição do comportamento médio dos

campos envolvidos, como feito no tratamento da turbulência. E, da mesma maneira, o processo de promediação (ato de efetuar médias) das equações instantâneas de conservação gera um problema de fechamento do sistema.

Figura 1. Exemplos de morfologias da interface que separa duas fases em sistemas multifásicos.



No fechamento do sistema deve-se descrever matematicamente de que maneira as fases interagem e trocam informações como quantidade de movimento, energia e massa. Deve-se, portanto, trazer a informação da microescala descontínua, caótica em sua natureza, à escala onde as equações de campo são válidas. E isso não é trivial. Os modelos de fechamento disponíveis são extremamente dependentes da morfologia e do regime do escoamento e carecem de generalidade, principalmente quando há variação de ambos (DREW, 1983; 1989; 1992; PATANKAR e JOSEPH, 2001; BURNS, 2002; CHAHED, ROIG e MASBERNAT, 2003). E atacar este problema tem sido a atual meta da maioria dos grupos de pesquisa que trabalham com esta classe de escoamentos, ou seja: *como modelar propriamente os processos de troca pela interface.*

A quantidade de dados experimentais disponíveis para isso ainda é relativamente pequena, e a descrição matemática destes fenômenos ainda levanta muita discussão na comunidade científica, pois pouco ainda se sabe quando comparada com outras áreas mais desenvolvidas da mecânica dos fluidos como a turbulência, por exemplo.

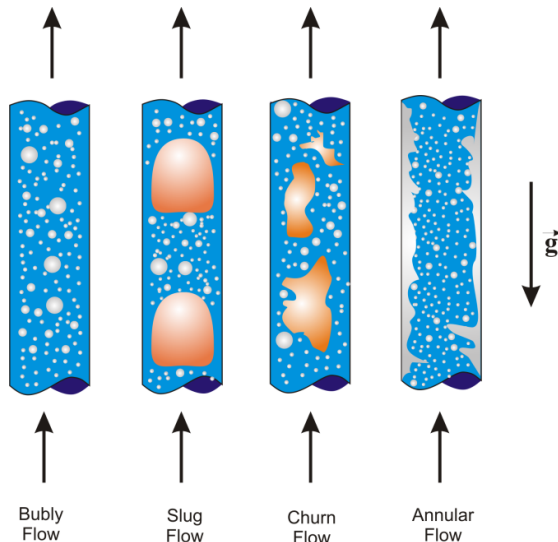
Tome-se como exemplo o transporte de fluidos em gasodutos ou oleodutos. Isto é altamente complexo. Hidrocarbonetos podem mudar de estado físico durante seu

escoamento por uma série de fatores, e um sistema monofásico, antes líquido (ou gasoso), muda para um padrão multifásico gás-líquido, apresentando uma série de regimes e padrões de escoamentos como os da Figura 2 que podem muitas vezes ser danosos às estruturas das tubulações e a outros equipamentos envolvidos, como válvulas, medidores de vazão, etc. (PALADINO, 2005; KOSTETZER e REZENDE, 2008).

Colunas de destilação, unidades de craqueamento catalítico, torres de vácuo, são outros exemplos onde escoamentos multifásicos estão presentes (GEORG, 2005). E todos estes processos estão atrelados a fenômenos de transferência de calor e massa entre as fases pela interface que as separa. Então, o entendimento de como as fases interagem se torna fundamental no avanço técnico-científico destes fenômenos, sendo este, portanto, o objeto de estudo deste trabalho.

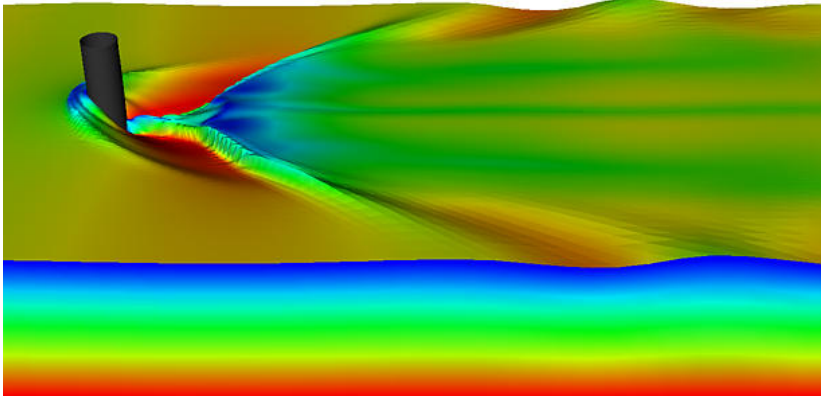
É comum classificar-se o escoamento multifásico de acordo com o comportamento das fases, e esta classificação é muito útil quando se trata de escoamentos confinados, como no caso de dutos. Paladino (2005) descreve estes regimes com propriedade. A Figura 2 apresenta um exemplo de padrões em dutos verticais.

Figura 2. Alguns padrões de escoamento gás-líquido em encontrados dutos verticais.



A denominação *superfície livre*, indica que há uma superfície fluida *não restringida* por nenhuma parede. Um exemplo deste tipo de escoamento pode ser visto em um rio ou riacho qualquer, onde o escoamento é restringido somente pelo leito do rio, enquanto a sua superfície – a interface ar/água – não está confinada e tem o seu comportamento dinâmico livre de impedimentos. A Figura 3 apresenta um exemplo deste tipo de escoamento.

Figura 3. Exemplo de escoamento com superfície livre em torno de um obstáculo. Fonte: <http://www.tafsm.org/PROJ/FSF/cylflow.html>



Este tipo de escoamento multifásico é peculiar sob o ponto de vista matemático, pois geralmente a interface que distingue uma fase da outra é bem delineada como em escoamentos laminares em canais abertos, por exemplo. Isto permite muitas simplificações matemáticas, e dependendo do caso e do grau de precisão requerido até mesmo soluções analíticas. Contudo, nem sempre a superfície livre é bem comportada e a descrição da dinâmica desta interface não permite simplificações. Esta mesma dinâmica pode muitas vezes alterar drasticamente a morfologia do escoamento que de uma interface bem definida e distinta passa a um escoamento de bolhas numa vasta distribuição de tamanhos devido ao arraste entre as fases e a instabilidades do tipo Kelvin-Helmholtz (ver SILVEIRA NETO, 2005).

A simulação de escoamentos multifásicos gás-líquido com superfície livre tem um grande interesse prático industrial. Citando alguns exemplos, tem-se a indústria química, de alimentos e a

indústria naval que muito se beneficiam com o estudo desta classe de escoamento.

1.2 Motivação e Objetivos

1.2.1 Científica

A principal motivação é por ser este tema ainda um campo fértil a contribuições, pois há mais indagações do que respostas em se tratando de escoamentos multifásicos, e estas dúvidas precisam ser respondidas. A indústria de Petróleo e Gás é uma das que tem extrema necessidade de avanços nesta área devido à alta concorrência do mercado e a necessidade de se aprimorar o rendimento das operações de extração e refino. Os estudos já realizados descortinam uma linha de pesquisa promissora e fecunda (GEORG, REZENDE e MALISKA, 2008a; 2008b; MALISKA *et al.*, 2008; REZENDE, GEORG e MALISKA, 2008).

1.2.2 Tecnológica

O estudo de modelos de fechamento para os processos de transferência interfacial propiciam, além do melhor entendimento da natureza dos fenômenos que ocorrem em escoamentos multifásicos, o aperfeiçoamento dos modelos já existentes e empregados nos aplicativos comerciais disponíveis, como ANSYS CFX e FLUENT, por exemplo. Isto permite que os códigos comerciais disponíveis sejam mais acurados na simulação deste tipo de fenômeno, pois a eficácia de um modelo matemático de um escoamento multifásico reside principalmente nas equações de fechamento dos termos de interface.

A modelagem deste processo físico é o ponto mais delicado dos modelos, e o grau de interação é definido pelo modo como isto é tratado matematicamente (ISHII e MISHIMA, 1984). Como consequência, espera-se que os resultados deste estudo venham a ser incorporados a estes códigos comerciais, melhorando as ferramentas de simulação utilizadas pela indústria, e que no final se traduz em maior tecnologia e valor agregado.

1.2.3 Objetivos

Como objetivo principal deste trabalho tem-se:

Proposição de um modelo de fechamento para a densidade de força interfacial – a força por unidade de volume na interface - sem decomposição de forças por meio da modelagem de todo o tensor de interface e do vetor normal à mesma, bem como o seu emprego em problemas tidos como clássicos em escoamentos multifásicos.

Como objetivos secundários, mas não menos importantes, tem-se:

- *Ampla revisão bibliográfica de escoamentos multifásicos,*
- *Detalhamento e descrição da obtenção das equações de conservação empregadas no trabalho;*
- *Descrição do método numérico implementado no código do simulador comercial ANSYS CFX;*
- *Verificação e Validação quando possível do modelo proposto empregando-o em um conjunto de casos do tipo “benchmark”.*

1.3 Justificativas

Nos últimos anos, alguns grupos de pesquisa têm realizado investigações detalhadas estudando o escoamento de um conjunto de bolhas com o intuito de encontrar novas relações constitutivas para as forças de interface. Entre estes, pode-se citar o trabalho de Bunner e Tryggvason (1999) que simularam o escoamento em três dimensões de bolhas esféricas pelo método de fronteira imersa.

Outros esquemas numéricos tais como VOF (Volume of Fluid) e o método lattice Boltzmann (LBM) (SANKARANARAYANAN *et al.*, 2002) estão sendo utilizados também com esta mesma finalidade. Takada e Colaboradores (2001) realizaram a comparação de simulações usando LBM com o método VOF para o escoamento de uma bolha.

Ainda assim, a literatura com o objetivo explícito de encontrar relações constitutivas para as forças de interface em

escoamentos multifásicos ainda é pouca devido à dificuldade de simular casos reais, onde quase sempre está presente uma grande quantidade de bolhas, o que causa instabilidades no padrão de escoamento. Isto por sua vez exige malhas extremamente refinadas e esquemas numéricos robustos para se resolver as escalas de tempo e espaço características do escoamento.

Todas estas distintas abordagens trazem em si um aspecto em comum: a hipótese de superposição linear de diferentes forças agindo em conjunto, que é um importante paradigma dos modelos atuais, e também um dos principais problemas, pois gera uma grande quantidade de abordagens e correlações para coeficientes de fechamento tornando a escolha de um modelo apropriado algo complexo de se decidir.

A abordagem deste trabalho, por sua vez, não faz uso deste paradigma e apresenta uma forma distinta de lidar com a transferência de quantidade de movimento pela interface

1.4 Organização do Trabalho

Este trabalho organiza-se como segue: o presente Capítulo, Capítulo 1, trata dos objetivos, motivações e justificativas que orientam esta pesquisa.

O Capítulo 2 trata da Revisão Bibliográfica, onde são apresentados e discutidos os principais métodos de solução de escoamentos multifásicos, seus princípios físicos e matemáticos, introduzindo ao leitor as principais ferramentas disponíveis para lidar com estes fenômenos.

O Capítulo 3 ocupa-se da fundamentação física e da formulação matemática de escoamentos multifásicos. Todas as equações de conservação usadas no trabalho são deduzidas e discutidas em seus detalhes. E por fim, o modelo de fechamento proposto é também apresentado e discutido.

Apresentado todo o formalismo matemático pertinente a este trabalho, o Capítulo 4 discorre acerca da metodologia numérica de solução destas equações. E neste caso, o Método de Volumes Finitos baseado em Elementos, EbFVM, usado na discretização do problema, tem uma vasta e muito bem discutida literatura. Alguns pormenores da metodologia numérica aplicada a escoamentos multifásicos definem o sucesso ou não da simulação, e alguns

detalhes da implementação que são intrínsecas do simulador comercial ANSYS CFX® são apresentadas de maneira a permitir a reprodução dos protocolos numéricos usados, de maneira a fornecer ao leitor todas as informações necessárias para a compreensão e reprodução do experimento numérico sem que seja imprescindível o uso do mesmo simulador comercial, e permitindo que se use até mesmo um código próprio ou outro simulador comercial onde as mesmas táticas e procedimentos podem ser aplicados.

O Capítulo 5 discute a Metodologia empregada, os casos de teste e as principais fontes onde estes casos são tratados com propriedade, alguns até já citados no Capítulo 2.

No Capítulo 6, os resultados obtidos são apresentados, comparados com a literatura e discutidos de maneira a validar o modelo e os protocolos de simulação. As vantagens e problemas apresentados são também expostos à análise.

As Conclusões são detalhadas no Capítulo 7 e as Referências Bibliográficas estão catalogadas após o Capítulo 7, bem como o Apêndice que trata de pormenores matemáticos necessários ao trabalho.

CAPÍTULO 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Introdução

Este Capítulo apresenta o estado da arte no estudo de escoamentos multifásicos com as principais metodologias e modelos estudados, tanto no campo científico quanto no industrial. As principais técnicas e abordagem são apresentadas, e seus princípios e objetivos fundamentais são postos em evidência, recorrendo ora ou outra a sua formulação matemática quando necessário, mas sem aprofundamentos teóricos ornamentais, a fim de evidenciar os fundamentos físicos de cada abordagem, suas aplicações e os motivos que levam a cada uma a se desenvolver, uma vez que muitas delas podem tratar de uma mesma problemática tão bem quanto a outra.

Infelizmente não é possível tratar de todas as abordagens, métodos e algoritmos, e de cada uma de suas variantes, sendo apresentados aqui os mais significativos. E, de posse deste ferramental matemático e computacional, pretende-se evidenciar e justificar a abordagem a que se propõe este trabalho.

2.2 Método de Volume de Fluido – VOF Method

Hirt e Nichols (1981) propuseram a solução do escoamento bifásico tratando a superfície livre como uma fronteira livre a partir de um modelo Euleriano. E como fronteira livre, pode-se entender superfícies em que existem descontinuidades em uma ou mais variáveis, ondas de choque, interfaces entre fluidos e estruturas deformáveis. No que concerne às fronteiras livres, a problemática resume-se a:

1. Como representá-la de forma discreta;
2. Como mapear a sua evolução no tempo; e

3. Como impor condições de contorno sobre as mesmas.

A formulação Euleriana requer uma promediação das equações o que gera uma suavização das descontinuidades e da posição da interface gerando o seu espalhamento nas regiões adjacentes.

À época, (1981) a forma mais simples de se resolver a posição da interface era considerar a evolução da sua altura em relação ao tempo e ao espaço considerando uma função $h = h(x, t)$:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + u \frac{\partial h}{\partial x} = v, \quad (1)$$

onde h é a altura da lâmina líquida; u e v as componentes de velocidade horizontal e vertical, respectivamente.

Obviamente, esta formulação se torna inadequada quando a interface sofre intersecção ou um enovelamento e sua extensão às três dimensões do espaço não é trivial.

Outra forma é o uso de partículas marcadoras e a interface surge da distinção das regiões com e sem partículas marcadoras. Sua resolução equipara-se a uma formulação Lagrangeana e tem um custo computacional elevado.

O método desenvolvido por Hirt e Nichols e denominado de VOF - Volume of Fluid, define uma função F que indica ou não a presença de um dos fluidos,

$$\begin{cases} F = 0 & \text{sem fluido,} \\ 0 > F > 1 & \text{interface,} \\ F = 1 & \text{com fluido.} \end{cases} \quad (2)$$

O método é similar ao de partículas marcadoras, mas com a vantagem de haver apenas uma variável a mais armazenada em cada nó. A orientação da interface está na direção do vetor gradiente da variável F . Tendo-se a direção normal da interface e o valor pode-se traçar a posição da interface. A reconstrução da interface segue uma série de métodos disponíveis como CICSAM, por exemplo, disponível no simulador comercial ANSYS FLUENT.

Uma vez conhecida a interface, as condições de salto (as condições de contorno sobre a fronteira livre) podem então ser aplicadas, evitando assim a suavização da promediação Euleriana. Esta metodologia foi empregada largamente e ainda é uma das que

figura entre as ferramentas disponíveis para a solução de escoamentos multifásicos e é a base do simulador comercial FLOW3D da Flow Science (<http://www.flow3d.com/>).

Hirt e Nichols colocam à prova sua abordagem resolvendo problemas “simples”: Rompimento de Barreira (Break Dam), uma instabilidade de Rayleigh-Taylor e um problema de sopro de ar em um seio líquido. O adjetivo simples se deve à facilidade em sua implementação, inicialização e nas condições de contorno, entretanto, os autores não fornecem dados acerca desta dita simplicidade, não obstante à clareza na apresentação do método VOF.

Detalhes e outras formas de aplicação e de formulação do método VOF podem ser encontrados facilmente e demonstram como o método tem sua aplicabilidade e vem sendo desenvolvido com novas abordagens (TSAI e YUE, 1996; HIRT, 1999; MARONNIER, PICASSO e RAPPAZ, 1999; SCARDOVELLI e ZALESKI, 1999; MALISKA e DE VASCONCELLOS, 2000; THOMAS e ZHANG, 2001; BARKHUDAROV, 2004; NGUYEN e EVANS, 2006)

Jahanbakhsh, Panahi e Seif (2007) tratam da solução de escoamentos bifásicos tridimensionais, transientes e com comportamento complexo da interface. Apesar de este trabalho ser relativamente recente, os autores ainda assinalam a complexidade da solução deste tipo de escoamento. No tratamento destas complexidades, pode-se discriminar dois tratamentos que já se viram até aqui:

- Mapeamento da interface, ou métodos de superfície;
- Captura da interface, ou métodos Volumétricos.

Como mapeamento de interface pode-se denominar a representação explícita da mesma e de seu movimento em uma grade, uma malha Euleriana, atualizando a sua posição a cada passo de tempo. Aplicáveis com bom resultado a deformações simples da interface. Um exemplo é o método de fronteira imersa (HE, CHEN e ZHANG, 1999; MEHRAVARAN e HANNANI, 2008).

Os métodos volumétricos envolvem a solução de uma equação de transporte adicional a uma malha Euleriana, geralmente esta variável é a fração volumétrica. Como abordado antes, formulações Eulerianas são passíveis de difusão da interface devido ao processo de promediação, ou ainda, extrapolação local dos limites físicos das propriedades. Problema muito comum nas

equações de transporte de propriedades turbulentas nas formulações URANS (SHAKIBAEINIA e JIN, 2011).

Uma maneira já comentada e usada no método VOF para dirimir a difusão da interface é o CICSAM – *Compressive Interface Capture Scheme for Arbitrary Meshes*, ou Método Compressivo de Captura de Interface para Malhas Arbitrárias, o qual respeita as duas restrições. Entre os casos resolvidos pelo Método de Volumes Finitos, citam-se novamente o Rompimento de Barreira com e sem obstáculo bi e tridimensional, Instabilidade de Rayleigh-Taylor com perturbação de pressão e velocidade e oscilação de fluido invíscido.

Os casos apresentados são de interesse para comparação numérica e mesmo experimental, uma vez que o caso de rompimento de barreira é comparado experimentalmente com os resultados obtidos para a variação de altura e avanço da frente de inundação com tempo. Os dados experimentais são obtidos do trabalho desenvolvido nos anos 50 por Martin e Moyce (1952).

O foco do trabalho é o algoritmo de resolução do sistema de equações e para a verificação da robustez do código os autores analisam os casos já citados. Os resultados obtidos foram de boa concordância com os disponíveis na literatura e o detalhamento na apresentação dos casos faz deste trabalho uma ótima referência para comparação.

2.3 Hidrodinâmica Suavizada de Partículas – SPH Method

Monaghan (1994) apresenta em seu trabalho outra abordagem da modelagem e simulação de sistemas multifásicos e compressíveis. Sua abordagem é Lagrangeana, mas não no sentido clássico. O método surgiu originalmente no campo da astrofísica na simulação de sistemas estelares, galáxias e aglomerados e dinâmica estelar (FAXÉN, 1922; LUCY, 1977). O método pode ser considerado um método da classe *Meshless*, ou seja, não utiliza malha para a discretização do domínio físico.

Nesta técnica, tendo-se um conjunto de partículas na interface, ou fronteira deste conjunto de um determinado tipo, impõem-se forças a estas, tal como no método VOF, mas que tenta emular a interação entre as partes do fluido e manter sua coesão. Estas forças são impostas a todas as fronteiras livres ou fixas, assim

condições escorregamento ou não escorregamento também podem ser utilizadas.

As equações de conservação são obtidas interpolando-se seus termos em um conjunto que pode ou não ser ordenado. Os interpoladores são *funções analíticas* que definem como uma partícula influencia e é influenciada pela sua vizinhança e são todas diferenciáveis sem a necessidade de uma malha.

Esta tática permite a descrição do movimento do conjunto de pontos, ou partículas, cada uma com uma massa m e velocidade \vec{v} e suas demais propriedades pertinentes ao problema. Para a velocidade tem-se

$$\frac{d\vec{v}_a}{dt} = -\sum_b m_b \left(\frac{P_a}{\rho_a} + \frac{P_b}{\rho_b} + \Pi_{ab} \right) \vec{\nabla}_a W_{ab} + \vec{F}_a, \quad (3)$$

onde o somatório é sobre todas as partículas b excluindo-se a própria partícula a , mas, devido à natureza da função interpoladora, esta influência é sentida somente nas partículas vizinhas.

Na Equação (3), P representa a pressão de cada partícula, Π_{ab} as forças cisalhantes e viscosas, e \vec{F}_a as forças de corpo que atuam sobre a partícula a . O termo W_{ab} representa o núcleo de interpolação, ou ainda, o núcleo de suavização e sua atuação pode ser sentida até aproximadamente a um raio não superior a $2h$, sendo h o diâmetro e/ou espaçamento característico das partículas do conjunto, assim,

$$W_{ab} = W_{ab}(h) \rightarrow 0 \Leftrightarrow \|\vec{r}\| > 2h. \quad (4)$$

Podendo ser uma gaussiana, por exemplo, em duas dimensões,

$$W_{ab} = \frac{\exp\left[-(\vec{r}_a - \vec{r}_b)^2 / h^2\right]}{\pi h^2}. \quad (5)$$

Sua superfície de resposta pode ser visualizada na Figura 4.

O operador $\vec{\nabla}_a$ denota o gradiente do núcleo de interpolação em relação às coordenadas da partícula a .

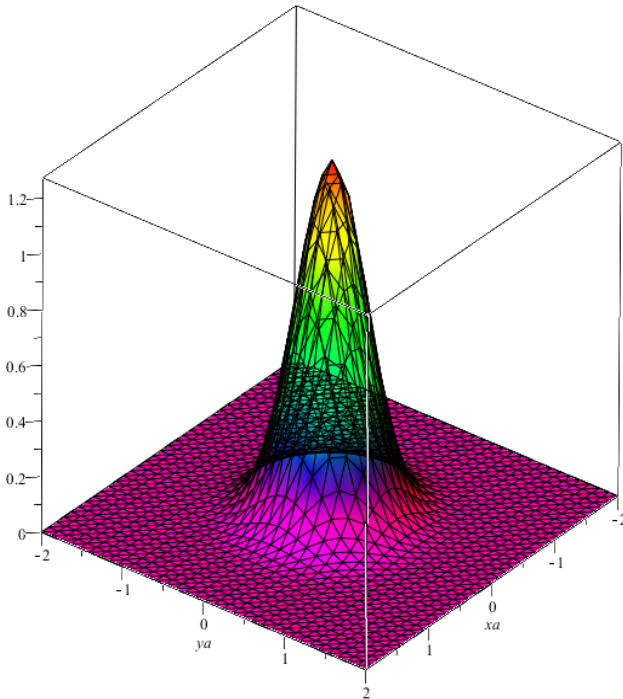
A equação de conservação da massa é reescrita da seguinte maneira:

$$\frac{d\rho_a}{dt} = \sum_b m_b (\vec{v}_a - \vec{v}_b) \cdot \vec{\nabla}_a W_{ab}, \quad (6)$$

levando-se em conta que $\rho = \sum_b m_b W_{ab}$. E a posição de cada partícula pode ser recalculada usando-se a definição de velocidade,

$$\frac{d\vec{r}_a}{dt} = \vec{v}_a. \quad (7)$$

Figura 4. Gráfico do núcleo de interpolação bidimensional de W_{ab} dado na Equação (5) considerando $h=1$ e a partícula centrada em $(0,0)$.



O método apresentado por Monaghan é denominado de Hidrodinâmica Suavizada de Partículas ou SPH. Inicialmente custoso computacionalmente devido ao número de partículas requeridas, mas hoje desponta como uma metodologia muito empregada em áreas de computação gráfica, programação de jogos e efeitos especiais do cinema, fazendo amplo uso da unidade de processamento gráfico dos computadores, a GPU.

2.4 Método Level Set

Porposto por Osher e Sethian (1988) apresentam em seu trabalho o método Level Set. Neste, a interface é identificada por uma isosuperfície ou isolinha de um valor particular da função ϕ , a função level set, sendo ela tipicamente uma função suave. Devido à discretização e às mudanças bruscas de propriedades físicas como densidade e viscosidade na interface, a interpolação gera novamente uma difusão numérica da região da interface e, conseqüentemente, perda de resolução da mesma,

Sussman, Smereka e Osher (1994) aplicam o método na análise do escoamento ascendente de bolhas e a queda livre de gotas. O mapeamento de cada fase é feito pelo sinal que a função level set assume:

- Positiva: fora da bolha ou gota;
- Negativa: dentro da bolha ou gota; e
- Nula sobre a interface.

Todos os campos das propriedades são também calculados como função da função level set, principalmente a função delta de Dirac quando a força de tensão superficial é considerada. A integração das equações de conservação contendo uma função delta de Dirac resulta em uma função de Heaviside do tipo

$$H(\phi) = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{se } \phi > \alpha, \\ \frac{1}{2} & \text{se } \phi < -\alpha, \\ \frac{1}{2} \left[\frac{\phi}{2} + \frac{1}{\pi} \operatorname{sen} \left(\frac{\pi\phi}{2} \right) \right] & \text{se outro caso,} \end{cases} \quad (8)$$

onde α é a espessura característica da interface, considerada igual a $3/2$ do espaçamento de malha.

Na formulação clássica, a função level set é advectada de forma similar à formulação VOF de acordo, por exemplo, com a equação de transporte abaixo:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{\mathbf{u}} \cdot \vec{\nabla} \phi = 0. \quad (9)$$

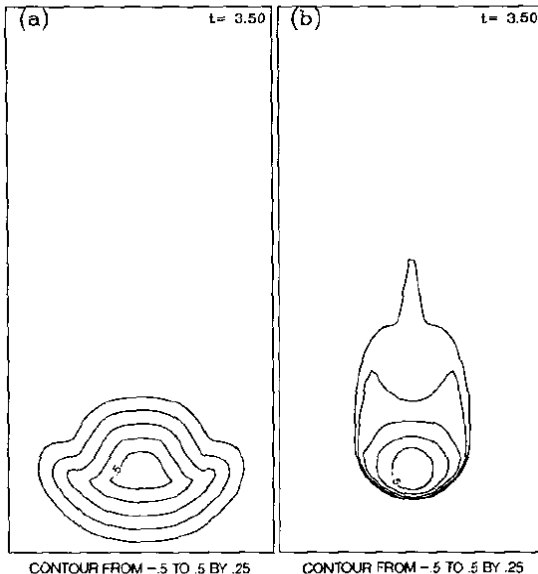
As vantagens da metodologia são a facilidade de sua codificação, o uso de uma malha Euleriana fixa e nenhuma

necessidade de uma rotina, ou algoritmo de busca e reconstrução da interface como no método VOF, além de prover uma forma analítica de calcular a curvatura e a topologia da interface, definida simplesmente como uma isossuperfície da função level set.

Entretanto, o processo de suavização necessário à estabilidade pode gerar perdas de massa substanciais, pois carece de qualquer fundamento conservativo. Sem o ciclo de reinicialização uma perda em massa pode ocorrer, fazendo então necessário um algoritmo de renormalização da função level set e de busca do contorno onde $\phi = 0$ para se achar a interface. Contudo, isto pode gerar distorções da interface (MCCASLIN e DESJARDINS, 2014).

Sem estes cuidados, tem-se na Figura 5 os resultados para uma gota grande em queda livre comparando os resultados obtidos com e sem a reinicialização. Em (b) a não reinicialização gera uma perda de massa na pluma que vai se perdendo na esteira da gota, e gera resultados fisicamente inconsistentes.

Figura 5. Contornos na função level set para uma gota grande. Em (a) tem-se o resultado com a rotina reinicialização, e em (b) o resultado sem ela. Fonte: Sussman, Smereka e Osher (1994).



O método level set tem muitas vantagens computacionais, principalmente sobre o seu custo computacional, além de permitir o cálculo de gradientes analíticos da função level set. Mas a não garantia de conservação é um problema que ainda persiste. No trabalho de Sussman, Smereka e Osher (1994), os resultados obtidos para o comportamento das bolhas e gotas foram bons. O método vem se aprimorando, como pode ser constatado no trabalho recente de (MCCASLIN e DESJARDINS, 2014), e a escolha adequada da função level set e do algoritmo são o ponto chave no sucesso do método. Mas ainda é pouco empregado em simuladores comerciais, contudo, pode ser encontrado no COMSOL Multiphysics. E diferentemente do método VOF de Hirt e Nichols (HIRT e NICHOLS, 1981), não há a aplicação de condições de contorno (quando for o caso) sobre a fronteira livre, pois ela não existe, apenas o mapeamento da função level set.

2.5 Método de Fronteira Imersa – Immersed Boundary

Perskin (2002) descreve o método de fronteira imersa que trata a interface como uma malha de pontos Lagrangeanos permeando uma malha Euleriana quase sempre Cartesiana e estruturada. Os pontos Lagrangeanos da interface são advectados pelo campo de velocidade resolvido na malha cartesiana. Os métodos de acoplamentos entre os dois campos e a sua solução numérica são ainda objetos de estudo. Cada ponto da malha da interface surge nas equações de conservação Eulerianas (Navier-Stokes) como uma função delta de Dirac, e, numericamente, sua representação é geralmente suavizada ou um método espectral é usado para se resolver a integral de convolução que surge da formulação (SZEWC, POZORSKI e MINIER, 2013). Tanto o campo Euleriano como o Lagrangeano são acoplados, e Perskin utilizou uma discretização Runge-Kutta de 4ª ordem. Já o método proposto por Mariano e Colaboradores (2010) são mais rápidos computacionalmente, mas usam transformadas rápidas de Fourier para resolver as equações no espaço espectral, e, logo, as condições de contorno precisam ser periódicas o que limita, até então, sua aplicação a geometrias e problemas simples.

A dinâmica de quebra e coalescência também é um problema, pois se deve postular na formulação numérica quando considerar duas fronteiras imersas distintas ou quando fundi-las. Geralmente qualquer aproximação ou estricção menor que o espaçamento de malha é um bom critério, mas torna o comportamento do sistema extremamente dependente da resolução da malha.

2.6 Método Cut-Cell

O método denominado Cut-Cell (viz. HUA e LOU, 2007) provê uma malha cartesiana ortogonal que se autoadapta se dividindo-se ou se aglomerando localmente para capturar uma fronteira móvel, seja ela fluida ou sólida, um exemplo é mostrado na Figura 6. A conformação com as fronteiras do domínio pode ser feita de diversas maneiras e isto diferencia as diversas variantes do método.

Devido ao seu algoritmo de refinamento da malha nas regiões onde isto é necessário, os problemas de dispersão da interface são contornados. Obviamente outros incômodos são gerados, como os elementos degenerados e/ou células fantasmas são necessárias – formulação *ghost cell* -, muito similar a volumes fictícios na discretização da fronteira.

Quando se tem fronteiras móveis, como uma interface, o uso de pontos marcadores se faz necessário, uma vez que esta fronteira é dinâmica e toda e qualquer parametrização que se possa aplicar à fronteira estática deve agora levar em consideração esta mudança de posição com o tempo. Uma vez de posse dos pontos marcadores uma parametrização pode então ser utilizada para estes pontos e para os pontos de intersecção com a grade cartesiana. Em 2D uma spline cúbica ou uma reconstrução de Bezier podem ser usadas (viz. Figura 7). Ji, Lien e Yee (2009) discorrem sobre estes pormenores e propõem um método mais robusto e eficiente de tratar estes problemas.

Todas as classes de métodos descritos anteriormente como o método VOF, que também possui uma etapa de reconstrução da superfície móvel também pode ser usado (LEVEQUE e SHYUE, 1996), ou mesmo o método Level Set ou Fronteira Imersa, uma vez

sendo os pontos marcadores advectados e sua descrição ser feita por uma abordagem Lagrangeana (UDAYKUMAR *et al.*, 1997).

Figura 6. Vista esquemática da malha cartesiana imposta a um domínio fluido com forma elipsoidal, e os pontos marcadores que representam a fronteira do domínio. Adaptado de Ji, Lien e Yee (2009).

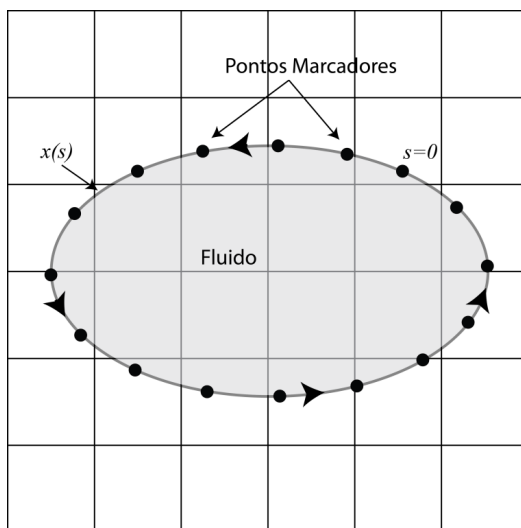
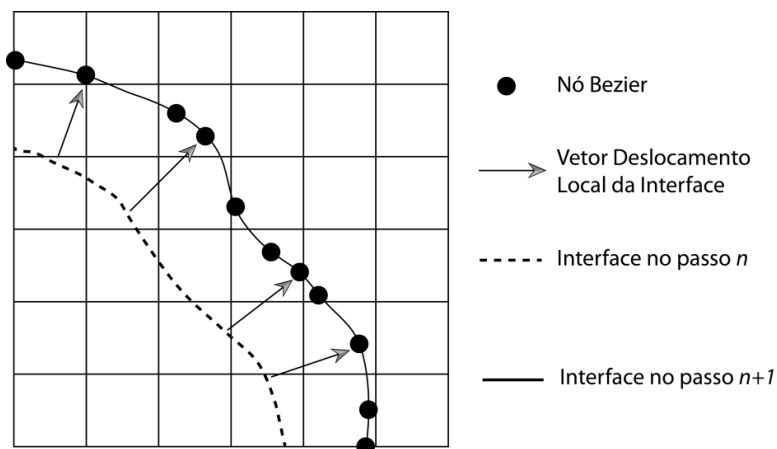


Figura 7. Reconstrução Bezier de uma fronteira móvel. Adaptado de Ji, Lien e Yee (2009)



Chung (2013) emprega o método de Cut-Cell na resolução de escoamentos bifásicos e em colisões com fronteiras sólidas acoplado ao método Level Set. Os resultados podem ser analisados na Figura 8 onde o problema de rompimento de barreira é novamente utilizado na validação do código proposto pelo autor. Na Figura 2.6 Figura 2.6 tem-se a colisão de um cilindro sólido com a superfície livre quiescente.

Figura 8. Problema do rompimento de barreira resolvido pelo Método Cut-Cell. Em (a) e (b) tem-se a comparação dos resultados numéricos de Chung (2013) com os resultados experimentais de Martin e Moyce (1952). À esquerda, o comportamento da malha com a movimentação da interface.

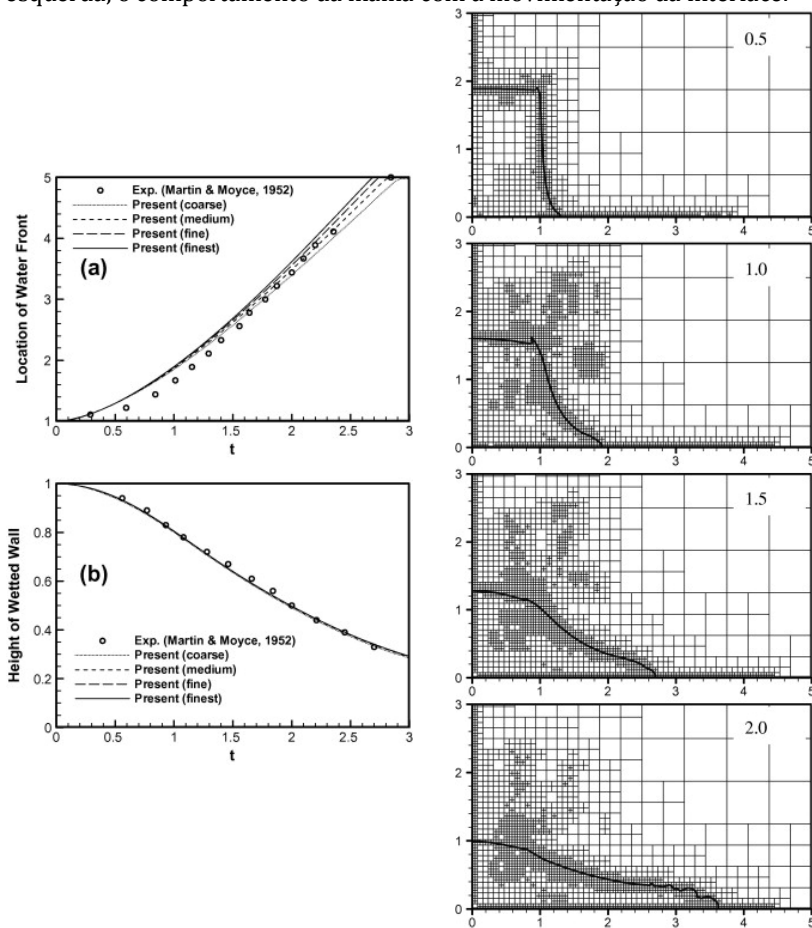
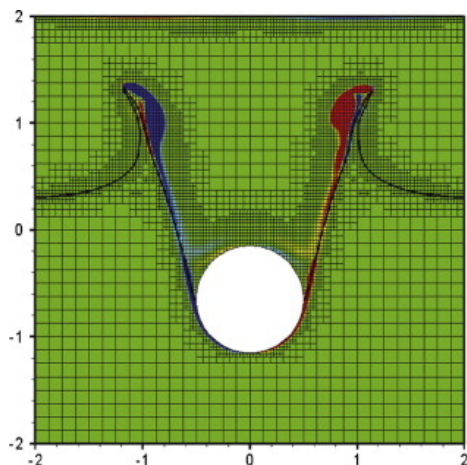


Figura 9. Impacto de um cilindro sólido sobre uma superfície quiescente. Em cores, a componente normal ao plano do campo de vorticidade (Chung, 2013).



Em ambos os resultados a interface é bem resolvida, embora na frente de avanço haja algumas ondulações.

2.7 Modelo Algébrico de Densidade de Área Interfacial - AIAD

Höhne e Vallée (2008), em um estudo de caráter mais prático, analisam o comportamento de escoamentos estratificados em dutos horizontais. As abordagens unidimensionais com promediação transversal não são capazes de capturar adequadamente um regime *slug flow*, por exemplo, o qual possui grande potencial de danos a uma tubulação devido aos gradientes de pressão envolvidos a cada vez que a fase líquida fecha a seção de escoamento e encarcera a fase gasosa de forma abrupta. A Abordagem Euleriana multidimensional é necessária e neste caso, o uso de equações constitutivas para a transferência de quantidade de movimento entre as fases através da interface.

Considerar a natureza destes escoamentos como superfície livre ou como disperso não é estritamente correto, sua morfologia transita entre os dois extremos, logo, as correlações para, por

exemplo, o coeficiente de arrasto são válidas em certo momento e não mais em outro. Isto torna difícil a análise numérica destes escoamentos e, logo, a reprodução dos padrões que se verificam experimentalmente. Para lidar com esta gama de morfologias, Höhhe e Vallée propõem uma solução simples e inteligente descrita seguir.

A magnitude da densidade de força interfacial, ou seja, a força por unidade de volume (N/m^3) devido ao arrasto entre as fases é definida como

$$\|\mathbf{D}\| = C_D A \frac{1}{2} \rho \|\mathbf{U}_{rel}\|^2, \quad (10)$$

onde C_D é o coeficiente de arraste, \mathbf{U}_{rel} a velocidade relativa entre as fases e A a densidade de área interfacial, ou a área da interface por unidade de volume, e ρ a massa específica da fase contínua. Para a fase descontínua, gotas ou bolha, a densidade de área interfacial, a quantidade de área de interface por unidade de volume ($1/\text{m}$), é dada por

$$A_{\alpha\beta} = \frac{6r_a}{d_a}. \quad (11)$$

Para a superfície livre, ou seja, duas fases como uma gás e um líquido, por exemplo, claramente estratificadas, tem-se

$$A_{FS} = \|\vec{\nabla} r_L\|, \quad (12)$$

e a massa específica média calculada por

$$\rho = \alpha_G \rho_G + \alpha_L \rho_L. \quad (13)$$

O modelo Algébrico de Densidade de Área Interfacial, AIAD, apenas mescla estas equações de acordo com funções peso dependentes das frações de cada fase

$$f_B = \left[1 + e^{a_B(r_G - r_{B,lim})} \right]^{-1}, \quad (14)$$

$$f_D = \left[1 + e^{a_D(r_L - r_{D,lim})} \right]^{-1}, \quad (15)$$

$$f_{FS} = 1 - f_D - f_B. \quad (16)$$

Já as escalas características são obtidas por simples superposição linear de cada caso,

$$L_{\alpha\beta} = f_{FS} L_{FS} + f_D d_D + f_B d_B, \quad (17)$$

$$A_{\alpha\beta} = f_{FS}A_{\alpha\beta,FS} + f_D A_{\alpha\beta,D} + f_B A_{\alpha\beta,B}, \quad (18)$$

e o coeficiente de arrasto da Equação (10)

$$C_D = f_{FS}C_{D,FS} + f_D C_{D,D} + f_B C_{D,B}, \quad (19)$$

sendo a_B e a_D os coeficientes da mistura e que devem ser calibrados de acordo com o caso. As frações volumétricas limites permitem que as funções peso não se estendam por todo o domínio de cálculo e se concentrem nas regiões de interesse, neste caso, elas são feitas iguais a 10% do volume ocupado pela fase contínua.

Este modelo é facilmente implementado no simulador comercial ANSYS CFX da versão 10 em diante sem a necessidade de subrotinas, apesar de os autores do modelo empregarem FORTRAN. A comparação dos resultados numéricos e experimentais foram consistentes e quantitativamente satisfatórias para o regime slug flow (HÖHNE e VALLÉE, 2008).

Este é um exemplo de como o comportamento das fases é afetada por uma série de fatores e a captura de todas as nuances de um problema físico desta monta é complexo. Deve-se assinalar que apenas a força de arrasto foi considerada, e como há transição local de um regime estratificado para um disperso de bolhas e gotas, as demais forças de alguma forma atuam nestas e, com toda a certeza, alteram o seu padrão de dispersão e novamente a forma de interação das fases.

A densidade de área interfacial é uma das propriedades que pode sofrer drásticas variações uma vez que ela mede a quantidade de superfície disponível à transferência de qualquer propriedade por unidade de volume de fluidos. E, caso o sistema seja ainda reativo, a área de contato entre as fases sobe em grau de importância.

2.8 Modelo de Transporte de Área Interfacial - IAET

A preocupação de Höhne e Vallè (2008) descrita na Seção anterior em desenvolver um método para o cômputo mais fiel da densidade de área interfacial deve-se ao fato de que, seja qual for o modelo de fechamento que descreva e de como se dá a transferência de qualquer propriedade através da interface, eles são dependentes da área da interface, pois quanto maior a área, maior o contato e interação entre as fases. A área da interface, como em todas as

equações de balanço, é medida por unidade de volume do conjunto das fases. É chamada por isto de densidade de área interfacial.

Considere-se, por exemplo, um escoamento gás-sólido com partículas sólidas esféricas de diâmetro d_p fixo e uniforme em concentração diluída. A área por unidade de volume do conjunto de partículas seria dado por

$$N\pi d_p^2, \quad (20)$$

onde N é a densidade do número de partículas, ou simplesmente, o número de partículas por unidade de volume.

Considerando agora um escoamento gás-líquido como em uma coluna de bolhas, onde as partículas podem agora, além de colidirem entre si e interagirem com a fase contínua líquida, partirem-se, coalescerem, e aumentar de diâmetro à medida que sobem na coluna devido à diminuição da pressão hidrostática. Logo, a Equação (20) varia o número de partículas no tempo e localmente, bem como o diâmetro, assim, tem-se para a área

$$N(t, d_p, \mathbf{x})\pi d_p^2(t, \mathbf{x}). \quad (21)$$

A simplicidade da Equação (21) é apenas aparente, pois determinar a variação dos diâmetros de partículas e o número das mesmas consiste em se definir como e quando cada fenômeno de quebra, coalescência, mudança de forma, geração e destruição de novos grupos de diâmetros ocorre, e requer o conhecimento físico e a descrição matemática de cada fenômeno, além de outros processos como condensação, ebulição, e cavitação quando for o caso. Em sistemas reativos, a determinação da área de contato entre as fases é mister na determinação do rendimento das reações envolvidas.

Kocamustafaogullari e Ishii (1995) assinalam a importância da densidade do número de partículas e, similarmente à equação de transporte de Boltzmann, tratam da densidade do número de partículas com volume v com a seguinte equação de transporte:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f \bar{\mathbf{v}}_p) = \sum_{j=1}^4 S_j + S_{ph}, \quad (22)$$

onde $f(\bar{\mathbf{x}}, v, t)$ é a função de distribuição da densidade de partícula assumida contínua numa região $d\bar{\mathbf{x}}$ entorno de $\bar{\mathbf{x}}$ a um dado tempo

t com partículas de volume entre v e $v+dv$; e $\bar{v}_p(\bar{x}, v, t)$ é a velocidade das partículas com volume entre v e $v+dv$. O termo S_{ph} é a o termo fonte relacionado à mudança de fase; e o termo $\sum_{j=1}^4 S_j$ o fonte relacionado à dinâmica de quebras e coalescências. Os termos S_1 e S_2 representam as taxas de criação ou destruição de partículas de volume v por unidade de volume de mistura, respectivamente pelo processo de quebra. Enquanto os termos S_3 e S_2 as taxas destruição ou a geração de um determinado grupo pelo processo de coalescência, respectivamente. Cada fonte destes requer um modelo constitutivo adequado.

A Equação (22) nesta forma implica na sua solução para cada classe de partículas de volume v . A sua integração sobre toda a faixa de volumes resulta e uma equação íntegro-diferencial da densidade do número de partículas de todos os tamanhos por unidade de volume, $N(\bar{x}, t)$,

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \nabla \cdot (N \bar{v}_{pm}) = \sum_{j=1}^4 \int_{v_{\min}}^{v_{\max}} S_j dv + \int_{v_{\min}}^{v_{\max}} S_{ph} dv , \quad (23)$$

onde,

$$N(\bar{x}, t) = \int_{v_{\min}}^{v_{\max}} f(\bar{x}, v, t) dv , \quad (24)$$

e

$$\bar{v}_{pm} = \frac{\int_{v_{\min}}^{v_{\max}} f(\bar{x}, v, t) v_p(\bar{x}, v, t) dv}{\int_{v_{\min}}^{v_{\max}} f(\bar{x}, v, t) dv} . \quad (25)$$

A equação de transporte da densidade de área interfacial é obtida pela multiplicação da Equação (22) pela área interfacial média $A_i(v)$,

$$\frac{\partial [f A_i(v)]}{\partial t} + \nabla \cdot [f A_i(v) \bar{v}_p] = \sum_{j=1}^4 A_i(v) S_j + A_i(v) S_{ph} , \quad (26)$$

e que da mesma maneira, deve ser integrada em todas as faixas de volumes de partículas, resultando na seguinte equação,

$$\frac{\partial a_i}{\partial t} + \nabla \cdot (a_i \bar{\mathbf{v}}_i) = \sum_{j=1}^4 \phi_j + \phi_{ph} , \quad (27)$$

onde $a_i(\bar{\mathbf{x}}, t)$ é a densidade de área interfacial média da faixa de partículas com volumes entre v_{\min} e v_{\max} e definida como

$$a_i = \int_{v_{\min}}^{v_{\max}} f(\bar{\mathbf{x}}, v, t) A_i(v) dv . \quad (28)$$

A velocidade da interface, $\bar{\mathbf{v}}_i(\bar{\mathbf{x}}, t)$, é definida em termos da média como segue,

$$\bar{\mathbf{v}}_i(\bar{\mathbf{x}}, t) = \frac{\int_{v_{\min}}^{v_{\max}} f(\bar{\mathbf{x}}, v, t) A(v) \bar{\mathbf{v}}_p(\bar{\mathbf{x}}, v, t) dv}{\int_{v_{\min}}^{v_{\max}} f(\bar{\mathbf{x}}, v, t) A(v) dv} . \quad (29)$$

Os termos fontes médios também são definidos em termos das integrais

$$\phi_j = \int_{v_{\min}}^{v_{\max}} A_i(v) S_j(\bar{\mathbf{x}}, v, t) dv, \quad (30)$$

$$\phi_{ph} = \int_{v_{\min}}^{v_{\max}} A_i(v) S_{ph} dv.$$

Para a fração de vazios – a fração volumétrica de partículas – novamente multiplica-se a Equação (22), mas agora pelo volume da partícula e integra-se a equação resultante em todas as faixas de volume, observando que a fração volumétrica, α_i , é definida como

$$\alpha_i = \int_{v_{\min}}^{v_{\max}} f(\bar{\mathbf{x}}, v, t) v dv , \quad (31)$$

e a velocidade baricêntrica média da fase dispersa

$$\bar{\mathbf{v}}(\bar{\mathbf{x}}, t) = \frac{\int_{v_{\min}}^{v_{\max}} f(\bar{\mathbf{x}}, v, t) \bar{\mathbf{v}}_p(\bar{\mathbf{x}}, v, t) v dv}{\int_{v_{\min}}^{v_{\max}} f(\bar{\mathbf{x}}, v, t) v dv} , \quad (32)$$

resultando em

$$\frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_i \bar{\mathbf{v}}_i) = \int_{v_{\min}}^{v_{\max}} \left(\sum_{j=1}^4 \phi_j + \phi_{ph} \right) v dv . \quad (33)$$

As grandezas, $a_i(\bar{\mathbf{x}}, t)$, $\alpha_i(\bar{\mathbf{x}}, t)$, resultam da promediação de correlações de 2ª ordem e são, portanto, momentos estatísticos¹ da área interfacial e do volume, respectivamente em relação à densidade média do número de partículas, $N(\bar{\mathbf{x}}, t)$, função esta da integração da equação de transporte da função de distribuição.

Acoplando este conjunto de equações ao balanço de quantidade de movimento da fase contínua e da dispersada, e em cada equação de fechamento dos termos de densidade de forças interfaciais, a densidade de área interfacial necessária às equações de fechamento é agora dada pela Equação (27).

Estas equações ainda são locais e precisam ser passadas ainda pelo processo de promediação empregado na abordagem Euleriana, e equações de fechamento devem ser postuladas para cada fenômeno envolvido nos termos fontes relacionados à agregação, quebra, condensação, etc. Kocamustafaogullari e Ishii desenvolvem estes termos em seu trabalho.

Diversos trabalhos enveredam por esta abordagem, e em praticamente sua maioria, o foco se dá em como melhorar o cálculo da densidade de força interfacial, seja via equações de transporte ou por correlações calibradas ao caso em análise.

Smith e Colaboradores (2012) propõem a divisão em duas classes de partículas na análise de escoamentos de bolhas em dutos de grandes diâmetros, onde bolhas de Taylor ou bolhas do tipo “cap” podem surgir, por exemplo, aprimorando os mecanismos de interação nas fontes da equação de transporte da densidade de área interfacial - IAET.

Correlações para o cálculo da densidade de área interfacial podem ser obtidas obtendo-se uma solução em regime permanente unidimensional das equações anteriores (HIBIKI e ISHII, 2002) tendo muitas a sua forma funcional dada por

$$a_i \approx Z \left(\frac{\sigma}{\rho_f} \right)^{-H} \alpha^\Theta \varepsilon^X, \quad (34)$$

onde Z é um coeficiente de fechamento e H , Θ e X expoentes a determinar. As variáveis envolvidas são: a tensão superficial, σ ; a

¹ O Método dos Momentos é apresentado na Seção 2.9.

fração de vazios, α ; e a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta por unidade de massa ε . Hibiki e Ishii apresentam uma ampla compilação dos dados e das correlações disponíveis.

O uso de uma Equação como a (34) tem uma vantagem óbvia: não resolver um conjunto de equações íntegro-diferenciais como as Equações (23)-(33). O que torna o processo computacionalmente mais ágil.

Cabe observar que toda esta abordagem é específica para escoamentos dispersos ou polidispersos e que se propõe ao tratamento de uma classe de problemas industriais bem específicas, mas de ampla utilidade dada a grande ocorrência de dutos e colunas com este tipo de escoamento.

2.9 Método dos Momentos- MOM

Como apresentado na Seção anterior, em escoamentos multifásicos com fases dispersadas como partículas sólidas, bolhas e/ou gotas, algumas abordagens específicas podem ser empregadas. As partículas por si podem ser tratadas por meio da teoria cinética (CHAPMAN e COWLING, 1990) como um escoamento granular que no limite diluído, o sistema é dominado por colisões binárias e encarado como um “gás granular”. Contudo, quando o número de partículas é considerável a quantidade de interações entre as mesmas e a complexidade delas não permite mais esta abordagem, pois a dinâmica de contato partícula-partícula se torna dominante. O número de Knudsen pode ser usado para avaliar em que limite se trabalha,

$$Kn = \frac{\lambda}{L}, \quad (35)$$

onde λ é o caminho livre médio e L a escala característica representativa do escoamento.

Quando $Kn \gg 1$ ou $Kn \sim 1$, a hipótese de meio contínuo não tem mais aplicabilidade e a dinâmica descrita pela teoria cinética, ou outra que leve em conta o comportamento mecânico-estatístico nesta escala é a mais adequada, pois o caminho livre médio é comparável ou mesmo muito maior que a escala característica (ex: diâmetro médio da partícula ou átomo, diâmetro médio de poro em uma matriz sólida).

Já quando $Kn \ll 1$, a hipótese do contínuo pode ser aplicada e as interações partícula-partícula se tornam dominantes e as funções de distribuição de velocidades são praticamente distribuições Maxwellianas e a abordagem de Boltzmann se torna mais adequada (FOX, 2008).

A interação com uma fase fluida contínua faz com que além das interações partícula-partícula, haja arrasto e neste caso o número de Reynolds (Re) baseado no diâmetro de partícula é outro parâmetro importante². Soma-se a isto a consideração acerca do número de Stokes (St), o qual mede a razão entre o tempo de resposta da partícula em relação à escala de tempo característica do escoamento. Esta razão pode ser entendida, grosso modo, como uma medida da inércia da partícula,

$$St = \frac{\tau U_o}{d_p}, \quad (36)$$

onde τ é o tempo de relaxação da partícula e o fator U_o/d_p o tempo característico do escoamento. Caso o número de Reynolds seja baixo o suficiente, ou seja, $Re \ll 1$, temos

$$St = \frac{\rho_d d_p^2}{18\mu_g}. \quad (37)$$

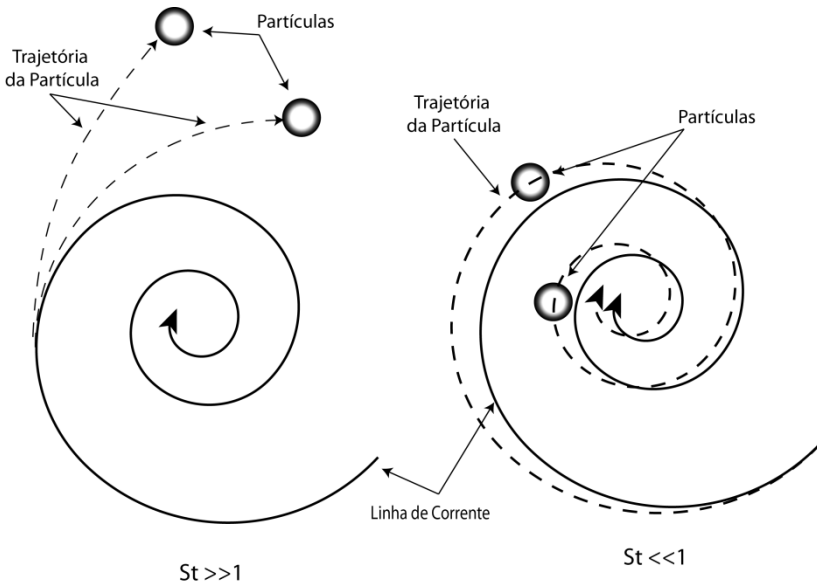
Caso tenha-se $St \gg 1$, implica que a partícula tende a seguir a sua trajetória e demora a responder às mudanças do seu entorno. O caso oposto, $St \ll 1$ o tempo de resposta da partícula é curto e qualquer mudança no escoamento altera sua trajetória drasticamente no sentido das linhas de corrente do escoamento da fase contínua. A Figura 10 ilustra esta discussão.

Um número de Stokes muito pequeno implica que a partícula tem praticamente a mesma velocidade da fase contínua. Estas diferenças dizem, por exemplo, em uma formulação Euler-Lagrange - considerando frações volumétricas moderadas, tem-se um acoplamento de uma ou duas vias -, se o fluido é influenciado pelo campo de velocidade das partículas ou se apenas as partículas

² Nestas situações, onde há uma fase fluida contínua separando os elementos do conjunto, ou conjunto de partículas, tem-se um sistema multifásico disperso.

são passivamente advectadas pelo campo. Em ambos os casos as interações entre partículas e com as paredes podem ser consideradas.

Figura 10. Ilustração do comportamento de partículas e de como suas trajetórias são influenciadas frente a diferentes números de Stokes.



A grande variabilidade destes números adimensionais torna difícil o tratamento destes problemas, uma vez que pode haver regiões densas ou rarefeitas, com limites tendendo à diluição ou com alta concentração de partículas, e ainda com uma distribuição variada de velocidades e tamanhos de partículas, e neste caso, o sistema pode-se chamar polidisperso. E neste último caso, dependendo da situação, há a necessidade extra de se efetuar um balanço populacional, ou seja, dada uma distribuição de partículas divididas em categorias de tamanho, acompanhar sua evolução no tempo em aumento ou diminuição no seu número, e no seu transporte e interações entre si e com a fase fluida contínua.

Uma das maneiras de se acoplar este balanço populacional ao campo de velocidade da fase é por meio do modelo de múltiplos grupos de tamanho, ou MUSIG (LO, 1996), onde a distribuição de tamanhos é dividida em classes e são levados em conta mecanismos

de criação e destruição destes grupos devido a interações diversas. Como uma forma de simplificação e diminuição de esforço computacional, pode-se considerar que toda a distribuição compartilha o mesmo campo de velocidade, sendo que os diâmetros de cada grupo irão influenciar as equações constitutivas de fechamento e das respectivas correlações dos coeficientes de cada formulação. É possível também subdividir os campos de velocidade em faixas de pequenos, médios e grandes tamanhos, sendo que o ideal é cada classe possuir seu próprio campo de velocidade. O modelo MUSIG está disponível no simulador comercial ANSYS CFX desde sua versão 5.7.

Dada à natureza estatística das distribuições dos campos de velocidade, concentração de partículas e taxa de colisão e os fenômenos a eles associados como quebra, coalescência, crescimento por evaporação ou condensação, por exemplo, outra abordagem e que vem ganhando terreno nos últimos anos na descrição de escoamentos mono e polidispersos é o *método dos momentos* (MOM), momentos estes estatísticos³.

Para esclarecer: momentos estatísticos, grosso modo, são apenas correlações entre uma, duas ou mais grandezas. O tensor de Reynolds, $-\rho \overline{u'_i u'_j}$, é um momento de segunda ordem, pois envolve a correlação das flutuações entre duas componentes do campo de velocidade. O problema de fechamento da turbulência está diretamente ligado à impossibilidade de se obter equações de transporte aos termos que vão surgindo, pois a cada novo grupo de equações um momento ou correlação de ordem superior é gerado, obrigando à imposição de relações constitutivas e modelagem destes termos.

McGraw (1997) apresenta o método dos momentos no tratamento de aerossóis. Os momentos de mais baixa ordem (1^a, 2^a e 3^a) são suficientes para se descrever as principais características do sistema. O momento radial de k-ésima ordem para distribuição de tamanhos pode ser escrito como

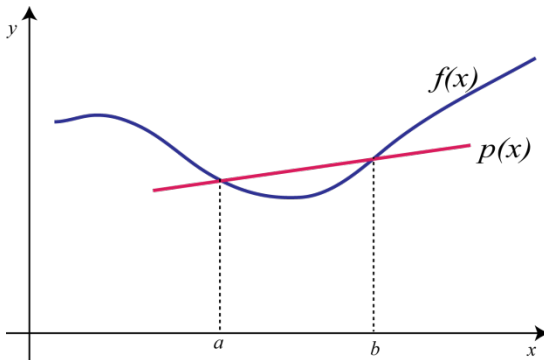
$$\mu_k = \int r^k f(r) dr , \quad (38)$$

³ Não confundir com *momentum*, termo usado para denominar quantidade de movimento.

onde $f(r)$ é a função de distribuição para o número de partículas ou densidade de partículas tendo um raio variando de r até $r + dr$. O mapeamento da evolução temporal destes momentos é feito resolvendo as integrais nas equações de transporte de cada grandeza envolvida no cálculo dos momentos por meio de quadratura gaussiana ao invés do fechamento exato da Equação (38) de onde vem o nome quadratura de momento (QMOM). A proposta de McGraw contorna o problema de explicitar uma forma matemática fechada para termos de crescimento, por exemplo.

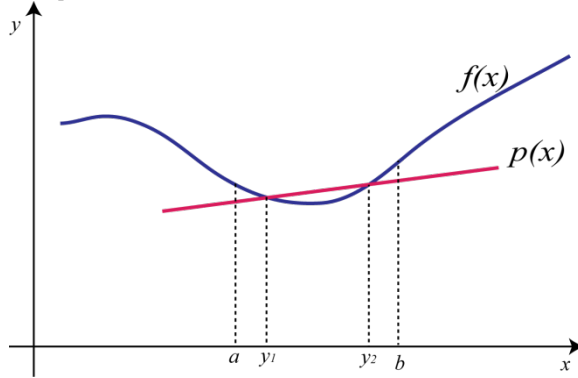
A integração de uma $f(x)$ no intervalo $[a, b]$ pode ser aproximada numericamente por um seguimento de reta $p(x)$, que pode ser calculada pela regra do trapézio formado por $p(a)$ e $p(b)$ e $dist[a, b]$ como ilustra a Figura 11.

Figura 11. Aproximação numérica da integral de $f(x)$.



A aplicação de um polinômio interpolador como o ilustrado na Figura 12 que neste caso intercepta a função em pontos diferentes dos limites de integração de maneira que as áreas para mais e para menos se compensem no sentido de minimizarem o erro cometido com a aproximação numérica. O problema então é definir-se em quais pontos y_1 e y_2 interceptar a função de modo que o erro seja o menor possível.

Figura 12. Aproximação numérica da integral de $f(x)$ aplicando um polinômio interpolador.



A integração por quadratura gaussiana consiste em escolher de forma adequada abscissas e pesos específicos de maneira que

$$\mu_k = \int r^k f(r) dr \approx \sum_{i=1}^n r_i^k w_i, \quad (39)$$

$$A = \int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^{n-1} w_i f(x_i), \quad (40)$$

sendo que os coeficientes w_i (os pesos) e os pontos x_i (as chamadas abscissas) são independentes da função escolhida e são definidos de modo que a aproximação seja exata até polinômios de ordem $2n - 1$ para n pontos de intersecção. A descrição detalhada está fora do escopo do trabalho e pode facilmente ser encontrada em compêndios de cálculo numérico.

Assim, retornando à Equação (38) pode-se escrever

$$\mu_k = \int r^k f(r) dr \approx \sum_{i=1}^{n-1} r_i^k w_i. \quad (41)$$

Vikas e Colaboradores (2011) aplicaram uma abordagem QMOM na análise em um reator de coluna de bolhas. O modelo empregado para fase contínua é uma formulação Euleriana padrão, e que será apresentada em detalhes mais adiante no Capítulo 3. A fase gasosa dispersada é tratada via teoria cinética com uma distribuição Maxwelliana,

$$f_{eq}(\bar{\mathbf{v}}) = \frac{N}{(2\pi\sigma_{eq})^{3/2}} \exp\left(-\frac{\|\bar{\mathbf{v}} - \bar{\mathbf{U}}_b\|}{2\sigma_{eq}}\right), \quad (42)$$

onde σ_{eq} é feito igual à temperatura granular Θ . Assim, sob um referencial Euleriano, considera-se a equação cinética na forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \bar{\mathbf{v}} \cdot \nabla f + \frac{\partial}{\partial \bar{\mathbf{v}}} \cdot \left(f \frac{\bar{\mathbf{F}}}{m_b} \right) = \mathbb{C}, \quad (43)$$

onde $\mathbb{C} = (f - f_{eq})/\tau_c$ representa a taxa de variação na função do número de densidade de bolhas inversamente proporcional à escala tempo de interação τ_c ; e m_b a massa de cada bolha onde atua a força $\bar{\mathbf{F}}$ (gravidade, interação com a fase líquida, etc.). A sua forma Lagrangeana é dada por

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{\mathbf{x}}}{dt} &= \bar{\mathbf{v}}, \\ m_b \frac{d\bar{\mathbf{v}}}{dt} &= \bar{\mathbf{F}} + m_b \mathbb{C}. \end{aligned} \quad (44)$$

O acoplamento entre a fase contínua – descrita pela formulação padrão Euleriana, e a discreta – descrita pela teoria cinética se dá por meio dos momentos. No caso, 10 momentos de ordem 0-3 são considerados no espaço 2D:

$$\mathbf{W} = [M^0 \ M_1^1 \ M_2^1 \ M_{11}^2 \ M_{12}^2 \ M_{22}^3 \ M_{111}^3 \ M_{112}^3 \ M_{122}^3 \ M_{222}^3], \quad (45)$$

onde cada superíndice representa a ordem do momento definidos pelas integrais de distribuição

$$\begin{aligned} M^0 &= \int f d\bar{\mathbf{v}}, \quad M_i^1 = \int v_i f d\bar{\mathbf{v}}, \\ M_{ij}^2 &= \int v_i v_j f d\bar{\mathbf{v}}, \quad M_{ijk}^3 = \int v_i v_j v_k f d\bar{\mathbf{v}}. \end{aligned} \quad (46)$$

Com as seguintes equações de transporte derivadas da Equação (43):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial M^0}{\partial t} + \frac{\partial M_i^1}{\partial x_i} &= 0, \\
\frac{\partial M_i^1}{\partial t} + \frac{\partial M_{ij}^2}{\partial x_j} &= F_i^1, \\
\frac{\partial M_{ij}^2}{\partial t} + \frac{\partial M_{ijk}^3}{\partial x_k} &= C_{ij}^2 + F_{ij}^2, \\
\frac{\partial M_{ijk}^3}{\partial t} + \frac{\partial M_{ijkl}^4}{\partial x_l} &= C_{ijk}^3 + F_{ijk}^3.
\end{aligned} \tag{47}$$

onde os termos F são termos fontes que representam forças que atuam em cada bolha, e os termos C as interações bolha-bolha. O conjunto de Equações (47) é não fechado, pois cada momento possui um acoplamento com um de ordem imediatamente superior. A solução é prover uma equação de fechamento e resolver o sistema pelo *algoritmo de inversão* descrito em Fox (2008), encontrando os respectivos pesos e abscissas necessários à integração numérica pelo método de quadratura discutido anteriormente. Santos (2010) em seu trabalho descreve uma ampla bibliografia sobre o tema e as fundamentações matemáticas do método.

2.10 Modelo de Múltiplos Grupos de Tamanho - MUSIG

O método MUSIG (LO, 1996), como já comentado na Seção anterior, trata de considerar as diferentes famílias, classes ou grupos de partículas subdividindo-as em faixas discretas de tamanho dentro da distribuição. Esta necessidade não é um preciosismo físico, mas surge da necessidade da descrição mais acurada do escoamento, pois quando a fração de vazios é alta, o campo de velocidade da fase contínua é fortemente afetado pela fase dispersada e o acoplamento entre as fases se torna mais intenso.

A dinâmica de quebras e coalescências é uma das mais importantes na descrição de como estes grupos irão evoluir. A placa perfurada de uma coluna de bolhas (*sparger*) quando bem calibrada, gera uma faixa de diâmetros bem fixa e estreita, quando não, uma única. E, à medida que estas bolhas sobem pela coluna líquida, colidem entre si e com a parede, agrupam-se e se partem gerando novos diâmetros de bolha, além da variação da pressão hidrostática

que faz com que a bolha se expanda. O Modelo MUSIG se compromete em tratar esta dinâmica.

O modelo MUSIG pode ser encarado como uma evolução conceitual da equação de balanço populacional, PBE. Segundo Lim e colaboradores (2002) a equação de balanço populacional pode ser escrita como

$$\frac{dN_i}{dt} = \left(\frac{dN_i}{dt} \right)_{\text{nucleação}} + \left(\frac{dN_i}{dt} \right)_{\text{crescimento}} + \left(\frac{dN_i}{dt} \right)_{\text{aglomeração}} + \left(\frac{dN_i}{dt} \right)_{\text{quebra}} \quad (48)$$

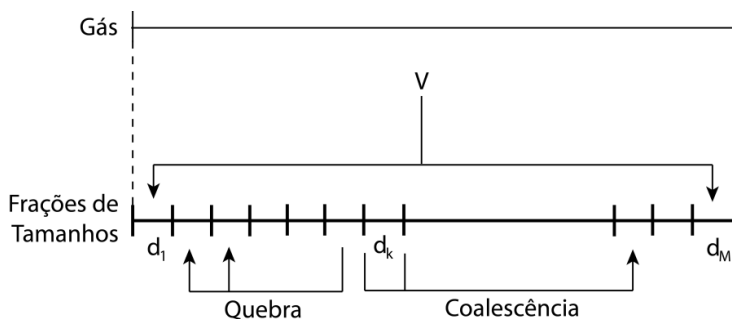
Cada termo de variação consiste em um conjunto de equações constitutivas. Lim *et al.* aplicaram a solução da PBE na análise de crescimento de cristais acoplado ao método Front Tracking (UNVERDI e TRYGGVASON, 1992; HUA, STENE e LIN, 2008; SUI *et al.*, 2010; SHIN, YOON e JURIC, 2011).

Azizi e Al Tawell (2010) trabalham diretamente com a solução da PBE e desenvolvem seu trabalho no tratamento das dificuldades numéricas desta solução, incluindo o surgimento de diâmetros negativos – oscilações numéricas -, propondo um algoritmo acurado para a solução de quebra e coalescência em escoamentos submetidos a cisalhamento intenso.

Krepper e Colaboradores (2008) fori um dos grupos responsáveis pela implementação do modelo MUSIG no código comercial ANSYS CFX. A descrição correta das forças que atuam nos grupos define como se dará a dispersão da fase gasosa dentro do seio líquido. A força de sustentação – Lift Force – é a responsável principal por esta segregação radial entre os grupos, e a consideração de um tamanho único fornece resultados bem distintos do que se observa experimentalmente neste tipo de situação.

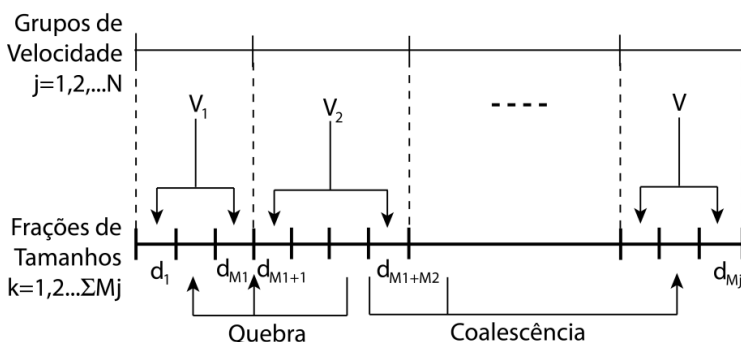
O Métodos de Momentos, Transporte de Área Interfacial e Equação de Balanço Populacional são capazes de lidar com esta dinâmica. O Método MUSIG divide a fase gasosa (ou líquida) dispersada em N grupos de velocidade não homogêneos e cada grupo é subdividido em M_j classes de tamanhos de bolhas. Os fenômenos de quebra e coalescência são então modelados de maneira apropriada. A Figura 13 ilustra como a fase dispersa é organizada em grupos de tamanhos e em que regiões os fenômenos de quebra e coalescência ocorrem.

Figura 13. Modelo MUSIG padrão ou homogêneo. Um único grupo de velocidade é dividido em classes de tamanhos (KREPPER *et al.*, 2008).



Um aprimoramento do modelo MUSIG padrão é considerar subgrupos de tamanhos diferentes tenha cada um o seu próprio campo de velocidade como apresenta Figura 14. A esta abordagem denomina-se MUSIG não homogêneo. Resolver grupos diferentes de velocidade implica em maior esforço computacional e é matematicamente equivalente a se resolver outra fase dispersada, com as mesmas propriedades físicas das outras fases dispersadas, mas com uma distribuição de tamanhos numa faixa diferente.

Figura 14. Modelo MUSIG não homogêneo com os subgrupos de velocidade (KREPPER *et al.*, 2008).



Liao e Colaboradores (2011) focam seu trabalho no aprimoramento dos mecanismos de quebra e coalescência, pois este é o ponto fraco do modelo, caso estes mecanismos sejam mal descritos, o modelo falhará. Isto posto, um modelo que considera

outras interferências neste processo incluem coalescência devido à turbulência, cisalhamento laminar, entranhamento em esteira⁴ e captura por vórtices; enquanto os mecanismos de quebra consideram também a flutuação turbulenta do campo, cisalhamento laminar e interfacial. Esta mecânica é toda implementada na versão 12 do ANSYS CFX e releases posteriores.

Lucas e Colaboradores (2011) apresentam uma extensão do modelo MUSIG não homogêneo considerando também agora o processo de condensação, pois até então apenas os processos de quebra e coalescência eram considerados. Os resultados demonstraram a ampliação do método com bons resultados.

2.11 Método de Rastreamento de Frente – Front Tracking

A necessidade de se resolver a interface acuradamente é um problema que possui várias abordagens como visto em Seções anteriores. Com esquemas numéricos de baixa ordem a difusão numérica degenera a posição da interface enquanto esquemas de alta ordem podem levar a oscilações numéricas. Unverdi e Tryggvason (1992) apresentam o Método de Rastreamento de Frente, ou Front Tracking, onde a interface é rastreada explicitamente permitindo a transição fina entre propriedades como densidade e viscosidade, e mesmo a inclusão da tensão superficial. Este método elimina a necessidade de esquemas e algoritmos complexos empregados na resolução e captura da interface.

Os métodos de rastreamento podem ser superficiais ou volumétricos, um exemplo é o que faz emprego de partículas marcadoras, e tem grande emprego por sua fácil implementação. Um aprimoramento desta ideia é rastrear a interface em si, utilizando para isto elementos geométricos adicionais na sua descrição que são advectados pelo escoamento. Estes elementos podem ser um conjunto de partículas conectadas entre si formando uma grade independente da malha do domínio e deformável. A

⁴ A esteira neste caso é causada pela bolha ou gota que deixa atrás de si na sua trajetória, e que, dependendo do regime, causa grande agitação na sua passagem podendo agregar e quebrar estruturas vizinhas.

questão que surge é obviamente como fazer estas estruturas geométricas interagirem entre si.

O trabalho de Unverdi e Tryggvason (1992) trata do escoamento de bolhas em um meio estagnado, e neste tipo de escoamento, as bolhas podem assumir várias formas, como esféricas, elipsoides, calotas esféricas, entre outras. Clift, Grace e Weber (1978) apresentam um diagrama de regimes e a dependência destes regimes com o número de Reynolds de Partícula, Eötvös⁵ e Morton como ilustrado na Figura 15.

Estes parâmetros adimensionais são definidos como segue:

$$\begin{aligned} Re &= \frac{\rho d_b U}{\mu}, \\ Eo &= \frac{g \Delta \rho d_p}{\sigma}, \\ M &= \frac{g \mu^4 \Delta \rho}{\rho^2 \sigma^3}. \end{aligned} \quad (49)$$

Hua, Stene e Lin (2005) aprimoraram o algoritmo de Unverdi e Tryggvason (*op. cit.*) para a simulação tridimensional de bolhas com altos números de Reynolds e Bond (ou Eötvös), e razões de viscosidade e densidade elevadas como os que se encontram no escoamento ar-água, muito comuns em operações industriais. O refino adaptativo também é adicionado ao método, tanto na malha Euleriana Cartesiana, quanto na superficial na interface.

Na proposta, as equações de Navier-Stokes são resolvidas em uma malha regular multibloco com estrutura adaptativa, e a malha da interface é representada por um conjunto de marcadores que são rastreados explicitamente e formam a estrutura de elementos triangulares da malha da interface que é advectada com a velocidade do fluido circundante. A estrutura das malhas é apresentada na Figura 16.

⁵ Pronuncia-se *Ertversh*.

Figura 15. Diagrama de regimes de forma de bolhas (THOMAS e ZHANG, 2001).

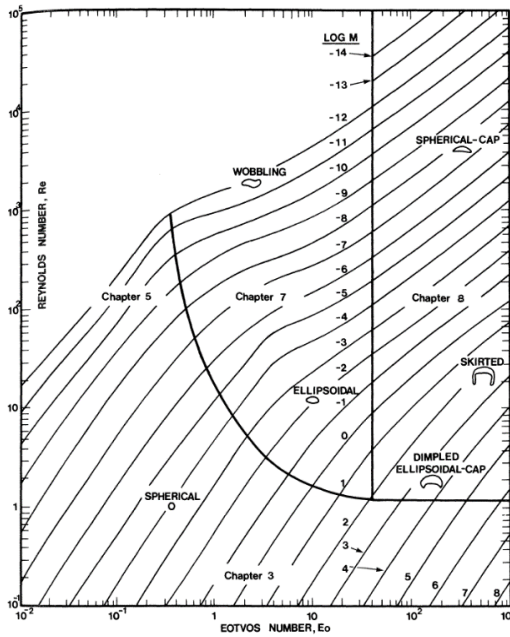
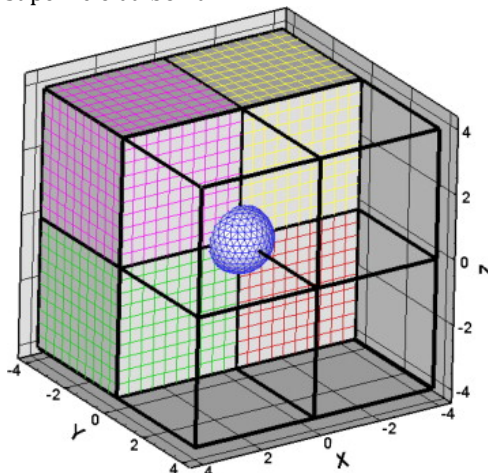


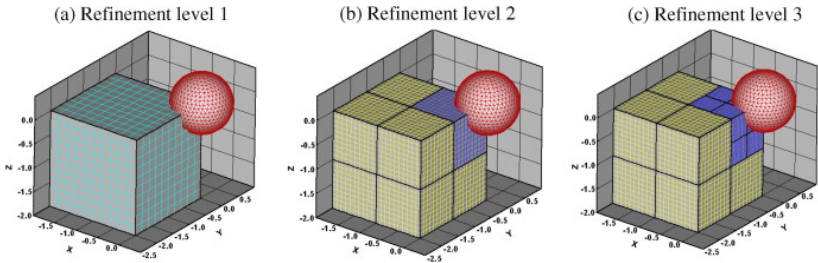
Figura 16. Malha multiblocos cartesiana, e a malha triangular não estruturada da superfície da bolha.



O algoritmo denominado PARAMESH, permite que nas regiões vizinhas à malha superficial haja um refino local adaptativo como mostrado na Figura 17. O refino da malha do domínio é muito similar ao método Cut-Cell na hierarquia de refinamento local cartesiano.

Apenas um conjunto de equações são resolvidas de forma “monofásica”, mas com propriedades variáveis definidas pela transição da interface assumida com uma espessura finita com cerca de 4 vezes o menor espaçamento de malha da vizinhança – por isto a necessidade de um refinamento local.

Figura 17. Refino adaptativo local da malha cartesiana entorno da malha superficial mostrando os estágios dos níveis de refinamento.



Estas características se assemelham ao método VOF, pois a interface varia de maneira suave e a formulação é também “monofásica” com propriedades variadas de acordo com a fração volumétrica. Um campo de uma propriedade material qualquer $b(\mathbf{x}, t)$ pode ser reconstruído da seguinte maneira:

$$b(\mathbf{x}, t) = b_l + (b_b - b_l)I(\mathbf{x}, t), \quad (50)$$

onde

$$I(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega(t)} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}'. \quad (51)$$

Tomando-se o gradiente da Equação (51), e empregando o Teorema de Stokes

$$\nabla I(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega(t)} \nabla \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' = \int_{\Gamma(t)} \mathbf{n} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') ds, \quad (52)$$

e depois o seu divergente,

$$\nabla^2 I(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \int_{\Gamma(t)} \mathbf{n} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') ds, \quad (53)$$

gera-se uma equação de Poisson para a solução da função de distribuição $I(\mathbf{x}, t)$, permitindo que se calcule adequadamente qualquer propriedade física ponderada de acordo com a Equação (50). Todavia, esta função tem como um termo fonte uma função delta de Dirac, e isto causa alguns inconvenientes numéricos.

Perskin (1977) no Método de Fronteira Imersa aplicado à solução do escoamento de sangue dentro do coração contornou este problema propondo uma aproximação do tipo Gaussiana

$$D(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \begin{cases} \frac{1}{(4h)^3} \prod_{i=1}^3 \left[1 + \cos\left(\frac{\pi}{2h} |x_i - x_{i,f}|\right) \right] & \text{se } |x_i - x_{i,f}| < 2h, \\ 0 & \text{se } |x_i - x_{i,f}| \geq 2h. \end{cases} \quad (54)$$

O que permite agora a solução da Equação (53) de forma contínua e suave, pois o termo fonte faz com que a função indicadora varie suavemente de zero na fase sólida até um na fase gasosa. A tensão superficial se utiliza da mesma função de distribuição na sua implementação.

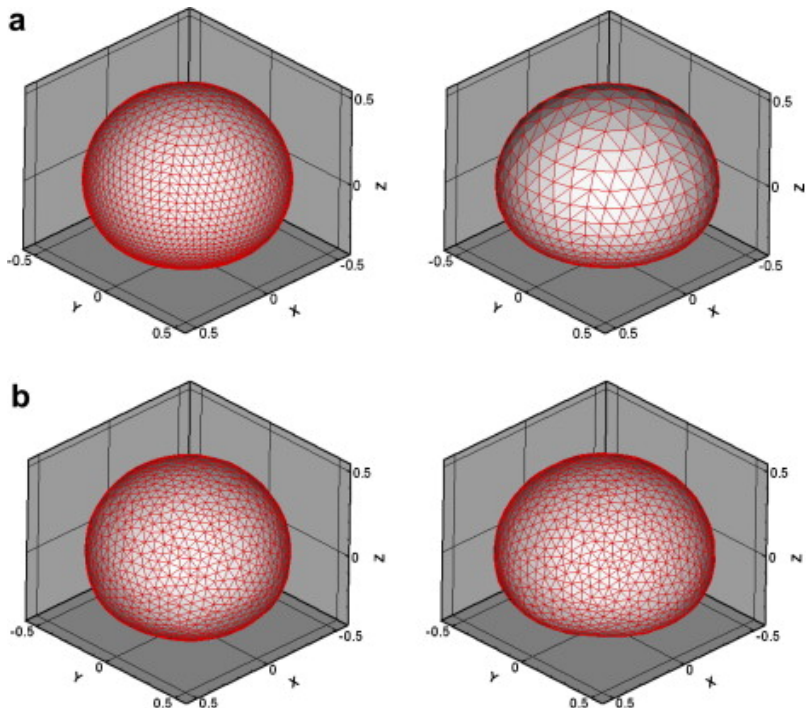
Os marcadores da frente se movem de acordo com

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_f(\mathbf{x}_f, t) &= \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) D(\mathbf{x} - \mathbf{x}_f), \\ \mathbf{x}_f^{n+1} &= \mathbf{x}_f^n + \mathbf{u}_f \Delta t, \end{aligned} \quad (55)$$

movimentando os marcadores com a mesma velocidade do fluido em torno. E, à medida que a bolha se movimenta e se deforma, os pontos marcadores se distanciam no seu topo e se concentram na sua base e isto muda a resolução de malha. Logo, uma etapa de refinamento da frente se faz necessária como ilustrado na Figura 18.

Este método tem sido útil no estudo da interação entre partículas e de sistemas com um número limitado de partículas como na análise numérica da quebra, mudança de forma, ou a coalescência de duas bolhas, por exemplo. Mas em sistemas polidispersos com altas frações de vazio, a complexidade e o custo computacional seriam tais que uma abordagem puramente Euleriana LES ou DNS seriam equiparáveis.

Figura 18. Detalhe do passo de refinamento da malha da interface. (a) sem refinamento adaptativo, (b) com refinamento adaptativo.



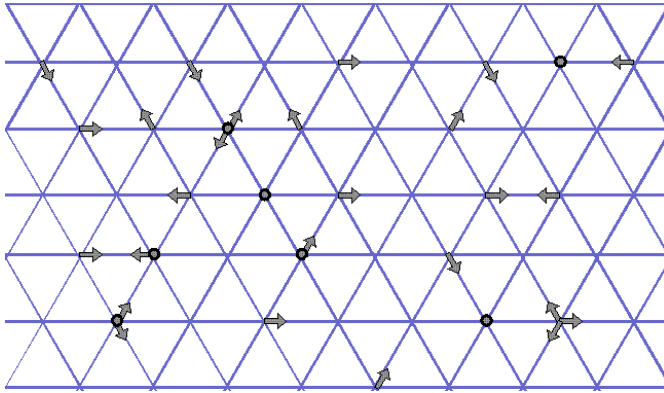
2.12 Métodos Lattice Boltzmann

Um método que não poderia ficar à margem é o método Lattice Boltzmann. Com o desenvolvimento da Teoria Cinética dos Gases emergindo entre os séculos XVIII e XIX com Daniel Bernoulli, e sendo aprimorada por pesquisadores do porte de Maxwell e Clausius. Na segunda metade do século XIX, Ludwig Boltzmann aprimora a Teoria Cinética generalizando a Lei de distribuição de Maxwell para gases poliatômicos e submetidos a forças externas (SANTOS, 2000).

O modelo de gás em rede – Lattice Gas – é composto de um conjunto de partículas ocupando os vértices de uma rede uniforme no espaço. As partículas só podem ocupar os nós da rede saltando

de um sítio (um nó) a outro vizinho em um passo de tempo discreto gerando um conjunto discreto de velocidades. A cada passo as partículas são reordenadas por meio de um conjunto de regras que emulam as colisões entre partículas⁶ tomando-se o cuidado para conservar o número de partículas e a quantidade de movimento de cada sítio, conforme o exemplo de rede mostrado na Figura 19.

Figura 19. Rede hexagonal suas partículas e direções de propagação. Santos (2000).



Os modelos podem comportar mais de uma partícula por sítio, em movimento ou em repouso, e as regras de colisão podem ser estatísticas ou determinísticas. As colisões podem ser binárias ou mais complexas de acordo com o modelo.

A descrição detalhada do método Lattice Boltzmann pode ser encontrada em Santos (2000). A equação microscópica de Boltzmann que descreve a evolução da rede é

$$n_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = n_i(\vec{X}, T) + \omega_i[\mathbf{n}(\vec{X}, T)], \quad (56)$$

onde n_i representa a função que indica ou não a presença de uma partícula em um sítio da rede possuindo velocidade \vec{c}_i em unidades da grade; e ω_i é o operador de colisão.

⁶ De acordo com cada modelo.

A descrição microscópica retém mais informação do que o necessário e o seu valor médio é suficiente para a descrição do escoamento na rede. Assim, aplicando uma média de conjunto sobre todas as realizações (eventos) e varrendo todos os estados possíveis que podem ser acessados pela rede, tem-se

$$N_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = N_i(\vec{X}, T) + \Omega_i \left[\mathbf{N}(\vec{X}, T) \right], \quad (57)$$

que é a equação para gás em rede de Boltzmann⁷.

A partir de uma série de premissas adequadas, pode-se obter uma equação para a conservação da massa e de conservação de quantidade de movimento similares as equações da continuidade e Navier-Stokes, respectivamente. Assim, a Equação (57) se encontra em uma escala mesoscópica entre a escala onde Navier-Stokes (macroescala, teoria de campo e modelos determinísticos) e a Mecânica Estatística Clássica (microescala, distribuições estatísticas e modelos *ab início* e estocásticos) trabalham.

Mas por que preocupar-se com estas escalas? A resposta surge nas equações de campo macroscópicas:

- *Qual a dimensão da interface?*
- *Como é o comportamento dos fluidos junto das interfaces?*
- *A condição de contorno sobre uma interface é free, no-slip, ou algo intermediário?*
- *Interfaces junto das fronteiras sólidas se comportam exatamente de que maneira?*

E mais uma série de outras tantas questões que podem surgir durante o desenvolvimento de um modelo, e nem sempre estes detalhes são levados em conta ou mesmo percebidos por alguns pesquisadores. A condição de não deslizamento, por exemplo, foi debatida durante décadas pela comunidade científica, e embora a olho nu ela pareça ser verdadeira, há sempre um “*E se...*”. E ela nem sempre é válida, e um exemplo disto é justamente o ponto da linha de contato entre dois fluidos imiscíveis. Pela condição de

⁷ A hipótese de ergodicidade está implícita neste procedimento de promediação

não deslizamento ela deveria ser estática, mas, no entanto, move-se a uma taxa que é dependente do ângulo de contato da interface, o qual depende da interação fluido-parede sujeita às leis físicas que são definidas em escalas microscópicas.

Por meio do Método Lattice Boltzmann, pode-se obter densidade, viscosidades, forças de interação entre fluido-parede que seriam usados em um modelo macroscópico aonde a hipótese do contínuo seja válida. A formulação não está limitada apenas a escoamentos de gases podendo ser empregada para líquidos também. A Figura 20 ilustra um processo de coalescência predita numericamente empregando o Método Lattice Boltzmann.

Alguns códigos comerciais se utilizam de formulações híbridas tratando regiões do escoamento com diferentes abordagens matemáticas, um destes é o XFLOW3D® (<http://www.xflow-cfd.com/>) capaz de resolver macro e meso escalas sem recorrer a uma DNS clássica com um refino de malha intenso. Nas regiões onde as escalas características são pequenas o domínio é subdividido como no esquema Cut-Cell e nela a formulação de Boltzmann é empregada.

Um trabalho em que uma abordagem híbrida é empregada é o de Sui e Colaboradores (SUI *et al.*, 2010) onde o Método Lattice Boltzmann é usado para modelar os fluidos em contato e a interface é mapeada pelo Método Front Tracking. O resultado pode ser visto na Figura 21.

Figura 20. Evolução do processo de coalescência pelo método Lattice Boltzmann, (SANTOS, 2000).

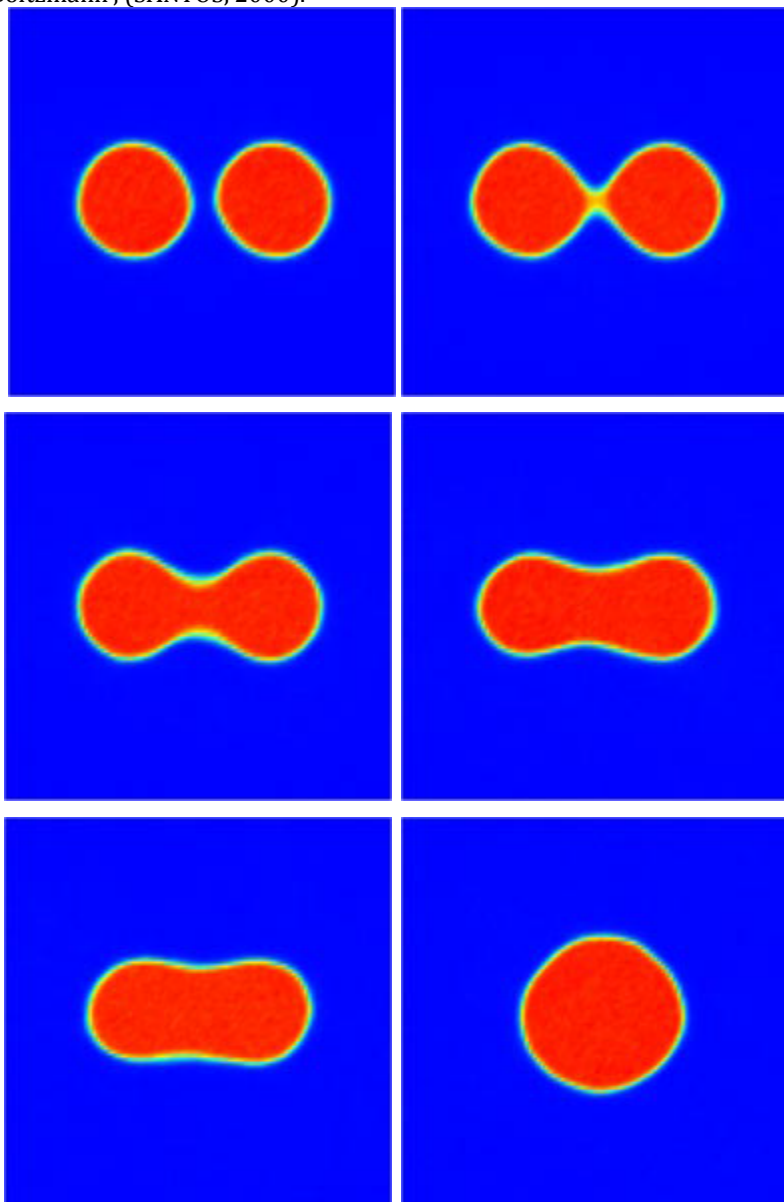
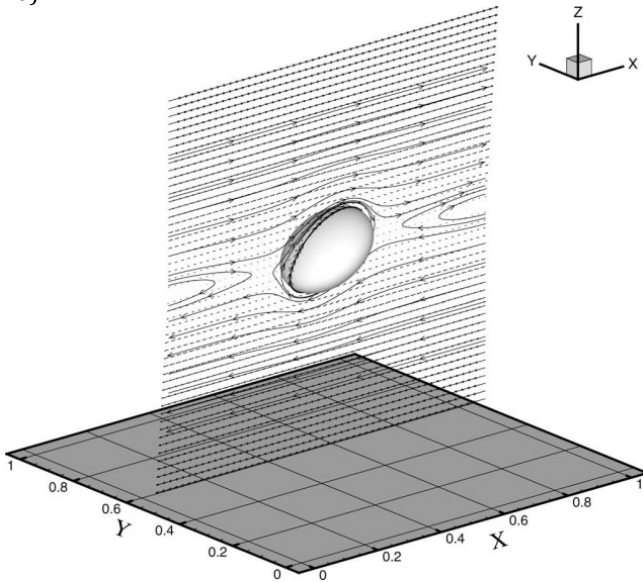


Figura 21. Campo de velocidade em torno de uma cápsula deformada, (SUI et al. 2010).



2.13 Modelos Constitutivos de Fechamento

Artigos sobre os modelos constitutivos de fechamento são vários e há um sem número de artigos que tratam de correlações que sempre aprimoraram a situação em estudo, mas quando levados à prática em outras situações diferentes ou similares em que os limites da operação em si são estendidos, nem sempre podem ser extrapolados.

Uma grande dificuldade é relativa a quais informações podem ser extraídas de um experimento, e por mais bem conduzido que este seja, são sempre resultados de uma média de realizações. Certos comportamentos ou variáveis são de uma dificuldade imensa de se capturar em tempo real e com o nível de detalhe intrínseco de cada fenômeno, como, por exemplo, o desenvolvimento e a interação da camada limite sobre a interface e deformação de uma bolha enquanto esta sobe por uma coluna de bolhas.

Dijkhuizen e Colaboradores (2005) investigaram numericamente a ascensão de bolhas de ar em água usando uma formulação VOF 2D, e Front Tracking em 3D para quantificar a interferência da 3ª dimensão na análise 2D. O coeficiente de arrasto pode ser calculado considerando o instante quando a bolha alcança sua velocidade terminal,

$$C_D = \frac{4(\rho_l - \rho_g)gd_b}{3\rho_l V_T^e}, \quad (58)$$

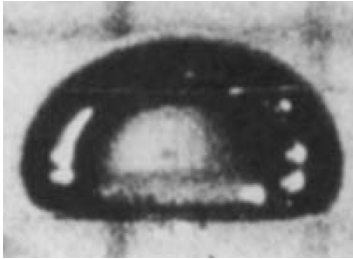
onde V_T é a velocidade terminal da bolha, a qual é constante para a bolha, pois nesta situação a aceleração devido ao empuxo é equilibrada pelo arrasto. Já no início da ascensão, a aceleração da bolha é mais alta, embora sua velocidade ainda seja praticamente nula, e neste período a força de massa virtual se torna mais importante que o arrasto e é equilibrada pelo empuxo, e assim, o coeficiente de massa virtual pode ser expresso por

$$C_{VM} = -\frac{\rho_g}{\rho_l} + \frac{(\rho_l - \rho_g)g}{\rho_l \frac{dV_b}{dt}}, \quad (59)$$

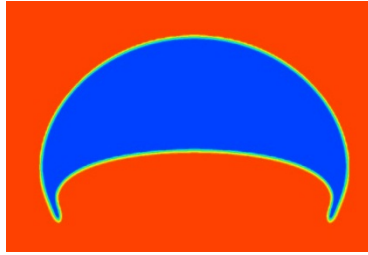
sendo o termo dV_{rel}/dt a aceleração da partícula, e V_{rel} a velocidade relativa entre a fase líquida e a bolha.

A obtenção destes parâmetros pode ser feito dinamicamente ou no pós-processamento dos resultados. Georg *et al.*, Rezende *et al.* e Maliska *et al.* (2008a; 2008b; 2008; 2008) estudaram a ascensão de bolhas pelo método VOF usando o código ANSYS CFX R11 em simulações DNS. Os valores previstos para os coeficientes das forças de interface obtiveram boa concordância reiterando os resultados obtidos por Dijkhuizen *et al.* (2005). Na Figura 22 mostra-se a comparação dos resultados numéricos obtidos com os experimentais de Bhaga e Weber (1981).

Figura 22 Gráfico Comparativo Numérico- Experimental da simulação de uma bolha ascendente.



(BHAGA e WEBER, 1981)



(REZENDE, GEORG e MALISKA, 2008)

O procedimento de cálculo destes coeficientes é computacionalmente custoso, pois envolve integração, avaliação da aceleração da velocidade relativa além do custo associado à própria simulação DNS. A Figura 23 apresenta a variação da velocidade, da forma e da força de arrasto de uma bolha. O tamanho do domínio tem forte influência sobre os resultados.

Tabib, Roy e Joshi (2008) estudaram a influência das forças de arrasto, sustentação, massa virtual e dispersão turbulenta (Drag e Lift Forces) em colunas de bolhas em conjunto com o emprego de modelos de turbulência $k-\varepsilon$, Tensor de Reynolds (RSM) e LES. E assinalam a importância adequada dos coeficientes de arrasto e sustentação para capturar o padrão de dispersão observado experimentalmente.

O Modelo RSM apresenta melhor comportamento no que diz respeito aos perfis de energia cinética turbulenta, enquanto o LES representa melhor o perfil de fração de vazios. O artigo apresenta uma série de correlações e valores para estes coeficientes ilustrando a variedade e, conseqüentemente, os erros que podem ser cometidos na escolha da correlação sem se saber como cada uma foi obtida e como foi o seu sucesso quando aplicada.

Obviamente, a profusão de correlações e modelos torna isto no mínimo frustrante, pois a não ser que se tenha uma carreira plenamente dedicada a esta problemática, tal como Tomyama, Ishii e Hibiki - pesquisadores e referências constantes na área -, só para citar alguns, a análise matemática e numérica perde sua praticidade, e o que acaba por ocorrer é o uso das correlações mais bem

sucedidas e disponíveis nos simuladores comerciais como o ANSYS CFX e Fluent. E este uso acaba por torná-las mais populares não por sua acurácia ou robustez, mas apenas por uma praticidade guiada pelas demandas do mercado e da indústria por soluções de engenharia.

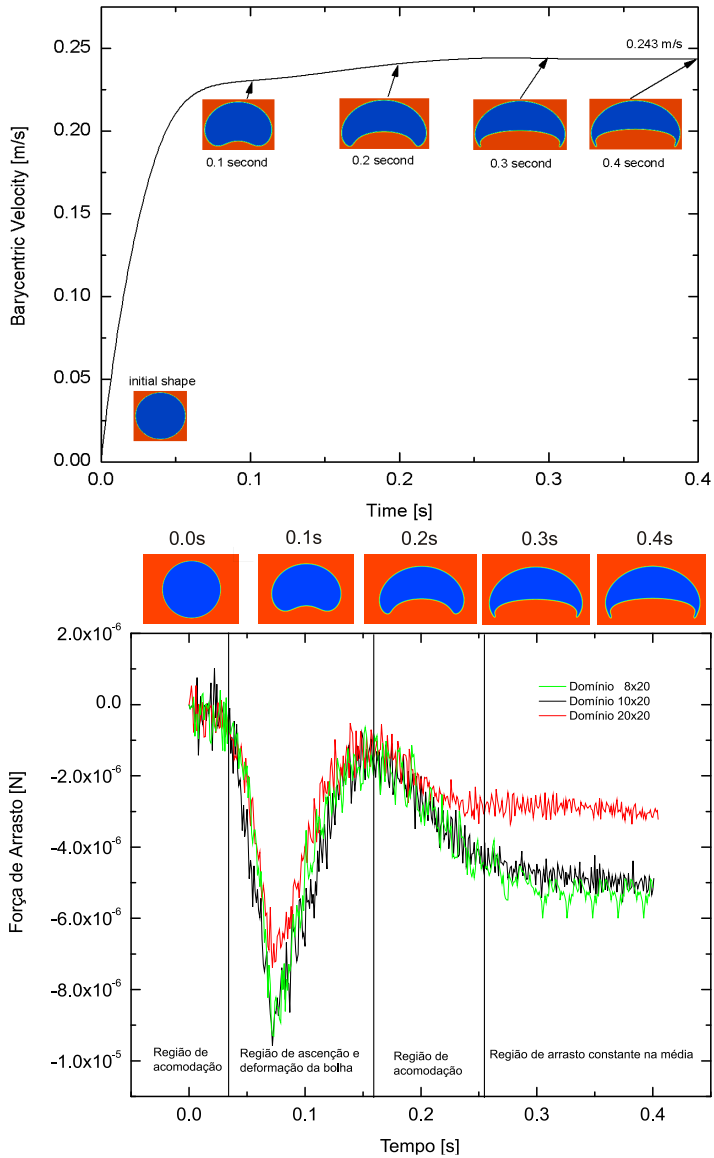
Em essência, como todo modelo de fechamento, a equação constitutiva é deduzida com base em fundamentos físicos conhecidos, ou induzidos com base empírica, e todo o reconhecimento acerca dos detalhes e dos porquês de tal modelo ser de certa maneira é enclausurada dentro dos coeficientes de fechamento como o de arrasto, por exemplo. Esta constatação é provavelmente algo de que não se pode desviar.

Em um artigo Hiniki e Ishii (2007) propõem mais uma maneira de calcular o coeficiente da força de sustentação para uma bolha deformável e estendem sua aplicabilidade a sistemas multiparticulados, e, na sua discussão eles apresentam catalogadas nada menos que trinta e oito correlações para o coeficiente entre os anos de 1965 e 2005, todas variando em várias faixas de número de Reynolds para variadas situações práticas.

Diante disto, deve-se questionar: *Por que se passaram os últimos 50 anos investindo na busca de novas correlações para cada uma das variadas forças decompostas que agem sobre a interface ao invés de se repensar a maneira de se modelar matematicamente o problema?*

Não que investir nesta busca seja uma perda de tempo, pelo contrário, é algo necessário e a prática vem demonstrando que é uma via que dá resultados. Mas seria a única? Investir em novas formas de encarar o problema também é fundamental.

Figura 23. Velocidade terminal e variação da força de arrasto com a forma da bolha (Rezende, Georg e Maliska, 2008).



2.14 Considerações Finais

Praticamente todos os trabalhos apresentados aqui têm em comum dois pontos de atuação: *a boa localização da interface e a boa descrição das forças que agem sobre a mesma* de modo a reproduzir o mais fidedignamente o comportamento das fases. Seja melhorando os algoritmos ou propondo novos paradigmas e incluindo mais detalhes físicos, a busca é sempre por melhores modelos de fechamento ou localizar o mais precisamente possível a fronteira móvel – a interface e então ali aplicar as condições físicas que atuam no problemas.

Cada uma ao seu turno fundamenta-se em muitas observações experimentais e tenta corrigir falhas das abordagens vigentes de maneira a melhorar uma classe de operações, como uma coluna de bolhas ou escoamentos bifásicos em dutos, devido principalmente ao seu interesse industrial. Alguns trabalhos são frutos de uma década ou mais de um determinado grupo que em cada novo trabalho adiciona mais complexidade ao modelo anterior de maneira a deixá-lo mais apropriado a uma determinada aplicação.

Tem-se então uma série de métodos, e um sem número de modelos de fechamento para forças de arrasto, sustentação, lubrificação, massa virtual, modelos de quebra, coalescência, cavitação, ebulição, condensação, etc. Alguns artigos surgem como *reviews* destas correlações e as discutem fazendo um balanço do que se tem à mão de melhor no momento.

Mas então, ao que isto leva? Qual o melhor modelo a empregar quando o objeto de estudo não se enquadra em nenhuma das situações em que as abordagens foram desenvolvidas? Por que as correlações não conseguem ser gerais e, principalmente, porque as forças sobre a interface são decompostas em uma série de classes e não em uma única? E ainda, porque considerar ou desconsiderar algumas na análise? Obviamente, muitas destas questões são respondidas com bom senso e prática, mas mesmo assim, há muita margem de incerteza e os porquês de uma abordagem ou outra nem sempre são justificativas rigorosas.

Um bom exemplo desta discussão são os modelos de turbulência. Um analista calcula o número de Reynolds que se encontra numa faixa em que se espera turbulência, e, sem hesitação,

utiliza um modelo RANS, por exemplo, o $k - \varepsilon$. Todavia, a Equação de Navier-Stokes não discerne entre os dois regimes, apenas nossa discretização temporal e espacial é adequada ou não a resolver o escoamento. A função prática do modelo de turbulência é aumentar a difusividade cinemática de quantidade de movimento de forma a estabilizar a solução numérica diminuindo o número de Reynolds efetivo, resultando em uma solução do campo médio. Quando bem resolvido, informações sobre a estatística dos campos também amentam a quantidade de informações sobre o estado do sistema, como por exmplo, as tensões das flutuações turbulentas. Mas o sistema seria numericamente instável sem o modelo de turbulência? A resposta depende do solver do algoritmo, do método de discretização, dos gradientes envolvidos, se o sistema admite matematicamente múltiplas soluções e uma série de parâmetros que estão relacionados à implementação de determinado método numérico.

Muitos problemas de Reynolds moderados não precisam de modelos de turbulência, pois a Equação de Navier-Stokes já descreve esta física desde a sua concepção. Esta assertiva não deve ser confundida com a simulação numérica direta – DNS, onde todas as escalas de tempo, espaço e velocidade do escoamento são resolvidas.

O passo de tempo e a resolução da malha atuam como filtros capazes de amortecerem as perturbações geradas pela não linearidade do termo advectivo da equação de Navier-Stokes. Um exemplo de onde ocorre este mau entendimento é visto em (FUKANO e INATOMI, 2003) na resolução do escoamento bifásico em dutos horizontais. Não obstante aos resultados excelentes do trabalho, seu título é categórico em afirmar a característica DNS do trabalho, e basta calcular-se o número de Reynolds e comparar ao seu espaçamento de malha para ver que este último é maior que as escalas dissipativas de Kolmogorov, ou seja, não há DNS, há um modelo sem tratamento especial da turbulência URANS ou submalha.

No contexto dos escoamentos multifásicos observa-se o mesmo tipo de prática. Sob o ponto de vista da interface, não há uma superposição de forças independentes, há apenas uma em cada ponto de sua superfície e que somadas definem a sua forma e a trajetória do elemento de fluido que elas encerram.

As forças que atuam sobre a interface resultam da projeção do tensor tensão de cada fase sobre a interface dando como consequência uma força resultante, que claro, pode ser decomposta nas que são usualmente trabalhadas. E estas informações já estão contidas no escoamento, basta que se calcule a força resultante devido à ação do tensor tensão na interface. E esta constatação é independente da morfologia ou regime, ela é sempre verdadeira, tanto que as condições de salto não são condições de contorno de velocidade ou de equilíbrio de força e sim de conservação de fluxo de tensões. E uma vez que a força agindo em uma superfície material é resultado do fluxo de tensão que a travessa, a determinação das tensões sobre a interface resultará na força resultante que age sobre a mesma e que se encaixa na dedução da equação de Navier -Stokes por meio da 2ª Lei de Newton.

Esta tese se propõe então a atuar na análise deste paradigma modelando o tensor tensão sobre a interface não decompondo as forças que agem sobre ela, e deixando a cargo do escoamento nos dizer o que age ou não age sobre a interface das fases que o compõe.

CAPÍTULO 3

MODELAGEM MATEMÁTICA

3.1 Introdução

O objetivo deste Capítulo é descrever uma das vias de obtenção das equações dos modelos matemáticos utilizados neste trabalho. As formas de se fazer isto são várias e a maioria delas permitem a obtenção do mesmo conjunto de equações. Todavia, algumas delas carecem de um formalismo matemático e físico mais sólido, uma delas, é a metodologia de *Volume de Controle*, pois em certo ponto da dedução matemática a hipótese do contínuo é violada, e a representação dos escoamentos multifásicos é feita quase que sempre pela representação matemática de campos macroscópicos e relações constitutivas baseadas na hipótese do contínuo. Exceções a isto, pode-se assinalar o método Lattice Gas ou Lattice Boltzmann apresentado no Capítulo anterior.

Algumas referências são indicadas como leitura complementar ou base matemática e conceitual para alternativas de obtenção das equações, entre estas, Drew (1983; 1992), Barbosa Jr. (2002), Ishii e Hibiki (2006), e Rezende (2009).

3.2 Metodologia de Volumes de Controle

O balanço em volumes de controle, embora muito prático e usual, se aplicado a escoamentos multifásicos sem um embasamento formal físico e matemático adequado gera inconsistências e violações de princípios como a *hipótese do contínuo*, por exemplo. A presença de fronteiras móveis dentro do volume de controle é uma

das causas deste inconveniente, e a falha principal está no conceito de *fração volumétrica*.

Seja $R_\alpha(V)$ a fração do volume arbitrário V , ocupado por duas fases, α e β , segundo a Figura 24. E seja $V_\alpha(\mathbf{x}, t)$ o volume da fase α no interior de V , tem-se,

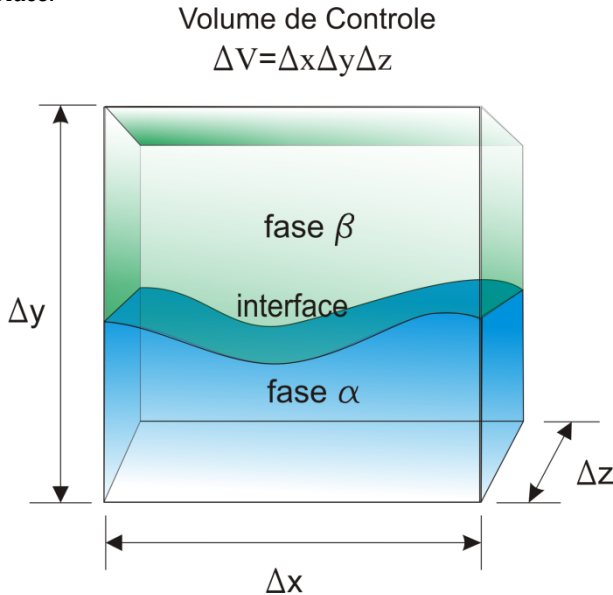
$$R_\alpha(V) = \frac{V_\alpha(\mathbf{x}, t)}{V}. \quad (60)$$

Colapsando o volume V em um ponto \mathbf{x} qualquer contido em V , fazendo-o tender a zero, onde $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$, pode-se definir o conceito de *fração volumétrica*, $r_\alpha(\mathbf{x}, t)$ como

$$r_\alpha(\mathbf{x}, t) = \lim_{V \rightarrow 0} R_\alpha(\mathbf{x}, t). \quad (61)$$

Podendo a mesma definição ser estendida às demais fases que constituem o sistema. Considere-se, por enquanto, a fase α .

Figura 24. Volume de controle contendo duas fases imiscíveis e separados pela interface.



A massa específica de cada fase é definida de maneira similar à fração volumétrica. Seja, portanto, a massa da fase α

contida no volume V dada por $M_\alpha(V)$. A sua massa específica é então definida como

$$\rho_\alpha(\mathbf{x}, t) = \frac{M_\alpha(V)}{V_\alpha(\mathbf{x}, t)}. \quad (62)$$

Note que a massa específica é calculada por *unidade de volume da fase α* . A massa da fase α por unidade total de volume material V é dada por $r_\alpha(\mathbf{x}, t)\rho_\alpha(\mathbf{x}, t)$. A quantidade de massa presente em um volume de controle arbitrário é calculada por

$$\int_V r_\alpha \rho_\alpha dV. \quad (63)$$

Aparentemente, não há nada de errado com estas definições mas, pela definição da Equação (61), quando o volume V tende a zero implica que V tende ao ponto \mathbf{x} , e fisicamente duas porções de matéria não podem estar presentes no mesmo ponto do espaço ao mesmo instante de tempo. Pois, pela hipótese do contínuo, há uma distribuição contínua de matéria, e, *para cada ponto do espaço matematicamente identificado, assume-se que há apenas uma partícula de fluido associada*.

Assim, $r_\alpha(\mathbf{x}, t)$ é igual a um no ponto \mathbf{x} quando a fase α está presente no volume V e quando este tende à zero no ponto \mathbf{x} , ou igual a zero quando no ponto \mathbf{x} a fase α não estiver presente. A consequência disto é a *descontinuidade* da Equação (61), $r_\alpha(\mathbf{x}, t)$ definida desta maneira não é uma propriedade que possa descrever rigorosamente os campos macroscópicos. Esta é a principal dificuldade na modelagem matemática destes escoamentos (ISHII e MISHIMA, 1984).

Há argumentos mais filosóficos que propriamente matemáticos para manter esta definição considerando que, fisicamente, V não é tão pequeno ($V \rightarrow \delta V$), como argumenta Drew (1992) em uma discussão similar a apresentada aqui, e contornar este problema, pois este *volume material* está em uma escala em que as flutuações moleculares não afetem os campos no seu interior (macro escala), e nem que seja grande demais de modo que as variações espaciais sejam apreciáveis, ou seja, uma argumentação de embasamento físico aceitável.

Isto é aceitável quando consideramos que na formulação numérica haverá sempre uma região com volume diferente de zero, e assim, na prática estaríamos utilizando como definição de fração volumétrica a Equação (60), que fisicamente apenas representa o percentual do volume material preenchido por determinada fase, ao invés da Equação (61).

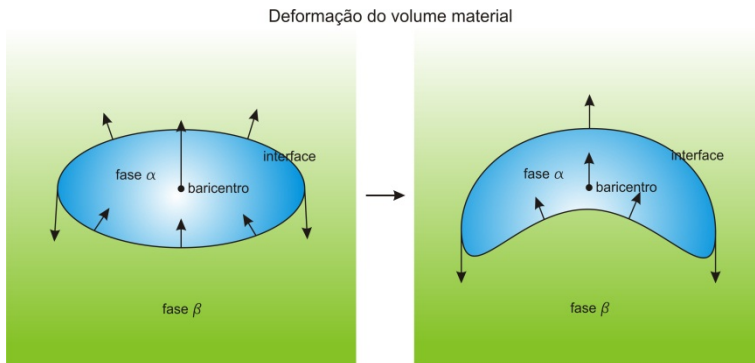
3.3 Abordagem Euleriana

Em teoria, conhecendo-se *exatamente* a posição de cada interface e a sua evolução no tempo, a condição de contorno apropriada nesta superfície material seria uma condição de equilíbrio de fluxo. Esta condição é comumente chamada de condição de salto (PASSMAN, 1989),

$$[\rho\Phi(\mathbf{u} - \mathbf{u}_i) + \mathbf{J}] \cdot \hat{\mathbf{n}} = S_i^\phi, \quad (64)$$

onde \mathbf{J} é o fluxo da variável em análise, Φ é a variável transportada; \mathbf{u} é a velocidade da fase junto à interface; \mathbf{u}_i é a velocidade da interface. A Figura 25 ilustra como diferentes velocidades sobre a interface e a diferença em relação à velocidade baricêntrica do volume material definido pela interface resulta em deformação deste volume.

Figura 25. Exemplo de como o volume material pode apresentar velocidades com magnitudes e direções distintas na interface e no seu baricentro, resultando na deformação deste volume.



O termo $\rho\Phi(\mathbf{u} - \mathbf{u}_i)$ representa a transferência da propriedade Φ pelo processo de transferência de massa como, por exemplo, mudança de estado ou dissolução.

Localmente, um escoamento multifásico consiste em regiões preenchidas por uma *única fase* limitadas cada uma por uma interface, gerando um problema com múltiplas fronteiras móveis e posições desconhecidas.

O domínio de cálculo da fase é a região que cada fase ocupa cujas fronteiras são determinadas pelo domínio físico do escoamento global - onde condições de contorno do problema são aplicadas - caso a fase esteja em contato com esta fronteira, e pelas interfaces onde se aplicam as condições de salto, fechando matematicamente e fisicamente o sistema (PASSMAN, 1989). A solução deste problema é ainda hoje no mínimo impraticável (ISHII e MISHIMA, 1984).

Shen e Hwang (1989) argumentam que somente um comportamento médio pode ser descrito por um modelo matemático determinístico que em um escoamento multifásico onde o fluxo em um determinado volume de controle é randômico.

3.3.1 Variável Característica ou Indicadora de Fase

Seja definida a variável característica de fase, χ_k , que indica a presença ou não da fase α em um ponto \mathbf{x} do domínio em um tempo t .

$$\chi_\alpha(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{se em } t \quad \mathbf{x} \in \alpha, \\ 0 & \text{se em } t \quad \mathbf{x} \notin \alpha. \end{cases} \quad (65)$$

A variável, ou função indicadora de fase é um artifício matemático que auxilia na dedução das equações de conservação multifásicas e a lidar com as descontinuidades físicas e matemáticas inerentes a esta classe de escoamentos. Alguns pormenores de seu formalismo são apresentados a seguir de maneira a esclarecer a sua natureza e os procedimentos matemáticos que se seguem.

3.3.1.1 Equação Topológica

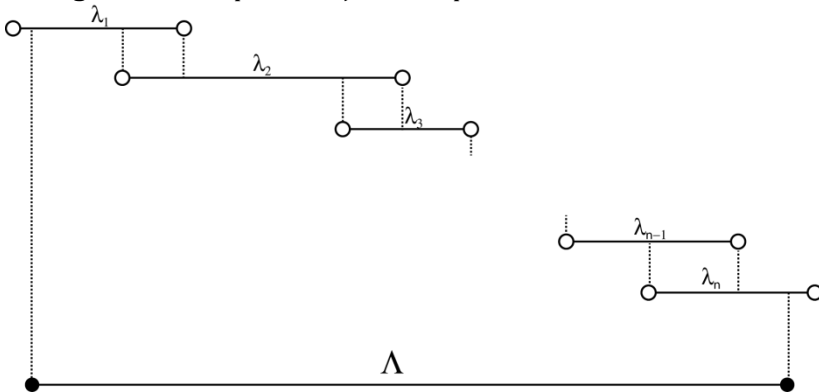
A derivada material da função característica de fase seguindo a interface é dada por

$$\frac{D_i \chi_\alpha}{Dt} = \frac{\partial \chi_\alpha}{\partial t} + \mathbf{u}_i \cdot \nabla \chi_\alpha = 0. \quad (66)$$

Para pontos fora da interface $\chi_\alpha = 0$, e sobre a interface $\chi_\alpha = 1$, sendo as derivadas parciais nulas em ambos os casos. Na interface, com um referencial na mesma velocidade, \mathbf{u}_i , acompanhando a interface, a função se comporta como um pulso, ou uma descontinuidade, e não muda espacialmente nem no tempo e sua derivada material deve ser, portanto, nula.

Uma justificativa mais formal é obtida primeiramente com a definição de *conjuntos compactos*. Um conjunto é dito compacto quando ele pode ser escrito como a união de vários conjuntos abertos e o conjunto resultante ser um conjunto fechado. Considere como exemplo, vários intervalos abertos da reta real como ilustra a Figura 26. abaixo.

Figura 26. Exemplo de conjunto compacto real em uma dimensão.



O conjunto compacto Λ é obtido a partir da união de vários conjuntos abertos λ_i , sendo que Λ é limitado pelos intervalos extremos inferior e superior de λ_1 e λ_n , respectivamente. De maneira formal,

$$\Lambda \subset \bigcup_{i=1}^n \lambda_i, \quad (67)$$

A Figura 27 ilustra o conceito de suporte compacto estendido a mais de uma dimensão.

Além disto, deve-se definir ainda o conceito de *função teste*, que é uma função diferenciável em um número infinito de vezes, como por exemplo, $f(x) = e^x$; e possui *suporte compacto*, ou seja,

$$\phi(x): \begin{cases} = 0 & \text{se } x \notin \Lambda, \\ \neq 0 & \text{se } x \in \Lambda. \end{cases} \quad (68)$$

De uma forma mais simples: *o suporte compacto de uma função é o menor conjunto no qual a função não se anula.*

Com estes dois conceitos, pode-se definir a função generalizada ou distribuição, que é um funcional⁸ linear e contínuo no espaço de funções teste. Grosso modo, este conceito permite a diferenciação de funções descontínuas, pois as componentes da base de funções teste sempre serão diferenciáveis em algum intervalo aberto λ_i dentro do suporte de $\phi(x)$, Λ . Qualquer solução para uma equação diferencial baseada nesta abordagem é denominada solução fraca, pois não tem o mesmo sentido da diferenciação clássica, sendo necessário um conjunto de artifícios matemáticos para que isto ocorra, ou seja, é uma tentativa de estender as propriedades de integração e diferenciação a funções que são descontínuas, ou, em sentido estrito, distribuições.

A função teste é sempre nula nas fronteiras do seu domínio, como, por exemplo,

$$h(x) = \begin{cases} \exp(|x|^2 - 1)^{-1} & \text{se } |x| < 1; \\ 0 & \text{se } |x| \geq 1, \end{cases} \quad (69)$$

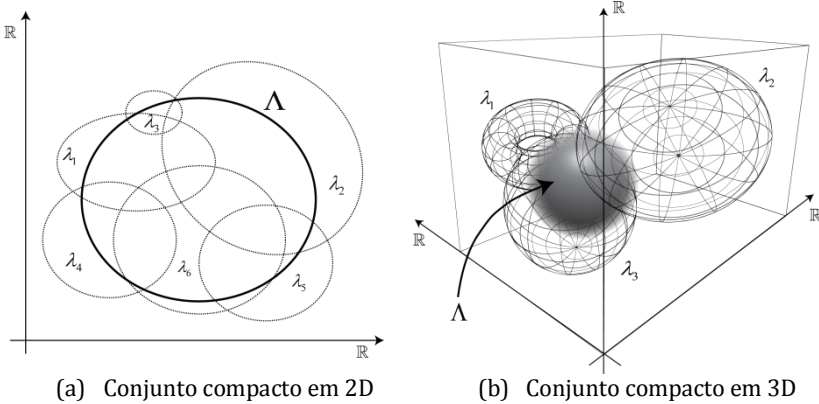
que tem seu comportamento ilustrado na Figura 28.

A somatória de distribuições (ou funções generalizadas) é possível, mas a sua multiplicação não o é, contudo, pode-se tomar a derivada de uma delas que ainda é uma distribuição,

⁸ Uma função de funções testes.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x)f'(x) dx = p(x)f(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} p'(x)f(x) dx , \quad (70)$$

Figura 27. Exemplos de conjuntos compactos em duas (a) e três (b) dimensões. A intersecção Λ está sempre delimitada e contida dentro da união dos conjuntos abertos λ_i .



onde, foi usada a regra de integração por partes. Se, por exemplo, $p(x)$ for a distribuição e $f(x)$ a função teste, o 1º termo do lado direito da igualdade da Equação (70) é igual zero, pois a função teste se anula nas fronteiras do domínio, $\partial\Lambda$, (*viz.* Figura 28). Assim,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x)f'(x) dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} p'(x)f(x) dx,$$

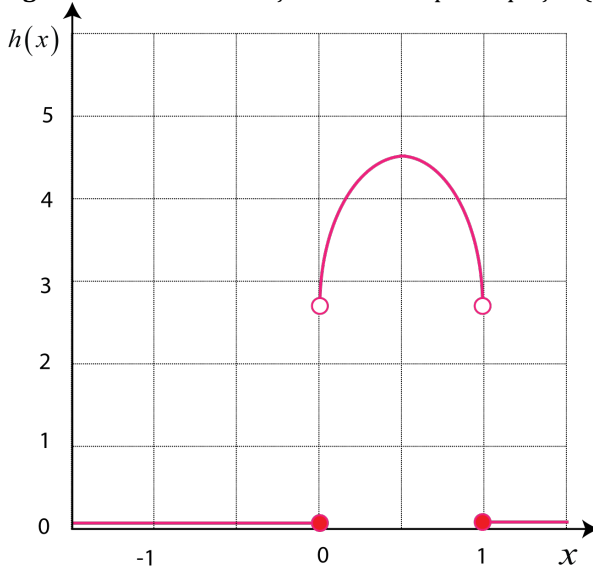
ou

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p'(x)f(x) dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} p(x)f'(x) dx,$$

(71)

pois são equivalentes.

Com base nestes argumentos, tem-se que $\chi(\mathbf{x},t)$ é a função de distribuição ou função generalizada e suas derivadas devem ser avaliadas com base na Equação (71). Considere então uma função teste $\phi : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Multiplicando a Equação Topológica (Equação (66)) pela função teste e integrando em $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}$, tem-se

Figura 28. Gráfico da função teste dada pela Equação (69).

$$\int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}} \partial_i \chi(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} dt = - \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}} \chi(\mathbf{x}, t) \partial_i \phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} dt, \quad (72)$$

e

$$\int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}} \partial_i \chi(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} dt = - \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}} \chi(\mathbf{x}, t) \partial_i \phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} dt.$$

Tomando a derivada material dentro do integrando,

$$\int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}} \left(\partial_t \chi_\alpha + u_{i,j} \cdot \partial_j \chi_\alpha \right) \phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} dt = \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}} \partial_t \chi_\alpha \phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} dt + \dots \quad (73)$$

$$\dots + \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}} \partial_j \left[u_{i,j} \phi(\mathbf{x}, t) \right] \chi_\alpha(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} dt,$$

assim, tem-se

$$\int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}} \left(\frac{\partial \chi_\alpha}{\partial t} + \mathbf{u}_i \cdot \nabla \chi_\alpha \right) \phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} dt = \quad (74)$$

$$- \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}} \chi_\alpha(\mathbf{x}, t) \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_i \phi) \right) d\mathbf{x} dt.$$

Uma vez que a função indicadora de fase assume somente valores iguais à zero ou um, apenas as regiões de $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}$ ocupadas

pela fase α , \mathbb{R}^k , são diferentes de zero e o valor de $\chi(\mathbf{x}, t)$ nestas regiões é igual a um. Logo, o lado direito da igualdade da Equação (74) pode ser escrito como

$$-\int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{\mathbb{R}^k} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_i \phi) \right) d\mathbf{x} \right] dt = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{\mathbb{R}^k} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\mathbf{x} + \int_{\partial \mathbb{R}^k} (\mathbf{u}_i \phi) \cdot \hat{\mathbf{n}}_i d\mathbf{x} \right] dt, \quad (75)$$

onde o Teorema da Divergência foi aplicado ao segundo termo do integrando. E, como por definição a função teste é nula nas fronteiras do domínio $\partial \mathbb{R}^k$, esta parcela da integral é zero. Assim,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{\mathbb{R}^k} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\mathbf{x} + \int_{\partial \mathbb{R}^k} (\mathbf{u}_i \phi) \cdot \hat{\mathbf{n}}_i d\mathbf{x} \right] dt &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{\mathbb{R}^k} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\mathbf{x} \right] dt, \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^k} \phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \right] dt, \quad (76) \\ &= \int_{\mathbb{R}^k} \phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0. \end{aligned}$$

Na Equação (76) a Regra de Leibniz foi empregada e, novamente, como nos limites a função de teste é nula, o resultado da integração é zero. Assim,

$$\int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}} \left(\frac{\partial \chi_\alpha}{\partial t} + \mathbf{u}_i \cdot \nabla \chi_\alpha \right) \phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} dt = 0. \quad (77)$$

O *Lemma* de Dubois-Reymond diz que se uma integral de volume de uma função contínua sobre um volume arbitrário é nula o seu argumento deve ser nulo (HOLST, 1992). Em termos matemáticos:

Teorema: Se $f(x) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ é contínua em todo o domínio Ω , e

$$\int_D F dx = 0 \text{ para qualquer região } D \subset \Omega, \text{ então } F = 0 \text{ em } \Omega.$$

Prova: Se F é contínua e $F(\mathbf{x}_1) > 0$ para algum \mathbf{x}_1 , então $\exists D_1$ tal que $\mathbf{x}_1 \in D_1 \subset \Omega$ e $F(\mathbf{x}) > 0 \forall \mathbf{x} \in D_1$, então $\int_{D_1} F dx > 0$, o que contradiz a igualdade \square

Com base nisto, e sabendo que a função teste não é nula em todo o domínio (exceto nas fronteiras), a única forma da Equação

(77) resultar nula é se a derivada material da função indicadora de fase for igual a zero; assim, demonstra-se a validade da Equação (66).

3.3.2 Promediação

Promediação é simplesmente o ato de se calcular a média de qualquer conjunto de valores. Há mais de uma maneira de se proceder ao cálculo desta média. No campo da Mecânica dos Fluidos a Média de Reynolds é uma média temporal das equações de quantidade de movimento, as equações de Navier-Stokes, e gera um conjunto de equações conhecido como *Reynolds Average Navier-Stokes Equations*, ou RANS. Esta promediação foi proposta por Reynolds em 1895 (REYNOLDS, 1895; WILCOX, 1993; JACKSON e LAUNDER, 2007) para contornar as mesmas dificuldades que ainda encontramos: o comportamento randômico ou muito complexo do sistema. (SHEN e HWANG, 1989).

Médias volumétricas são também muito comuns e muito aplicadas a escoamentos em meios porosos (WHITAKER, 1999). Todas estas médias têm a sua utilidade em certas situações específicas, mas também apresentam algumas deficiências (DREW, 1992), contudo, há de se ressaltar que estas incongruências surgem do mau uso destes procedimentos como assinalado por Jackson (2000).

Nas Subsecções seguintes são apresentados os procedimentos de média que podem empregados para se definir e calcular a propriedade a propriedade que geralmente chamamos de fração volumétrica.

3.3.3 Promediação Temporal Local (*Time Average*)

Como um campo de uma propriedade qualquer pode apresentar flutuações no espaço, ele também pode apresentar localmente flutuações no tempo. A média temporal é apropriada para escoamentos estatisticamente estacionários, ou seja, um escoamento que localmente, na média, não varia com o tempo (WILCOX, 1994).

O cuidado que se deve ter na promediação temporal local é com o período de integração, escolhido de maneira que

comportamento médio da variável no tempo não seja descaracterizado, ou seja, o intervalo de promediação deve ser muito maior que a escala de tempo de flutuação das fases e muito menor que a escala de tempo da variação média do escoamento. De maneira genérica, a média temporal é definida como

$$F_T(\mathbf{x}) = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} f(\mathbf{x}, t) dt, \quad (78)$$

onde T é o intervalo de promediação.

O tempo de promediação de fase T_α é definido como uma fração do período de promediação total T em que um ponto \mathbf{x} do domínio de interesse encontra-se imerso na fase α , ou seja,

$$T_\alpha = \{ \mathbf{x} \in T ; \chi_\alpha(\mathbf{x}, t) = 1 \}. \quad (79)$$

Assim, pode-se ter duas médias temporais distintas de acordo com o período

$$\widehat{F}_\alpha \equiv \frac{1}{T} \int_T F_\alpha dt, \text{ e} \quad (80)$$

$$\widetilde{F}_\alpha \equiv \frac{1}{T_\alpha} \int_{T_\alpha} F_\alpha dt. \quad (81)$$

A partir do operador $\widehat{\quad}$ define-se a *taxa de presença local*, ou tempo de residência médio, γ_α como a média da variável característica de fase, $\chi_\alpha(\mathbf{x}, t)$, sobre o período de tempo T :

$$\gamma_\alpha \equiv \widehat{\chi_\alpha(\mathbf{x}, t)} = \frac{T_\alpha}{T}. \quad (82)$$

3.3.4 Promediação Espacial Instantânea (*Volume Average*)

A interface pode obviamente assumir um comportamento não estacionário no espaço, o que torna a média temporal difícil de descrever, ou inapropriada para isto. O procedimento de média espacial permite a descrição do comportamento médio deste tipo de escoamento no espaço similarmente ao comportamento médio de um escoamento turbulento. A média volumétrica é mais apropriada para escoamentos homogêneos onde o escoamento é, na média, uniforme em todas as direções (WILCOX, 1994):

$$F_V(t) = \frac{1}{V} \iiint f(\mathbf{x}, t) dV. \quad (83)$$

Definindo-se o domínio de fase $D_{\alpha n}$ como o conjunto de pontos do domínio D_n ocupados pela fase α em um instante t , tem-se

$$D_{\alpha n} = \{ \mathbf{x} \in D_n; \chi_{\alpha}(\mathbf{x}, t) = 1 \}, \quad (84)$$

onde n é o número de dimensões do domínio.

Considere F_{α} um campo qualquer da fase α , podendo ser então definidos os seguintes operadores de média espacial instantânea:

$$\begin{aligned} \llbracket F_{\alpha} \rrbracket &\equiv \frac{1}{D_n} \int_{D_n} F_{\alpha} dD_n, \\ \llbracket F_{\alpha} \rrbracket_{\alpha} &\equiv \frac{1}{D_{n\alpha}} \int_{D_{n\alpha}} F_{\alpha} dD_n. \end{aligned} \quad (85)$$

O operador $\llbracket \rrbracket$ representa a média no domínio ocupado por todas as fases, enquanto o operador $\llbracket \rrbracket_{\alpha}$ representa à média no domínio ocupado somente pela fase α .

Assim, pode-se definir a média espacial instantânea de $\chi_{\alpha}(\mathbf{x}, t)$ sobre o domínio D_n :

$$R_{\alpha n} \equiv \llbracket \chi_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \rrbracket = \frac{D_{n\alpha}}{D_n}, \quad (86)$$

e com base na Equação (86), para uma dimensão tem-se para um segmento L :

$$R_{\alpha 1} \equiv \frac{L_{\alpha}}{\sum L_{\alpha}} = \frac{L_{\alpha}}{L}; \quad (87)$$

para uma superfície,

$$R_{\alpha 2} \equiv \frac{A_{\alpha}}{\sum A_{\alpha}} = \frac{A_{\alpha}}{A}; \quad (88)$$

e para um volume,

$$R_{\alpha 3} \equiv \frac{V_{\alpha}}{\sum V_{\alpha}} = \frac{V_{\alpha}}{V}. \quad (89)$$

No caso da região espacial de promediação ser um volume, a Equação (89) é a fração volumétrica da fase α . E neste caso, não há problemas de singularidades ou descontinuidades como ocorre com a definição dada pela Equação (60) e (61), pois neste caso, o volume de promediação é uma região finita e diferente de zero, e qualquer

descontinuidade dentro desta região é “suavizada” pelo procedimento de promediação.

3.3.5 Promediação Conjunta ou de Realizações (*Ensemble Average*)

Outra média também bastante comum é a média das realizações. É dada em termos de medidas de N experimentos idênticos:

$$F_R(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f_n(\mathbf{x}, t). \quad (90)$$

Este é o conceito mais elementar de média, e é muitas vezes também chamada de média conjunta na literatura (*ensemble average*) (DREW, 1983; 1992; BARBOSA JR, 2002). A generalização da *promediação conjunta* descrita a seguir é dada por Drew (1983):

- **Processo:** define um *processo* como o *conjunto* dos todos os possíveis *eventos* que podem ocorrer com determinadas condições de contorno e inicial.
- **Realização:** define-se *realização* como *um* possível evento que poderia ter ocorrido dentro do processo, ou seja, um dos elementos do conjunto de todos os possíveis eventos.

Assim, para um campo $f(\mathbf{x}, t)$ qualquer, a média de conjunto é definida como

$$F_E(\mathbf{x}, t) = \int_E f(\mathbf{x}, t; \mu) dm(\mu), \quad (91)$$

onde $dm(\mu)$ é a *probabilidade* de se observar a realização ou evento μ dentro do conjunto ou “*ensemble*” – E – de todos os possíveis *eventos*. O emprego do termo probabilidade é mais bem entendido adiante e ajuda e compreender o significado físico dado à variável denominada fração volumétrica.

As duas definições Equações (90) e (91) são referidas como o mesmo tipo de processo de promediação (PALADINO, 2005), embora a última tenha um apelo mais formal e genérico.

O procedimento de promediação utilizado aqui é o de média conjunta dada pela Equação (91).

Sob o ponto de vista estatístico, as médias temporais e espaciais são casos especiais de fenômenos estacionários e homogêneos, respectivamente. E, com base na *hipótese de ergodicidade*, todos os procedimentos de promediação são equivalentes, assim, os operadores $\llbracket \rrbracket, \widehat{}, \langle \rangle$, representam procedimentos diferentes para se chegar a uma mesma formulação.

Embora o operador $\langle \rangle$ seja usado para representar o operador de média conjunta que é a aplicada neste trabalho, na dedução e detalhamento das equações a seguir, ele será substituído por outra notação também muito comum para médias, o operador $\overline{}$, por uma razão simplesmente tipográfica, pois ele é mais compacto e permite uma economia de espaço durante a escrita das equações. Basta comparar $\langle \langle y \rangle \langle x \rangle \rangle$ com \overline{yx} . Não obstante, ambas tem o mesmo efeito algébrico.

Outra modificação diz respeito à notação tensorial que ao longo do trabalho é representado por uma letra maiúscula em negrito com uma barra superior. Esta barra será omitida para se evitar confusões com o operador de média. Assim, $\overline{\mathbf{T}}$ representa um tensor, e $\overline{\mathbf{T}}$ a sua média.

3.3.6 Propriedades da Promediação

Algumas propriedades de interesse devem ser assinaladas de maneira a permitir o entendimento dos procedimentos a seguir. A promediação de funções submetidas a operadores diferenciais seguem as seguintes regras:

$$\overline{\frac{\partial f}{\partial t}} = \frac{\partial \overline{f}}{\partial t}, \quad (92)$$

$$\overline{\nabla f} = \nabla \overline{f}, \quad (93)$$

$$\overline{\chi_\alpha \frac{\partial f}{\partial t}} = \frac{\partial \overline{\chi_\alpha f}}{\partial t} - \overline{f \frac{\partial \chi_\alpha}{\partial t}}, \quad (94)$$

$$\overline{\chi_\alpha \nabla f} = \nabla \overline{\chi_\alpha f} - \overline{f \nabla \chi_\alpha}. \quad (95)$$

3.3.7 Equações Locais de Balanço

Dentro de cada fase as equações de balanço de quantidade de movimento, conservação da massa e, se for o caso, conservação da energia são válidas localmente e escritas em sua forma padrão. Tem-se então para conservação da massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (96)$$

Para a quantidade de movimento:

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = \nabla \cdot \bar{\mathbf{T}} + r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{g}. \quad (97)$$

Assumindo o fluido Newtoniano e incompressível, o tensor tensão é dado pela hipótese de Stokes,

$$\bar{\mathbf{T}} = -p\bar{\mathbf{I}} + 2\mu\bar{\mathbf{D}}, \quad (98)$$

onde p representa a pressão, $\bar{\mathbf{D}}$ o tensor taxa de deformação definido como:

$$\bar{\mathbf{D}} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T), \quad (99)$$

e $\bar{\mathbf{I}}$ o tensor identidade definido como:

$$\bar{\mathbf{I}} = \delta_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j, \quad (100)$$

onde δ_{ij} é o delta de Kröenecker (ver Apêndice 1).

Estas equações são válidas dentro de cada material que compõem as fases. De forma a facilitar o procedimento matemático, as Equações (96) e (97) podem ser representadas genericamente em sua forma canônica:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \phi = \nabla \cdot \mathbf{J} + \rho f, \quad (101)$$

onde ϕ é a propriedade conservada, \mathbf{J} o fluxo desta propriedade, f a sua fonte ou sumidouro, e \mathbf{u} o vetor velocidade. Na interface ocorre a descontinuidade das propriedades, contudo, os seus fluxos ainda devem ser conservados, assim sendo,

$$[\rho \phi (\mathbf{u} - \mathbf{u}_i) + \mathbf{J}] \cdot \hat{\mathbf{n}} = S_i^\phi, \quad (102)$$

onde \mathbf{u}_i representa a velocidade da interface, S_i^ϕ a fonte de ϕ sobre a interface e $\hat{\mathbf{n}}$ o vetor normal unitário à interface. Na Tabela 1 são

definidas as propriedades que cada um dos termos supracitados podem representar.

Tabela 1. Variáveis das Equações de Conservação

Equação de Conservação	ϕ	\mathbf{J}	f	S_i^ϕ
Massa	1	0	0	0
Quantidade de Movimento	\mathbf{u}	$\bar{\mathbf{T}}$	\mathbf{g}	\mathbf{m}_i^σ

Multiplicando-se a Equação (101) pela função indicadora de fase, χ_α , e aplicando o operador de promediação tem-se:

$$\chi_\alpha \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \chi_\alpha \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \phi - \chi_\alpha \nabla \cdot \mathbf{J} - \chi_\alpha \rho f = 0. \quad (103)$$

Os campos das variáveis instantâneas podem ser decompostos como uma superposição linear de um campo médio mais uma flutuação

$$\begin{aligned} \phi &= \bar{\phi} + \phi', & \mathbf{u} &= \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}', \\ \rho &= \bar{\rho} + \rho', & \mathbf{J} &= \bar{\mathbf{J}} + \mathbf{J}'. \end{aligned} \quad (104)$$

É relevante neste ponto assinalar algumas propriedades de interesse:

$$\begin{aligned} \bar{\bar{x}} &= \overline{\bar{x} + x'} = \bar{\bar{x}} + \bar{x'} = \bar{x} + \bar{x'} = \bar{x}, \text{ pois } \bar{x'} = 0; \\ \overline{\bar{x} \bar{y}} &= \bar{\bar{x}} \bar{\bar{y}} = \bar{x} \bar{y}; \\ \overline{\bar{x} y'} &= \bar{\bar{x}} \bar{y}' = \bar{x} \bar{y}' = 0, \text{ pois } \bar{y}' = 0; \\ \overline{\bar{x} y} &= \overline{(\bar{x} + x')(\bar{y} + y')} = \bar{\bar{x} \bar{y}} + \overline{\bar{x} y'} + \overline{x' \bar{y}} + \overline{x' y'} = \bar{x} \bar{y} + \overline{x' y'}. \end{aligned} \quad (105)$$

Substituído os campos decompostos da Equação(104) em (103), pode-se agora termo a termo desenvolver a equação de transporte promediada. Para o termo transiente,

$$\chi_\alpha \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} = \chi_\alpha \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} + \rho') (\bar{\phi} + \phi') = \chi_\alpha \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \bar{\phi} + \rho' \phi'), \quad (106)$$

e usando a Equação (94) tem-se

$$\overline{\chi_\alpha \frac{\partial \rho \phi}{\partial t}} = \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha (\overline{\rho \phi} + \overline{\rho' \phi'})} - \overline{(\overline{\rho \phi} + \overline{\rho' \phi'})} \frac{\partial \chi_\alpha}{\partial t}. \quad (107)$$

Para o termo advectivo,

$$\begin{aligned} \overline{\chi_\alpha \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \phi} &= \overline{\chi_\alpha \nabla \cdot (\overline{\rho} + \overline{\rho'}) (\overline{\mathbf{u}} + \overline{\mathbf{u}'}) (\overline{\phi} + \overline{\phi'})}, \\ &= \overline{\chi_\alpha \nabla \cdot \left(\begin{array}{l} \overline{\rho \mathbf{u} \phi} + \overline{\rho \mathbf{u}' \phi'} + \overline{\rho' \mathbf{u} \phi} + \overline{\rho' \mathbf{u}' \phi'} + \\ \overline{\rho' \mathbf{u} \phi'} + \overline{\rho' \mathbf{u}' \phi'} + \overline{\rho' \mathbf{u}' \phi} + \overline{\rho' \mathbf{u}' \phi'} \end{array} \right)}, \\ &= \overline{\chi_\alpha \nabla \cdot (\overline{\rho \mathbf{u} \phi} + \overline{\rho \mathbf{u}' \phi'} + \overline{\rho' \mathbf{u} \phi} + \overline{\rho' \mathbf{u}' \phi} + \overline{\rho' \mathbf{u}' \phi'})}. \end{aligned} \quad (108)$$

Utilizando a Equação (95),

$$\begin{aligned} \overline{\chi_\alpha \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \phi} &= \overline{\nabla \cdot \chi_\alpha (\overline{\rho \mathbf{u} \phi} + \overline{\rho \mathbf{u}' \phi'} + \overline{\rho' \mathbf{u} \phi} + \overline{\rho' \mathbf{u}' \phi} + \overline{\rho' \mathbf{u}' \phi'})} + \dots \\ &\dots - \overline{(\overline{\rho \mathbf{u} \phi} + \overline{\rho \mathbf{u}' \phi'} + \overline{\rho' \mathbf{u} \phi} + \overline{\rho' \mathbf{u}' \phi} + \overline{\rho' \mathbf{u}' \phi'})} \nabla \chi_\alpha. \end{aligned} \quad (109)$$

Para o termo difusivo,

$$\begin{aligned} \overline{\chi_\alpha \nabla \cdot \mathbf{J}} &= \overline{\chi_\alpha \nabla \cdot (\overline{\mathbf{J}} + \overline{\mathbf{J}'})} = \overline{\chi_\alpha \nabla \cdot \overline{\mathbf{J}}} + \overline{\chi_\alpha \nabla \cdot \overline{\mathbf{J}'}} \\ &= \overline{\nabla \cdot \chi_\alpha \overline{\mathbf{J}}} - \overline{\overline{\mathbf{J}} \cdot \nabla \chi_\alpha} + \overline{\nabla \cdot \chi_\alpha \overline{\mathbf{J}'}} - \overline{\overline{\mathbf{J}'} \cdot \nabla \chi_\alpha}. \end{aligned} \quad (110)$$

Assim,

$$\overline{\chi_\alpha \nabla \cdot \mathbf{J}} = \overline{\nabla \cdot \chi_\alpha \overline{\mathbf{J}}} - \overline{\overline{\mathbf{J}} \cdot \nabla \chi_\alpha} - \overline{\overline{\mathbf{J}'} \cdot \nabla \chi_\alpha}. \quad (111)$$

Substituindo as Equações (107), (108) e (111) na Equação (103) obtém-se a seguinte equação

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha (\overline{\rho \phi} + \overline{\rho' \phi'})} - \overline{(\overline{\rho \phi} + \overline{\rho' \phi'})} \frac{\partial \chi_\alpha}{\partial t} + \dots \\ &\dots + \overline{\nabla \cdot \chi_\alpha (\overline{\rho \mathbf{u} \phi} + \overline{\rho \mathbf{u}' \phi'} + \overline{\rho' \mathbf{u} \phi} + \overline{\rho' \mathbf{u}' \phi} + \overline{\rho' \mathbf{u}' \phi'})} + \dots \\ &\dots - \overline{(\overline{\rho \mathbf{u} \phi} + \overline{\rho \mathbf{u}' \phi'} + \overline{\rho' \mathbf{u} \phi} + \overline{\rho' \mathbf{u}' \phi} + \overline{\rho' \mathbf{u}' \phi'})} \nabla \chi_\alpha - \\ &\dots + \overline{\nabla \cdot \chi_\alpha \overline{\mathbf{J}}} + \overline{\overline{\mathbf{J}} \cdot \nabla \chi_\alpha} + \overline{\overline{\mathbf{J}'} \cdot \nabla \chi_\alpha} - \overline{\chi_\alpha (\overline{\rho} - \overline{\rho'})} f = 0. \end{aligned} \quad (112)$$

Rearranjando os termos,

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho\phi})} + \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho\mathbf{u}\phi})} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha \overline{\mathbf{J}}} - \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho - \rho'})} f = \\
& - \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho'\phi'})} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho\mathbf{u}'\phi' + \rho'\overline{\mathbf{u}}\phi' + \rho'\mathbf{u}'\overline{\phi} + \rho'\mathbf{u}'\phi'})} \quad (113) \\
& + \overline{(\overline{\rho\phi} + \rho'\phi')} \frac{\partial \chi_\alpha}{\partial t} + \overline{(\overline{\rho\phi} + \rho'\phi')} (\overline{\mathbf{u}} + \mathbf{u}') \cdot \nabla \chi_\alpha - \overline{(\overline{\mathbf{J}} + \mathbf{J}') \cdot \nabla \chi_\alpha}.
\end{aligned}$$

Agrupando o 3º e 4º termos do lado direito do sinal de igualdade

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho\phi})} + \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho\mathbf{u}\phi})} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha \overline{\mathbf{J}}} - \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho - \rho'})} f = \\
& - \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho'\phi'})} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho\mathbf{u}'\phi' + \rho'\overline{\mathbf{u}}\phi' + \rho'\mathbf{u}'\overline{\phi} + \rho'\mathbf{u}'\phi'})} + \dots \quad (114) \\
& \dots + \overline{(\overline{\rho\phi} + \rho'\phi')} \left[\frac{\partial \chi_\alpha}{\partial t} + (\overline{\mathbf{u}} + \mathbf{u}') \cdot \nabla \chi_\alpha \right] - \overline{(\overline{\mathbf{J}} + \mathbf{J}') \cdot \nabla \chi_\alpha},
\end{aligned}$$

e substituindo a Equação (66), a Equação Topológica, na Equação (114) para eliminar o termo $\partial \chi_\alpha / \partial t$,

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho\phi})} + \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho\mathbf{u}\phi})} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha \overline{\mathbf{J}}} - \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho - \rho'})} f = \\
& - \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho'\phi'})} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho\mathbf{u}'\phi' + \rho'\overline{\mathbf{u}}\phi' + \rho'\mathbf{u}'\overline{\phi} + \rho'\mathbf{u}'\phi'})} + \dots \quad (115) \\
& \dots + \overline{(\overline{\rho\phi} + \rho'\phi')} \left[-\mathbf{u}_i \cdot \nabla \chi_\alpha + (\overline{\mathbf{u}} + \mathbf{u}') \cdot \nabla \chi_\alpha \right] - \overline{(\overline{\mathbf{J}} + \mathbf{J}') \cdot \nabla \chi_\alpha},
\end{aligned}$$

obtendo, portanto,

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho\phi})} + \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho\mathbf{u}\phi})} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha \overline{\mathbf{J}}} - \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho - \rho'})} f = \\
& - \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho'\phi'})} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha(\overline{\rho\mathbf{u}'\phi' + \rho'\overline{\mathbf{u}}\phi' + \rho'\mathbf{u}'\overline{\phi} + \rho'\mathbf{u}'\phi'})} + \dots \quad (116) \\
& \dots + \overline{(\overline{\rho\phi} + \rho'\phi')} \left[(\overline{\mathbf{u}} + \mathbf{u}') - \mathbf{u}_i \right] - \overline{(\overline{\mathbf{J}} + \mathbf{J}') \cdot \nabla \chi_\alpha}.
\end{aligned}$$

Um argumento válido em escoamentos com velocidades moderadas a ordem da flutuação da densidade é útil quando comparada as de velocidade, portanto, $\rho = \overline{\rho}$ e $\rho' = 0$. Assim,

simplificando a Equação (116), obtém-se a equação de transporte de uma propriedade qualquer em sua forma canônica:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha (\overline{\rho\phi})} + \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha (\overline{\rho\mathbf{u}\phi})} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha \overline{\mathbf{J}}} - \overline{\chi_\alpha \overline{\rho f}} = \\ -\nabla \cdot \overline{\chi_\alpha (\overline{\rho\mathbf{u}'\phi'})} + \left\{ \overline{\rho\phi} \left[(\overline{\mathbf{u}} + \overline{\mathbf{u}'} - \mathbf{u}_i) - (\overline{\mathbf{J}} + \overline{\mathbf{J}'}) \right] \right\} \cdot \nabla \chi_\alpha. \end{aligned} \quad (117)$$

A partir da Equação (117) e usando a Tabela 1 as equações de conservação podem então ser discriminadas. Antes, contudo, deve-se abordar a promediação das variáveis de campo e as variáveis promediadas que disto resultam.

3.3.8 Variáveis Promediadas

A forma que se apresenta a Equação (117) não é apropriada na descrição do escoamento, pois é definida em termos da função indicadora de fase. A aplicação do operador de média à função indicadora de fase resulta em uma variável que comumente é denominada de *fração volumétrica*. Mas isto é rigorosamente correto quando a promediação é espacial tal como definido na Seção 3.3.4.

Quando a promediação é temporal o termo adequado é *tempo relativo de residência* (DREW, 1983). Neste trabalho o termo fração volumétrica é preferido apenas pela familiaridade com o conceito já apresentado na Seção 3.2. Então:

$$r_\alpha \equiv \langle \chi_\alpha \rangle. \quad (118)$$

A função indicadora de fase é por definição descontínua. A princípio pode parecer que o problema de singularidade nas equações ainda persiste. Todavia, como já comentado anteriormente, apenas a sua média é usada, ou seja, dentro do operador integral, agindo, portanto, como uma função *delta de Dirac*. À luz da discussão dos procedimentos de promediação das seções precedentes e, especificamente a Equação (91), a média da função indicadora de fase representa a *probabilidade* de se encontrar a fase α no ponto \mathbf{x} ao tempo t . *E esta probabilidade é contínua podendo variar de zero até um.*

No modelo de dois fluidos, é comum dizer-se que os campos das variáveis de cada fase são contínuos e *interpenetrantes*, os

campos coexistem sobrepostos em uma posição x do espaço. E de acordo com esta percepção duas fases, dispersas ou não, são passíveis de ocupar o mesmo lugar no espaço ao *mesmo tempo*, o que viola a hipótese do contínuo.

Sem considerar o conceito de probabilidade esta interpretação é um paradoxo, sendo uma maneira algebricamente mais laboriosa de se obter uma dedução inconsistente.

Todavia, quando se considera o conceito de probabilidade, esta argumentação não procede. O significado físico embutido na Equação (116) é que o valor de um campo qualquer ϕ de uma fase α a uma coordenada de tempo-espaço definida é obtido pelo valor que o campo assume neste ponto ponderado pela probabilidade de esta fase estar presente neste ponto. Se a probabilidade neste ponto é zero o valor do campo observado é zero.

Assim, os resultados obtidos pelo modelo de dois fluidos representam a sobreposição de campos de probabilidade dos campos das variáveis instantâneas se observados dentro do conjunto de realizações. A média da variável indicadora de fase dada pela Equação (118) indicaria a *presença potencial da fase* (BURNS, 2002), mas o termo *fração volumétrica* ainda será usado apenas por convenção, pois é o nome comumente empregado. Acerca da probabilidade, ou presença potencial das fases, a única restrição é que o somatório das probabilidades seja igual à unidade, ou seja,

$$\sum_{\alpha=1}^{N_f} r_{\alpha} = 1, \quad (119)$$

onde N_f representa o número de fases. Esta equação é também chamada de *equação conservação do volume*. Vale ressaltar que este modelo é válido assumindo-se que as fases estão misturadas em uma escala muito menor do que se deseja resolver.

Sendo os resultados obtidos com as equações uma média das realizações, dificilmente os resultados de um único experimento, ou realização haverão de ser reproduzidos *exatamente* pelo modelo acima. As equações fornecem a média das realizações, ou seja, o modelo reproduz a média do conjunto de experimentos. E esta deve ser a resposta do modelo, pois as flutuações instantâneas se perdem com o procedimento de promediação.

De posse destes conceitos, as demais variáveis de campo são definidas como variáveis ponderadas. E uma vez deduzida a

equação de transporte, o operador de média e de conjunto pode ser retomado como $\langle \rangle$.

Pode-se ponderar uma variável de campo em função de χ_α , e neste caso tem-se uma *média física*; ou ponderar pela massa, $\chi_\alpha \rho$, e neste caso tem-se uma *média mássica*, ou do tipo Favre. E, apesar de a literatura não ser explícita sobre qual delas usar, ambas são empregadas de forma a se recuperar em cada caso, de acordo com a variável, o campo médio da mesma e extrair a função indicadora de fase das equações, cuja média é a fração volumétrica. Ou seja, o que se apresenta a seguir é uma maneira que atende aos objetivos da dedução

$$\begin{aligned}\langle \phi_\alpha \rangle &\equiv \frac{\langle \chi_\alpha \rho \langle \phi \rangle \rangle}{\langle \chi_\alpha \rho \rangle} = \frac{\langle \chi_\alpha \rho \langle \phi \rangle \rangle}{r_\alpha \rho}, \\ \langle \phi_\alpha \rangle &\equiv \frac{\langle \chi_\alpha \langle \phi \rangle \rangle}{\langle \chi_\alpha \rangle} = \frac{\langle \chi_\alpha \langle \phi \rangle \rangle}{r_\alpha}.\end{aligned}\quad (120)$$

Assim, tem-se então para a massa específica, a partir de uma média física,

$$\langle \rho_\alpha \rangle \equiv \frac{\langle \chi_\alpha \rho \rangle}{\langle \chi_\alpha \rangle} = \frac{\langle \chi_\alpha \rho \rangle}{r_\alpha} \Rightarrow r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle = \langle \chi_\alpha \rho \rangle; \quad (121)$$

para a velocidade, por uma média mássica,

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{u}_\alpha \rangle &\equiv \frac{\langle \chi_\alpha \rho \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle \rangle}{\langle \chi_\alpha \rho \rangle} = \frac{\langle \chi_\alpha \rho \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle \rangle}{r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle} \Rightarrow \\ r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle &= \langle \chi_\alpha \rho \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle \rangle \quad ;\end{aligned}\quad (122)$$

o campo de pressão ponderado por uma média física

$$\langle p_\alpha \rangle \equiv \frac{\langle \chi_\alpha \langle p \rangle \rangle}{\langle \chi_\alpha \rangle} = \frac{\langle \chi_\alpha \langle p \rangle \rangle}{r_\alpha} \Rightarrow r_\alpha \langle p_\alpha \rangle = \langle \chi_\alpha \langle p \rangle \rangle; \quad (123)$$

assim como o tensor taxa de deformação,

$$\begin{aligned}\mu_\alpha \langle \bar{\mathbf{D}}_\alpha \rangle &\equiv \frac{\langle \chi_\alpha \mu \langle \bar{\mathbf{D}} \rangle \rangle}{\langle \chi_\alpha \rangle} = \frac{\langle \chi_\alpha \mu \langle \bar{\mathbf{D}} \rangle \rangle}{r_\alpha} \Rightarrow \\ r_\alpha \mu_\alpha \langle \bar{\mathbf{D}}_\alpha \rangle &= \langle \chi_\alpha \mu \langle \bar{\mathbf{D}} \rangle \rangle \quad ;\end{aligned}\quad (124)$$

e o tensor de Reynolds:

$$\bar{\mathbf{T}}_{\alpha}^{\text{Re}} \equiv -\frac{\langle \chi_{\alpha}(\rho \overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'}) \rangle}{\langle \chi_{\alpha} \rangle} = -\frac{\langle \chi_{\alpha}(\rho \overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'}) \rangle}{r_{\alpha}} \Rightarrow \quad (125)$$

$$r_{\alpha} \bar{\mathbf{T}}_{\alpha}^{\text{Re}} = -\langle \chi_{\alpha}(\rho \overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'}) \rangle \quad ;$$

A força de corpo é de obtenção direta:

$$\langle \chi_{\alpha} \rho \mathbf{g} \rangle = \langle \chi_{\alpha} \rho \rangle \mathbf{g} = r_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{g} \Rightarrow \langle \chi_{\alpha} \rho \mathbf{g} \rangle = r_{\alpha} \langle \rho_{\alpha} \rangle \mathbf{g}. \quad (126)$$

Assim, substituindo as variáveis da Tabela 1 na Equação (117). Para a conservação da massa, tem-se

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \chi_{\alpha} \langle \rho \rangle \rangle + \nabla \cdot \langle \chi_{\alpha} \langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle \rangle = \langle \langle \rho \rangle [(\langle \mathbf{u} \rangle + \mathbf{u}') - \mathbf{u}_i] \cdot \nabla \chi_{\alpha} \rangle, \quad (127)$$

lembrando que a fração volumétrica da fase α é dada pela média da função indicadora,

$$\langle \chi_{\alpha} \rangle \equiv r_{\alpha}. \quad (128)$$

Definindo-se o fluxo de massa interfacial como

$$\Gamma_{\alpha} \equiv \langle \langle \rho \rangle [(\langle \mathbf{u} \rangle + \mathbf{u}') - \mathbf{u}_i] \cdot \nabla \chi_{\alpha} \rangle, \quad (129)$$

logo,

$$\frac{\partial (r_{\alpha} \langle \rho_{\alpha} \rangle)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_{\alpha} \langle \rho_{\alpha} \rangle \langle \mathbf{u}_{\alpha} \rangle) = \Gamma_{\alpha}. \quad (130)$$

Para a equação de conservação de quantidade de movimento tem-se

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \langle \chi_{\alpha} (\langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle) \rangle + \nabla \cdot \langle \chi_{\alpha} \langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle \langle \mathbf{u} \rangle \rangle + \dots \\ & \dots - \nabla \cdot \langle \chi_{\alpha} \langle \bar{\mathbf{T}} \rangle \rangle - \langle \chi_{\alpha} \langle \rho \rangle \mathbf{g} \rangle = -\nabla \cdot \langle \chi_{\alpha} \langle \rho \rangle \langle \mathbf{u}'\mathbf{u}' \rangle \rangle + \dots \quad (131) \\ & \dots + \left\langle \left\{ \langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle [(\langle \mathbf{u} \rangle + \mathbf{u}') - \mathbf{u}_i] - (\langle \bar{\mathbf{T}} \rangle + \mathbf{T}') \right\} \cdot \nabla \chi_{\alpha} \right\rangle, \end{aligned}$$

onde $\bar{\mathbf{T}}$ representa o tensor tensão é dado por

$$\bar{\mathbf{T}} = -p\bar{\mathbf{I}} + 2\mu\bar{\mathbf{D}} - \left(\frac{2}{3}\mu\nabla \cdot \mathbf{u}\right)\bar{\mathbf{I}}, \quad (132)$$

sendo p a pressão e $\bar{\mathbf{D}}$ é o tensor taxa de deformação e $\bar{\mathbf{I}}$ o tensor identidade. Considerando então um fluido newtoniano incompressível ou escoamento isocórico,

$$\bar{\mathbf{T}} = -\bar{p}\bar{\mathbf{I}} + \mu(\nabla\bar{\mathbf{u}} + \nabla\bar{\mathbf{u}}^T). \quad (133)$$

Assim,

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \langle \chi_\alpha (\langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle) \rangle + \nabla \cdot \langle \chi_\alpha \langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle \rangle = \dots \\ & \dots \nabla \cdot \left[\chi_\alpha (2\mu_\alpha \langle \bar{\mathbf{D}} \rangle) - \chi_\alpha (\langle \rho \rangle \langle \mathbf{u}' \mathbf{u}' \rangle) \right] + \dots \\ & \dots + \langle \chi_\alpha \langle \rho \rangle \mathbf{g} \rangle + \langle \mathbf{u} \rangle \langle \langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle [(\langle \mathbf{u} \rangle + \mathbf{u}') - \mathbf{u}_i] \cdot \nabla \chi_\alpha \rangle + \dots \\ & - \langle (\bar{\mathbf{T}} + \mathbf{T}') \cdot \nabla \chi_\alpha \rangle. \end{aligned} \quad (134)$$

Recorrendo às variáveis promediadas

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \langle \rho \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) + \nabla \cdot (r_\alpha \langle \rho \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle \otimes \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) = -\nabla (r_\alpha \langle p_\alpha \rangle) + \dots \\ & \dots + \nabla \cdot \left[r_\alpha (2\mu_\alpha \langle \bar{\mathbf{D}} \rangle + \langle \bar{\mathbf{T}}_\alpha^{\text{Re}} \rangle) \right] + r_\alpha \langle \rho \rangle \mathbf{g} + \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle \Gamma_\alpha - \langle \langle \bar{\mathbf{T}} \rangle \cdot \nabla \chi_\alpha \rangle, \end{aligned} \quad (135)$$

onde o termo $\langle \mathbf{u}_\alpha \rangle \Gamma_\alpha$ representa o fluxo de quantidade de movimento através da interface devido ao fluxo de massa definido na Equação (129). O termo $\langle \langle \bar{\mathbf{T}} \rangle \cdot \nabla \chi_\alpha \rangle$ representa a resultante das forças que atuam na interface:

$$\mathbf{M}_\alpha \equiv -\langle \bar{\mathbf{T}} \cdot \nabla \chi_\alpha \rangle = -\langle \bar{\mathbf{T}} \rangle \cdot \nabla \langle \chi_\alpha \rangle - \langle \bar{\mathbf{T}}' \rangle \cdot \nabla \langle \chi_\alpha \rangle, \quad (136)$$

pois a média da flutuação é nula. Assim,

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) + \nabla \cdot (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle \otimes \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) = -\nabla (r_\alpha \langle p_\alpha \rangle) + \dots \\ & \dots + \nabla \cdot \left[r_\alpha (2\mu_\alpha \langle \bar{\mathbf{D}}_\alpha \rangle + \bar{\mathbf{T}}_\alpha^{\text{Re}}) \right] + r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \mathbf{g} + \Gamma_\alpha \mathbf{u}_\alpha + \mathbf{M}_\alpha, \end{aligned} \quad (137)$$

onde o termo $\bar{\mathbf{T}}_\alpha^{\text{Re}}$ representa o tensor tensão de Reynolds.

As condições de salto promediadas para a massa devem ser tais que

$$\sum_{\alpha=1}^{N_f} \Gamma_\alpha = 0, \quad (138)$$

ou seja, o fluxo mássico deve ser conservado, e para a conservação de quantidade de movimento

$$\sum_{\alpha=1}^{N_f} (\Gamma_\alpha \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle + \mathbf{M}_\alpha) = \mathbf{m}_i^\sigma, \quad (139)$$

onde \mathbf{m}_i^σ é a força exercida na interface devido à tensão superficial e N_f o número de fases. Assim, o desequilíbrio de forças que surge na interface é contrabalançado pela força exercida pela tensão

superficial. Em situações em que os seus efeitos podem ser desconsiderados, tem-se

$$\sum_{\alpha=1}^{N_f} (\Gamma_{\alpha} \langle \mathbf{u}_{\alpha} \rangle + \mathbf{M}_{\alpha}) = 0. \quad (140)$$

As singularidades associadas à interface agora não se apresentam como tal. O processo de promediação difunde a informação local e toda a informação microscópica das fases é perdida, descrevendo agora, uma informação acerca do comportamento médio ao longo de um processo.

A informação da microescala perdida não desaparece do balanço, ela apenas surge como dois novos termos fontes: um devido à quantidade de movimento transportada pelo fluxo de massa através da interface; e outro pela ação das tensões que agem sobre a interface. As condições de salto que eram condições de contorno aplicadas à interface, agora não passam de equações restritivas. *Este é o ônus do processo de promediação. Estes dois termos devem ser modelados com equações constitutivas apropriadas, e este é o que denominamos de problema de fechamento, e em se tratamento da interface mais especificamente, modelos interfaciais de fechamento.*

As singularidades, descontinuidades e mapeamento de fronteiras móveis não se fazem mais necessários até este ponto, pois o processo de promediação agiu como um filtro passa baixa eliminando flutuações locais instantâneas. Além disto, o sistema de equações locais que era matematicamente fechado, não o é mais, pois as condições de salto são apenas restrições (ISHII e MISHIMA, 1984; PASSMAN, 1989). Isto é muito similar ao que acontece na promediação temporal das equações de Navier-Stokes na modelagem da turbulência onde a tentativa de fechamento das equações gera momentos ou covariâncias de mais alta ordem (SILVEIRA-NETO, 1998).

O modelo deduzido pode prever bem a distribuição das fases e dar bons resultados qualitativos e com dificuldade resultados quantitativos, pois é altamente dependente de como se modelam as forças interfaciais e a turbulência quando este for o caso, (BURNS, 2002), e esta dificuldade, principalmente em escoamentos polidispersos, foi assinalada nos trabalhos comentados no Capítulo 2.

Comentando um pouco sobre a turbulência, a Equação (137) foi obtida considerando-se os campos como uma superposição de uma média mais uma flutuação para que o tensor de Reynolds surgisse naturalmente em um único procedimento de promediação, mas este não é o único modo e nem tão pouco tido como o melhor ou mesmo correto. Não há uma concordância sobre o procedimento de média adequado para escoamentos multifásicos turbulentos, muito menos dos modelos de fechamento que ainda considerem a modulação do campo turbulento na dinâmica das interfaces (ver KASHIWA e VANDERHEYDEN, 2000; BURNS, 2002).

Uma abordagem alternativa seria não considerar os campos decompostos, e assim teríamos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \rho_\alpha \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) + \nabla \cdot (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle \otimes \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) = -\nabla (r_\alpha \langle p_\alpha \rangle) + \dots \\ \dots + \nabla \cdot (r_\alpha 2\mu_\alpha \langle \bar{\mathbf{D}}_\alpha \rangle) + r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \mathbf{g} + \Gamma_\alpha \mathbf{u}_\alpha + \mathbf{M}_\alpha, \end{aligned} \quad (141)$$

e submetê-la em seguida a uma promediação temporal.

A média temporal poderia muito bem ser aplicada primeiro gerando as conhecidas *URANS* e, subsequente, uma promediação conjunta. E, considerando-se $\mathbf{J} = \langle \bar{\mathbf{T}}_\alpha \rangle + \bar{\mathbf{T}}_\alpha^{\text{Re}}$, isto teria por consequência o surgimento explícito de componentes do tensor de Reynolds na resultante das forças que agem na interface.

Uma média ponderada pela massa ou de Favre também é possível o que gera uma covariância (ou momento de 2ª ordem) entre as flutuações dos campos de fração volumétrica e velocidade denominada *dispersão turbulenta*.

E por mais rigorosos e bem justificados que sejam cada um destes procedimentos, há sempre em algum ponto do caminho a necessidade de se postular equações de fechamento e a imposição criteriosa de equações constitutivas é sempre muito dependente de ajuste experimental, e a sua universalidade sempre questionável.

E neste ponto o modelo pode obter sucesso ou falhar grosseiramente. No Capítulo 2 abordou-se a profusão de modelos de fechamento dos mais variados e todos calibrados experimentalmente e dentro de certos limites quase sempre não muito amplos. O termo $\Gamma_\alpha \mathbf{u}_\alpha$ é dependente de que maneira a massa se transfere de uma fase a outra e pode envolver relações constitutivas mecanicistas e/ou termodinâmicas e está fortemente

atrelada à física do equilíbrio de fases, sendo as coordenadas de estado do sistema os fatores determinantes em sua modelagem.

Já a densidade de força interfacial \mathbf{M}_α , o segundo termo adicional da Equação (137), representa a densidade de força interfacial (N/m^3) e é sobre este termo que pesquisadores vem se debruçando há meio século e gerando uma quantidade considerável de modelos. Uma alternativa distinta do que foi abordado até então na modelagem da densidade de força interfacial é então proposta neste trabalho.

3.3.9 Modelo Heterogêneo (Two-Fluid Model)

Retornando a Equação (137) há ainda algumas questões que podem ser consideradas para o fechamento do sistema.

Nota-se que para este sistema tem-se $5N_f$ variáveis: u_ω , v_ω , w_ω , p_α e r_α em um conjunto de $3N_f$ equações de quantidade de movimento, N_f equações de continuidade e uma equação de restrição de fração volumétrica, ou seja, $4N_f + 1$ equações para um sistema de $5N_f$ variáveis se desconsiderar o tensor de Reynolds. Logo, o sistema está subdeterminado.

Uma prática comum é assumir que o campo de pressão seja compartilhado entre as fases, ou seja,

$$p_1 = p_2 = \dots = p_{N_f} = p. \quad (142)$$

O que é numericamente conveniente, facilitando o acoplamento das equações pelo campo de pressão e é aplicável em escoamentos subsônicos.

Com esta restrição passa-se a ter $4N_f$ variáveis: u_ω , v_ω , w_ω e r_α mais a pressão p fechando assim o sistema de $4N_f + 1$ variáveis com $4N_f + 1$ equações. Como tudo tem um preço, a simplificação pode levar o sistema a ser mal posto e em escoamentos gás-sólido e líquido-sólido onde outras formulações geralmente são preferidas (GIDASPOW, 1994), e usando para isto outras equações auxiliares, geralmente algébricas.

Desta maneira então, recorrendo à definição do tensor taxa de deformação dada na Equação (99), tem-se:

$$\frac{\partial(r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) = \Gamma_\alpha, \quad (143)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) + \nabla \cdot (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle \otimes \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) = -\nabla (r_\alpha \langle p \rangle) + \dots \quad (144)$$

$$\dots + \nabla \cdot \left[r_\alpha \left(\mu_\alpha \langle \nabla \mathbf{u}_\alpha + \nabla \mathbf{u}_\alpha^T \rangle + \bar{\mathbf{T}}_\alpha^{\text{Re}} \right) \right] + r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \mathbf{g} + \Gamma_\alpha \mathbf{u}_\alpha + \mathbf{M}_\alpha,$$

$$\sum_{\alpha=1}^{N_p} r_\alpha = 1. \quad (145)$$

Este modelo é denominado modelo heterogêneo, pois cada fase possui o seu próprio campo de velocidade. Caso escoamento seja turbulento, um modelo adequado no fechamento da turbulência deve ser escolhido, além das equações constitutivas que devem ser postuladas para se modelar a densidade de força interfacial.

Sem a densidade de força interfacial, os campos de velocidades não se enxergam nem se influenciam mutuamente. Há um acoplamento fraco devido ao compartilhamento do campo de pressão, mas não suficiente para se descrever a dinâmica das fases.

3.3.10 Modelo Homogêneo

Outro modelo muito útil é o chamado modelo homogêneo. Neste modelo além do campo de pressão, o campo de velocidade também é compartilhado por todas as fases, ou seja,

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 = \dots = \mathbf{u}_{N_f} = \mathbf{u}. \quad (146)$$

Ele se denomina homogêneo por existir apenas um campo de velocidade para todas as fases. Pode-se também pensá-lo como um caso limite do modelo heterogêneo onde não há escorregamento na interface e o campo de velocidade é contínuo através dela. Somando-se as equações fásicas de quantidade de movimento e desconsiderando a tensão superficial, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle) + \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle \otimes \langle \mathbf{u} \rangle) = \\ -\nabla \langle p \rangle + \nabla \cdot \left[\left(\mu \langle \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \rangle + \bar{\mathbf{T}}^{\text{Re}} \right) \right] + \langle \rho \rangle \mathbf{g}, \end{aligned} \quad (147)$$

onde se tem as chamadas propriedades de mistura

$$\langle \rho \rangle = \sum_{\alpha=1}^{N_p} r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle, \quad (148)$$

$$\mu = \sum_{\alpha=1}^{N_p} r_\alpha \mu_\alpha. \quad (149)$$

A conservação do volume ainda deve ser respeitada, e, por uma conveniência numérica que será tratada no Capítulo 4, a conservação da massa permanece a mesma do modelo heterogêneo, exceto que $\mathbf{u}_\alpha = \mathbf{u}$.

Segundo a condição de salto, o somatório das forças de interface deve ser igual à zero ou então igual à tensão superficial, caso ela seja considerada. Todos os termos de transferência de massa e quantidade de movimento interfacial se cancelaram, pois a tensão superficial foi desconsiderada. Caso ela seja importante, o somatório de todos os termos de interface deve ser igual a \mathbf{m}_i^σ como manda a condição de salto e, portanto, a Equação (147) recebe um termo fonte a mais,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle) + \nabla \cdot \left[\langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle \otimes \langle \mathbf{u} \rangle - \left(\mu \langle \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \rangle + \bar{\mathbf{T}}^{\text{Re}} \right) \right] = \dots \\ \dots - \nabla \langle p \rangle + \langle \rho \rangle \mathbf{g} + \mathbf{m}_i^\sigma. \end{aligned} \quad (150)$$

Estas duas equações de quantidade de movimento têm a vantagem de não necessitar de modelagem dos termos de interface como o que descreve o arraste entre as fases, por exemplo, além de demandarem menor esforço computacional devido ao número menor de variáveis a serem calculadas.

O uso do modelo homogêneo, com ou sem tensão superficial, não deve ser feito a qualquer tipo de escoamento sem uma análise criteriosa, como por exemplo, sabe se haverá uma mistura muito intensa, se o diâmetro de partículas é muito grande ou muito pequeno, em que regime o sistema trabalha, e toda uma gama de números adimensionais.

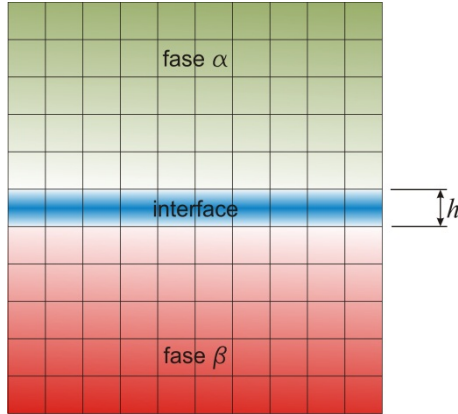
3.3.11 Modelo de Força Contínua de Superfície

Este modelo foi proposto por Brackbill, Kothe e Zemach (1992). O modelo interpreta a tensão superficial como um efeito tridimensional contínuo através da interface ao invés de uma condição de contorno na mesma. A interface é considerada como tendo uma espessura finita h comparável à resolução da malha, *viz.* Figura 29.

Esta abordagem substitui o problema de valor de contorno na interface, pois a transição é formulada de maneira a ser suave e

contínua entre os dois fluidos, contornando assim, o problema de descontinuidade associado à interface, ou seja, a condição de salto.

Figura 29. Espaçamento de malha e espessura de interface no modelo de força contínua.



Na implementação utilizada no ANSYS CFX, a força de superfície entre dois fluidos α e β é calculada como

$$\mathbf{m}_i^\sigma = \left(-\sigma_{\alpha\beta} \kappa_{\alpha\beta} \hat{\mathbf{n}}_{\alpha\beta} + \nabla_s \sigma_{\alpha\beta} \right) \delta_{\alpha\beta}, \quad (151)$$

onde $\sigma_{\alpha\beta}$ é a tensão superficial entre os dois fluidos em unidades de força por comprimento.

O operador ∇_s é o operador gradiente sobre a superfície que define a interface. Caso a tensão superficial não seja uma constante, forças tangenciais tomarão parte na perturbação da interface. Este efeito é denominado efeito ou convecção de Marangoni. A tensão superficial pode variar por efeitos de gradientes térmicos ou de concentração de um composto químico como, por exemplo, um surfactante.

O parâmetro $\kappa_{\alpha\beta}$ é a curvatura da superfície calculada por

$$\kappa_{\alpha\beta} = -\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}_{\alpha\beta}, \quad (152)$$

onde $\hat{\mathbf{n}}_{\alpha\beta}$ é o vetor normal unitário à interface calculado de acordo com

$$\hat{\mathbf{n}}_{\alpha\beta} = \frac{\mathbf{n}_{\alpha\beta}}{\|\mathbf{n}_{\alpha\beta}\|} \equiv \frac{\nabla r_\alpha}{\|\nabla r_\alpha\|}. \quad (153)$$

Deve-se escolher um dos fluidos como fluido primário para o cálculo destes parâmetros. O parâmetro $\delta_{\alpha\beta}$ atua como uma função delta de Dirac na interface que vale zero longe dela, e deste modo garante que a força superficial se fará sentir somente na *região de transição*. Ela é avaliada pelo gradiente da fração volumétrica:

$$\delta_{\alpha\beta} = \|\nabla r_\alpha\|. \quad (154)$$

3.4 Modelagem da Densidade de Força Interfacial

Na Seção 3.3, ao longo da dedução das equações de conservação da quantidade de movimento o termo de densidade de força interfacial, \mathbf{M}_w , foi deixado um pouco à parte da discussão. Este termo fonte das equações físicas de Navier-Stokes é a conexão matemática e física que permite a interação entre as fases, como já comentado até aqui ao longo do Capítulo.

A modelagem deste termo é o ponto mais delicado dos modelos, pois ele define o grau de interação entre as fases. Uma modelagem inapropriada da densidade de força interfacial põe por terra a vantagem do uso do modelo heterogêneo, isto considerando que uma solução numérica tenha sido obtida, pois os termos de interface são quase sempre as principais fontes de instabilidades numéricas (ISHII e MISHIMA, 1984).

Sendo uma composição de vários processos físicos acoplados e simultâneos, a descrição exata de como a interface se comporta é um problema desafiador, pois envolve várias escalas e questões de base como, por exemplo, “*Qual a espessura da interface?*”, ou “*Como se comporta o perfil de velocidade numa interface gás-líquido?*”, e “*Como se dá interação com a parede? Free ou No-Slip?*”. São questões sem muitas respostas categóricas e de cunho geral até o momento. Esta última é de extrema importância na análise do enchimento de moldes, por exemplo.

Os primeiros estudos das forças que agem sobre a interface, não foram necessariamente sobre uma interface qualquer, e sim sobre uma única esfera rígida em um meio líquido quiescente (STOKES, 1851; BASSET, 1888a; 1888b), obtendo soluções analíticas que descrevessem as forças que atuam na superfície da partícula e deste modo definir seu comportamento dentro do seio fluido. Na segunda metade no séc. XIX, Stokes (1851) desprezou o

termo inercial das equações de conservação de quantidade de movimento obtendo a hoje chamada lei de Stokes:

$$F_d = -6\pi\mu r_p v_s, \quad (155)$$

onde r_p o raio da partícula, e v_s é a velocidade de sedimentação da partícula

$$v_s = \frac{2}{9}g \frac{\Delta\rho}{\mu} r_p^2, \quad (156)$$

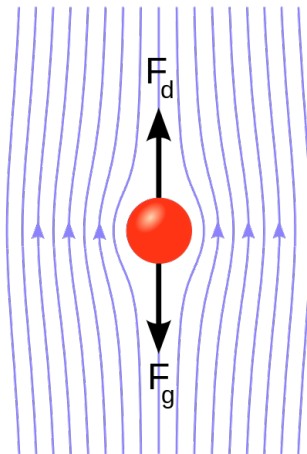
válida quando a esfera é lisa. Não há interferência entre as demais partículas que podem compor o sistema, e para escoamento com baixo número de Reynolds, ou seja, laminar.

Quando ocorre o equilíbrio entre a força de arrasto e a força gravitacional (ou empuxo),

$$F_g = \Delta\rho g \frac{4}{3}\pi r_p^3, \quad (157)$$

não há mais aceleração da partícula e a velocidade se torna constante, a esta velocidade denomina-se terminal. A Figura 30 ilustra o escoamento em torno da esfera e o equilíbrio entre a força de arrasto e a gravitacional. A igualdade entre as Equações (155) e (157) permite a obtenção da velocidade terminal. (*viz.* Figura 23).

Figura 30. Escoamento lento entorno de uma esfera ilustrando o balanceamento entre a força de arrasto F_d e a força gravitacional F_g .



Esta abordagem, claro, é limitada a casos bem específicos e não leva em consideração os efeitos inerciais e não lineares que resultarão disto, e em números de Reynolds mais elevados as hipóteses que a sustentam não são mais válidas.

Em situações de Reynolds mais elevados, o termo inercial não pode mais ser desprezado e isto torna a solução analítica do problema, mesmo em duas dimensões, complexa. Análises subsequentes por parte de outros pesquisadores como Alfred B. Basset em 1988, Joseph V. Boussinesq em 1904 Carl W. Oseen em 1927 (ROSA, 2011), e, empregando a assim denominada, *Aproximação de Oseen*, que considera uma aproximação linear para os termos de inércia. A então chamada equação Basset-Boussinesq-Oseen, ou simplesmente Equação BBO, descreve o movimento de uma partícula de diâmetro pequeno em regime transiente. A dedução desta equação foge ao escopo do trabalho, mas a sua forma é a seguinte (HILTUNEN *et al.*, 2009):

$$\begin{aligned} \frac{\pi}{6} \rho_p d_p^3 \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} &= \overbrace{3\pi\mu d_p (\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p)}^{(I)} - \overbrace{\frac{\pi}{6} d_p^3 \nabla p}_{(II)} + \dots \\ \dots + \overbrace{\frac{\pi}{12} \rho_f d_p^3 \frac{d}{dt} (\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p)}^{(III)} + \dots & \quad (158) \\ \dots + \underbrace{\frac{3}{2} d_p^2 \sqrt{\pi\rho_f\mu} \int_{t_0}^t \frac{1}{\sqrt{t-t'}} \frac{d}{dt'} (\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p) dt'}_{(IV)} + \underbrace{\sum_k F_k}_{(V)}, \end{aligned}$$

onde o termo *I* representa o arrasto de Stokes em termos de velocidade relativa; o *II* a força devido ao gradiente de pressão; o *III* a força de massa virtual; o termo *IV* a força de Basset; e o *V* as demais forças que agem sobre a partícula como a de empuxo, por exemplo.

O gradiente de pressão pode ser obtido a partir da equação de Navier-Stokes,

$$-\nabla p = \frac{D\mathbf{u}_f}{Dt} - \mu \nabla^2 \mathbf{u}_f. \quad (159)$$

Neste caso simples, uma quantidade considerável de trabalho algébrico é necessário, e leva em conta ainda uma única partícula de forma esférica e rígida. Estes resultados foram sendo

aprimorados e aplicados a casos mais complexos como bolhas em regimes em que ocorrem deformações. E, como em toda teoria ideal, os desvios da situação inicial são compensados na forma de coeficientes de ajuste, sempre tentando manter a mesma forma matemática da situação física original em que uma solução ou uma análise algébrica mais elementar era possível.

Outras forças foram sendo adicionadas como a força de sustentação, lubrificação e dispersão turbulenta, por exemplo, sempre tentando maximizar o número de efeitos possíveis atuando sobre uma partícula, contudo sem a possibilidade de uma solução fechada como a da Equação BBO (Equação (158)). E esta tem sido a prática herdada: determinar os efeitos termo a termo e encontrar modelos fechados analíticos e/ou ajustados experimentalmente. Um inconveniente disto é muitas vezes uma profusão de correlações e modelos diversos para cada um dos fenômenos e estendendo-os a situações práticas reais das mais distintas.

A Força de Arrasto talvez seja a mais intuitiva e de fácil entendimento, pois é devido ao atrito entre um fluido e outro, como entre um fluido e uma superfície rígida de uma parede, por exemplo. A condição de escorregamento é geralmente aplicada, pois a interface não é estática muito menos rígida como uma parede. A força de arrasto, como indica o termo (I) na Equação (158) é diretamente proporcional à velocidade de escorregamento, $(\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p)$. A força de arrasto está presente em praticamente todos os escoamentos multifásicos sendo geralmente a predominante, e raramente pode ser desconsiderada. Sua forma matemática é praticamente a mesma e bem estabelecida sendo dado ao coeficiente de arrasto o ônus de toda a complexidade que o modelo de base não pode capturar.

Na Figura 31 tem-se um exemplo onde é mostrada a evolução temporal destas forças causadas pelo vento agindo sobre uma partícula de pólen considerando a camada limite sobre a superfície da planta. Neste trabalho Urzay e Colaboradores (2009) analisam a importância de cada termo da Equação (158) dentro do seu contexto, normalizados pelo arrasto de Stokes. A predominância da Força de Arrasto é notória enquanto a Força de Basset, mesmo relativamente pequena, corresponde em média a 10% do total. Já a Força de Massa Virtual, tem uma importância mensurável somente

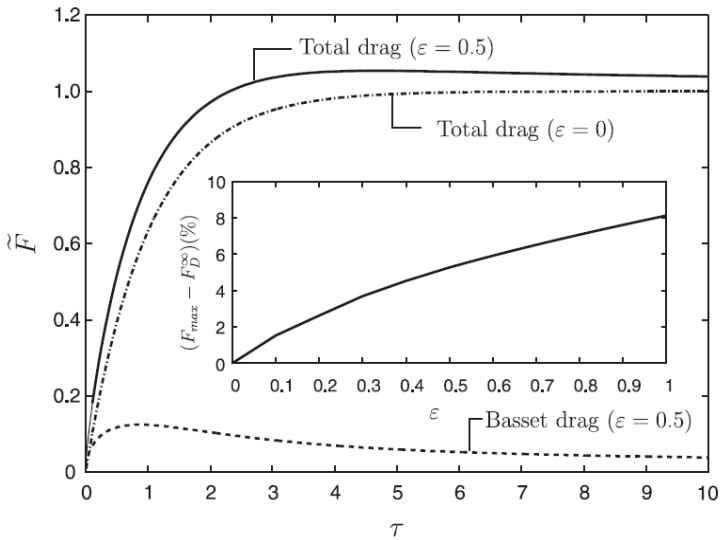
nos instantes iniciais, onde o termo de aceleração relativa $d(\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p)/dt$ predomina.

3.4.1 Força de Basset-Boussinesq

A Força de Basset, Basset-Boussinesq, ou “história” de Basset é uma força que surge devido ao atraso no desenvolvimento da camada limite devido a mudanças na velocidade relativa entre o fluido circundante e a partícula. Ela considera os efeitos viscosos – não contabilizados a princípio pela solução de Stokes - e a consequente defasagem na mudança da velocidade relativa entre a partícula e o fluido, τ ,

$$\tau = \sqrt{\frac{\rho_f \mu_f}{\pi}} \int_0^t \frac{du/dt'}{\sqrt{t-t'}} dt' . \quad (160)$$

Figura 31. Evolução temporal das forças sobre uma partícula de pólen. A curva mais abaixo representa a Força de Basset e o detalhe apresenta a contribuição da Massa Virtual, importante nos primeiros instantes de aceleração da partícula (ISHII e HIBIKI, 2006).

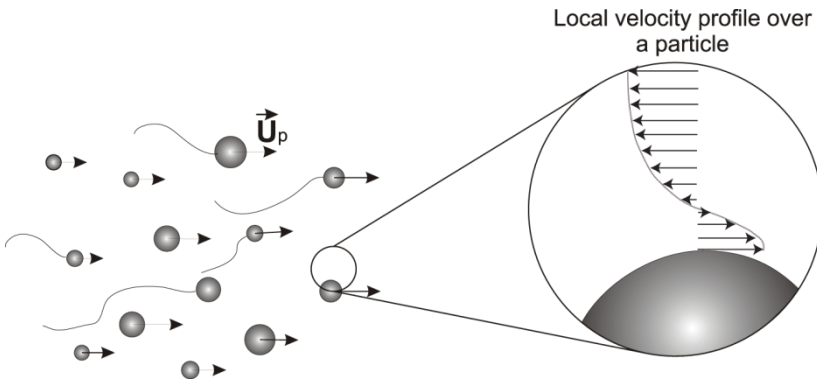


A camada limite que se desenvolve e a esteira⁹ da partícula deixada por sua passagem permanece como uma memória do campo de taxa de deformação e cisalhamento e isto vai se acumulando à medida que a partícula se move. A presença de outras partículas aumenta a complexidade desta dinâmica, pois agora à frente de uma partícula tem-se a esteira de outra e uma superposição das “histórias” destas trajetórias, *viz.* Figura 32. O tempo de resposta da partícula depende tanto de suas características morfológicas, como massa e forma, quanto da viscosidade do fluido circundante.

A obtenção do termo correspondente à força de Basset envolve uma manipulação matemática considerável (LEICHTBERG *et al.*, 1976; LANDAU e LIFSHITS, 1987). Para um escoamento transiente de Stokes o termo inercial pode ser desprezado, e a aplicação do operador rotacional elimina o campo de pressão¹⁰, assim,

$$\frac{\partial(\nabla \times \mathbf{u})}{\partial t} = \nu \nabla^2 (\nabla \times \mathbf{u}), \quad (161)$$

Figura 32. Exemplo de desenvolvimento de camada limite sobre uma partícula que arrasta parte do fluido que a circunda.



⁹ A presença de uma esteira implica em descolamento da camada limite, ou no mínimo perturbação do fluido na parte posterior da partícula quando da sua passagem. Logo, o escoamento de Stokes e todas as hipóteses que o sustentam já perdem sua validade.

¹⁰ Por identidade vetorial tem-se $\nabla \times \nabla \phi = 0$, para qualquer campo escalar.

cuja solução para um escoamento em torno de uma esfera é dada por Landau e Lifshits (*op.Cit*) por meio de uma integral de Fourier:

$$u(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} u_{\omega} e^{-i\omega t} d\omega, \quad (162)$$

onde u_{ω} é a solução da Equação (161) para uma esfera oscilando com frequência ω .

A solução completa do problema leva a já citada Equação BBO, e a integral que compõe a Força de Basset advém do fato da decomposição dos períodos de aceleração (ou desaceleração) envolvidos no retardo do desenvolvimento da camada limite. A força total seria a somatória destes períodos, que no limite, nos retornam a integral do termo, *viz.* Figura 33.

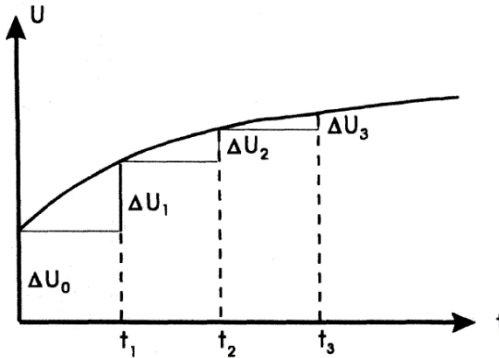
A inclusão da Força de Basset é quase sempre evitada devido à sua dificuldade de cálculo, em se mapear no tempo esta história devido a dificuldades tanto numéricas quanto de implementação computacional no tratamento de escoamentos complexos e polidispersos. Pode-se pensar que um método de integração como um Runge-Kutta de 4ª ordem é de fácil emprego na solução, mas em relação à Força de Basset, à medida que os intervalos de tempo tendem a aproximar por um aumento de resolução temporal, a integral se torna singular, pois o seu denominador se torna zero. A integral deve ser efetuada desde o tempo inicial até o tempo corrente¹¹. E isto impõe uma dificuldade computacional considerável quando se considera todo o sistema de partículas.

Uma forma de contornar é a integração durante um período onde a memória do escoamento é mais significativa, ou seja, um período de tempo em que as escalas características sejam relevantes. Esta escala é dada pelo tempo de relaxação da partícula,

$$\tau_p = \frac{\rho_s d_p^2}{18\mu}. \quad (163)$$

¹¹ Quando colidindo com a parede, a força é reinicializada do zero para a partícula. Esta prática se apoia na provável perda de correlação temporal após a colisão.

Figura 33. Decomposição dos períodos de aceleração para uma partícula sujeita à Força de Basset.



o que reduz o tempo de computação de 70 a 90% requerendo de 20 a 50 passos de tempo de memória¹² (viz. Figura 33) para o cálculo aproximado da Força de Basset sem desvios apreciáveis.

3.4.2 Força de Massa Virtual

A Força de Massa Virtual foi primeiramente proposta por Friedrich Bessel em 1828 (SANTOS, 2000):

(...)The most obvious effect of the air consists in a diminution of the moving force, and consequent increase in the time of vibration, arising from the buoyancy of the fluid. The correction for buoyancy is easily calculated from the first principles of hydrostatics, and formed for a considerable time the only correction which it was thought necessary to make for reduction to a vacuum. But in the year 1828 Bessel, in a very important memoir in which he determined by a new method the length of the seconds' pendulum, pointed out from theoretical considerations the necessity of taking account of the inertia of the air as well as of its

¹² Este intervalo pode ser interpretado como o tempo de correlação entre as partículas.

buoyancy.(...) In the case of a body of which the dimensions are small compared with the length of the suspending wire, Bessel represented the increase of inertia by that of a mass equal to k times the mass of the fluid displaced, which must be supposed to be added to the inertia of the body itself.

Este efeito da inércia é justamente a chamada Força de Massa Virtual ou Massa Adicionada (Added Mass) ocasionado pelo incremento da inércia da partícula devido à interação com o fluido circundante, acelerando ou desacelerando o mesmo. Para um sistema Massa-Mola amortecido tem-se

$$m \frac{d^2}{dt^2} x(t) + b \frac{d}{dt} x(t) + kx(t) = f(t), \quad (164)$$

onde m é a massa do sistema; b o coeficiente de amortecimento linear; k a constante da mola e $f(t)$ a força motriz que induz a oscilação, por exemplo, a força devido ao estiramento inercial da mola, dada pela lei de Hook, $f = kx$. A frequência natural deste sistema será dada por

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (165)$$

O comportamento deste sistema no vácuo difere quando o mesmo se encontra em um meio fluido como o ar, por exemplo. Este fluido circundante possui uma inércia e vai se opor aos ciclos de aceleração do sistema devido ao fato de uma parcela do fluido, por um breve período de tempo, permanecer aderido à superfície da partícula (como ilustra a

Figura 34), pois sua resposta a uma mudança na velocidade relativa não é instantânea, portanto, a Equação (164) deve considerar esta massa que atua contra o sistema,

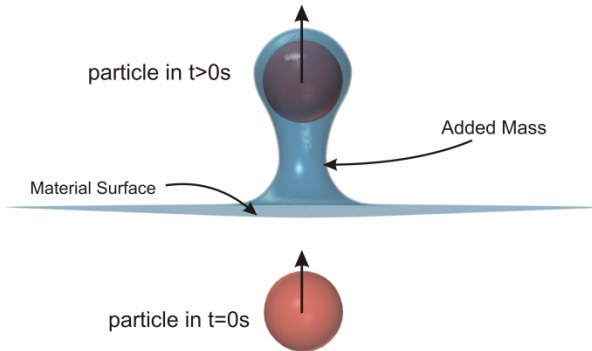
$$\begin{aligned} m \frac{d^2}{dt^2} x(t) + b \frac{d}{dt} x(t) + kx(t) &= f(t) - m_a \frac{d^2}{dt^2} x(t), \\ (m + m_a) \frac{d^2}{dt^2} x(t) + b \frac{d}{dt} x(t) + kx(t) &= f(t), \\ m' \frac{d^2}{dt^2} x(t) + b \frac{d}{dt} x(t) + kx(t) &= f(t), \end{aligned} \quad (166)$$

onde m_a é a massa adicionada ao sistema. Isto diminui a frequência de oscilação, pois aumenta virtualmente a massa efetiva do sistema massa-mola, assim,

$$\omega > \omega' \Rightarrow \sqrt{\frac{k}{m}} > \sqrt{\frac{k}{(m + m_a)}}. \quad (167)$$

Soma-se a isto ainda o amortecimento devido ao arrasto que não é considerado neste exemplo. A Figura 35 ilustra a solução da Equação (166) com e sem massa adicionada, e percebe-se a variação do período de oscilação, alterando a frequência de 14,5Hz para 10hz dobrando-se a massa do sistema.

Figura 34. Ilustração do conceito de massa adicionada ou massa virtual.



O fluido circundante ganha energia cinética à custa do trabalho realizado para acelerar a partícula. Da Equação (158), desconsiderando a força do gradiente de pressão, a de Basset, e a de arrasto de Stokes, tem-se

$$\rho_p V_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \sum_k \mathbf{F}_k + \frac{1}{2} \rho_f V_p \frac{d(\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_p)}{dt}, \quad (168)$$

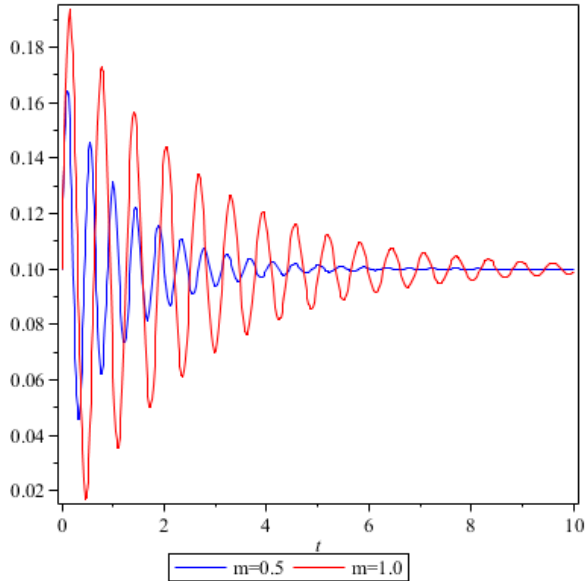
e isolando-se a derivada total da velocidade da partícula,

$$\left(\rho_p V_p + \frac{1}{2} \rho_f V_p \right) \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \sum_k \mathbf{F}_k + \frac{1}{2} \rho_f V_p \frac{d\mathbf{u}_f}{dt}, \quad (169)$$

em que do lado esquerdo da igualdade tem-se a massa da partícula mais a massa do fluido deslocado. O fator 0,5 é o coeficiente de massa virtual teórico, C_{VM} , para uma esfera rígida. A quantidade

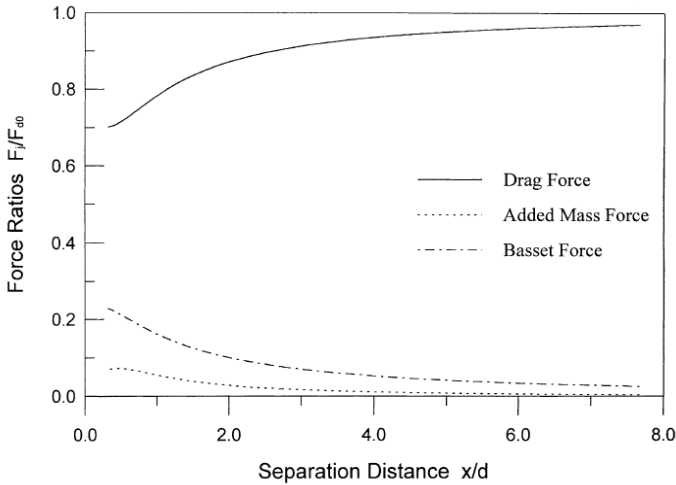
$C_{VM} \rho_f V_p$ é a massa adicionada ou massa virtual. Por isto, na Figura 35 o aumento da massa causa uma ampliação do tempo em que o sistema permanece oscilando, pois teve sua inércia aumentada, logo, seu amortecimento até o estado de repouso será mais lento.

Figura 35. Exemplos de sistemas massa-mola com massas diferente. A massa menor apresenta frequência maior e um amortecimento mais rápido que o mesmo sistema com o dobro de massa.



Zhang e Fang (2003) analisam o efeito da interação de bolhas ascendentes avaliando o balanço de forças e a influência de uma bolha sobre a outra em função da separação entre elas assinalando como a inclusão da Força de Basset e Massa Virtual melhoram os resultados na predição do comportamento de uma trilha de bolhas. A Figura 36 apresenta o razão entre as forças consideradas até aqui. À medida que as bolhas se afastam a importância das outras forças diminui, e a de arrasto tende a predominar, pois os efeitos que dependem do tempo, da história do escoamento tendem a perder a correlação entre si para duas partículas distintas.

Figura 36. Razão entre as forças em função da distância entre bolhas. As demais forças perdem importância à medida que a separação aumenta enquanto a de arrasto se torna dominante (PASSMAN, 1989).



No modelo de dois fluidos, a forma matemática da Força de Massa Virtual podem ser várias, uma muito comum e simples é

$$\mathbf{F}_{VM} = r_d \rho_c C_{VM} \left(\frac{D_d \mathbf{u}_d}{Dt} - \frac{D_c \mathbf{u}_c}{Dt} \right), \quad (170)$$

para domínios não rotativos, em domínios em rotação, a formulação leva em consideração a força de Coriolis:

$$\mathbf{F}_{VM} = r_d \rho_c C_{VM} \left[\frac{D_d \mathbf{u}_d^*}{Dt} - \frac{D_c \mathbf{u}_c^*}{Dt} + 2\Omega \times (\mathbf{u}_d^* - \mathbf{u}_c^*) \right], \quad (171)$$

onde os subíndices referem-se à fase discreta e a contínua; \mathbf{u}_k^* a velocidade no sistema de coordenadas rotativo; Ω a velocidade angular; e C_{VM} é o coeficiente de massa virtual igual a 0,5 como num escoamento invíscido em torno da esfera. Ele pode ser modificado de acordo com a necessidade.

A alteração da formulação com a rotação do sistema coordenado indica que a formulação é não objetiva, ou seja, não é invariante, independente do sistema de referência. Paladino (2005), estudou o escoamento de bolhas em medidores de vazão diferencial e considerou uma formulação objetiva (ou invariante) da

Força de Massa Virtual. Os resultados demonstraram uma alteração do campo gradiente de pressão, sem nenhum outro impacto nos resultados.

A forma matemática da Força de Massa Virtual tem um grande apelo numérico, pois permite a sua codificação de forma implícita, o que melhora o condicionamento do sistema de equações. As versões 12.x e posteriores do simulador ANSYS CFX fizeram uso desta característica e um ganho de estabilidade e velocidade na solução, contudo, a formulação continua sendo não objetiva. Este aspecto será tratado mais adiante em uma Seção pertinente.

3.4.3 Força de Arrasto

A Força de Arrasto seja talvez a mais estudada, desde a teoria de fluidos perfeitos onde a viscosidade era desprezada e o uso de funções de potenciais de velocidade geravam resultados muito interessantes para a época, mas o efeito do atrito entre o fluido e a superfície de contato não podia ser contabilizado, gerando resultados como o chamado paradoxo de D'Alembert na metade do século XVIII. Somente na primeira para a segunda metade do século XIX com as contribuições de Saint-Venant, Navier e Stokes, os efeitos viscosos entraram em cena e soluções como a já discutida solução de Stokes para o arrasto em uma esfera rígida puderam ser obtidas. A extrapolação para altos números de Reynolds levam o limite das Equações de Navier-Stokes a forma conhecida como Equação de Euler, onde os termos viscosos são desprezáveis em comparação aos demais. As soluções obtidas neste caso, também reincidem nas de D'Alembert, embora mesmo a altos números de Reynolds, o arrasto ainda existir, pois a camada limite¹³, por menor que seja ainda está lá.

A forma mais simples para a força de arrasto é dada pela lei de Stokes, que considera a partícula se movendo em um meio fluido

¹³ O conceito de camada limite foi introduzido por Prandtl em 1904 apenas, e apesar de discutirmos a força de massa virtual e Basset como relacionadas a ela, esta não era a que se tinha em mente na segunda metade do século XIX, sendo atribuídas a “efeitos viscosos”.

estagnado. Quando fluido possui um movimento relativo, ela se torna proporcional à velocidade relativa como na Equação BBO,

$$\mathbf{F}_D = c_{\alpha\beta} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha), \quad (172)$$

onde $c_{\alpha\beta}$ depende a princípio da massa e diâmetro de partícula. O coeficiente de arrasto é definido como,

$$C_D = \frac{F_D}{\frac{1}{2} \rho A U^2}, \quad (173)$$

onde A é a área projetada do corpo na direção do deslocamento. Em termos de velocidade relativa entre duas fases distintas α e β , e associando as Equações (172) e (173), tem-se

$$F_D = \frac{1}{2} C_D \rho_\alpha A (u_\beta - u_\alpha)^2, \quad (174)$$

ou na forma vetorial,

$$\mathbf{F}_D = \frac{1}{2} C_D \rho_\alpha A \|\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha\| (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha).$$

Esta relação contabiliza a força de arrasto para uma única partícula esférica (grão, gota ou bolha) cuja área projetada é igual a $\pi d_p^2/4$. A fração volumétrica de partículas, r_β , é a razão entre o volume de partículas, $n_p V_p$, e o volume total da mistura. Assim, o número total de partículas por unidade de volume, n_p , pode ser calculado por

$$n_p = \frac{r_\beta}{V_p} = \frac{6r_\beta}{\pi d_p^3}, \quad (175)$$

logo, a força de arrasto total exercida em um conjunto de partículas é dado por

$$\mathbf{F}_D = \frac{3}{4} \frac{C_D}{d_p} r_\beta \rho_\alpha \|\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha\| (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha). \quad (176)$$

Comparando as Equações (172) e (176) pode-se dizer que

$$c_{\alpha\beta} = \frac{3}{4} \frac{C_D}{d_p} r_\beta \rho_\alpha \|\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha\|. \quad (177)$$

E, como comentado ao longo do texto, todo desvio deste comportamento é imputado ao coeficiente de arrasto. E neste ponto

surtem as diversas correlações para as mais variadas situações, e ainda categorizando os sistemas de acordo com o tipo de partículas e sua concentração. Para partículas sólidas esféricas pode-se usar

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re} & \text{se } Re \ll 1, \\ 0,44 & \text{se } 1000 \leq Re \leq 2 \cdot 10^5. \end{cases} \quad (178)$$

O 1º caso é o regime de Stokes e o último o regime de Newton, o intervalo entre eles e acima disto é descrito por uma variada série de correlações. A correlação de Schiller e Naumann (1933) é uma das mais populares,

$$C_D = \max \left\{ \frac{24}{Re} (1 + 0,15 Re^{0,687}); 0,44 \right\}, \quad (179)$$

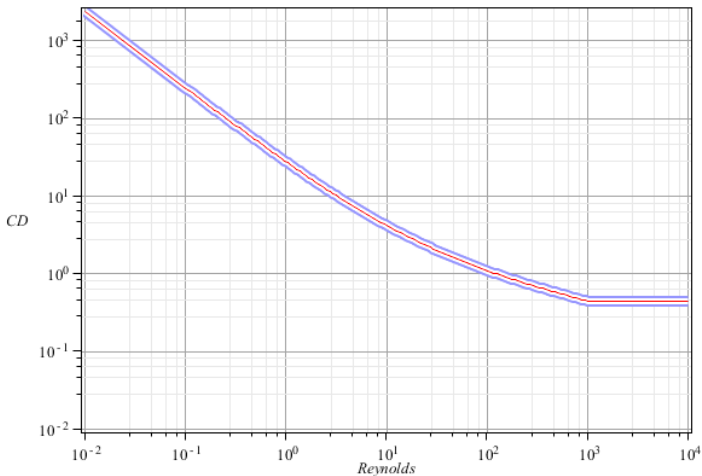
ilustrada na Figura 37.

Já para um regime denso Wen e Yu (1966) propuseram uma correção ao modelo anterior em função da fração volumétrica da fase contínua como

$$C_D = \max \left\{ r_c^{-1,65} \frac{24}{Re_c} (1 + 0,15 Re_c^{0,687}); 0,44 \right\}, \quad (180)$$

onde $Re_c = r_c Re$ que no limite quando $r_c \rightarrow 1$, ou seja, no regime diluído, a correlação de Schiller e Naumann é recuperada.

Figura 37. Resultado da Equação(179) para o Coeficiente de a Arrasto.



Em se tratando de partículas deformáveis como bolhas e gotas, a forma em que estas se encontram deve ser levada em conta na hora de se calcular o coeficiente de arrasto devido à mudança de comportamento da camada limite e do gradiente de pressão. Este arrasto é denominado arrasto de forma.

Bolhas ou gotas muito pequenas tendem a manter sua forma esférica à custa da força resultante da tensão superficial, e, no regime disperso, comportam-se como no modelo Schiller e Naumann, e à medida que o Reynolds de partícula aumenta, a forma que esta assume interfere nos resultados, para uma forma de calota esférica tem-se

$$C_D^{cap} = \frac{8}{3} . \quad (181)$$

As formas intermediárias são dadas por uma série considerável de correlações, como a proposta por Ishii e Zuber (1979) que assinalam que no regime distorcido o arrasto é fracamente relacionado com o número de Reynolds, mas é função do número de Eötvös,

$$C_D^{elip} = \frac{2}{3} \sqrt{Eo} , \quad (182)$$

e o uso de uma forma ou outra pode ser feita da seguinte maneira,

$$\begin{aligned} C_D^{dist} &= \min \{ C_D^{elip}, C_D^{cap} \}; \\ C_D &= \max \{ C_D^{esf}, C_D^{dist} \}. \end{aligned} \quad (183)$$

Na situação de um regime de distribuição densa, as formulações se alteram, e, para o regime esférico o coeficiente de arrasto

$$C_D^{esf} = \frac{24}{Re_{mix}} \left(1 + 0,15 Re_{mix}^{0,687} \right) , \quad (184)$$

onde Re_{mix} é o número de Reynolds de partícula baseado na viscosidade da mistura, calculada como se segue

$$\mu_{mix} = \mu_c \left(1 - \frac{r_d}{r_{dm}} \right)^{-2,5r_{dm}\mu_*}, \quad (185)$$

$$\mu_* = \frac{\mu_d + 0,4\mu_c}{\mu_d + \mu_c},$$

sendo r_{dm} a fração de empacotamento máximo (ISHII e MISHIMA, 1984). As correções para o regime denso são dadas por

$$C_D^{elip} = \left[\frac{1 + 17.67 \left(\frac{\mu_c}{\mu_m} \sqrt{1 - r_d} \right)^{0,7}}{18.67 \left(\frac{\mu_c}{\mu_m} \sqrt{1 - r_d} \right)} \right] \cdot \frac{2}{3} \sqrt{Eo}, \quad (186)$$

e

$$C_D^{cap} = (1 - r_d)^2 \frac{8}{3}, \quad (187)$$

que são as mesmas anteriores com fatores de correção que levam em conta tanto a fração volumétrica da fase dispersa, quanto à viscosidade da mistura e da fase contínua. O coeficiente de arrasto é então determinado avaliando-se

$$C_D = \begin{cases} C_D^{esf} & \text{se } C_D^{esf} \geq C_D^{elip} \\ \min\{C_D^{elip}, C_D^{cap}\} & \text{se } C_D^{esf} < C_D^{elip}. \end{cases} \quad (188)$$

Mas nem sempre se tem um sistema disperso, e quando se tem duas ou mais fases contínuas, a área de contato agora é definida pela área da superfície da interface, mantendo a mesma relação funcional dada pela Equação (174),

$$\mathbf{F}_D = C_D \rho_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta} \|\mathbf{u}_\alpha - \mathbf{u}_\beta\| (\mathbf{u}_\alpha - \mathbf{u}_\beta), \quad (189)$$

onde a massa específica é a da mistura,

$$\rho_{\alpha\beta} = r_\alpha \rho_\alpha + r_\beta \rho_\beta, \quad (190)$$

e a densidade de área interfacial,

$$A_{\alpha\beta} = \frac{r_\alpha r_\beta}{d_{\alpha\beta}}, \quad (191)$$

sendo $d_{\alpha\beta}$ a escala característica para interface. O produto $r_\alpha r_\beta$ garante que apenas na região da interface este termo seja diferente de zero. Este é denominado Modelo de Mistura. Outra forma de

avaliar a densidade de área interfacial é pelo gradiente da fração volumétrica, que de forma genérica pode ser calculada como a média harmônica entre o gradiente das frações volumétricas entre duas fases distintas

$$A_{\alpha\beta} = 2 \frac{\|\nabla r_{\alpha}\| \|\nabla r_{\beta}\|}{\|\nabla r_{\alpha}\| + \|\nabla r_{\beta}\|}, \quad (192)$$

que, no caso de haver apenas duas fases presentes, reduz-se a $A_{\alpha\beta} = \|\nabla r_{\alpha}\|$. Este é o denominado Modelo de Superfície Livre.

Nota-se que o modelo da Força de Arrasto está atrelado a dois parâmetros: o coeficiente de arrasto – que corrige todos os desvios do caso mais simples, o arrasto de Stokes; e a densidade de área interfacial - que pode ser geometricamente determinada em alguns casos, mas que na maioria das vezes deve ser calculada dinamicamente, como nos modelos de transporte de área interfacial ou de mistura algébrica como o AIAD abordados no Capítulo 2. E a densidade de área interfacial possui relação funcional com o campo de fração volumétrica, e erros nesta avaliação, ou de seus gradientes, quando for o caso, são propagados para o termo de arrasto que é um termo fonte das equações fásicas de Navier-Stokes. A solução deste acoplamento deve ser cuidadosa.

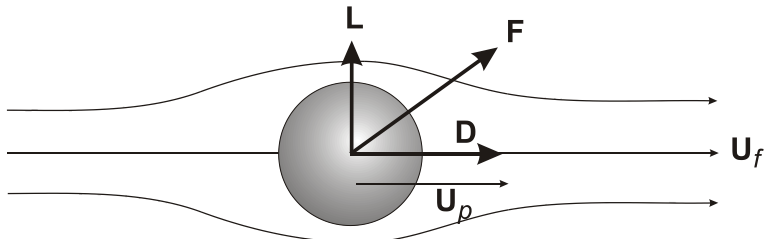
3.4.4 Força de Sustentação

As forças discutidas até aqui tratam de forças que geram arrasto, aceleração ou desaceleração por algum mecanismo sempre na direção de deslocamento, ou, mais apropriadamente, na direção do vetor velocidade relativa, ou grosso modo, na direção principal do escoamento (*streamwise direction*). Mas outros mecanismos podem gerar forças no sentido perpendicular a esta direção (*spanwise direction*) sendo a principal delas a chamada Força de Sustentação, ou Força Lift.

Este nome advém da correlação direta do efeito de sustentação que ocorre e perfis aerodinâmicos, onde a diferença de velocidade do fluido que escorre junto à parte superior e inferior do perfil gera uma diferença de pressão atuando sobre estas superfícies e, conseqüentemente, uma força resultante diferente de zero que faz com que o corpo sofra uma força que o direciona transversalmente à direção do escoamento.

No caso de partículas, o efeito não é muito diferente, apesar da forma e superfícies serem das mais diversas, diferenças de velocidade entre duas regiões da partícula geram componentes de força transversais à direção do deslocamento. Numa coluna de bolhas, por exemplo, é esta componente transversal a responsável pela segregação radial de partículas concentrando-as no centro ou junto às paredes dependendo da situação. Na Figura 38 uma partícula sendo arrastada por um fluido de velocidade U_f com uma velocidade de escorregamento $U_p < U_f$. A composição de forças gera uma resultante diagonal alterando sua trajetória. Esta componente transversal tende a inverter sua direção à medida que a partícula se locomove descrevendo uma trajetória sinuosa.

Figura 38. Composição de forças de sustentação e arrasto em uma partícula esférica sendo arrastada por um fluido.



A força de sustentação pode ser descrita por, (ANSYS, 2010)

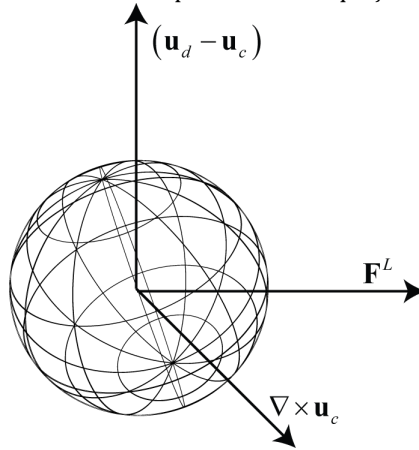
$$\mathbf{F}^L = r_d \rho_c C_L (\mathbf{u}_d - \mathbf{u}_c) \times (\nabla \times \mathbf{u}_c), \quad (193)$$

onde C_L é o coeficiente de sustentação; e r_d a fração volumétrica da fase dispersa – as partículas – garantindo que este termo fonte se faça presente somente onde houver partículas. A Figura 39 ilustra Força de Sustentação na direção perpendicular ao plano formado pelos vetores velocidade relativa e vorticidade.

A forma funcional da Equação (193) carrega em si informações físicas importantes, a primeira é a dependência direta com a velocidade relativa, caso o tempo de relaxação da partícula seja muito curto, ela tende a seguir as linhas de corrente do escoamento de forma praticamente passiva e a dispersão do conjunto será função exclusiva da fase contínua. Caso ela tenha um tempo de relaxação longo, ela tende a manter parte de sua trajetória

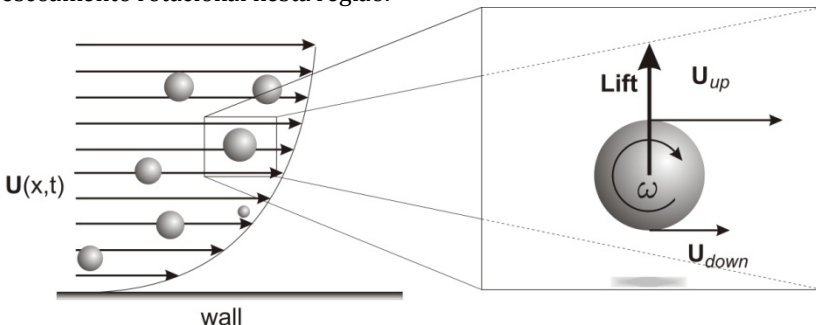
perturbando o escoamento ao seu redor criando gradientes de velocidade nas suas vizinhanças.

Figura 39. Posição relativa dos vetores de Força de Sustentação, Vorticidade e Velocidade Relativa presentes na Equação (193).



A segunda é a dependência funcional com o campo de vorticidade, pois os desequilíbrios de força transversal surgem devido à imersão da partícula em um campo de velocidade não uniforme que possui, conseqüentemente, um gradiente de velocidade qualquer, ou seja, um escoamento rotacional. Assim, a força de sustentação é afetada por efeitos inerciais e pela taxa de deformação/cisalhamento (KULKARNI, 2008).

Figura 40. Força de Sustentação agindo sobre partículas junto à parede devido ao gradiente de velocidade normal a esta e o conseqüente escoamento rotacional nesta região.



Já o coeficiente de sustentação depende de vários fatores como já mencionado no Capítulo 2 e, assim como na Força de Arrasto, as correlações também são diversas (HIBIKI e ISHII, 2007), e aplicadas a situações distintas, como partículas esféricas, regimes densos ou diluídos; ou bolhas ou gotas deformáveis. Há uma conhecida inversão da direção da Força de Sustentação relacionada ao tamanho e ao regime distorcido da partícula, Tomiyama, e Tomiyama e Colaboradores (1998; 2002; apud ANSYS, 2010) propuseram uma maneira de capturar este efeito responsável pela segregação de bolhas ou gotas grandes e pequenas. A formulação empregada no ANSYS CFX 12.1 é a do trabalho de 1998,

$$C_L = \begin{cases} \min\{0,288 \tanh(0,121\text{Re}), f(Eo')\} & \text{se } Eo' < 4, \\ f(Eo') & \text{se } 4 \leq Eo' \leq 10, \\ -0,27 & \text{se } Eo' > 10, \end{cases} \quad (194)$$

onde

$$f(Eo') = 0,00105Eo'^3 - 0,0159Eo'^2 - 0,0204Eo' + 0,474, \quad (195)$$

sendo Eo' o número de Eötvös modificado usando como escala característica o maior comprimento da bolha deformada

$$d_H = d_p (1 + 0,163Eo'^{0,757})^{1/3}. \quad (196)$$

Dijkhuizen e Colaboradores (2005) empregaram o método de captura de fronteira e simulações DNS para o cálculo direto dos coeficientes de sustentação e de arrasto. As oscilações do coeficiente foram de grande amplitude resultando em um coeficiente de sustentação de -0,44, quase o dobro da prevista para a mesma situação na Equação (194). Trabalhos experimentais (MCGRAW, 1997) e alguns numéricos (HÖLZER e SOMMERFELD, 2009; ZASTAWNY *et al.*, 2012) se aplicam na obtenção sempre mais acurada de correlações para os coeficientes, gerando uma nova geração de correlações que, com raras exceções, tem uma sobrevida suficiente para que o uso e a prática numérica demonstrem sua eficácia e robustez em outras situações das que foram obtidas.

3.4.5 Força de Dispersão Turbulenta

A chamada Dispersão Turbulenta surge da covariância entre flutuações do campo de fração volumétrica e o de velocidade (SHI, FRANK e BURNS, 2004). Pela decomposição e média de Reynolds aplicada à conservação da massa,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\langle \rho_k \rangle \langle r_k \rangle) + \nabla \cdot (\langle \rho_k \rangle \langle r_k \rangle \langle \mathbf{u}_k \rangle) = -\nabla \cdot (\langle \rho_k \rangle \langle r'_k \mathbf{u}'_k \rangle). \quad (197)$$

Como nos modelos de turbulência o termo do lado direito da igualdade é aproximado por um mecanismo de difusão de gradiente, ou

$$\langle \rho_k \rangle \langle r'_k \mathbf{u}'_k \rangle \approx \frac{\mu_T}{\sigma_T} \nabla \langle r_k \rangle, \quad (198)$$

onde μ_T e σ_T são a viscosidade e o número de Prandtl-Schmidt turbulentos.

Mesmo para situações onde se tem um fluido incompressível ou um escoamento isocórico, a densidade local da mistura sofre flutuações devido às diferentes proporções de fases presentes em dada região ao longo do tempo, e neste caso, uma Média de Favre é conveniente para a descrição das propriedades, assim pode-se escrever,

$$\tilde{\mathbf{u}}_k = \frac{\langle r_k \mathbf{u}_k \rangle}{\langle r_k \rangle} = \langle \mathbf{u}_k \rangle + \frac{\langle r'_k \mathbf{u}'_k \rangle}{\langle r_k \rangle}, \quad (199)$$

então,

$$\langle \mathbf{u}_k \rangle = \tilde{\mathbf{u}}_k - \frac{\langle r'_k \mathbf{u}'_k \rangle}{\langle r_k \rangle} = \tilde{\mathbf{u}}_k + \langle \mathbf{u}''_k \rangle, \quad (200)$$

onde $\langle \mathbf{u}''_k \rangle \equiv -\frac{\langle r'_k \mathbf{u}'_k \rangle}{\langle r_k \rangle}$, e pela Média de Reynolds,

$$\mathbf{u}_k = \langle \mathbf{u}_k \rangle + \mathbf{u}'_k = \tilde{\mathbf{u}}_k + \langle \mathbf{u}''_k \rangle + \mathbf{u}'_k. \quad (201)$$

Note que $\langle \mathbf{u}''_k \rangle \neq 0$, distintamente da Média de Reynolds. Assim, a Equação (197) pode ser reescrita em função do campo de velocidade ponderado pela Média de Favre,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\langle \rho_k \rangle \langle r_k \rangle) + \nabla \cdot (\langle \rho_k \rangle \langle r_k \rangle \langle \tilde{\mathbf{u}}_k \rangle) = 0, \quad (202)$$

retornando a forma padrão da equação da continuidade mas com o campo de velocidade médio de Favre. O efeito da dispersão pode

ser inteiramente capturado pelas equações de conservação de quantidade de movimento (BURNS *et al.*, 2004).

A chamada Força de Dispersão Turbulenta surge da aplicação deste procedimento de decomposição e média aos termos de forças interfaciais, gerando igual número de termos com correlações entre o campo de velocidade e o de fração volumétrica em cada força que estiver atuando: arrasto, massa virtual, Basset, sustentação, etc. Todavia, estudando a Força de Arrasto, as demais covariâncias não se mostram significativas (LAMB, 1895). O mecanismo de dispersão se dá pela ação dos vórtices que arrastam as partículas, e os mesmos vórtices sofrem ação da interação destas partículas que modulam a turbulência. Este mecanismo de dispersão é importante principalmente em partículas com números de Stokes pequenos. Assim, apenas a decomposição da força de arrasto é levada em conta,

$$\mathbf{F}_D = \underbrace{\frac{6r_\beta}{d_p}}_{A_{\alpha\beta}} \overbrace{\frac{\rho C_{D\alpha}}{8} \|\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha\|}_{D_{\alpha\beta}} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha), \quad (203)$$

que por decomposição e promediação nos retorna,

$$\mathbf{F}_D = \langle c_{\alpha\beta} \rangle (\tilde{\mathbf{u}}_\beta - \tilde{\mathbf{u}}_\alpha) + \mathbf{F}_{TD}. \quad (204)$$

O segundo termo é então chamado Força de Dispersão Turbulenta, \mathbf{F}_{TD} , até então um mecanismo de transporte de massa de caráter difusivo da equação da continuidade. Nas equações de conservação de quantidade de movimento ela surge como mais uma força interfacial (BURNS *et al.*, 2004):

$$\mathbf{F}_{TD} = \langle c_{\alpha\beta} \rangle \left(\frac{\langle r'_\beta \mathbf{u}'_\beta \rangle}{\langle r_\beta \rangle} - \frac{\langle r'_\alpha \mathbf{u}'_\alpha \rangle}{\langle r_\alpha \rangle} - \frac{\langle A'_{\alpha\beta} (\mathbf{u}'_\beta - \mathbf{u}'_\alpha) \rangle}{\langle A_{\alpha\beta} \rangle} \right), \quad (205)$$

e aplicando-se a aproximação de difusão de gradiente (Hipótese de Boussinesq), modela-se como

$$\mathbf{F}_{TD} = \langle c_{\alpha\beta} \rangle \left[\begin{array}{l} \left(\frac{\nu_{T\beta}}{\sigma_{T\beta}} \frac{\nabla \langle r_\beta \rangle}{\langle r_\beta \rangle} - \left(\frac{\nu_{T\alpha}}{\sigma_{T\alpha}} \frac{\nabla \langle r_\alpha \rangle}{\langle r_\alpha \rangle} \right) \right) \\ + \left(\frac{\nu_{T\beta}}{\sigma_{T\beta}} - \frac{\nu_{T\alpha}}{\sigma_{T\alpha}} \right) \frac{\nabla \langle A_{\alpha\beta} \rangle}{\langle A_{\alpha\beta} \rangle} \end{array} \right]. \quad (206)$$

Considerando um sistema polidisperso, a área interfacial da fase dispersa β é dada por

$$A_{\alpha\beta} = \frac{6r_\beta}{d_{p\beta}}, \quad (207)$$

logo, pode-se escrever,

$$\frac{\langle A'_{\alpha\beta} (\mathbf{u}'_\beta - \mathbf{u}'_\alpha) \rangle}{\langle A_{\alpha\beta} \rangle} = \frac{\langle r'_\beta (\mathbf{u}'_\beta - \mathbf{u}'_\alpha) \rangle}{\langle r_\beta \rangle} = \frac{\langle r'_\beta \mathbf{u}'_\beta \rangle}{\langle r_\beta \rangle} - \frac{\langle r'_\beta \mathbf{u}'_\alpha \rangle}{\langle r_\beta \rangle}, \quad (208)$$

que na Equação (205):

$$\mathbf{F}_{TD} = \langle c_{\alpha\beta} \rangle \left(\frac{\langle r'_\beta \mathbf{u}'_\beta \rangle}{\langle r_\beta \rangle} - \frac{\langle r'_\alpha \mathbf{u}'_\alpha \rangle}{\langle r_\alpha \rangle} - \frac{\langle r'_\beta \mathbf{u}'_\beta \rangle}{\langle r_\beta \rangle} + \frac{\langle r'_\beta \mathbf{u}'_\alpha \rangle}{\langle r_\beta \rangle} \right), \quad (209)$$

$$\mathbf{F}_{TD} = \langle c_{\alpha\beta} \rangle \left(\frac{\langle r'_\beta \mathbf{u}'_\alpha \rangle}{\langle r_\beta \rangle} - \frac{\langle r'_\alpha \mathbf{u}'_\alpha \rangle}{\langle r_\alpha \rangle} \right),$$

que modelada pela aproximação de difusão de gradiente, reduz-se a

$$\mathbf{F}_{TD} = \langle c_{\alpha\beta} \rangle \left(\frac{\nu_{T\alpha}}{\sigma_{T\alpha}} \right) \left(\frac{\nabla \langle r_\beta \rangle}{\langle r_\beta \rangle} - \frac{\nabla \langle r_\alpha \rangle}{\langle r_\alpha \rangle} \right), \quad (210)$$

a qual depende da viscosidade turbulenta e do número de Prandtl-Schmidt turbulento da fase contínua.

Outros modelos estão disponíveis e sua aplicabilidade é tão boa quanto os demais quando aplicada dentro dos parâmetros usados em sua calibração, mas deve-se salientar pela sua ampla utilização, apesar de algumas críticas a ele, o modelo proposto por Lopez de Bertodano (1992):

$$\mathbf{F}_{TD} = -C_{TD} \rho_c k \nabla r_c, \quad (211)$$

mantendo ainda a relação funcional com o gradiente de fração volumétrica, mas considerando uma dependência com a energia cinética turbulenta – já implícita na anterior pela viscosidade turbulenta. A constante de fechamento C_{TD} é outro parâmetro a se determinar e que depende do número de Stokes e indicado a escoamento de bolhas.

3.4.6 Invariância com o Sistema de Referência

Há diversas controvérsias na modelagem de cada uma destas forças, uma delas é a invariância em relação ao sistema de referência. Drew (1983; 1989; e 1992) discute a modelagem destes termos e a questão da invariância argumentando que estas forças devem ser funções somente de grandezas também invariantes para que isto ocorra, e demonstra que estas forças isoladamente não necessitam ser objetivas, somente o seu somatório é que deve ser (DREW, 1992), postulando

$$\begin{aligned}
 \mathbf{M}_{\alpha\beta} = & A_1(\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha) + \dots \\
 & \dots + A_2 \left[\left(\frac{\partial \mathbf{u}_\beta}{\partial t} + \mathbf{u}_\alpha \cdot \nabla \mathbf{u}_\beta \right) - \left(\frac{\partial \mathbf{u}_\alpha}{\partial t} + \mathbf{u}_\beta \cdot \nabla \mathbf{u}_\alpha \right) \right] + \dots \\
 & \dots + A_3(\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha) \cdot \bar{\mathbf{D}}_\alpha + A_4(\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha) \cdot \bar{\mathbf{D}}_\beta + \quad (212) \\
 & \dots + A_5(\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha) \cdot \nabla(\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha) + \dots \\
 & \dots + A_6(\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha) \cdot \left[\nabla(\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha) \right]^T,
 \end{aligned}$$

onde os coeficientes A_i são funções escalares de grandezas invariantes; e $\bar{\mathbf{D}}$ é o tensor taxa de deformação.

As formulações aqui apresentadas para a Força de Massa Virtual e a Força de Sustentação quando consideradas em conjunto *com os mesmos coeficientes* torna a formulação invariante. E isto é feito por *default*¹⁴.

A indiferença às mudanças no sistemas de referência implica que há um mapeamento espaço-temporal de maneira que distâncias, intervalos de tempo e a ordem temporal não se alterem (DREW, CHENG e LAHEY JR, 1979), ou de maneira mais formal, *uma grandeza invariante é aquela que é indistinguível da original mesmo sob uma transformação linear de qualquer natureza,*

$$\begin{aligned}
 \mathbf{x}^*(t) &= \mathbf{Y}(t) + \bar{\mathbf{Q}}(t) \cdot (\mathbf{x}(t) - \mathbf{z}_o), \\
 t^* &= t + t',
 \end{aligned} \quad (213)$$

¹⁴ Termo usado para definir uma configuração padrão de determinado software.

onde \mathbf{z}_o é o vetor posição do sistema de referência I e mapeado em II por $\mathbf{Y}(t)$, que representa a translação do sistema I para o II; $\bar{\mathbf{Q}}(t)$ o tensor de segunda ordem ortogonal¹⁵ que representa rotação de corpo rígido; e t' um escalar, *viz.* Figura 41.

Um escalar é invariante se

$$\alpha^* = \alpha, \quad (214)$$

enquanto um vetor qualquer, \mathbf{u} é invariante se,

$$\mathbf{u}^* = \bar{\mathbf{Q}} \cdot \mathbf{u}, \quad (215)$$

e para um tensor de segunda ordem quando

$$\bar{\mathbf{T}}^* = \bar{\mathbf{Q}} \cdot \bar{\mathbf{T}} \cdot \bar{\mathbf{Q}}^T, \quad (216)$$

se verifica.

A título de exemplo, considere a derivada total em relação ao tempo da Equação (213),

$$\frac{D\mathbf{x}^*}{Dt} = \bar{\mathbf{Q}} \cdot \left(\frac{D\mathbf{x}}{Dt} \right) + \frac{d\mathbf{Y}}{dt} + \frac{d\bar{\mathbf{Q}}}{dt} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{z}_o), \quad (217)$$

e sabendo que a derivada temporal da posição é a própria definição de velocidade, tem-se

$$\mathbf{u}^* = \bar{\mathbf{Q}} \cdot \mathbf{u} + \left[\frac{d\mathbf{Y}}{dt} + \frac{d\bar{\mathbf{Q}}}{dt} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{z}_o) \right], \quad (218)$$

que quando comparada a Equação (215) indica que esta transformação linear - a aplicação da derivada material -, altera a grandeza transformada por um fator igual ao termo entre colchetes na Equação (218), logo, tem-se uma transformação não objetiva.

Considerando agora dois campos de velocidades, uma pertencente a cada fase de um escoamento bifásico, por exemplo, tem-se

$$\mathbf{u}_\beta^* = \bar{\mathbf{Q}} \cdot \mathbf{u}_\beta + \left[\frac{d\mathbf{Y}}{dt} + \frac{d\bar{\mathbf{Q}}}{dt} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{z}_o) \right], \quad (219)$$

$$\mathbf{u}_\alpha^* = \bar{\mathbf{Q}} \cdot \mathbf{u}_\alpha + \left[\frac{d\mathbf{Y}}{dt} + \frac{d\bar{\mathbf{Q}}}{dt} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{z}_o) \right],$$

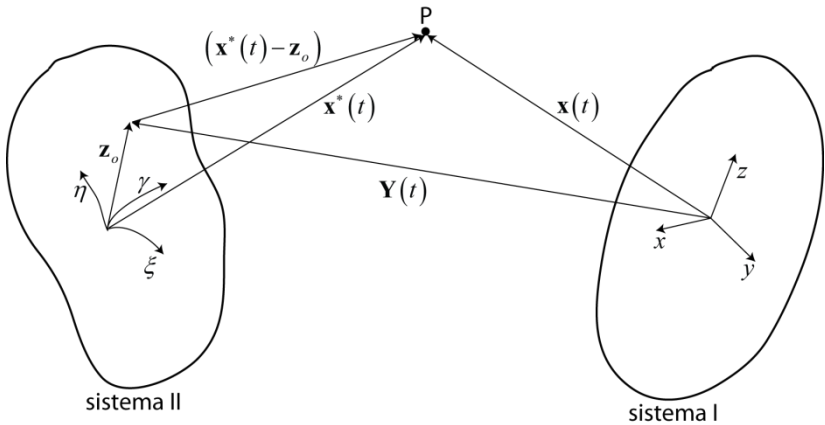
que, quando subtraídas, resultam

¹⁵ Ou seja, $\bar{\mathbf{Q}} \cdot \bar{\mathbf{Q}}^T = \bar{\mathbf{I}}$.

$$(\mathbf{u}_\beta^* - \mathbf{u}_\alpha^*) = \bar{\mathbf{Q}} \cdot (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\alpha), \quad (220)$$

que pela Equação (215) é uma grandeza objetiva ou invariante. Assim, a velocidade relativa é uma grandeza vetorial invariante, e a Força de Arrasto, por consequência, também o é.

Figura 41. Mudança de sistema de referência.



Pode se considerar agora acelerações. Tomando novamente a derivada material da Equação (219) de um ponto material j movendo na fase k ,

$$\begin{aligned} \frac{D_j \mathbf{u}_k^*}{Dt} = & \frac{d\bar{\mathbf{Q}}}{dt} \cdot \mathbf{u}_k + \bar{\mathbf{Q}} \cdot \frac{D_j \mathbf{u}_k^*}{Dt} + \frac{d\bar{\mathbf{Q}}}{dt} \cdot \frac{\overbrace{D_j \mathbf{x}}^{\mathbf{u}_j}}{Dt} + \dots \\ & \dots + \left[\frac{d^2 \mathbf{Y}}{dt^2} + \frac{d^2 \bar{\mathbf{Q}}}{dt^2} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{z}_o) \right] \end{aligned}, \quad (221)$$

ou

$$\frac{D_j \mathbf{u}_k^*}{Dt} = \bar{\mathbf{Q}} \cdot \frac{D_j \mathbf{u}_k^*}{Dt} + \frac{d\bar{\mathbf{Q}}}{dt} \cdot (\mathbf{u}_k + \mathbf{u}_j) + \left[\frac{d^2 \mathbf{Y}}{dt^2} + \frac{d^2 \bar{\mathbf{Q}}}{dt^2} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{z}_o) \right]. \quad (222)$$

E novamente, considerando um caso bifásico onde se tem $j = \alpha, \beta$ e $k = \alpha, \beta$, pode-se escrever

$$\begin{aligned} \frac{D_\alpha \mathbf{u}_\beta^*}{Dt} &= \bar{\mathbf{Q}} \cdot \frac{D_\alpha \mathbf{u}_\beta^*}{Dt} + \frac{d\bar{\mathbf{Q}}}{dt} \cdot (\mathbf{u}_\alpha + \mathbf{u}_\beta) + \left[\frac{d^2 \mathbf{Y}}{dt^2} + \frac{d^2 \bar{\mathbf{Q}}}{dt^2} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{z}_o) \right], \\ \frac{D_\beta \mathbf{u}_\alpha^*}{Dt} &= \bar{\mathbf{Q}} \cdot \frac{D_\beta \mathbf{u}_\alpha^*}{Dt} + \frac{d\bar{\mathbf{Q}}}{dt} \cdot (\mathbf{u}_\beta + \mathbf{u}_\alpha) + \left[\frac{d^2 \mathbf{Y}}{dt^2} + \frac{d^2 \bar{\mathbf{Q}}}{dt^2} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{z}_o) \right], \end{aligned} \quad (223)$$

e subtraindo,

$$\left(\frac{D_\alpha \mathbf{u}_\beta^*}{Dt} - \frac{D_\beta \mathbf{u}_\alpha^*}{Dt} \right) = \bar{\mathbf{Q}} \cdot \left(\frac{D_\alpha \mathbf{u}_\beta^*}{Dt} - \frac{D_\beta \mathbf{u}_\alpha^*}{Dt} \right), \quad (224)$$

logo, a aceleração relativa escrita em termos das velocidades da outra fase é objetiva:

$$\mathbf{a}_{\alpha\beta}^{rel} = \frac{D_\alpha \mathbf{u}_\beta}{Dt} - \frac{D_\beta \mathbf{u}_\alpha}{Dt}. \quad (225)$$

Esta formulação é diferente da implementada no simulador ANSYS CFX dada pela Equação (170) que, como já dito, não é objetiva. Estes exemplos ilustram a questão da objetividade dos modelos de fechamento e que ainda são tema de debates, mesmo por que os campos são fracamente afetados na maioria das situações. O impacto principal se dá sobre a solução do sistema de equações resultante, pois cada uma destas forças quando consideradas altera os autovalores da matriz do sistema, modificando o seu condicionamento, estabilidade e facilidade de solução pelo solver. A inclusão do termo de massa virtual, mesmo de forma não objetiva, com uma discretização implícita nas versões 12.x do simulador ANSYS CFX tem por objetivo somente o aumento de estabilidade, o que claro melhora a precisão das soluções obtidas, mas carecem de embasamento físico, pois não se pode afirmar que uma melhora no processo de solução é devido a uma formulação fisicamente mais consistente. É um artifício numérico, e como tal, tem a sua valia e deve ser usado com propriedade.

Variáveis submetidas à promediação também são invariantes uma vez que elas dependem somente dos limites de integração que são uma variação entre duas coordenadas distintas, e a mudança de sistema de referência não altera esta norma.

3.5 Modelo de Fechamento para o Tensor de Interface

Os modelos discutidos até aqui tratam sempre de como se modelar cada uma das forças interfaciais separadamente, obtendo melhores formulações, correlações e estabilidade numérica. Esta prática, como foi demonstrado, foi iniciada no começo do século XIX, com Bessel, Stokes, Basset, Boussinesq e tantos outros, e vem desde então sendo escrutinadas e exaustivamente repensadas para melhorarem o tratamento matemático de escoamentos multifásicos e assim, poderem descrever escoamentos cada vez mais complexos.

Outro detalhe diz respeito a como estes modelos são calibrados. Praticamente todos são projetados com base em dados experimentais. E, como quase todo processo matemático de fechamento, coeficientes são necessários e a universalidade dos valores comumente adotados ainda não foi bem determinada (LAHEY JR, 2005). É dificilmente se consegue em algum experimento desacoplar todos os efeitos de forma a calibrar o coeficiente de uma força isolada. Além do mais, são muito dependentes dos regimes de escoamento. Embora a forma matemática de cada uma destas forças esteja razoavelmente bem sedimentada, os seus coeficientes de fechamento não estão, e a cada dia surgem sempre novas correlações.

A necessidade de desacoplar os efeitos surge como algo natural e até comum, entendendo cada tipo de fenômeno e os modelando como problemas menores e que podem ser superpostos para contabilizar o que se observa na Natureza. O que sob o ponto de vista matemático e físico está consoante com a prática desde que Newton publicou os *Principia* em 1682. Mas a dificuldade em se determinar o comportamento microscópico das fases, da interface que as separa, e como isto se manifesta na escala macroscópica em que as equações de campo são válidas torna a tarefa de definir os coeficientes de fechamento de cada uma destas componentes de força uma tarefa praticamente sem fim. Entretanto, os métodos de medição e simulação estão a cada dia proporcionando mais subsídios para que isto seja feito com mais precisão.

Mas como desacoplar os efeitos? Como medir determinada força e não sofrer interferências de outra? Obviamente há maneiras de diminuir estas interferências desenvolvendo um robusto projeto experimental com uma base estatística sólida. Pode-se analisar o

arrasto de uma partícula em sua velocidade terminal; colocá-la próxima a uma parede para capturar a ação da força de sustentação; e usar tubos com restrições para promover uma aceleração relativa mensurável, por exemplo. Mas ainda assim surgem detalhes difíceis de lidar experimentalmente como a análise de um “trem” de partículas, coluna de bolhas, cavitação e transferência de massa associadas e a turbulência.

A Força de Dispersão Turbulenta é o único efeito explícito relacionado à turbulência empregado nos modelos multifásicos e ainda assim, sua eficácia não está bem documentada, pois os modelos de turbulência disponíveis são praticamente todos projetados para escoamentos monofásicos. Até mesmo a simulação de grandes escalas em sua formulação original (SMAGORINSKY, 1963) não lida com esta questão. Um dos poucos modelos que leva em consideração a presença de outras fases e teve um sucesso considerável é creditado a Troshko e Hassan (2001a; 2001b), contudo sem focar na interface e sim na função de parede. Praticamente todos os modelos que tentam definir como a presença de diferentes fases interfere no campo turbulento representam os termos de transferência interfacial tentando considerar o escoamento de bolhas ou partículas sólidas dispersadas (ver LOPEZ-DE-BERTODANO, LAHEY-JR e JONES, 1994; NIKITOPULOS e MICHAELIDES, 1995; PFLEGER *et al.*, 1999; PFLEGER e BECKER, 2001; TROSHKO e HASSAN, 2001b; CHAHED, ROIG e MASBERNAT, 2003; LAHEY JR, 2005; ZHANG, DEEN e KUIPERS, 2006).

A superposição de vários modelos de forças tem suas vantagens no que tange a categorizar os diversos fenômenos, considerar os mais importantes após uma análise dos regimes e condições do escoamento e permitir o uso de modelos simples aos mais complexos na análise e soluções de problemas de engenharia, mesmo que de forma aproximada ou com desvios consideráveis, mas sempre gerando algum tipo de informação a mais do que se tinha ao início da análise.

As dificuldades surgem na escolha de quais efeitos considerar, pois alguns grupos adimensionais devem ser considerados (Reynolds, Froude, Eötvös, Bond, Weber, Morton, Knudsen, Stokes, escalas de Kolmogorov, número de capilaridade e outros tantos) e ainda assim recorrer à correlação mais adequada ao problema, o que nem sempre é fácil. Os fatores numéricos são

importantes, como passo de tempo, malha, esquemas de interpolação, instabilidades numéricas ou dificuldade de convergência devido a um modelo mal ou bem posto.

Durante o processo de promediação das equações de conservação, toda a informação da microescala é perdida de foco e se condensa em um termo fonte integral que envolve as tensões na interface, velocidade da interface relativa ao fluido e o gradiente da função indicadora de fase, e por simplicidade, desconsiderando as flutuações de campo,

$$\langle \mathbf{u} \rangle \langle \langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle (\langle \mathbf{u} \rangle - \mathbf{u}_i) \cdot \nabla \chi_\alpha \rangle - \langle \bar{\mathbf{T}}_i \cdot \nabla \chi_\alpha \rangle. \quad (226)$$

O primeiro termo é a transferência de quantidade de movimento por transferência de massa, e o segundo, o fluxo de tensão normal à superfície da interface. Desconsiderando que haja alguma transferência de massa entre as fases, os fluidos em contato só interagem por meio do termo $-\langle \bar{\mathbf{T}}_i \cdot \nabla \chi_\alpha \rangle$. O gradiente da função indicadora de fase opera como uma função Delta de Dirac dentro do operador integral de média,

$$\mathbf{M}_\alpha = \int_E \bar{\mathbf{T}}_i \cdot \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \hat{\mathbf{n}}_i dm(\mu). \quad (227)$$

Naturalmente, estas formulações não elucidam nem permitem a solução do escoamento, a Equação (226) é então modelada como uma composição de efeitos, $\mathbf{M}_\alpha = \mathbf{F}_\alpha^{Drag} + \mathbf{F}_\alpha^{Lift} + \mathbf{F}_\alpha^{VM} + \mathbf{F}_\alpha^{Basset} + \dots$, e tentando respeitar algumas premissas como a invariância.

A forma geral de equação de transporte de uma propriedade ϕ qualquer (tensorial de qualquer ordem) promediada por média de conjunto ou equivalente é

$$\partial_t \langle r_\alpha \rho_\alpha \phi \rangle + \nabla \cdot \langle r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha \phi \rangle = \nabla \cdot \left[r_\alpha \left(\Gamma_\alpha^\phi \nabla \langle \phi \rangle \right) \right] + \langle S_\alpha^\phi \rangle + \langle T_i^\phi \rangle. \quad (228)$$

A condição de salto estabelece que, mesmo havendo descontinuidade das propriedades físicas das fases através da interface, deve haver a conservação dos fluxos, assim:

$$\sum_{\alpha=1}^{N_p} \langle T_i^\phi \rangle_\alpha = \langle S_i^\phi \rangle. \quad (229)$$

onde $\langle S_i^\phi \rangle$ é a fonte ou sumidouro da propriedade ϕ sobre a interface. No caso da quantidade de movimento *o que se conserva é o seu fluxo*. O perfil de velocidade pode sofrer descontinuidades e o fluxo de quantidade de movimento na unidade de tempo através de uma superfície material como a interface é a própria tensão. Este fluxo pode ser decomposto em componentes normais e tangenciais sobre a superfície material, e devem ser tais que

$$\mathbf{M}_\alpha + \mathbf{M}_\beta = \mathbf{m}_i^\sigma, \quad (230)$$

onde \mathbf{M}_α e \mathbf{M}_β são as densidades de força interfacial – sejam quais forem as suas formas matemáticas -, ou o fluxo de quantidade de movimento em cada lado da interface que não são necessariamente iguais. Este possível desbalanço é equilibrado por \mathbf{m}_i^σ , a tração exercida na interface devido à tensão superficial, ou seja, a fonte $\langle S_i^\phi \rangle$.

A tensão superficial pode ou não ser importante, isto depende da magnitude do coeficiente de tensão superficial, σ , e da curvatura, quanto menor o raio de curvatura, maior a tração exercida. A equação de Young-Laplace é um caso da condição de salto onde os fluidos estão estagnados

$$\Delta p = \sigma \kappa, \quad (231)$$

onde σ é o coeficiente de tensão superficial em unidades de força por comprimento; κ é a curvatura igual ao inverso do raio de curvatura; e Δp é a diferença de pressão dos dois lados da interface, as únicas componentes de tensão normal que ainda permanecem, logo, $p_{\alpha,i} \neq p_{\beta,i}$. Em raios de curvatura muito grandes a diferença de pressão é praticamente nula e a tensão superficial pode ser desprezada, restando a relação

$$\mathbf{M}_\alpha + \mathbf{M}_\beta = 0, \quad (232)$$

que diz que a densidade de força interfacial sentida por uma fase é igual ao seu simétrico na outra fase, $\mathbf{M}_\alpha = -\mathbf{M}_\beta$.

Esta premissa de simetria é mantida mesmo quando a tensão superficial existe e deve ser levada em conta, e todas as componentes de força: arrasto, sustentação, massa virtual,

lubrificação, etc., são consideradas recíprocas na outra fase, e o termo de tensão superficial é adicionado às equações de balanço de uma das fases.

Isto obviamente está em desacordo com a condição de salto e como as equações representam a soma de efeitos que devem se equilibrar, esta simetria entre os termos de força interfacial é contrabalançado pelos outros termos como o advectivo, o difusivo e o gradiente de pressão. No trabalho de Paladino (2005) a alteração da formulação da Massa Virtual teve impacto sobre o gradiente de pressão.

Mesmo no modelo homogêneo onde o campo de velocidade é considerado contínuo através da interface

$$\mathbf{u}_\alpha = \mathbf{u}_\beta = \dots = \mathbf{u}_\zeta = \mathbf{u} \quad , \quad (233)$$

a condição de salto é respeitada. Considere o balanço de uma propriedade ϕ qualquer em duas fases, líquida (L) e gasosa (G). Considerando a Equação (233), tem-se

$$\begin{aligned} \text{Liq.: } \quad & \partial_t \langle r_L \rho_L \phi \rangle + \nabla \cdot \langle r_L \rho_L \mathbf{u} \phi \rangle = \nabla \cdot \left[r_L \left(\Gamma_L^\phi \nabla \langle \phi \rangle \right) \right] + \langle S_L^\phi \rangle + \langle T_i^\phi \rangle_L \\ & + \\ \text{Gás: } \quad & \partial_t \langle r_G \rho_G \phi \rangle + \nabla \cdot \langle r_G \rho_G \mathbf{u} \phi \rangle = \nabla \cdot \left[r_G \left(\Gamma_G^\phi \nabla \langle \phi \rangle \right) \right] + \langle S_G^\phi \rangle + \langle T_i^\phi \rangle_G \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Mistura: } \quad & \partial_t \langle (r_G \rho_G + r_L \rho_L) \phi \rangle + \nabla \cdot \langle (r_G \rho_G + r_L \rho_L) \mathbf{u} \phi \rangle = \dots \quad (234) \\ & \dots \nabla \cdot \left[(r_G \Gamma_G^\phi + r_L \Gamma_L^\phi) \nabla \langle \phi \rangle \right] + \langle S_G^\phi + S_L^\phi \rangle + \underbrace{\left(\langle T_i^\phi \rangle_G + \langle T_i^\phi \rangle_L \right)}_{\text{somatório dos fluxos na interface}} \end{aligned}$$

ou simplesmente,

$$\begin{aligned} \partial_t \langle \rho_m \phi \rangle + \nabla \cdot \langle \rho_m \mathbf{u} \phi \rangle = \nabla \cdot \left[\Gamma_m^\phi \nabla \langle \phi \rangle \right] + \langle S_m^\phi \rangle + \dots \\ \dots + \underbrace{\left(\langle T_i^\phi \rangle_G + \langle T_i^\phi \rangle_L \right)}_{\text{somatório dos fluxos na interface}} \end{aligned} \quad (235)$$

onde as propriedades físicas de mistura, m , são apenas uma combinação linear das propriedades de cada fase ponderadas pela respectiva fração volumétrica.

De acordo com a condição de salto, Equação (229), este somatório deve ser igual a zero ou a uma fonte. No caso da

quantidade de movimento, $\mathbf{M}_L = -\mathbf{M}_G$ e a tensão superficial deve ser imposta, ela não surge naturalmente da condição de salto, ou seja, mesmo com todo o formalismo dado até aqui, há uma inconsistência. Todavia, quando se recorre novamente às equações promediadas, apenas duas questões ficam em aberto:

- 1) *Como calcular o tensor tensão sobre a interface? E;*
- 2) *Como calcular o gradiente da função indicadora de fase?*

A dedução das equações não pede nenhuma decomposição e sim o resultado médio do produto escalar do tensor na interface e do gradiente da função indicadora de fase.

A segunda questão tem uma resposta mais direta e já apresentada, pois a média da função indicadora de fase é a presença potencial da fase em determinado ponto em um dado instante, ou a fração volumétrica, como é comumente chamada. Assim,

$$\langle \nabla \chi_\alpha \rangle = \nabla \langle \chi_\alpha \rangle = \nabla r_\alpha, \quad (236)$$

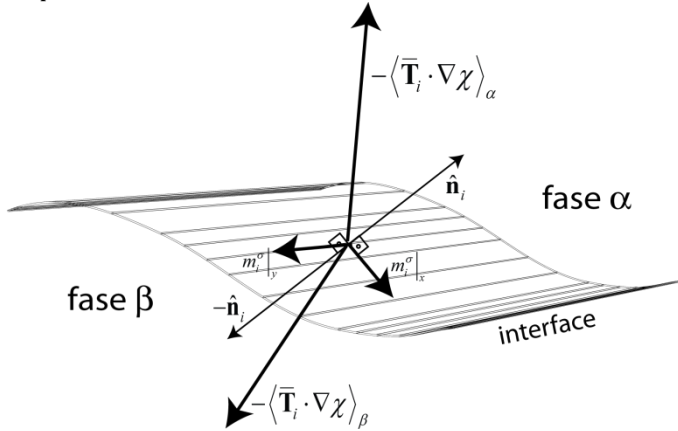
que é sempre normal a qualquer isossuperfície do campo de fração volumétrica e seu módulo é igual à densidade de área interfacial,

$$\|\nabla r_\alpha\| = A_{\alpha\beta}. \quad (237)$$

Vários modelos empregam o gradiente de fração volumétrica como o de tensão superficial desenvolvido por Brackbill, Kothe e Zemach (1992) e o de dispersão turbulenta de Lopez de Bertodano (2009).

Considerando uma grandeza tensorial qualquer de segunda ordem sua ação sobre uma superfície orientada é definida pelo produto escalar entre o tensor e o vetor normal unitário da superfície. A ação das tensões do fluido sobre a interface é definida da mesma maneira. A Figura 42 apresenta os termos interfaciais, incluindo a tensão superficial \mathbf{m}_i^σ . Nela têm-se as duas forças em ambos os lados da interface e elas não são necessariamente colineares, pois com tensões distintas dos dois lados da interface, este desequilíbrio é compensado pela força de tração, ou seja, tem-se a representação gráfica da condição de salto.

Figura 42. Representação das forças sobre a interface considerando as projeções dos tensores de ambas as fases nas direções normais e a força de tração na superfície.



O modelo proposto neste trabalho trata justamente desta relação de tensões sem o paradigma da decomposição de forças. A força resultante sobre a interface deve ser igual ao somatório das forças que agem em ambos os lados dela,

$$\mathbf{F}_\alpha|_i + \mathbf{F}_\beta|_i = \mathbf{M}_{\alpha\beta}|_i, \quad (238)$$

ou seja,

$$\left[-\langle \bar{\mathbf{T}}_i \cdot \nabla \chi \rangle_\alpha \right] + \left[-\langle \bar{\mathbf{T}}_i \cdot \nabla \chi \rangle_\beta \right] = \mathbf{M}_{\alpha\beta}|_i. \quad (239)$$

Considerando que o tensor na interface tenha as mesmas características do tensor tensão da fase, pode-se considerar

$$-\langle \bar{\mathbf{T}}_i \cdot \nabla \chi \rangle_\alpha \approx -\langle \bar{\mathbf{T}} \cdot \nabla \chi \rangle_\alpha. \quad (240)$$

Recorrendo a Equação (118):

$$-\langle \bar{\mathbf{T}} \cdot \nabla \chi \rangle_\alpha \cong -\langle \bar{\mathbf{T}} \rangle_\alpha \cdot \langle \nabla \chi \rangle = -\langle \bar{\mathbf{T}} \rangle_\alpha \cdot \nabla \langle \chi \rangle = -\langle \bar{\mathbf{T}} \rangle_\alpha \cdot \nabla r_\alpha, \quad (241)$$

e para a outra fase,

$$-\langle \bar{\mathbf{T}} \cdot \nabla \chi \rangle_\beta \cong -\langle \bar{\mathbf{T}} \rangle_\beta \cdot \nabla r_\beta, \quad (242)$$

ou em notação indicial,

$$\mathbf{M}_k = -\langle T_{ij} \rangle_k \partial_j r_k \hat{\mathbf{e}}_i. \quad (243)$$

De posse da mesma filosofia da Hipótese de Boussinesq onde o tensor de Reynolds é descrito como função dos gradientes de velocidades, o modelo aqui proposto também considera a ação das forças em cada lado da interface como função dos gradientes de velocidade, por meio da diferença do produto escalar entre o tensor dentro de cada fase e o vetor normal a ela,

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta} = r_\alpha \mathbf{M}_\alpha + r_\beta \mathbf{M}_\beta, \quad (244)$$

onde, $\mathbf{M}_\alpha = -\langle \bar{\mathbf{T}}_i \rangle_\alpha \cdot \nabla r_\alpha$ e $\mathbf{M}_\beta = -\langle \bar{\mathbf{T}}_i \rangle_\beta \cdot \nabla r_\beta$, ou seja, uma média ponderada pela fração volumétrica.

Apesar do tensor taxa de deformação ser geralmente empregado, ele representa somente a parte simétrica do tensor gradiente de velocidade,

$$\nabla \mathbf{u} = \bar{\mathbf{D}} + \bar{\mathbf{\Omega}}. \quad (245)$$

A parte antissimétrica, $\bar{\mathbf{\Omega}}$, é o tensor taxa de rotação. E, a fim de levar em conta tanto os efeitos da taxa de deformação quanto da taxa de rotação, o modelo proposto modela o tensor $\langle \bar{\mathbf{T}}_i \rangle$ empregando o gradiente de velocidade de cada fase, lembrando que $\nabla r_\alpha = -\nabla r_\beta$,

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta} = -C_T \cdot \left[\begin{array}{l} r_\alpha \langle \mu_\alpha \rangle \langle \partial_i u_{\alpha j} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j \rangle + \\ r_\beta \langle \mu_\beta \rangle \langle \partial_i u_{\beta j} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j \rangle \end{array} \right] \cdot (\partial_k r_\alpha \hat{\mathbf{e}}_k) \cdot \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i). \quad (246)$$

A constante C_T é uma constante de fechamento para contabilizar algum possível ajuste na magnitude do termo fonte, pois como já discutido, dificilmente pode-se desviar de algum tipo de calibragem, mas sendo, todavia, neste caso, apenas uma. *A não ser quando explicitamente assinalado, ao longo do trabalho o valor da constante de fechamento é considerada igual a um.*

A função delta $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ garante que este termo fonte seja sentido somente na região da interface. Neste trabalho ela é aproximada pelo produto de duas funções degrau

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \approx u(r_\alpha - r_{\alpha, \min}) \cdot u(r_{\beta, \min} - r_\beta), \quad (247)$$

onde $r_{\alpha, \min}$ e $r_{\beta, \min}$ são as frações volumétricas mínimas em que se considera a presença de uma interface feitas iguais a 10^{-4} .

Em notação matricial,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{M}_{\alpha\beta} = C_T \cdot & \left\{ -r_\alpha \langle \mu_\alpha \rangle \left\langle \begin{bmatrix} \partial_x u_\alpha & \partial_y u_\alpha & \partial_z u_\alpha \\ \partial_x v_\alpha & \partial_y v_\alpha & \partial_z v_\alpha \\ \partial_x w_\alpha & \partial_y w_\alpha & \partial_z w_\alpha \end{bmatrix} \right\rangle \cdot \begin{bmatrix} \partial_x r_\alpha \\ \partial_y r_\alpha \\ \partial_z r_\alpha \end{bmatrix} + \dots \right. \\
 & \left. \dots - r_\beta \langle \mu_\beta \rangle \left\langle \begin{bmatrix} \partial_x u_\beta & \partial_y u_\beta & \partial_z u_\beta \\ \partial_x v_\beta & \partial_y v_\beta & \partial_z v_\beta \\ \partial_x w_\beta & \partial_y w_\beta & \partial_z w_\beta \end{bmatrix} \right\rangle \cdot \begin{bmatrix} \partial_x r_\alpha \\ \partial_y r_\alpha \\ \partial_z r_\alpha \end{bmatrix} \right\} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \hat{\mathbf{e}}_k.
 \end{aligned} \tag{248}$$

Para um caso bidimensional,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{M}_{\alpha\beta} = C_T \cdot & \left\{ -r_\alpha \langle \mu_\alpha \rangle \left\langle \begin{bmatrix} \partial_x u_\alpha & \partial_y u_\alpha \\ \partial_x v_\alpha & \partial_y v_\alpha \end{bmatrix} \right\rangle \cdot \begin{bmatrix} \partial_x r_\alpha \\ \partial_y r_\alpha \end{bmatrix} + \dots \right. \\
 & \left. \dots - r_\beta \langle \mu_\beta \rangle \left\langle \begin{bmatrix} \partial_x u_\beta & \partial_y u_\beta \\ \partial_x v_\beta & \partial_y v_\beta \end{bmatrix} \right\rangle \cdot \begin{bmatrix} \partial_x r_\beta \\ \partial_y r_\beta \end{bmatrix} \right\} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \hat{\mathbf{e}}_k.
 \end{aligned} \tag{249}$$

Todas estas informações são intrínsecas do escoamento, estão disponíveis e podem ser calculadas dinamicamente. Não há a necessidade de se perguntar qual força usar ou não usar. O próprio escoamento define sua dinâmica e a intensidade de sua interação. Esta formulação pode ser caracterizada como um método volumétrico, pois não há a necessidade de se rastrear, ou reconstruir uma interface para se calcular nenhum dos parâmetros do modelo, embora um método de reconstrução possa ainda ser empregado e o mesmo cálculo feito e aplicado sobre esta interface rastreada ou reconstruída.

A vantagem direta está em manter a formulação mais próxima do termo original sem uma postulação agressiva. Contudo, como sendo dependente de gradientes, a resolução espacial e da região de interface são parâmetros importantes e que devem ser tratados adequadamente, pois gradientes mal resolvidos resultarão em vetores normais mal resolvidos e gradientes de velocidades mal avaliados. Logo, a solução do campo de frações volumétricas deve ser acurada dada a inserção de forma explícita dos termos fontes nas equações.

Um inconveniente que pode surgir diz respeito a interfaces difusas e que ocorrem em escoamentos mono ou polidispersos com frações volumétricas baixas. Sendo uma média ponderada por

frações volumétricas, o termo que representa a fase contínua irá predominar sobre a da fase dispersa,

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta} \approx -C_T \langle \mu_\alpha \rangle \left\langle \begin{bmatrix} \partial_x u_\alpha & \partial_y u_\alpha \\ \partial_x v_\alpha & \partial_y v_\alpha \end{bmatrix} \right\rangle \cdot \begin{bmatrix} \partial_x r_\alpha \\ \partial_y r_\alpha \end{bmatrix} \hat{\mathbf{e}}_k. \quad (250)$$

Neste caso, a área interfacial mais apropriada é a do Modelo de Partícula

$$A_{\alpha\beta} = \frac{6r_\beta}{d_p}, \quad (251)$$

e o gradiente de fração volumétrica deve então ser normalizado, pois sua magnitude representa a própria área interfacial, mas sendo mais adequada para escoamentos em que as frações volumétricas são equiparáveis. A viscosidade em si é outro fator a ser repensado nesta situação, para escoamentos dispersos Ishii e Mishima (1984) propõem

$$\mu_{mix} = \mu_c \left(1 - \frac{r_d}{r_{dm}} \right)^{-2,5r_{dm}\mu_*}, \quad (252)$$

$$\mu_* = \frac{\mu_d + 0,4\mu_c}{\mu_d + \mu_c},$$

onde o r_{dm} é fração volumétrica máxima no problema. Quando $r_{dm} \rightarrow 0$, a viscosidade de mistura (ou aparente) tende ao valor da viscosidade da fase contínua. Assim,

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta} \approx -C_T \frac{\mu_{mix}}{\|\nabla r_i\|} \frac{6r_d}{d_p} \left\langle \begin{bmatrix} \partial_x u_i & \partial_y u_i \\ \partial_x v_i & \partial_y v_i \end{bmatrix} \right\rangle \cdot \begin{bmatrix} \partial_x r_i \\ \partial_y r_i \end{bmatrix} \hat{\mathbf{e}}_k. \quad (253)$$

Ou, se considerar o tensor taxa de deformação, $\bar{\mathbf{T}}_i = 2\mu_{mix}\bar{\mathbf{D}}$,

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta} \approx -C_T \frac{\mu_{mix}}{\|\nabla r_i\|} \frac{6r_d}{d_p} \left\langle \begin{bmatrix} \partial_x u_i & \partial_y u_i \\ \partial_x v_i & \partial_y v_i \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \partial_x v_i & \partial_y u_i \\ \partial_x u_i & \partial_y v_i \end{bmatrix} \right\rangle \cdot \begin{bmatrix} \partial_x r_i \\ \partial_y r_i \end{bmatrix} \hat{\mathbf{e}}_k. \quad (254)$$

O subíndice i denota que uma das fases deve ser escolhida como fase primária, tal como feito para o modelo de tensão superficial, o subíndice d denota a fase dispersa.

Uma vantagem desta abordagem diz respeito à inclusão direta do Tensor de Reynolds vindo ele de um modelo a duas equações, como o $k - \varepsilon$, LES, ou algum modelo de fechamento para os momentos de segunda ordem. Isto pode ser feito diretamente

adicionando à viscosidade turbulenta a viscosidade dinâmica, resultando assim na viscosidade efetiva, ou introduzir diretamente as componentes do tensor no modelo do tensor da interface,

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta} = \left(-r_\alpha \langle \bar{\mathbf{T}} + \bar{\mathbf{T}}^{\text{Re}} \rangle_\alpha \cdot \nabla r_\alpha \right) + \left(-r_\beta \langle \bar{\mathbf{T}} + \bar{\mathbf{T}}^{\text{Re}} \rangle_\beta \cdot \nabla r_\beta \right), \quad (255)$$

ou,

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{\alpha\beta} = & \left\{ -r_\alpha \mu_\alpha \left\langle \left[\begin{array}{cc} \partial_x u_\alpha & \partial_y u_\alpha \\ \partial_x v_\alpha & \partial_y v_\alpha \end{array} \right] - \rho_\alpha \left[\begin{array}{cc} \overline{u'_\alpha u'_\alpha} & \overline{v'_\alpha u'_\alpha} \\ \overline{u'_\alpha v'_\alpha} & \overline{v'_\alpha v'_\alpha} \end{array} \right] \right\rangle \cdot \left[\begin{array}{c} \partial_x r_\alpha \\ \partial_y r_\alpha \end{array} \right] + \dots \\ & \dots - r_\beta \mu_\beta \left\langle \left[\begin{array}{cc} \partial_x u_\beta & \partial_y u_\beta \\ \partial_x v_\beta & \partial_y v_\beta \end{array} \right] - \rho_\beta \left[\begin{array}{cc} \overline{u'_\beta u'_\beta} & \overline{v'_\beta u'_\beta} \\ \overline{u'_\beta v'_\beta} & \overline{v'_\beta v'_\beta} \end{array} \right] \right\rangle \cdot \left[\begin{array}{c} \partial_x r_\beta \\ \partial_y r_\beta \end{array} \right] \right\} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \hat{\mathbf{e}}_k, \end{aligned} \quad (256)$$

considerando um caso bidimensional por simplicidade.

Esta extensão a casos turbulentos é direta, sem a necessidade de postulações, pois as componentes surgem naturalmente do processo de promediação de Reynolds e pode ser aplicada em conjunto com qualquer tipo de modelo de turbulência, e assim, os efeitos das flutuações e covariâncias entram diretamente no cômputo nas forças que agem sobre a interface.

3.5.1 Força de Pressão

Um detalhe foi mantido à parte por raramente ser empregado nos modelos. A densidade de força interfacial muitas vezes mesmo sem a prescrição de modelos constitutivos é separada em duas parcelas, uma devida às tensões viscosas e modelada aqui, e uma devido à força de pressão, ou componentes normais de tensão do tensor tensão que ainda atuam mesmo o fluido estando estagnado. O termo em questão é o seguinte:

$$(p_i - p_\alpha) \nabla r_\alpha, \quad (257)$$

onde p_i é a pressão sobre a interface, e p_α a pressão da fase α ; e, de acordo com Drew (1983), a pressão pode ser calculada por

$$p_i = \langle p_\alpha \nabla \chi_\alpha \rangle \cdot \nabla r_\alpha \|\nabla r_\alpha\|^{-2}. \quad (258)$$

E de acordo com Lamb (1895), a diferença de pressão interfacial, pelo menos em um escoamento potencial, é obtida por

$$p_i - p_\alpha = -C_{pi} r_\alpha \rho_\alpha \|\mathbf{u}_{rel}\|, \quad (259)$$

onde o coeficiente da Força de Pressão, C_p , depende das condições do escoamento. Mas em condições isocóricas ou fluidos incompressíveis, na ausência de expansões e/ou contrações da bolha leva a um equilíbrio de pressão ao nível microscópico muito rápido, e C_p pode ser feito igual a zero, ou seja, a força de pressão é desprezível ou mesmo nula (TROSHKO e HASSAN, 2001b).

A maneira como se apresenta a Equação (259) é muito similar a da Força de Arrasto, e sua associação física com a atuação do campo de pressão na interface remete ao *efeito de arrasto de forma*, que indiretamente já está presente na equação constitutiva da Força de Arrasto propriamente. E ainda a parcela $-p_i \nabla r_\alpha$ que descreve a força média de pressão entorno da bolha é também referida como força de flutuação.

Esta parcela é desconsiderada neste trabalho pelas razões descritas e pela assertiva do compartilhamento do campo de pressão no fechamento do sistema de equações.

3.6 Considerações Finais

Foi apresentada uma das formas de obtenção das equações de conservação da massa, quantidade de movimento, bem como a sua fundamentação física e matemática.

Assinala-se que a formulação matemática descrita de escoamentos multifásicos não é a única e figura entre tantas outras, como as de promediação espacial ou temporal, modelos unidimensionais com promediação na seção para escoamentos em dutos, método de volumes de controle, etc. A apresentada aqui é tida por este autor a mais bem detalhada em seu formalismo na literatura sem apresentar inconsistências ou violações de conceitos precípuos da Mecânica dos Fluidos, além de considerá-la mais elegante do ponto de vista matemático.

O modelo proposto é em sua fundamentação muito simples quando comparado aos demais mecanismos de transferência interfacial apresentados até aqui, apesar de sua forma matemática o apresentar de forma um pouco mais complexa, pois trata de grandezas tensoriais, vetoriais e escalares em conjunto.

Espera-se que este Capítulo permita ao leitor o entendimento matemático necessário à compreensão do trabalho e de outros similares

CAPÍTULO

4

MÉTODO
NUMÉRICO

A formulação numérica é apresentada neste Capítulo o que inclui o Método de Volumes Finitos Baseado em Elementos, ou EbFVM, empregado na solução do sistema de equações diferenciais deduzidas no Capítulo 3, e alguns detalhes da implementação do código comercial ANSYS CFX. A literatura disponível sobre o método EbFVM é bem conhecida e não há a necessidade de se repetir o que já se encontra bem documentado. Apenas os princípios e fundamentos que permitem a compreensão conceitual do método são abordados. Sugere-se a leitura de Maliska (2004), Cordazzo (2006) e Keller (2007), para se apreender detalhes intrínsecos da implementação do método, além da ampla revisão bibliográfica apresentada pelos três trabalhos.

A todo usuário de códigos comerciais é bem conhecida a dificuldade em se saber o que o programa faz, e como ele o faz, mesmo quando a base teórica seja bem conhecida, cada programador tem suas formas de interpretar a filosofia de cada método e maneiras de o transcrever para o código fonte (C, C++, FORTRAN, Matlab, etc.), desenvolvendo um algoritmo que se julga o melhor para a situação. Em simuladores comerciais isso não é diferente e segue ainda o fato destas artimanhas serem muitas vezes segredos comerciais e muito pouca ou nenhuma informação é dada nos manuais. E algumas destas metodologias numéricas são responsáveis pelo sucesso ou não do código. Mas raramente estas informações são abordadas em teses, dissertações e mesmo artigos de periódicos de confiança sendo que a metodologia numérica resume-se a indicar qual código comercial foi usado. Esta filosofia em um trabalho de cunho experimental não seria tolerada de maneira alguma, pois como se reproduzir os resultados se a maneira exata pela qual eles foram obtidos não é abordada?

Este autor acredita que o mesmo cuidado e zelo devem ser dados quando uma metodologia numérica é empregada, e muitos analistas numéricos sabem da dificuldade em se reproduzir alguns trabalhos publicados por falta de indicadores de o que foi e o que não foi empregado, pois os simuladores comerciais são tratados como caixas pretas de onde os resultados emergem sem se saber o que ele fez. E, sendo este um trabalho científico, estes detalhes não podem ser ignorados, pois nenhum trabalho científico é crível se as bases para a sua reprodução não puderem ser conhecidas por outros pesquisadores. E isto deve ser assim, independentemente do uso simulador ANSYS CFX, FLUENT ou outro qualquer.

Algumas informações deste Capítulo não estão disponíveis nos manuais do ANSYS CFX, sendo informações obtidas ao longo de alguns anos de emprego do software, muitas conversas com representantes, e algumas vezes com os próprios idealizadores de alguns modelos e da implementação numérica do programa em vários países. Obviamente, as informações fornecem apenas uma base conceitual do quê e para quê foram idealizadas, e nem todos os detalhes estão disponíveis, pois as leis de direitos autorais e patentes comerciais devem ser respeitadas. Mas ainda assim, as informações aqui descritas das abordagens do código ANSYS CFX permitem sua implementação *in house*, ou o seu emprego em outros simuladores, pois toda a fundamentação numérica é de conhecimento aberto.

Alguns dos tópicos abordados como condições de contorno, por exemplo, por estarem muito intimamente relacionados à implementação numérica e ao simulador ANSYS CFX, são tratadas aqui ao invés de apresentá-los como parte da modelagem matemática.

4.1 Introdução

O método de volumes finitos baseado em elementos é uma evolução natural do método de volumes finitos clássico para malhas não estruturadas e geometrias de qualquer natureza; de sistemas coordenados ortogonais de qualquer natureza e malhas

estruturadas¹⁶, passando por sistemas de coordenadas generalizadas e curvilíneas, culminando com a formulação baseada em elementos, ou seja, a presente.

O EbFVM é uma associação entre o método clássico de balanços de volumes de controle, ou volumes finitos, muito utilizado na solução de escoamentos e transferência de calor por sua natureza conservativa, com a versatilidade geométrica e teoricamente muito bem fundamentada do método de elementos finitos, FEM, muito usado em problemas estruturais. O uso em um campo ou outro pode ser efetuado em qualquer problema, assim como tantos outros como diferenças finitas, elementos de contorno, colocação ortogonal, etc., pois são todos uma classe de métodos variacionais derivados do método de resíduos ponderados onde a diferença entre eles reside na função peso utilizada. A Figura 43 apresenta um diagrama relacionando os métodos e suas diferenças.

A função comum de todos estes métodos é reduzir este sistema a um conjunto de equações algébricas, e assim, resolvê-lo por alguma metodologia numérica apropriada, quando da dificuldade ou mesmo na impossibilidade da obtenção de uma solução analítica fechada de um sistema de equações diferenciais, Tal solução é uma aproximação da solução exata e ainda descontínua, ou seja, discreta e associada a regiões pré-determinadas que de acordo com a natureza do método, podem ser os pontos de colocação, volumes de controle, elementos, nós, etc., ou seja, a solução numérica é dada a um conjunto de pontos ou regiões discretas, ou finitas. A este artifício denomina-se *discretização*.

O sistema de equações algébricas é então uma aproximação discreta do sistema de equações diferenciais original. E, quando o número de elementos discretos aumenta e a distância h que os separa tende a zero, o conjunto de equações algébricas deve retornar à formulação diferencial que a originou. A esta propriedade do método de discretização denomina-se *consistência*, e nem todos a possuem. Consistência é uma condição necessária para que um sistema de equações algébricas resultante convirja para uma solução. Este cuidado é observado no método EbFVM. A Figura 44 ilustra estes dois conceitos.

¹⁶ O conceito de malha estruturada não deve ser confundido com malha hexaédrica ou quadrilateral uniforme.

Figura 43. Diagrama das principais diferenças dos métodos numéricos. Adaptado de Cordazzo (2006).

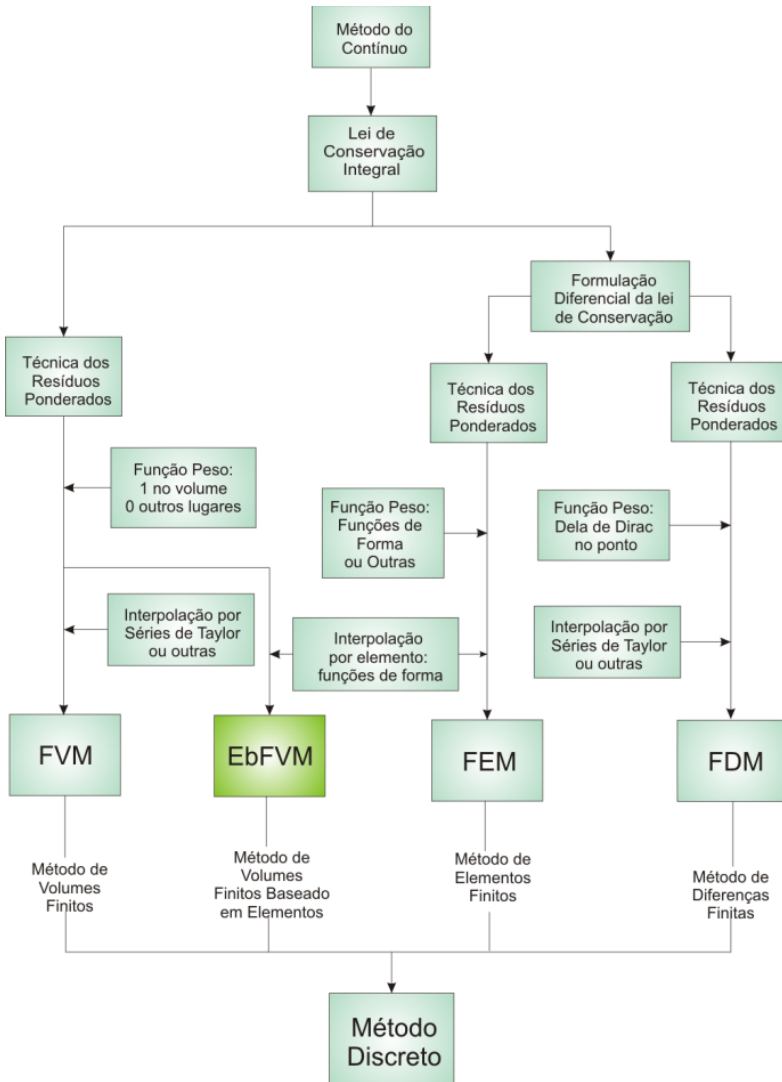
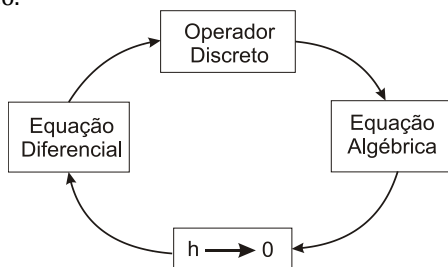


Figura 44. Representação gráfica da discretização e da consistência de um método numérico.



O EbFVM é um método de volumes finitos, assim, um volume de controle deve ser usado para a integração local das equações diferenciais. O volume de controle é a região, uma entidade geométrica discreta, onde os balanços são efetuados. Portanto, dado um domínio de cálculo, este deve ser geometricamente subdividido em elementos discretos menores, sub-regiões. A estrutura resultante denomina-se *malha*. Os pontos de intersecção da malha são denominados *nós*.

O volume de controle pode ser definido de duas maneiras: *cell vertex* ou *cell center*. A formulação *cell center* é aquela onde o elemento é o próprio volume de controle com o seu centro no centro da célula, enquanto que na formulação *cell vertex*, o centro do volume de controle é posicionado em torno dos nós, os vértices das células. O método EbFVM utilizado tem uma formulação *cell vertex*.

A Figura 45 ilustra a discretização de um domínio de cálculo bidimensional. A malha apresentada pode também ser usada pelo método de diferenças finitas ou elementos finitos, sem a necessidade de se definir um volume de controle.

Pode-se pensar que a malha é um ente à parte do método numérico que se pretende empregar, mas isso não é um conceito que se possa generalizar. Muitos problemas ou modelos matemáticos requerem certas características para uma boa representação da física do fenômeno, e muitas vezes manter a estabilidade da solução numérica. Sendo a estabilidade o 2º critério necessário a convergência. Logo, a geração de malha está implicitamente relacionada a um bom resultado de uma simulação. Malhas mal projetadas dificultam ou mesmo impossibilitam a boa aplicação de um método numérico.

4.2 Discretização do Domínio de Cálculo

No método de volumes finitos as equações de conservação de massa, quantidade de movimento, etc., são integradas sobre cada volume de controle, VC, e o somatório dos fluxos da propriedade em questão pelas fronteiras do volume de controle devem ser, mesmo de maneira discreta, conservados. A

Figura 46 ilustra o balanço de uma propriedade qualquer em um volume de controle bidimensional quadrangular regular.

Figura 45. Exemplo bidimensional da discretização de um domínio e os esquemas de montagem dos volumes de controle.

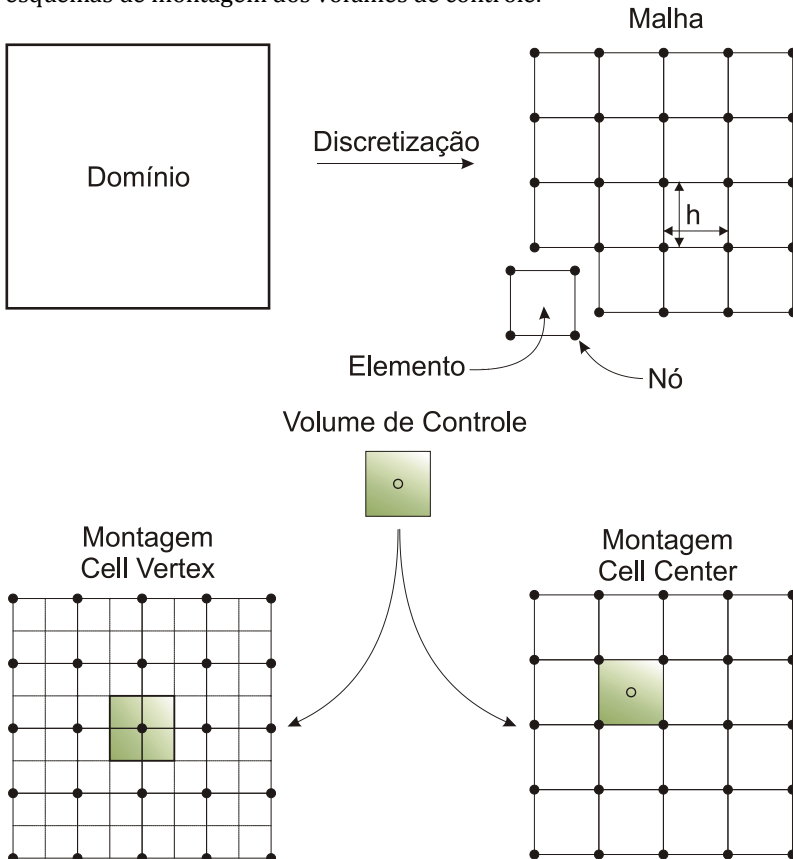
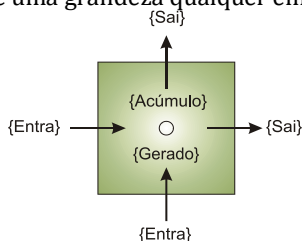


Figura 46. Balanço de uma grandeza qualquer em um volume de controle.

$$\{Entra\} + \{Sai\} + \{Acúmulo\} + \{Gerado\} = 0$$

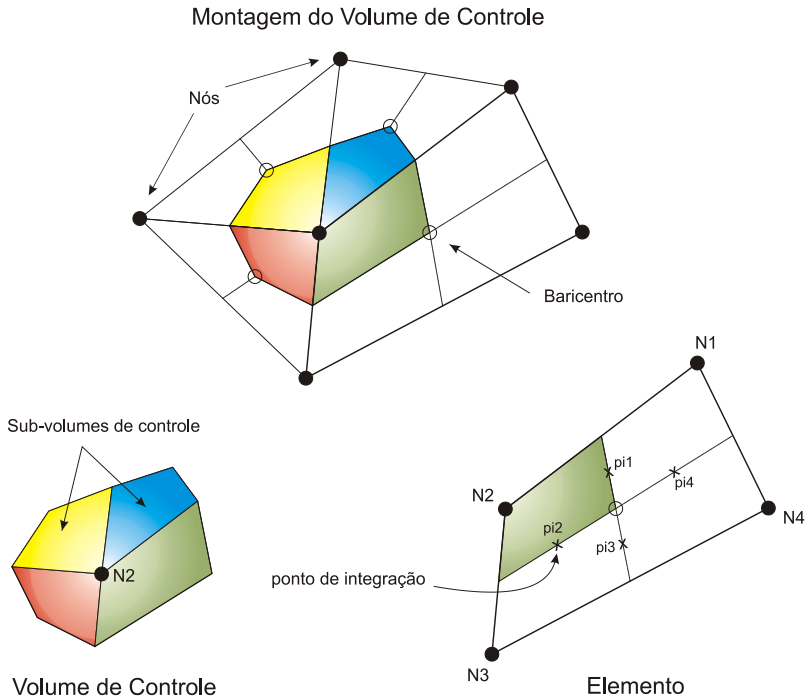
No método EbFVM a formulação é cell vertex, e o volume de controle é formado pelo somatório dos subvolumes de controle adjacentes que envolvem o nó. A Figura 47 esclarece: a malha formada por quatro elementos - três triangulares e um quadrangular -, e seis nós. A partir do baricentro de cada elemento (círculo aberto) divide-se o elemento em sub-regiões: os subvolumes de controle iguais em número ao número de nós que definem o elemento, portanto, elementos triangulares possuem três subvolumes; quadrangulares, quatro; e assim por diante. Uma vez que um nó pode definir mais de um elemento, como é o caso do nó central (N2) na Figura 47, pode-se ter mais de um subvolume associado a um mesmo nó, e a união destes subvolumes é que determina o volume de controle no entorno deste nó.

O fluxo total que atravessa a fronteira do VC precisa ser avaliado integrando-se o fluxo das propriedades em cada face sobre os chamados *pontos de integração* - π_i . Estes pontos localizam-se na fronteira entre dois subvolumes de controle adjacentes dentro de um mesmo elemento. Nestas regiões os fluxos entre dois volumes de controle diferentes são avaliados. Esta é a diferença básica entre os métodos de volumes finitos, apenas as informações no elemento são necessárias para o cálculo dos fluxos. A montagem do volume de controle sim é que vai envolver elementos vizinhos.

O estêncil do VC neste caso é maior, recorrendo novamente à Figura 45, para o caso 2D, na montagem cell center o fluxo é calculado em quatro faces com quatro pontos de integração, como mostrado na

Figura 46, enquanto a cell vertex faz isso em oito faces com oito pontos de integração o que gera um melhor acoplamento na matriz dos coeficientes. Além disso, a área das faces é menor, o que a torna a sua integração mais representativa do valor médio do fluxo destas faces, portanto, mais precisos.

Figura 47. Acima: exemplo de montagem do volume de controle a partir de elementos triangulares e quadrangular; Abaixo e à esquerda: detalhe do volume de controle resultante; Abaixo e à direita: detalhe de um elemento quadrangular mostrando seus pontos de integração, nós e subvolumes de controle.



Na montagem cell vertex, o número de volumes de controle será igual ao número de nós e não igual ao número de elementos, portanto, para a malha da Figura 45, a montagem cell vertex gera n^2 volumes de controle, enquanto a cell center $(n-1)^2$ volumes de controle.

4.3 Discretização das Equações

A discretização está associada à integração das equações diferenciais em sua *forma conservativa* sobre o volume de controle. Com base no *Teorema de Gauss*, as integrais de volume podem ser representadas como integrais de superfície; no caso, a superfície do volume de controle. Assim, considerando a conservação da massa, quantidade de movimento e um escalar passivo qualquer tem-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j) = 0, \quad (260)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j U_i) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right] + S_{U_i}, \quad (261)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j \phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\Gamma_\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) \right] + S_\phi. \quad (262)$$

Integrando sobre o subvolume de controle e considerando que a região de integração é fixa no tempo (sem malha móvel), pelos teoremas de Gauss e Leibniz tem-se,

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \int_S \rho U_j dn_j = 0, \quad (263)$$

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho U_i dV + \int_S \rho U_i U_j dn_j = \quad (264)$$

$$- \int_S P dn_j + \int_S \mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) dn_j + \int_V S_{U_i} dV,$$

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi dV + \int_S \rho U_j \phi dn_j = \int_S \Gamma_{eff} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) dn_j + \int_V S_\phi dV. \quad (265)$$

onde V representa o volume de integração; S a superfície de integração e dn_j a componente diferencial de superfície orientada de acordo com o vetor normal unitário à superfície apontando para fora. Estas integrais representam o cômputo dos fluxos que atravessam cada uma das superfícies $\hat{n}dS$ dos subvolumes de controle.

Os termos volumétricos - acúmulo e fontes - são aproximados de forma discreta pelos seus valores ou funções em cada subvolume de controle, enquanto os fluxos são avaliados em

cada elemento diferencial de superfície sobre o ponto de integração, pi , sendo este valor representativo *da média* dos fluxos que atravessam esta superfície. Assim, de forma discreta, as integrais representam o somatório de todas estas contribuições,

$$V \left(\frac{\rho - \rho^o}{\Delta t} \right) + \sum_{pi} (\rho U_j \Delta n_j)_{pi} = 0, \quad (266)$$

$$V \left(\frac{\rho U_i - \rho^o U_i^o}{\Delta t} \right) + \sum_{pi} (\dot{m}_{pi} U_i)_{pi} = - \sum_{pi} (P \Delta n_i)_{pi} + \dots \quad (267)$$

$$\dots + \sum_{pi} \left(\mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \Delta n_j \right)_{pi} + \overline{S_{U_i}} V,$$

$$V \left(\frac{\rho \phi - \rho^o \phi^o}{\Delta t} \right) + \sum_{pi} (\dot{m}_{pi} \phi_i)_{pi} = \sum_{pi} \left(\Gamma_{eff} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \Delta n_j \right)_{pi} + \overline{S_\phi} V, \quad (268)$$

sendo $\dot{m}_{pi} = (\rho U_j \Delta n_j)_{pi}$ a vazão mássica através do elemento de superfície discreto orientado Δn_j no ponto de integração. O superíndice o representa o nível de tempo anterior.

A discretização temporal mostrada emprega uma aproximação de Euler regressiva de 1ª ordem, E apesar do tratamento implícito e de sua robustez, é uma aproximação de primeira ordem e está sujeita a difusão numérica. Uma aproximação de segunda ordem contorna este inconveniente. Assim, de forma geral tem-se

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi dV \approx V \frac{(\rho \phi)^{n+\frac{1}{2}} - (\rho \phi)^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t}, \quad (269)$$

onde $n + \frac{1}{2}$, e $n - \frac{1}{2}$ representam o fim e o começo do passo de tempo, respectivamente. Para uma aproximação de Euler regressiva de segunda ordem,

$$(\rho \phi)^{n+\frac{1}{2}} = (\rho \phi)^o + \frac{1}{2} \left[((\rho \phi)^o - (\rho \phi)^{oo}) \right], \quad (270)$$

$$(\rho \phi)^{n-\frac{1}{2}} = (\rho \phi) + \frac{1}{2} \left[((\rho \phi) - (\rho \phi)^o) \right]. \quad (271)$$

Desenvolvendo,

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi dV \approx \frac{V}{\Delta t} \left[\frac{3}{2} (\rho \phi) - 2 (\rho \phi)^o + \frac{1}{2} (\rho \phi)^{oo} \right]. \quad (272)$$

Embora esta formulação seja também robusta, conservativa e com aproximação de 2ª ordem, está sujeita a oscilações numéricas, o que pode produzir resultados não físicos. Pode-se ganhar em precisão, mas pode-se perder em estabilidade. Tudo depende do problema, e pode-se introduzir a difusão numérica de forma proposital de maneira e estabilizar um problema com escalas de tempo muito curtas e variações temporais bruscas nos campos. É uma questão de compromisso entre precisão e estabilidade. Para o tratamento de quantidades como frações volumétricas as formulações de 2ª ordem são preferíveis pela precisão, e o uso de passos de tempo e malhas com espaçamento adequados contribuem para a estabilidade (COURANT, FRIEDRICHS e LEWY, 1967).

Vários campos dependem da boa solução do campo de fração volumétrica e no caso do modelo proposto, esta dependência é aumentada sobremaneira, sendo aproximação de 2ª ordem a aproximação preferida neste trabalho.

4.4 Funções de Forma

A partir do valores nodais do elemento, as funções de forma ou funções peso são funções que determinam como uma propriedade qualquer varia dentro do mesmo, sendo contínuas e diferenciáveis e *são escritas em função do sistema de referência local do elemento*. As funções podem ser de vários tipos e a literatura de elementos finitos é vasta sobre isto (ver, por exemplo, HUTTON, 2004; LI, 2006).

Uma propriedade qualquer pode ser escrita como

$$\phi = \sum_{i=1}^{N_{\text{nó}}} N_i \phi_i, \quad (273)$$

onde N_i é a função de forma para o nó de índice i e ϕ_i é o valor que ϕ assume no nó i .

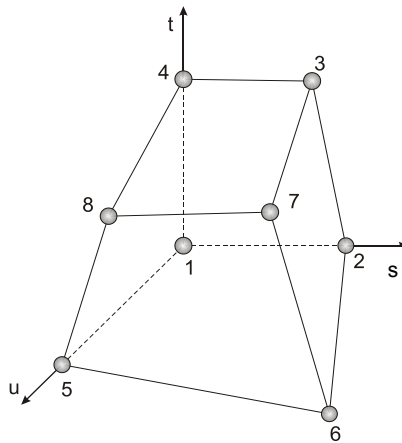
As funções de forma são como soluções analíticas locais postuladas do campo de uma propriedade dentro do elemento, interpolando os valores nodais que o definem e respeitando a seguinte propriedade:

$$\sum_{i=1}^{N_{\text{nó}}} N_i = 1 \quad \text{no nó } j \quad N_i = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j, \\ 0 & \text{se } i \neq j. \end{cases} \quad (274)$$

As funções de forma implementadas no simulador ANSYS CFX são *funções trilineares*. Os elementos podem ser de várias formas geométricas, triangulares, quadrilaterais, hexaédricos¹⁷, tetraédricos, piramidais, prismáticos, etc; mas neste trabalho apenas elementos hexaédricos, como ilustra a Figura 48, são empregados. Eles não precisam ser necessariamente regulares.

Um sistema de referência local é usado para avaliação das funções de forma e a numeração dos nós, em relação a este sistema, quando definida, é aplicada igualmente a todos os elementos. No caso ela é anti-horária a partir da origem aplicada primeiramente ao plano definido pelos vetores de base s e t , depois ao plano à frente ainda no sentido anti-horário.

Figura 48. Representação do elemento hexaédrico usado neste trabalho, bem como a enumeração dos seus nós dentro do sistema de referência local onde s , t e u variam de 0 até 1.



Elemento Hexaédrico

Para um elemento hexaédrico as funções de forma são definidas como,

¹⁷ O elemento hexaédrico é um cubo, regular ou não.

$$\begin{aligned}
N_1(s, t, u) &= (1-s)(1-t)(1-u) \\
N_2(s, t, u) &= s(1-t)(1-u) \\
N_3(s, t, u) &= st(1-u) \\
N_4(s, t, u) &= (1-s)t(1-u) \\
N_5(s, t, u) &= (1-s)(1-t)u \\
N_6(s, t, u) &= s(1-t)u \\
N_7(s, t, u) &= stu \\
N_8(s, t, u) &= (1-s)tu
\end{aligned} \tag{275}$$

Desta maneira, qualquer propriedade, em qualquer coordenada *dentro do elemento*, inclusive as coordenadas (x,y,z) no sistema de referência global dos nós, podem ser escritas como uma combinação linear dos valores que as mesmas possuem nos nós e ponderadas pela função de forma de cada um, como diz a Equação (273). Assim, as coordenadas dos pontos de integração podem ser obtidas a partir das coordenadas dos nós no sistema de referência global avaliando as funções de forma em *relação ao sistema de referência local do elemento*, e com isso, calcular-se propriedades geométricas como comprimentos, áreas e volumes:

$$\phi_{pi} = \sum_n N_n(s_{pi}, t_{pi}, u_{pi}) \phi_n. \tag{276}$$

No cálculo de fluxos e gradientes, usam-se as derivadas das funções de forma empregando a regra da cadeia

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{ip} = \sum_n \left. \frac{\partial N_n}{\partial x} \right|_{ip} \phi_n, \tag{277}$$

onde,

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial N}{\partial x} \\ \frac{\partial N}{\partial y} \\ \frac{\partial N}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial s} & \frac{\partial y}{\partial s} & \frac{\partial z}{\partial s} \\ \frac{\partial x}{\partial t} & \frac{\partial y}{\partial t} & \frac{\partial z}{\partial t} \\ \frac{\partial x}{\partial u} & \frac{\partial y}{\partial u} & \frac{\partial z}{\partial u} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial N}{\partial s} \\ \frac{\partial N}{\partial t} \\ \frac{\partial N}{\partial u} \end{bmatrix}. \tag{278}$$

A matriz é a *Matriz Jacobiana* da transformação do sistema de referência físico para o local do elemento, e que mapeia o sistema global de coordenadas no sistema de coordenadas local.

4.5 Campo de Pressão

O termo de pressão passa pela avaliação do termo $(P\Delta n_{pi})_{pi}$. A pressão no ponto de integração é então calculada com base nos valores nodais usando a Equação (276):

$$P_{pi} = \sum_n N_n (s_{pi}, t_{pi}, u_{pi}) P_n. \quad (279)$$

A solução do campo de pressão e de seu gradiente é feita com base no esquema de acoplamento pressão-velocidade descrito mais adiante.

4.6 Termo Advectivo

O termo advectivo é um dos mais delicados devido à natureza do acoplamento não linear entre os campos de velocidade e as demais propriedades. Ele é avaliado por uma formulação *upwind* que tem a forma

$$\phi_p = \phi_{up} + \beta \nabla \phi \cdot \Delta \vec{r}, \quad (280)$$

sendo ϕ_{up} o valor de ϕ no nó a montante (*upwind*); β o peso ou fator de mistura (*blend factor*); $\nabla \phi$ o gradiente de ϕ e $\Delta \vec{r}$ o vetor posição entre o nó a montante e o ponto de integração. A segunda parcela da Equação (280) atua como uma contradifusão gerada pela aproximação de 1ª ordem (ver MALISKA, 2004 p. 88).

Quando $\beta = 0$ tem-se uma formulação *upwind* de 1ª ordem robusta, mas susceptível a difusão numérica; enquanto $\beta = 1$ tem-se um esquema de 2ª ordem - mais acurado e sem difusão numérica -, mas susceptível a oscilações diante de gradientes espaciais acentuados. A solução emprega ambas as formulações de acordo com as condições locais. No esquema de alta resolução (*High Resolution*) o valor de β é automaticamente escolhido de acordo com as condições locais. Os detalhes de como se empregar esta formulação em malhas não estruturadas é dada por Barth e Jeperson (1989).

4.7 Acoplamento Massa - Pressão - Velocidade

O método de acoplamento pressão-velocidade utilizado é o método Rhie-Chow com arranjo colocalizado (viz. MENDES, 2007). Os detalhes da discretização não são apresentados devido a sua extensão e também por causa da informação difusa do manual do ANSYS CFX, o que deixa apenas espaço para especulação de como o método está implementado. A descrição a seguir é dada por Burns (2002), um dos responsáveis pela implementação dos modelos disponíveis no ANSYS CFX. Assim, segundo Burns (2002),

$$U_{i,pi} = \bar{U}_{i,pi} + f_{pi} \left[\left(\frac{\partial p}{\partial x_i} - S_i \right)_{pi} - \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} - \bar{S}_i \right)_{pi} \right] + \dots \quad (281)$$

$$\dots - c_{pi} f_{pi} \left(U_{i,pi}^o - \bar{U}_{i,pi}^o \right)$$

onde

$$f_{ip} = \frac{d_{ip}}{1 - c_{ip} d_{ip}}, \quad d_{ip} = -\frac{V}{A}, \quad c_{ip} = \frac{\rho}{\Delta t}, \quad (282)$$

sendo A a aproximação dos coeficientes e sem o termo transiente; e V o volume do volume de controle; e S_i a força de corpo como o empuxo. As barras superiores indicam valores médios avaliados no ponto de integração. Esta equação acopla o campo de velocidade ao de pressão com uma aproximação de 3ª ordem. Os termos de força de corpo dentro do segundo termo da Equação (281) existem para que não haja oscilações em regiões de descontinuidades da força de corpo como a superfície livre, por exemplo.

A forma discreta da equação de conservação da massa para cada fase é dada por;

$$\frac{\rho_\alpha V}{\Delta t} (r_{\alpha,i}^{n+1} - r_{\alpha,i}^n) + \dots \quad (283)$$

$$\dots + \sum_{i=ip} (\rho_\alpha r_{\alpha,ip}^{n+1} U_{\alpha,ip}^n + \rho_\alpha r_{\alpha,ip}^n U_{\alpha,ip}^{n+1} - \rho_\alpha r_{\alpha,ip}^n U_{\alpha,ip}^n) \cdot \mathbf{A}_{ip} = 0,$$

onde \mathbf{A}_{ip} representa a matriz de coeficientes do termo advectivo avaliados nos pontos de integração. Substituindo a Equação (281) e desprezando a segunda parcela,

$$\begin{aligned} & \frac{\rho_\alpha V}{\Delta t} (r_{\alpha,i}^{n+1} - r_{\alpha,i}^n) + \sum_{i=ip} \left[\rho_\alpha (r_{\alpha,i}^{n+1} - r_{\alpha,i}^n) U_{\alpha,ip}^n \right] \cdot \mathbf{A}_{ip} + \dots \\ & \dots + \sum_{i=ip} \left(\rho_\alpha r_{\alpha,ip}^n \left[\overline{U}_{\alpha,i}^{n+1} + f_{pi} (\nabla P - \overline{\nabla P})^{n+1} \right] \right) \cdot \mathbf{A}_{ip} = 0. \end{aligned} \quad (284)$$

Nas Equações (283) e (284) empregou-se uma linearização de Newton-Raphson (ver GALPIN e RAITHBY, 1986; e MALISKA, 2004 p. 151). Este artifício, mais a Equação (281) permitem estabelecer uma equação para evolução das frações acoplada ao campo de velocidades e pressão.

Para a evolução da pressão, utiliza-se a equação de conservação de volume que é dada por

$$\sum_{\alpha} r_{\alpha,i}^{n+1} = 1. \quad (285)$$

Substituindo-se a Equação (284) em (285), tem-se

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha} \sum_{i=ip} \left[\rho_\alpha (r_{\alpha,i}^{n+1} - r_{\alpha,i}^n) U_{\alpha,ip}^n \right] \cdot \mathbf{A}_{ip} + \dots \\ & \dots + \sum_{\alpha} \sum_{i=ip} \left(\rho_\alpha r_{\alpha,ip}^n \left[\overline{U}_{\alpha,i}^{n+1} + f_{pi} (\nabla P - \overline{\nabla P})^{n+1} \right] \right) \cdot \mathbf{A}_{ip} = 0, \end{aligned} \quad (286)$$

que é uma aproximação discreta de uma Equação de Poisson para pressão acoplada às frações das fases α e à velocidade. Estas equações mais a forma discreta das *equações físicas* de Navier-Stokes formam um sistema fechado e acoplado de equações algébricas:

$$\begin{aligned} & \frac{r_{\alpha}^n \rho_{\alpha} V_i}{\Delta t} \left[(U_{\alpha}^k)_i^{n+1} - (U_{\alpha}^k)_i^n \right] + (\mathbf{A}_{\alpha}^k)_{ij} (U_{\alpha j}^k)^{n+1} = \\ & - r_{\alpha}^n \sum_{i=pi} (P_{pi} A_{pi}^k)^{n+1} + V_i \sum_{\beta} c_{\alpha\beta} (U_{\beta}^k - U_{\alpha}^k)_i^{n+1}, \end{aligned} \quad (287)$$

onde \mathbf{A}_{α}^k representa a matriz de coeficientes de advecção-difusão para componente de velocidade U_{α}^k , onde k é a iteração na atualização dos coeficientes dentro do passo de tempo n .

Para a solução segregada, o sistema de equações é dividido em dois subsistemas, resolvendo primeiro de maneira acoplada as equações de velocidade e o campo de pressão de maneira análoga a um sistema monofásico, e depois resolvendo-se as equações de conservação da massa para cada fase. Neste caso, as variáveis

implícitas das equações anteriores ficam sempre disponíveis ao próximo ciclo iterativo de cada subsistema.

A solução acoplada tem por vantagem a precisão obtida na solução dos campos, pois todos são obtidos no mesmo passo iterativo, mas à custa de um maior esforço computacional. Enquanto a solução segregada requer um esforço computacional menor, mas a natureza do acoplamento físico entre os campos de fração volumétrica, velocidade e pressão, cobra seu preço em estabilidade e precisão. A decisão por uma prática ou outra, é de caráter numérico.

O *solver* dá prioridade de solução ao subsistema principal, as equações de Navier-Stokes e as de conservação da massa para a solução do acoplamento P-V. Os demais subsistemas, fração volumétrica, turbulência, energia, e espécies químicas ficam em segundo plano, e a convergência é monitorada com base nos resíduos do subsistema principal. Critérios mais rígidos de convergência devem ser empregados na solução segregada do campo de fração volumétrica, pois além de aumentar a precisão dos campos de pressão e velocidade, melhora a solução dos campos de fração volumétrica.

Em ambos os casos as fases estão sempre acopladas pelos termos de transferência interfacial, como força de arrasto, o último termo da Equação (287). Quando usado o modelo tensorial, este acoplamento será praticamente nulo e poderá acarretar problemas numéricos.

4.8 Solução do Sistema Linear

Feita a discretização do sistema de equações, ele se reduz a um sistema linear de equações algébricas da forma

$$\sum_{nb_i} A_i^{nb} \phi_i^{nb} = B_i, \quad (288)$$

onde nb indica os nós vizinhos ao nó i . Escrevendo de forma matricial tem-se,

$$[A]\{\phi\} = \{B\}. \quad (289)$$

O sistema linear acima é então resolvido de forma iterativa,

$$\phi^{k+1} = \phi^k + \phi', \quad (290)$$

sendo ϕ' a solução aproximada da iteração k ,

$$A\phi' = r^k. \quad (291)$$

ϕ' não é a solução exata do sistema, logo não reproduz a identidade da Equação (288) de onde se obtém o resíduo r^k :

$$r^k = B - A\phi^k, \quad (292)$$

onde ϕ^k é a solução da iteração anterior.

O método de solução é uma decomposição LU incompleta - ILU. Na decomposição LU padrão, decompõe-se a matriz dos coeficientes em duas matrizes diagonais, uma inferior (L) e outra superior (U), sendo escrita como $[A]\{\phi\} = [L][U]\{\phi\} = \{B\}$. Após a decomposição, resolve-se o subsistema $[U]\{\phi\} = \{D\}$, e em seguida o subsistema $[L]\{D\} = \{B\}$. Este, entretanto, é um método direto e computacionalmente custoso. A ILU tira proveito da esparsidade da matriz e manipula somente os termos não nulos. Assim, pode-se escrever

$$[L][U] = [A] + [A']. \quad (293)$$

Como a decomposição ILU não é a exata, ela gera duas matrizes. A matriz $[A']$ deve ser tal que permita uma decomposição fácil:

$$[A + A']\{\phi\}^{k+1} = [A + A']\{\phi\}^k - \{[A]\{\phi\}^k - \{B\}\}, \quad (294)$$

O segundo termo do lado direito da igualdade da Equação (294) é igual a zero, logo

$$[A]\{\phi\}^k - \{B\} = \{R\}^k, \quad (295)$$

o que diz que $\{\phi\}^{k+1} = \{\phi\}^k$ quando o sistema converge, e portanto, a matriz $[A']$ não afeta o resultado da solução, mas pode com certeza afetar a sua velocidade de cálculo, ou mesmo a sua convergência. A diferença entre as soluções em cada iteração é expressa por

$$\{\delta\}^{k+1} = \{\phi\}^{k+1} - \{\phi\}^k. \quad (296)$$

Substituindo as Equações (295) e (296) na Equação (294) tem-se

$$[A + A']\{\delta\}^{k+1} = -\{R\}^k. \quad (297)$$

Utilizando agora a Equação (293), obtém-se

$$[L][U]\{\delta\}^{k+1} = -\{R\}^k. \quad (298)$$

Agira o procedimento é similar à decomposição completa resolvendo $[L]\{V\} = -\{R\}^k$ e em seguida $[U]\{\delta\}^{k+1} = \{V\}$, resultando em $\{\delta\}^{k+1}$, que por meio da Equação (296) permite encontrar o valor de $\{\phi\}^{k+1}$ no próximo passo iterativo. O processo segue até que o resíduo da Equação (295) esteja abaixo da tolerância.

Todavia, minimizar o resíduo abaixo da tolerância nem sempre é fácil ou mesmo ágil. Muitas vezes a solução fica estagnada em certo patamar ou oscilando em volta de um valor médio, e isto acontece por vários motivos, por exemplo:

- mal condicionamento da matriz,
- problemas mal postos,
- esparsidade,
- termos fontes,
- malha inadequada,
- física inconsistente.

Entretanto, um dos principais e que relaciona muitos dos problemas citados diz respeito à *anisotropia dos coeficientes*.

O ideal é que os coeficientes tenham aproximadamente a mesma magnitude, pois uma matriz com coeficientes muito anisotrópicos pode apresentar outra série de características indesejáveis para a solução do sistema linear.

O que se observa é que, durante a solução, os erros são minimizados rapidamente na direção dos maiores coeficientes e o oposto se dá na direção dos de menor magnitude. O espaçamento da malha minimiza rapidamente os erros com o comprimento de onda da mesma ordem. E feito isso, a solução não evolui significativamente e a convergência é lenta ou mesmo nem obtida. Caso malhas diferentes fossem usadas sucessivamente, toda a banda de frequências de erros seria reduzida acelerando a convergência.

Este é o conceito que embasa os métodos denominados *multigrid*, todavia, isto não é feito com refino adaptativo, isto é feito apenas matematicamente. A ideia básica é nivelar a magnitude dos coeficientes aglomerando coeficientes de forma sucessiva em um ou mais ciclos de aglomeração e refinamento, e ao final, a informação deve retornar à malha original. O critério de escolha pode ser

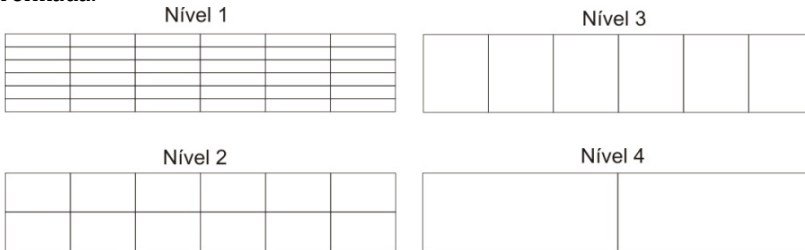
baseado na malha (Multigrid Geométrico), ou nos coeficientes (Multigrid Algébrico). Neste caso o efeito algébrico é considerado, pois este implicitamente carrega o efeito geométrico. O ANSYS CFX utiliza o método multigrid algébrico (AMG) de correções aditivas (ACM) (MALISKA, 2004; KELLER, 2007).

Considerando a equação discretizada, ou o sistema linear

$$A_i \phi_i - \sum A_{nb} \phi_{nb} = b_i, \quad (299)$$

onde i é o índice na variável na malha fina, e A_{nb} são todos os coeficientes associados aos seus vizinhos nb . Itera-se nesta malha o suficiente para eliminar os erros de alta frequência, e em sucessivos ciclos, eliminam-se os erros das frequências subsequentes. A Figura 49 ilustra um exemplo de aglomerações sucessivas. Assinala-se que esta fusão de volumes de controle é algébrica e não geométrica, *não há refinamento ou engrossamento real da malha original*.

Figura 49. Exemplo da aglomeração aplicada a uma malha inicialmente refinada.



No último nível (4º nível na Figura 49, por exemplo) a solução da malha deve ser repassada à malha do nível anterior (nível 3) e assim sucessivamente. A correção da variável no nível i é dada por

$$\tilde{\phi}_i = \phi_i + \phi_{i,i}^*, \quad (300)$$

onde ϕ_i é a solução na malha fina i , e $\phi_{i,i}^*$ a correção aplicada na malha grossa I . Respeitando o princípio da conservação, o resíduo da correção deve ser nulo, assim,

$$\sum_{i \text{ de } I} \tilde{r}_i = 0, \quad (301)$$

$$\tilde{r}_i = b_i - A_i \tilde{\phi}_i + \sum_{nb \text{ de } i} A_{nb} \tilde{\phi}_{nb} = 0, \quad (302)$$

Substituindo a Equação (300),

$$\tilde{r}_i = b_i - A_i(\phi_i + \phi_{i,i}^*) + \sum_{nb \text{ de } i} A_{nb}(\phi_{nb} + \phi_{NB,nb}^*) \tilde{\phi}_i = \phi_i + \phi_{i,i}^* = 0, \quad (303)$$

$$\tilde{r}_i = b_i - A_i \phi_i + \underbrace{\sum_{nb \text{ de } i} A_{nb} \phi_{nb}}_{r_i} - A_i \phi_{i,i}^* + \sum_{nb \text{ de } i} A_{nb} \phi_{NB,nb}^* = 0, \quad (304)$$

e isolando r_i ,

$$\sum_{i \text{ de } I} r_i = \sum_{nb \text{ de } i} (A_i \phi_{i,i}^* - A_{nb} \phi_{NB,nb}^*) = 0, \quad (305)$$

ou seja,

$$A_i \phi_{i,i}^* = \sum_{nb \text{ de } i} A_{nb} \phi_{NB,nb}^* + b_i, \quad (306)$$

onde $b_i = \sum_{i \text{ de } I} r_i$.

Este sistema então é resolvido para determinar o valor de ϕ^* , a correção no bloco I , que corrige $\tilde{\phi}_i$. E segue-se o processo de correção em cada nível retornando ao nível precedente, recebendo assim o nome de correções aditivas. Isso, claro requer uma considerável alocação e uma gerenciamento inteligente de memória, pois a informação deve ser repassada intacta para o 1º nível.

4.9 Condições de Contorno e Iniciais

Alguns detalhes da implementação do ANSYS CFX tem a necessidade de serem melhor explicados. O primeiro é em relação à pressão. Há várias variáveis relacionadas à pressão e cada uma tem um significado distinto. A variável p (denominada *Pressure*) das equações de Navier-Stokes pode sem problemas assumir valores negativos. Isto soa estranho, pois o conceito de pressões negativas não é fisicamente possível uma vez que ela representa a densidade de força exercida sobre uma superfície, e sua magnitude é no mínimo nula. Esta variável pode ser interpretada como uma pressão dinâmica associada ao campo de velocidade e não a pressão termodinâmica.

Todavia, para as equações do movimento isto não importa uma vez que o que lhes interessa é o *gradiente de pressão* e não o seu valor absoluto, ou seja, como varia a pressão no espaço.

Para pressão absoluta (*Absolute Pressure*) é a pressão termodinâmica a que serve de parâmetros para Equações de Estado,

e para isso, uma pressão de referência deve ser especificada. Esta pressão é a pressão do domínio com os fluidos estagnados. *Considera-se aqui a pressão de referência igual a pressão atmosférica, ou seja, 1 atm.*

A pressão absoluta é calculada como a soma da pressão dinâmica, obtida pela solução da equação Navier-Stokes, e a pressão de referência,

$$p_{abs} = p + p_{ref} \quad (307)$$

Contabilizando ainda o empuxo,

$$p_{abs} = p + p_{ref} + \rho \mathbf{g} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ref}), \quad (308)$$

onde $(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ref})$ implica na diferença de altura local em relação ao sistema de referência e \mathbf{g} o vetor aceleração da gravidade.

4.9.1 Condição de Entrada com Velocidade Prescrita (Inlet)

Tipo de condição que permite apenas o influxo de massa e onde as componentes do vetor velocidade são prescritas:

$$\mathbf{u}_{inlet} = u_{spec} \hat{\mathbf{i}} + v_{spec} \hat{\mathbf{j}} + w_{spec} \hat{\mathbf{k}}. \quad (309)$$

As velocidades podem ser tanto das fases ou para toda a corrente. Este detalhe deve ser levando em conta quando são definidas em termos de velocidade superficial.

As frações volumétricas também têm seus valores prescritos na entrada com a restrição de seu somatório ser igual à unidade:

$$r_{\alpha} = r_{\alpha, prescrito} \quad (310)$$

$$\sum_{\alpha=1}^{N_f} r_{\alpha} = 1.$$

4.9.2 Condição de Abertura (Opening)

Condição de contorno aplicada às regiões onde podem ocorrer tanto a entrada como a saída de fluido do domínio dependendo da diferença de pressão na fronteira. Esta diferença de pressão é função da solução do sistema de equações, sendo uma condição dinâmica que apresenta alterações da direção do fluxo.

É uma condição de pressão prescrita onde a direção e o módulo do vetor velocidade são partes da solução. Apenas a pressão relativa na fronteira é especificada

$$P_{open} = P_{spec} , \quad (311)$$

de maneira que a magnitude da velocidade normal à fronteira, u_n , é calculada com base na variação de pressão,

$$\Delta p_{loss} = \frac{1}{2} f \rho u_n^2 , \quad (312)$$

sendo que f é o coeficiente de perda de carga, e caso não seja especificado, ele é feito igual a unidade; Δp_{loss} é a variação de pressão adjacente ao contorno em relação à pressão especificada na saída. Há outras possibilidades, mas esta é a mais estável, pois a direção do vetor velocidade não é imposta e sim parte da solução.

As frações volumétricas devem ter condições de contorno, pois esta condição permite o influxo de massa, assim, para estas variáveis as condições de contorno são do mesmo tipo que às de entrada: valor prescrito para as frações.

4.9.3 Condição de Parede (Wall)

As frações volumétricas não necessitam de condições de parede especificada, como uma condição de Dirichlet. Ou o seu gradiente normal à parede é nulo, ou, considerando uma possível interação fluido-parede, o ângulo de contato θ deve ser especificado, assim,

$$\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{n}}_w \cos \theta + \hat{\mathbf{t}}_w \sin \theta , \quad (313)$$

sem, neste caso, empregar o gradiente de fração volumétrica para o cálculo do vetor normal. Todavia, os valores das frações não são prescritos.

O manual do código não é explícito, a condição de contorno de gradiente de frações normal nulo junto à parede é imposto, ou seja, parede impermeável. Os valores que as frações volumétricas assumem junto às paredes são parte da solução. Excetuando-se condições de entrada e abertura, os valores das frações junto às paredes são sempre conservativos, ou seja, obtidos através de um balanço de fluxos na fronteira do volume de controle adjacente à parede.

A mesma condição de gradiente nulo é usada para a pressão, enquanto para as componentes de velocidade é a de velocidade prescrita, e considerando o não escorregamento, *no-slip*, a velocidade nas paredes é igual a zero. Caso a condição seja a de escorregamento apenas a componente normal de velocidade é nula.

4.9.4 Condição de Desgaseificação (Degassing)

Esta condição de contorno é uma condição específica para escoamentos onde pelo menos uma das fases está dispersa, como bolhas de ar em água, por exemplo. Para a fase dispersa é uma condição de saída com pressão prescrita como a Equação (311). As bolhas gotas ou partículas que chegam nesta região podem sair do domínio de cálculo. Já para a fase contínua a condição atua como uma condição de parede com escorregamento (*free-slip*).

O seu uso se justifica quando em uma superfície livre não se deseja capturar o comportamento oscilatório da mesma ocasionado pela eclosão da fase dispersa ascendente. Outras situações são passíveis do seu emprego, mas esta é uma das principais.

A condição de Desgaseificação só pode ser empregada no modelo heterogêneo (ou de dois fluidos), pois o modelo homogêneo possui apenas um campo de velocidade compartilhado entre as fases. Mas pode-se contornar isto com o emprego de um sumidouro de massa em uma parede com condição de escorregamento permitindo imitar o mesmo comportamento.

4.9.5 Condição de Simetria

A condição de simetria implica em gradientes normais nulos e componentes de velocidade nula,

$$\begin{aligned}\frac{\partial \phi}{\partial n} &= 0, \\ u_n &= 0.\end{aligned}\tag{314}$$

4.9.6 Condições Iniciais

Para o campo de velocidade tem-se o fluido em repouso, o que implica em

$$\mathbf{u}^o = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (315)$$

onde \mathbf{x} é o ponto pertencente ao domínio Ω . O superíndice o significa no tempo $t = 0$.

As condições iniciais para as frações volumétricas requerem cuidados devido a mudança brusca nas propriedades físicas, o que geralmente leva a problemas de estabilidade numérica nas primeiras iterações resultando quase sempre em divergência do sistema linear ou a um campo mal resolvido.

A transição suave das propriedades através da interface é um artifício que dirime este inconveniente. Para que isto ocorra, uma malha adequada deve ser gerada, e de posse desta, uma função de transição deve ser empregada. A função de transição escolhida para isto é a tangente hiperbólica, por exemplo

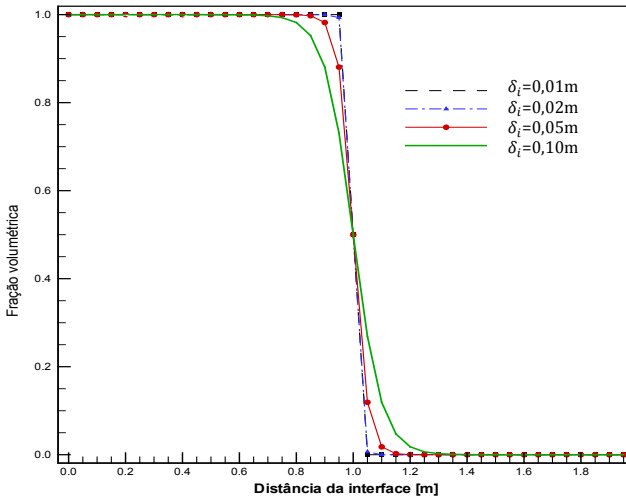
$$r_{liq}^o = \left(0,5 \cdot \tanh \left(\frac{y^o - y}{\delta_i} \right) + 0,5 \right), \quad (316)$$

$$r_{gas}^o = 1 - r_{liq}^o,$$

sendo y^o a altura inicial; y a coordenada vertical; e δ_i a espessura de transição da interface. Esta espessura deve ser de no mínimo um espaçamento de malha para interceptar pelo menos dois nós adjacentes, mas pode-se aumentar esta faixa de transição o quanto for necessário. Isto é melhor compreendido observando-se a Figura 50. Entretanto, o emprego da função em uma malha grosseira em que a espessura de transição é menor que o espaçamento de malha tem o mesmo efeito do uso de funções degrau, o que não se recomenda dentro do contexto deste trabalho.

Este artifício é extremamente poderoso no que tange à estabilidade, principalmente em sistemas com grandes razões de densidade, e não era uma opção nativa do ANSYS CFX até seu release 12, onde então esta tática surgiu como uma opção de inicialização. Contudo, nenhuma informação de como ela é feita é dada e não pode ser controlada como a função apresentada aqui. Assim, mesmo de posse desta opção, variações da Equação (316) são empregadas de acordo com as condições iniciais de cada caso de estudo.

Figura 50. Comportamento da função de transição para várias espessuras de transição.



Embora após a 1ª iteração a pressão estática seja automaticamente incluída, o campo de pressão também deve ser inicializado, considerando a contribuição hidrostática. A inicialização é sempre aconselhável por questões numéricas. Assim, por exemplo,

$$P^o = r_{liq} \rho_{liq} g (h^o - y). \quad (317)$$

4.10 Força de Empuxo

Em um sistema em repouso a força de empuxo surge devido a ação das tensões normais à interface de um volume material e da diferença de massa específica do fluido que ocupa este volume e do que o circunda naturalmente. Matematicamente, isto já está nas equações do movimento no termo de força de corpo e no tensor tensão, *mas nas equações promediadas as interfaces não são superfícies materiais definidas e conhecidas, e esta informação não tem onde ser computada.*

Assim, deve-se adicionar um termo fonte às equações de conservação de quantidade de movimento,

$$S_{empuxo} = (\langle \rho \rangle - \rho_{ref}) \bar{\mathbf{g}}, \quad (318)$$

que descreve a força de empuxo por unidade de volume. A massa específica de referência é um artifício que gera a força de empuxo sendo geralmente a do fluido mais leve.

4.11 Tratamento dos Termos Fontes Interfaciais

Considerando as forças já implementadas no código comercial ANSYS CFX como Força de Arrasto, por exemplo, elas mantém o acoplamento entre as fases fazendo-as se enxergarem e tem uma formulação implícita na maioria das vezes, contudo, quando o modelo de fechamento aqui proposto é adicionado às equações dois problemas surgem:

1. *As forças de interface já implementadas não podem estar ativas;*
2. *A solução deve ser segregada.*

Desativar as forças é relativamente simples, bastando zerar o coeficiente de arrasto e não ativar as outras. Todavia, em análises prévias, zerar o coeficiente de arrasto mostrou-se algo que ocasionava instabilidades no processo de solução. Sem nenhuma força interfacial acoplado o sistema, a estabilidade numérica da solução é prejudicada, e a forma de contornar isto é não usar um zero absoluto e sim um valor muito pequeno próximo ao “zero do solver”, na prática um valor igual a 10^{-10} é suficiente. Apesar de parecer simples e aparentemente sem efeito, esta abordagem é suficiente para manter um leve acoplamento e não permitir que o termo de força de arrasto interfira na análise, pois ele tende a zero. A mesma prática de não usar zeros é aplicada às condições de contorno onde frações volumétricas são fisicamente iguais à zero. O mesmo se aplicando a mínimas frações volumétricas permitidas. Isto evita uma série de problemas numéricos e não interfere no resultado, pois sua ação é muito sutil nos valores absolutos dos campos de fração volumétrica.

Já a solução segregada diz respeito à natureza dos termos fontes deste trabalho. Eles são funções de gradientes de velocidades e de frações volumétricas, e a sua implementação é tratada de forma explícita. Optar pela solução segregada assegura que os gradientes de fração volumétrica sejam calculados com os mesmos campos

disponíveis para o cálculo da matriz de coeficientes da próxima iteração. O campo de velocidade empregado no cálculo dos termos fontes já seria por padrão o disponível da iteração anterior, mas haveria uma defasagem entre os campos de fração volumétrica que são o ponto fraco do modelo se forem mal resolvidos.

Estudos prévios comprovaram a eficácia desta tática. A solução acoplada é também possível, mas muito susceptível a instabilidades, e resultando quase sempre em divergência do sistema linear em momentos onde gradientes acentuados surgem.

Mas como já abordado, a solução segregada penaliza a solução do subsistema linear de fração volumétrica. E para atacar esta fraqueza, os resíduos médios quadráticos do subsistema principal são fixados entre 10^{-6} - 10^{-5} . Uma a duas ordens de grandeza abaixo do padrão permite que o campo de fração seja resolvido com a precisão padrão de um RMS em torno de 10^{-4} ou menos. Valores de resíduos acima deste patamar dificilmente resultam em convergência ou campos fisicamente consistentes. Outros artifícios também são utilizados como passo de tempo adaptativo; número mínimo de iterações por passo de tempo, independentes se estão abaixo do resíduo; sub-relaxações distintas em cada conjunto de equações e tratamento adequado do particionamento e processamento paralelo.

4.12 Passo de Tempo e Ciclos Iterativos

O passo de tempo adequado deve levar em conta tanto as escalas de tempo da física do problema quanto questões de estabilidade e custo computacional. Um critério para adaptação do valor do passo de tempo é do número de Courant, ou critério CFL (COURANT, FRIEDRICHS e LEWY, 1967) definido para um caso unidimensional a título de exemplo como

$$C = \frac{u\Delta t}{\Delta x}. \quad (319)$$

Um valor *teórico* para o número de Courant é $C \leq 13$. Mas nem sempre isto é possível, principalmente em problemas com acoplamentos não lineares da natureza dos deste trabalho, e um valor médio $C_{RMS} \leq 5$ mostra-se geralmente suficiente, mas deve-se manter o número de Courant o menor possível com valores menores ou próximos à unidade. A prática demonstra que valores

abaixo de 0,1 asseguram boa estabilidade, mas isto é particular de cada código.

A cada passo de tempo deve-se iterar o sistema linear de modo a tratar as não linearidades do sistema. O número máximo de iterações é dependente de cada caso aqui apresentado, mas varia em entre 10-20 iterações por passo de tempo, o que se mostrou suficiente. Entretanto, este número de iterações é usado somente em caso de instabilidades, ou nas primeiras iterações no tempo. Após isso, a tendência é convergir em apenas uma iteração e estabilizar os resíduos num certo patamar em torno de 5 iterações ou no número mínimo estipulado.

Para forçar uma boa convergência, o número mínimo de iterações por passo de tempo foi fixado em dois ou três, dependendo do problema. Assim, mesmo que o resíduo da primeira iteração esteja abaixo do critério, ele será reduzido ainda mais iterando uma segunda vez ou uma terceira vez, evitando oscilações dos resíduos próximas do limiar do critério estabelecido.

4.13 Processamento Paralelo

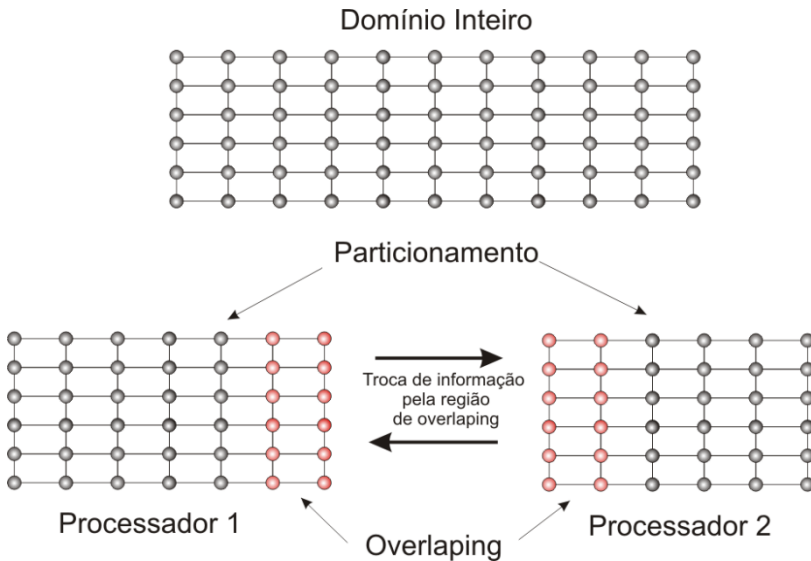
Variáveis como fração volumétrica e as demais que são funções da mesma, como curvatura, gradientes, densidade de área interfacial, etc., requerem um grau de precisão alto, pois pequenos erros de truncamento na fração volumétrica podem resultar em grandes erros no cálculo de gradientes dos termos fontes propostos neste trabalho e da curvatura da interface quando for o caso, assim uma boa resolução de malha é empregada.

Não obstante, a dupla precisão além de ser recomendada deve ser tomada como *protocolo padrão*, o que evita uma série de problemas numéricos e resultados pobres, mas a alocação de memória é aumentada.

Para lidar com esta quantidade de dados e atividades de cálculo de maneira ágil, é necessário o uso de processamento paralelo, pois permite a subdivisão do domínio em partições menores, ou matematicamente, submatrizes. Resolve-se cada partição simultaneamente de forma isolada, e então, a informação é repassada pelas fronteiras entre as partições. As fronteiras das partições atuam como condições de contorno dinâmicas, permitindo a troca de informações entre os subsistemas pelas fronteiras.

Para melhorar o acoplamento, parte destes nós de fronteira são redundantes, com sobreposição de regiões denominada de *overlapping*, o que ocasiona cerca de 5% do aumento de alocação de memória. A Figura 51 apresenta de forma bem simples o conceito de particionamento e *overlapping*.

Figura 51. Ilustração do processo de particionamento de um domínio computacional em dois processos. Os nós destacados representam a região de *overlapping*.



Alguns cuidados devem ser observados quando se utiliza processamento paralelo. Um diz respeito à escalabilidade, não se requisita processadores a esmo, e sim por necessidade de ganho de velocidade. A velocidade cresce de forma linear com o aumento de processadores envolvidos até certo ponto, após certa quantidade o tempo gasto na troca de informação pode superar o de processamento e esta relação deixa de ser linear, e o ganho de velocidade passa a ser menor a cada núcleo adicionado.

Não é recomendado que uma fronteira de partição intercepte paralelamente uma superfície livre ou alguma posição em que a mesma possa vir a surgir, pois nestas regiões há gradientes acentuados devido às mudança brusca de propriedades. Isto quase sempre resulta em divergência e quando possível, deve ser evitado.

E podendo ou não se evitar, esta região está sempre com a informação atrasada, e gradientes temporais acentuados sobre a mesma podem surgir hora ou outra. Portanto, além de se fixar a direção de particionamento adequada ao problema, o emprego de sub-relaxações aos nós da região de overlapping deve ser considerado.

CAPÍTULO

5

METODOLOGIA

5.1 Introdução

A apresenta-se neste Capítulo a Metodologia empregada no estudo do modelo de fechamento proposto. A abordagem de validação e verificação do modelo matemático proposto se embasa na comparação dos resultados obtidos empregando-se os modelos existentes atualmente e disponíveis no código ANSYS CFX, e os obtidos a partir do presente modelo. Para tanto, uma série de problemas de referência foram escolhidos, problemas estes de concepção simples, mas larga e exaustivamente empregados na validação de modelos e/ou algoritmos na literatura.

Cada um dos casos foi escolhido de forma a submeter o modelo a situações físicas distintas, como cisalhamento, instabilidades de interface, empuxo, números de Reynolds elevados, razões de densidades relativamente elevadas, mistura, fases contínuas e dispersas, com o intuito de definir os limites de aplicabilidade do modelo. Os problemas escolhidos são:

- Escoamento Cisalhante Vertical;
- Instabilidade de Rayleigh-Taylor;
- Rompimento de Barreira;
- Coluna de Bolhas;

Alguns destes problemas são de aplicação conceitual, pois algumas configurações são muito complicadas de se reproduzirem sob a ótica experimental sem adicionar perturbações que alteram as condições de contorno e/ou iniciais dos problemas, e pela natureza caótica de alguns deles, a sensibilidade às condições iniciais deve ser levada em conta em uma comparação com dados experimentais. Alguns deles nem mesmo possuem uma base experimental de dados

para validação sendo problemas conceituais e desafios numéricos que os modelos e os algoritmos devem ser capazes de lidar.

O protocolo padrão de simulação deste trabalho inclui:

1. Geração de geometria e malha cartesiana ortogonal com razão de aspecto igual ou próxima a unidade quando for possível;
2. Pré-processamento que inclui toda a definição física do problema e parâmetros numéricos de acordo com o caso;
3. Solução do sistema de equações;
4. Pós-processamento e análise dos campos de interesse ao caso;
5. Comparação entre os resultados obtidos e os disponíveis na literatura, sejam eles numéricos ou experimentais;
6. Auto comparação entre o modelo de fechamento proposto e os disponíveis até então;
7. Em caso de não ser possível uma simulação numérica direta – DNS – um estudo de refino de malha é indicado quando a infraestrutura computacional permitir e, após isso, comparar com os resultados precedentes;
8. Determinar quando possível se o modelo é ou não adequado, preciso, robusto, melhor ou pior do que outros trabalhos e outras abordagens matemático-computacionais empregadas;
9. Quando houver uma falha ou um resultado abaixo do padrão esperado, tentar determinar suas causas, se numéricas intrínsecas ao *modus operandi* do código ou à formulação matemática, ou de ambos.

Os softwares empregados em cada etapa são listados a seguir:

- Geração de Geometria: SolidWorks® 2012 e/ou ICEM® R12.1, 13 e 14.5;
- Geração de Malha ICEM® R12.1, 13 e 14.5;

- Pré-processamento: CFX-Pré® Releases 12.1, 13, e 14.5;
- Solução do Sistema CFX-Solver® Releases 12.1 ou 13 e 14.5;
- Pós-processamento: CFD-Post® Releases 12.1, 13 e 14.5, Enight® CFD Release 10, Tecplot® 360 R2013 e Origin® Pro R8.0.

Hardware empregado:

- CPU Intel® Core™ i7@3,4GHz, Sand Bridge 2ª Geração - 8 núcleos HyperThread (4 físicos);
- Memória RAM 16GB @1333MHz DDR3;
- Adaptadora de Vídeo ATI Radeon HD5760 Series 1GB GDDR5 @1200MHz dedicada;

Ambas com sistema operacional Windows 7 Ultimate® 64 bits

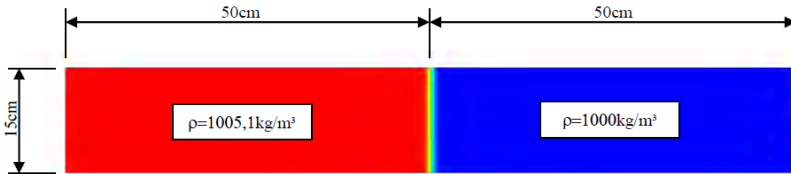
A seguir, a descrição dos casos escolhidos para análise.

5.2 Escoamento Cisalhante Vertical - CV

Embora este problema seja pouco visto na literatura, é um problema comum para testes de códigos e modelos multifásicos, principalmente de métodos VOF com reconstrução de interface. A Figura 52 apresenta a configuração do problema.

Dois fluidos com densidades próximas – cerca de 0,5% de diferença – são postos em um tanque cada um ocupando uma de suas metades e separados por um septo. Os fluidos são os mesmos, mas apresentam diferença de densidade por estarem a temperaturas ligeiramente diferentes ou possuírem algum composto dissolvido como glicerina ou sais. No caso, os fluidos em questão são água pura e água com sal, ambos a 25°C, sendo por isso chamado de problema da salmoura. A solução salina é preferível por não alterar drasticamente a viscosidade como a glicerina. A temperatura também pode ser usada, mas para apenas provocar uma ligeira diferença de densidades.

Figura 52. Esquema do problema de escoamento cisalhante vertical entre dois fluidos.



Uma vez em contato e em repouso, o septo é retirado e os fluidos entram em movimento, com o mais denso indo para baixo do menos denso, enquanto a interface entre eles começa a ser cisalhada. À medida que ocorre o cisalhamento as diferenças de velocidade entre as fases começam a gerar instabilidades que culminam em estruturas do tipo Kelvin-Helmholtz e estas se degeneram, e a interface se torna caótica com porções de fluidos se despreendendo de ambas as fases, tornando a morfologia do escoamento tanto estratificada - em grande parte -, quanto disperso com gotas sendo desprendidas e recapturadas pela interface que separa as duas grandes porções de fluidos.

A reprodução experimental deste problema é complexa uma vez que os fluidos não são imiscíveis, sendo a solução salina ou diferença de temperatura o que ocasiona a variação de densidades, e ambos impõem um gradiente e a transferência de uma ou outra propriedade ocorre no mínimo de forma difusiva. E a condição inicial numérica é uma condição idealizada. Na prática, uma placa lisa seria retirada de maneira a gerar a menor perturbação possível, mas a reprodução numérica disto não seria fácil.

Este problema tem uma função de análise conceitual e pode ser encontrado em Bakker (2002). E, sendo possível ou não fisicamente analisar um sistema nestas condições, numericamente o é. Logo, diferentes abordagens matemáticas podem ser empregadas e confrontadas entre si para se avaliar suas diferenças.

Nesta situação a força de arrasto é provavelmente a dominante por ser um escoamento inicialmente estratificado verticalmente, mas a degeneração da interface em porções menores de fluido faz com que as forças que atuam sobre as gotas, como massa virtual e sustentação, comecem a ter importância também, mesmo que de forma transitória. Ambas as morfologias estão

presentes, fases contínuas e fases dispersas, o que torna a modelagem pelo método padrão complicado de decidir sem penalizar um comportamento característico ou outro.

5.3 Instabilidade de Rayleigh-Taylor - RT

A instabilidade de Rayleigh-Taylor¹⁸ é uma instabilidade da interface entre dois fluidos de concentrações mássicas diferentes devido a uma perturbação da interface que separa o fluido mais denso acima, do mais leve abaixo. Isto provoca a aceleração de ambos os fluidos em direções opostas devido à força de empuxo.

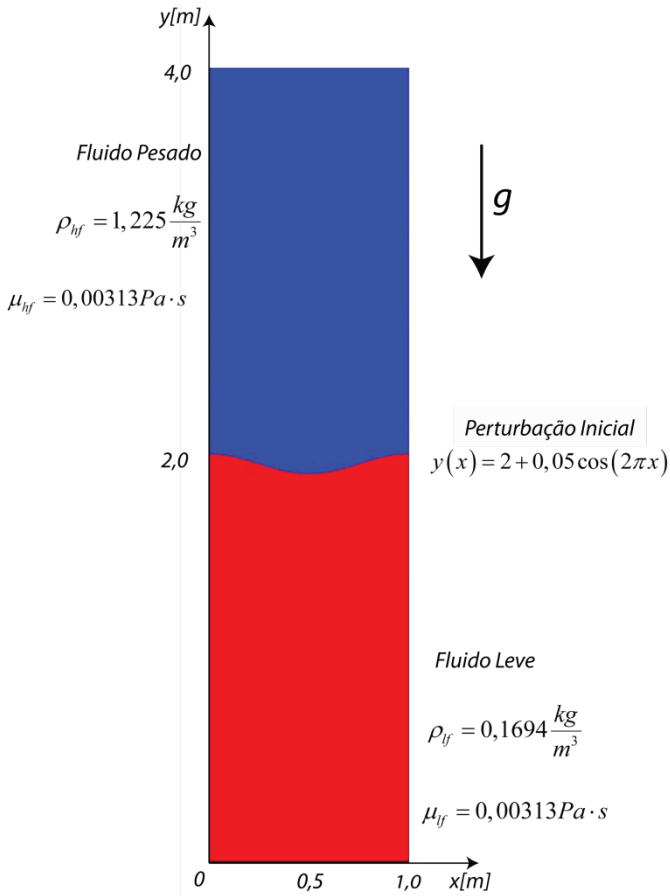
A Figura 53 ilustra a configuração deste problema onde o fluido mais pesado se encontra acima do mais leve em um domínio retangular. A perturbação da interface deve ser prescrita, pois caso contrário nada ocorre. Numericamente, uma interface horizontal está equilibrada em todos os seus pontos, então uma pequena perturbação no campo de pressão estático ou de velocidade deve ser imposta, e assim, a física do problema segue seu rumo natural: a queda do fluido mais pesado e a ascensão do mais leve.

No caso aqui apresentado, a perturbação é devido a uma ligeira diferença do campo de pressão estática ocasionada por uma interface levemente sinusoidal como apresentado na Figura 53. A diferença de densidades neste caso é bem maior que a do caso anterior que era de 0,5%, sendo que o fluido mais leve é ~86% menos denso, quase dez vezes. A posição inicial da interface também é praticamente horizontal sendo distendida para cima e para baixo ao longo do processo.

Este problema é facilmente encontrado na literatura e é quase sempre usado como *benchmark* na análise e verificação de códigos numéricos (viz. HE, CHEN e ZHANG, 1999; FOURNIER, GAUTHIER e RENAUD, 2002; MEHRAVARAN e HANNANI, 2008). Uma fonte onde sua descrição é bem simples e clara e os resultados são de fácil comparação é dado por Jahanbakhsh, Panahi e Seif (2007).

¹⁸ Atribuída a Lord Rayleigh e Sir Geoffrey Ingram Taylor.

Figura 53. Configuração do Problema de Rayleigh-Taylor sujeito a uma perturbação inicial prescrita.

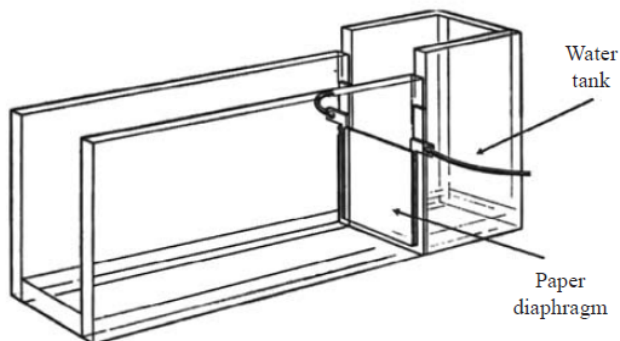


5.4 Rompimento de Barreira - RB

Experimento numérico clássico e talvez um dos mais conhecidos em escoamentos multifásicos. Uma fonte experimental – talvez a única – deste problema é provida por Martin e Moyce (1952). Outras fontes experimentais de variações do problema podem ser encontradas (STELLING e DUINMEIJER, 2003;

SHAKIBAEINIA e JIN, 2011; PARK *et al.*, 2012), mas a configuração clássica é a apresentada na Figura 54.

Figura 54. Esquema do aparato experimental empregado por Martin e Moyce (1952). O diafragma é cortado instantaneamente pelo calor da passagem de uma corrente em um condutor posicionado nas junções.

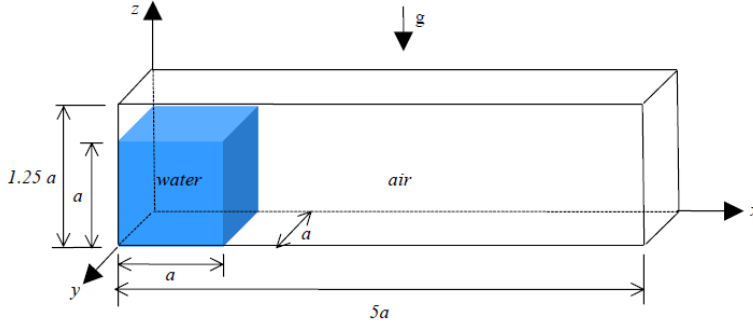


Novamente o trabalho de Jahanbakhsh, Panahi e Seif (2007) fornece uma boa base comparativa além de analisar as diferenças entre uma análise 2D e 3D, concluindo que a diferença nos resultados frente ao custo computacional não é lucrativa, pois são praticamente iguais.

Este problema já possui características mais difíceis de lidar como a razão de densidades, pois desta vez os fluidos em consideração são um líquido (água) e um gás (ar) com uma diferença de densidade de quase mil vezes. As velocidades envolvidas são também de maior magnitude associadas a uma brusca aceleração em regime que tende ao turbulento à medida que a frente líquida escoar, além da diferença de viscosidade entre os fluidos. A Figura 55 apresenta a configuração do problema de rompimento de barreira.

Assim que o diafragma se rompe tanto a altura da coluna quanto a posição da frente líquida se alteram e isto ocorre a uma taxa não constante e foi medida experimentalmente por Martin e Moyce (1952). E em geral, sempre há uma certa defasagem entre os resultados numéricos e os experimentais e geralmente são atribuídos na literatura a desvios experimentais.

Figura 55. Configuração do domínio de cálculo para o problema de quebra de barreira clássico (JAHANBAKSH, PANAHI e SEIF, 2007).



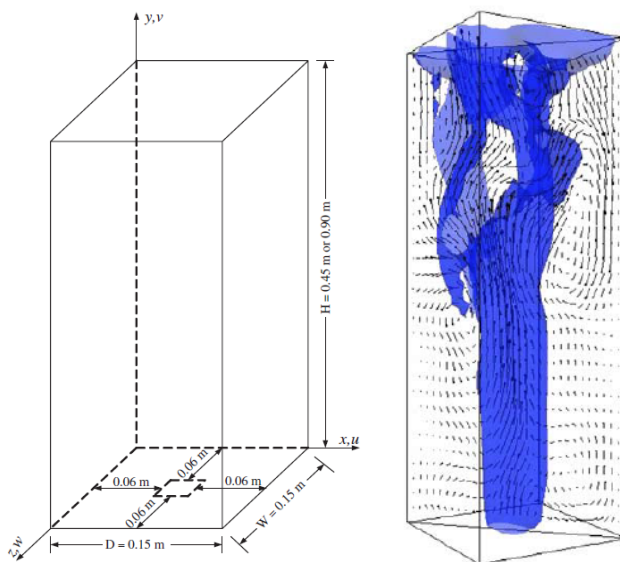
5.5 Coluna de Bolhas - CB

Outra aplicação muito comum e de grande importância na prática industrial é a coluna de bolhas. A característica principal deste escoamento é a interação entre uma fase líquida contínua e uma gasosa dispersa. Então, além de uma grande razão de densidades e viscosidades, há um comportamento dinâmico mais complexo associado a números de Reynolds de magnitude apreciáveis e provavelmente turbulento. Este problema apresenta, portanto, características mais complexas tanto física quanto numericamente. As frações volumétricas envolvidas também são geralmente baixas e a interface é algo difuso, o que o torna um desafio numérico interessante ao modelo. E devido a sua complexidade, uma atenção maior e mais minuciosa é dada a seguir.

Sob a ótica Euleriana, a fase dispersa não são bolhas individuais com suas interfaces bem definidas, a promediação degenera esta informação e ela se dispersa na densidade de probabilidade, ou grosso modo, é descrita como a fração volumétrica. Diversos trabalhos estão disponíveis na literatura tanto com enfoque industrial quanto de natureza mais fundamental.

As configurações são as mais variadas, na Figura 56 tem-se um exemplo do trabalho de Zhang, Deen e Kuipers (2006) que simulam uma coluna retangular para o estudo do impacto dos modelos de fechamento de turbulência sobre o comportamento dinâmico do sistema, empregando para isto uma abordagem submalha (SMAGORINSKY, 1963).

Figura 56. Esquema de uma coluna de bolhas empregada no trabalho de Zhang, Deen e Kiupers (2006).



Nos últimos 20 anos na literatura, dois fatores são comuns nas análises: padrão de dispersão das bolhas e a dinâmica da pluma.

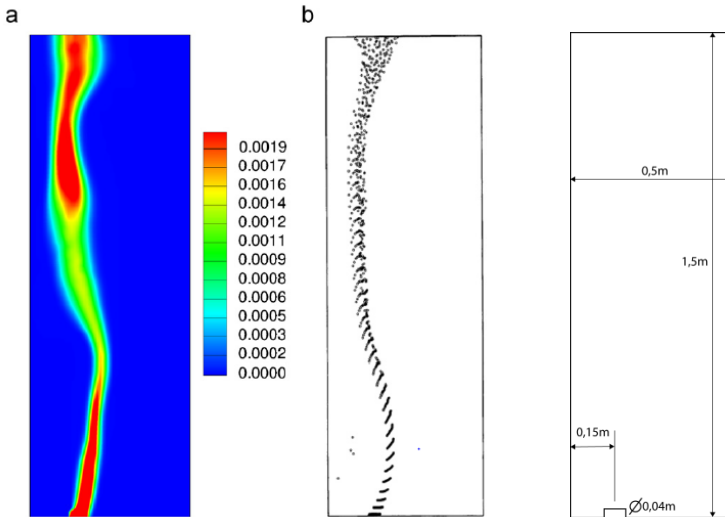
Sokolichin e Eigenberger (1994) descrevem um modelo Euler-Euler para a simulação de um reator de bolhas com recirculação e assinalam a importância da captura da dinâmica da pluma para a predição do rendimento de operações industriais de reatores multifásicos. E em um artigo subsequente, Becker, Sokolichin e Eigenberger (1994) apresentam os resultados experimentais.

Delnoij e Colaboradores (1997) atacam o mesmo problema empregando uma abordagem Euler-Lagrange. Diversas forças interfaciais são consideradas incluindo um modelo colisional podendo por isto ser considerado um modelo de acoplamento de quatro vias (*four way coupling*). Este trabalho é empregado por Vikas e Colaboradores (2011) para validação do seu modelo baseado em quadratura de momento (QMOM). A Figura 57

apresenta os resultados de ambos os trabalhos e o domínio de cálculo.

Sokolichin e Eigenberger (1999) e Borchers e Colaboradores (1999) estudaram a aplicabilidade do modelo $k-\varepsilon$ na dinâmica de coluna de bolhas e a abordagem laminar. O caso de teste é o mesmo caso estudado em Becker, Sokolichin e Eigenberger (1994), mas é altamente dependente da resolução da malha, enquanto a RANS alcança a independência de malha mas penaliza a dinâmica da pluma. O termo de dispersão turbulenta é um termo chave na indução da oscilação.

Figura 57 Resultados numéricos obtidos por (a) Vikas (2011), e (b) Delnoij (1997), e em (c) mostra-se o esquema do domínio de cálculo.



Pfleger e Colaboradores (1999) em um trabalho numérico/experimental também analisam o mesmo tipo de problema empregando Anemometria Doppler por Laser (LDA) e o modelo de dois fluidos. Juntamente com o modelo $k-\varepsilon$ considerando a turbulência induzida pelas bolhas - BIT (SATO, SADATOMI e SEKOGUCHI, 1981a; 1981b; KATAOKA e SERIZAWA, 1989) e abordagem laminar, e à época empregaram o simulador comercial CFX 4.2 comercializado então pela AEA Technology.

Seus resultados com a abordagem laminar não obtiveram oscilações harmônicas com comportamento complexo enquanto o uso do modelo $k-\varepsilon$ em três dimensões entra em acordo com as observações experimentais concluindo que uma abordagem 3D e um refino de malha adequados são necessários para a boa representação do problema. Os autores não foram capazes de capturar o comportamento dinâmico da pluma em duas dimensões.

Em um estudo experimental Becker, De Bie e Sweeney, (1999) analisam a mesma coluna pseudo 2D (retangular achatada) e uma coluna cilíndrica por LDA. No caso cilíndrico, o comportamento é complexo e não preditivo, enquanto na coluna retangular uma pluma com oscilação harmônica é observada oscilando em um período de cerca de 20s. Os autores recomendam esta última como uma ferramenta de validação de códigos e modelos dada sua simplicidade, comportamento preditivo e facilidade de visualização e medição.

Um trabalho posterior de Pflieger e Becker (2001) analisam uma coluna cilíndrica em um estudo também numérico/experimental usando LDA e empregando a versão 4.3 do CFX, mas com um modelo mais simples considerando somente o termo de arrasto. As mesmas abordagens da turbulência são empregadas e novamente um termo de dispersão turbulenta é considerado, e reafirmam que uma abordagem 3D é a única capaz de capturar a dinâmica da coluna de bolhas.

No trabalho de Bech (2005a), uma análise 2D da coluna retangular é efetuada analisando como os modelos de turbulência $k-\varepsilon$, $k-\omega$, e de comprimento de mistura (MANNINEN, TAIVASSALO e KALLIO, 1996) afetam o comportamento da pluma, obtendo resultados dos mais diversos com simulações 2D e obtendo o comportamento oscilatório harmônico. A chave está mais uma vez no termo de dispersão turbulenta calibrado apropriadamente e mostrando que uma abordagem 2D é capaz de capturar a oscilação da pluma.

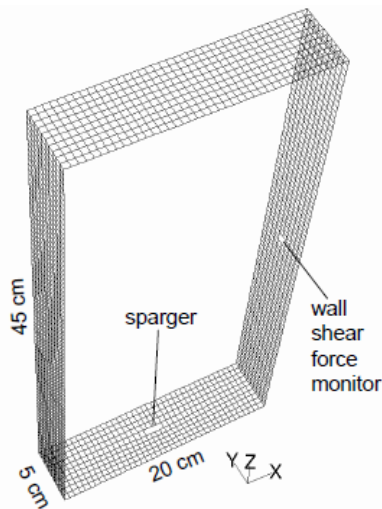
No outro trabalho mostrado na Figura 58, Bech (2005b) emprega uma abordagem submalha e confronta com modelos de turbulência a duas equações. A razão é a dispersão ocasionada pela turbulência. Modelos muito difusivos como os baseados na Hipótese de Boussinesq tendem a manter uma pluma comportada e difusa,

enquanto outros modelos como o LES ou SMC tendem a gerar padrões mais fidedignos.

Neste trabalho, o caso da coluna de bolhas plana é o preferido, pois há uma grande quantidade de dados numéricos e experimentais. Seu setup é relativamente simples, embora sua análise e convergência não o sejam. Um inconveniente de problemas deste tipo é que as análises devem ser efetuadas por um longo período de tempo físico para o cálculo de comportamentos médios e a captura adequada dos campos de velocidade e fração volumétrica.

Análises de tempo longo (LTA) são sempre efetuadas tanto experimental quanto numericamente. Escalas de tempo de 100, 200, e até 500 segundos são comuns. Logo, o esforço computacional é bem maior para este problema.

Figura 58. Configuração do domínio de cálculo da coluna de bolhas estudada por Bech (2005b).



A característica comum entre os exemplos é a simplicidade da configuração dos domínios de cálculo e a facilidade na geração da malha, sendo casos tridimensionais e turbulentos em sua natureza. Isto impõe um desafio numérico no que tange a estabilidade do modelo aqui proposto, devido à natureza explícita da

implementação dos termos fontes, o que pode adicionar uma dificuldade numérica a mais a um problema, que usando as metodologias disponíveis tem um grau de dificuldade de convergência e acurácia consideráveis.

5.6 Considerações finais

Os problemas aqui assinalados varrem uma vasta gama de situações possíveis de serem encontradas no estudo de escoamentos multifásicos e em muitas aplicações industriais, embora estas aplicações sejam um conjunto deveras vasto.

Este conjunto de casos englobam características fisicamente interessantes tais como escoamentos estratificados, cisalhantes, dispersos, com Reynolds moderados ou elevados, com baixa ou alta razão de densidades e diversas outras características instigantes de se pôr a prova.

O processo de geração de malhas e setup para estes casos escolhidos também é outra vantagem na análise, pois se tratam de geometrias simples e que possibilitam o uso de malhas ortogonais cartesianas e todos passíveis de uma análise bidimensional, o que computacionalmente é uma vantagem.

O tratamento numérico destas modalidades é também outro desafio ao modelo, de forma a determinar as limitações e suas vantagens.

CAPÍTULO

6

RESULTADOS E
DISCUSSÃO

6.1 Introdução

Neste capítulo são apresentados e discutidos os resultados pertinentes às simulações realizadas dos casos apresentados no Capítulo anterior.

Os pormenores numéricos, como relaxações, esquemas de interpolação, ciclo multigrid, etc., encontram-se disponíveis nos Anexos em Formato CCL¹⁹.

6.2 Escoamento Cisalhante Vertical – CV

Este é um problema de número de Reynolds moderado, logo passível de uma análise DNS, o que é interessante. Primeiramente, as escalas características do escoamento devem ser calculadas. Estas, segundo Kolmogorov (1942), são dadas por,

$$\eta \equiv \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4}, \quad \tau \equiv \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2}, \quad \nu \equiv (\nu \varepsilon)^{1/4}, \quad (320)$$

que, por uma manipulação algébrica simples podem ser escritas como função do número de Reynolds,

$$\eta \approx L \text{Re}^{-3/4}, \quad \tau \approx t \text{Re}^{-1/2}, \quad \nu \approx u \text{Re}^{-1/4}, \quad (321)$$

onde L , t e u são as escalas características de comprimento, tempo e velocidade do problema, respectivamente; e η , τ e ν as escalas

¹⁹ O arquivo CCL é um arquivo contendo todos os comandos e parâmetros empregados na simulação, descrição dos materiais e esquemas numéricos. Ele é gerado pelo simulador e pode ser importado em uma nova simulação em que se deseja empregar as mesmas diretivas de simulação.

de comprimento, tempo e velocidade de Kolmogorov. O número de Reynolds é então calculado a partir destas escalas.

As propriedades físicas dos fluidos são apresentadas na Tabela 2 e o domínio físico é mostrado na Figura 59..

Tabela 2. Propriedades Físicas dos Fluidos do Escoamento Cisalhante Vertical.

Material	$\rho [kg/m^3]$	$\mu [Pa \cdot s]$
Água Leve	1000,00	0,001
Água Pesada	1005,10	0,001

O problema em questão é considerado bidimensional, como um plano de uma caixa infinita na direção normal ao plano. Para o presente caso, tem-se duas escalas de comprimento característico, $L=1m$ e $H=0,15m$.

Inicialmente a cota H é a dominante e do meio ao fim da mistura dos fluidos a cota L . Uma forma de estimar a escala de comprimento é fixar uma destas duas. Contudo, o próprio simulador ANSYS CFX usa como escala característica de qualquer escoamento a raiz cúbica do volume do domínio frente a complexidade das possíveis geometrias para poder ser o mais geral possível.

Figura 59. Domínio de Cálculo do Escoamento Cisalhante Vertical onde $L=1,00m$ e $H=0,15m$.



Para a escala de velocidade, como primeira estimativa, optou-se por simular com uma malha de espaçamento intermediário e verificar a escala do campo de velocidade se apresentava. Neste estudo prévio, a escala de velocidade média obtida foi de cerca de $0,01m/s$. Assim, como escala característica de velocidade tem-se $U \approx o(0,01m/s)$.

Para a escala de comprimento podem-se ter três escalas distintas $L = [1,00; 0,15]m$, (a 3ª escala é a raiz cúbica do volume do domínio) e neste caso dois valores distintos para o número de Reynolds: $1,01 \times 10^4$ e $1,51 \times 10^3$, o que resulta em duas escalas características: $9,7 \times 10^{-4}m$ e $6,2 \times 10^{-4}m$. As escalas são bem próximas e são um pouco menores do que 1 mm, e caso uma delas seja preferida em detrimento da outra, não estará se cometendo um erro de grandes proporções na avaliação das escalas de comprimento, pois a escala de velocidade é também uma estimativa média.

O domínio de cálculo foi subdividido em uma malha de 1181 x 177 nós resultando em um espaçamento de malha de $8,4 \times 10^{-4}m$, ou seja, a escala intermediária.

A escala de tempo do problema pode ser encontrada considerando a escala de velocidade e a espacial, ou seja, cerca de 15s para um dos fluidos percorrer toda a extensão L . Assim, de acordo com a Equação (321), obtém-se $\tau \approx 0,014s$. O passo de tempo empregado nesta análise foi de 0,001s, catorze vezes abaixo da escala característica de tempo. O tempo total de simulação especificado foi de 20s de forma a capturar a colisão das frentes com as paredes laterais.

Uma nota deve ser dada a simulações bidimensionais com o simulador ANSYS CFX. Um domínio 2D não é possível de ser resolvido uma vez que o solver é programado para problemas tridimensionais. Para casos bidimensionais um domínio tridimensional fino deve ser gerado e a malha não pode possuir nós entre os planos. A espessura é de 1mm.

Nestes planos a condição de simetria é aplicada, o que é equivalente a não permitir fluxos na direção normal ao domínio de cálculo. Matematicamente, não há alterações dos resultados por isto, apenas uma elevação do custo computacional, pois são dois planos bidimensionais ao invés de um. Para esta malha, com este refinamento o número de nós é de aproximadamente 447mil (metade para cada plano de simetria) demandando um tempo de computação de 10 dias para os 20s de tempo físico estipulado com processamento paralelo local em três partições.

Como o domínio é fechado, as condições de contorno são de não escorregamento para velocidade e sem ângulo de contato

prescrito para fração volumétrica. Os parâmetros são resumos na Tabela 3.

Tabela 3. Parâmetros de Simulação do Escoamento Cisalhante Vertical.

Número de nós	223,5 mil (por plano)
Passo de tempo	0,001s
Condições de contorno	Não escorregamento sem ângulo de contato prescrito
Número de partições	3 a 4 partições

Na Figura 60 e Figura 61 comparam-se os resultados obtidos com os resultados de Bakker (2002).

Os resultados são bem similares no comportamento macroscópico, mas não são iguais. Inicialmente os resultados apresentados por Bakker (2002) apresentam estruturas enoveladas e com certa organização no tempo e no espaço, como estruturas de Kelvin- Helmholtz. Já os resultados apresentados pelo modelo entram em um regime complexo muito mais cedo.

Outra diferença diz respeito à posição das frentes de fluido nas paredes inferior e superior. Nos resultados de Bakker (2002), a interface possui sempre um ângulo de contato próximo de 90° , enquanto no modelo deste trabalho isto não ocorre. A Figura 62 apresenta um detalhe de ambos os resultados. Como no modelo resolvido neste trabalho não há ângulo de contato prescrito, a interface é livre, e pela condição de não escorregamento, ela tende a estar atrasada em relação às porções de fluido acima dela com maior velocidade causando uma espécie de desmoronamento de fluido nesta região.

A prescrição de um ângulo de contato igual a 90° alteraria este perfil da interface junto à parede deixando-a muito similar aos resultados de Bakker (2002). Todavia, não garante que a posição da frente seja a mesma. Um pequeno vórtice aparece em ambos os resultados. O comportamento da interface como um todo também está correlacionada às maneiras como a interface é resolvida nos dois casos. Bakker (2002) emprega o simulador ANSYS FLUENT com o algoritmo de reconstrução da interface CICSAM e uma malha de 190 mil elementos, quase tão refinada quanto à usada neste trabalho (223,5mil), pois o simulador ANSYS FLUENT é capaz de operar somente bidimensionalmente. Enquanto o ANSYS CFX

emprega um algoritmo de alta resolução com contra difusão que comprime a interface sem reconstrução. O passo de tempo também empregado pelo autor é o dobro do utilizado neste trabalho.

Figura 60. Comparação do campo de fração volumétrica apresentando a evolução da posição da interface com o tempo. Em (A) Modelo Proposto e em (B) Bakker (2002).

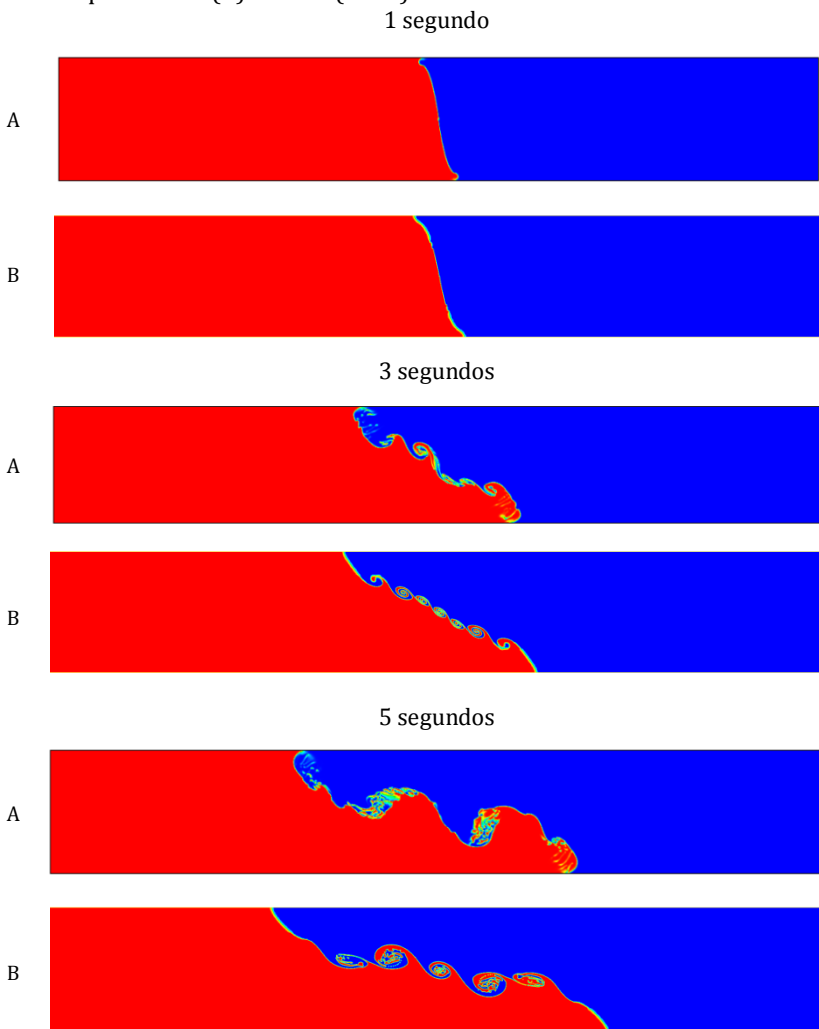
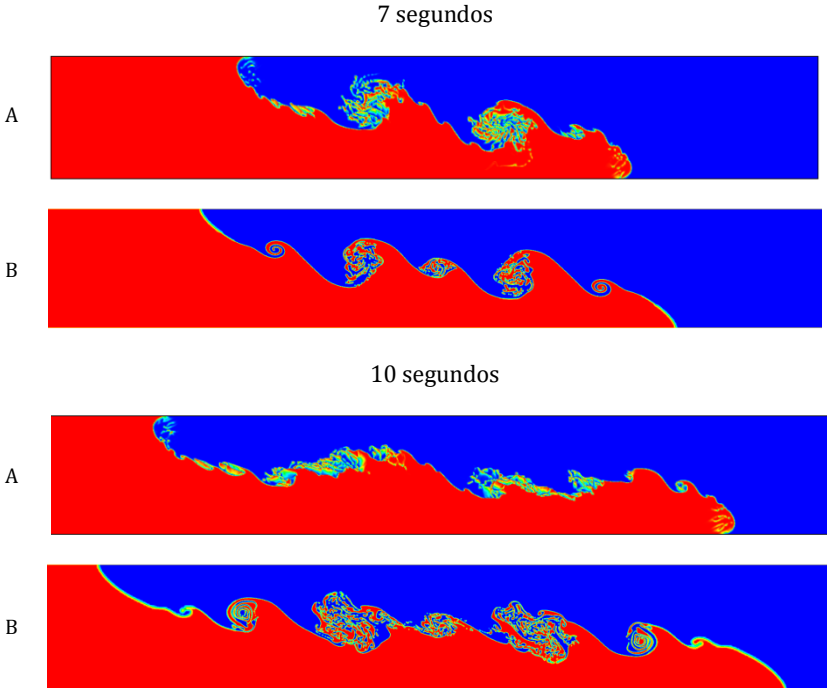


Figura 61. (Continuação) Comparação do campo de fração volumétrica apresentando a evolução da posição da interface com o tempo. Em (A) Modelo Proposto e em (B) Bakker (2002).



A Figura 63 apresenta um detalhe da resolução da malha sobre um vórtice da interface. A interface se espalha por aproximadamente dois espaçamentos de malha. Esta resolução é garantida pelo algoritmo de compressão da interface.

Figura 62. Gráfico comparativo do avanço da interface e ângulo de contato junto à parede.

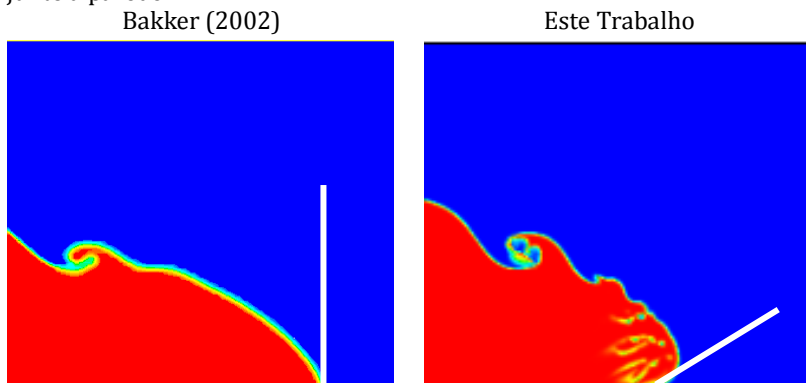
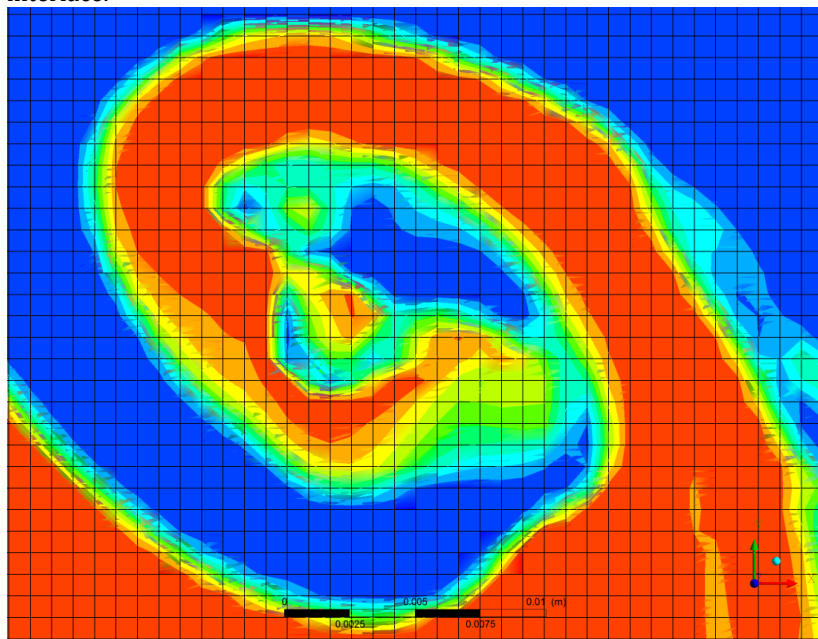


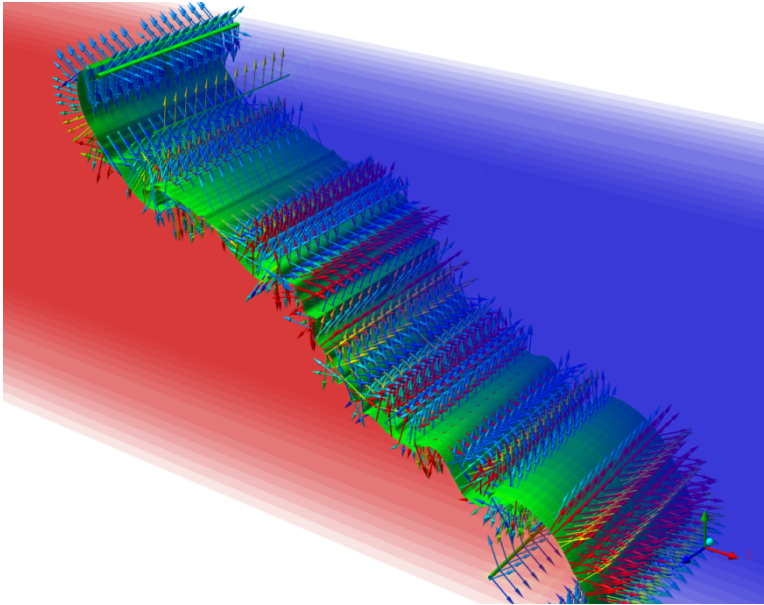
Figura 63. Detalhe apresentando a resolução da malha e um vórtice da interface.



Na Figura 64 apresentam-se os vetores da densidade de força interfacial, o plano está repetido algumas vezes pra criar alguma espessura. Percebe-se nos vórtices que os vetores de força

condizem com a direção em que há o seu envelhecimento. Os vetores de força estão orientados na direção de propagação da interface

Figura 64. Vetores da densidade de força interfacial sobre a interface.



As estruturas envelhecidas na interface não perduram por muito tempo e se partem formando gotas que continuam sua trajetória curvilínea e são então recapturadas. A Figura 65 ilustra um detalhe em que acima, pequenas porções de fluido inicialmente difusas, glutinam-se, e se tornam mais esféricas na imagem seguinte e se encaminham para o aglomerado em rotação. Vale lembrar que a força de tensão superficial não está sendo considerada.

Este desprendimento de gotas faz com que o escoamento seja também em algumas regiões do tipo polidisperso, o que pela prática vigente iria requerer um modelo de partícula condizente ao regime. Mas ainda apresentando características de escoamento estratificado. O modelo proposto transita bem entre os dois extremos.

O comportamento apresentado pelo modelo é mais dinâmico e complexo do que o obtido por Bakker (2002). Na Figura 66. a interface é mostrada com suas nuances por meio de uma

imagem do tipo shadowgraph emulado numericamente pelo laplaciano do campo de densidade (SETTLES, 2001). Na Figura, percebe-se como a interface dobra sobre si mesma várias vezes em vários pontos distintos.

Figura 65. Detalhe apresentando desprendimento e recaptura de gotas .

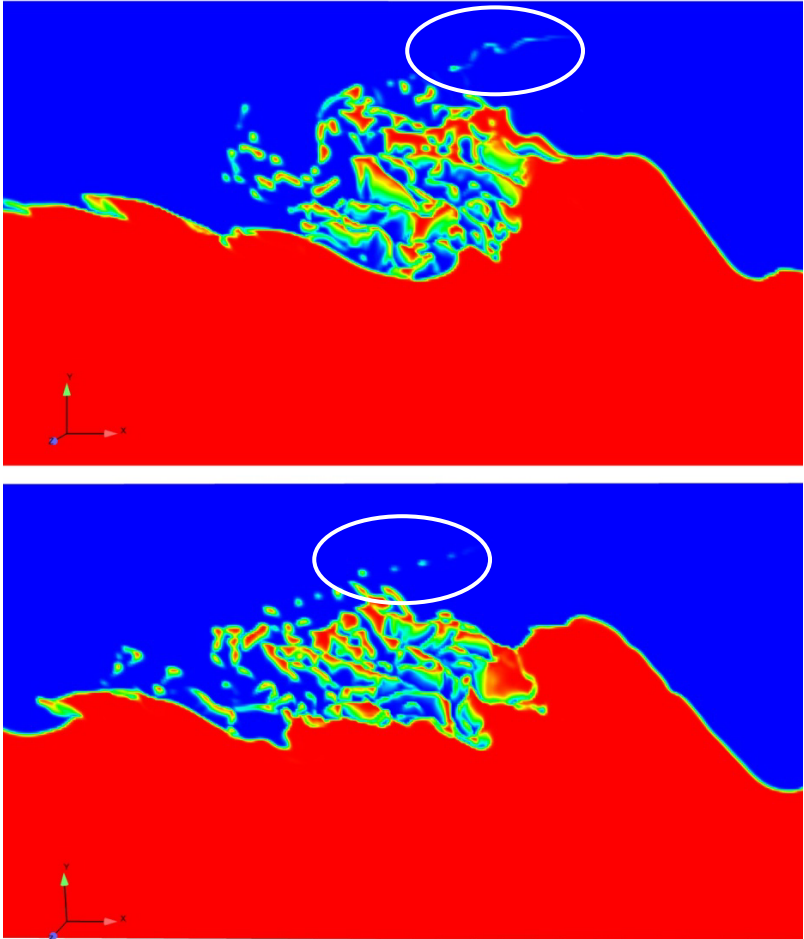
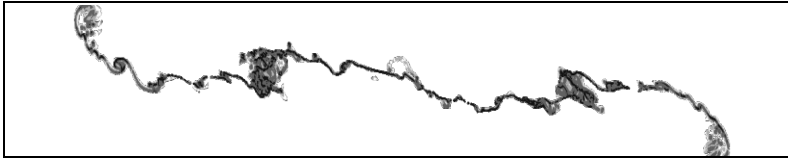
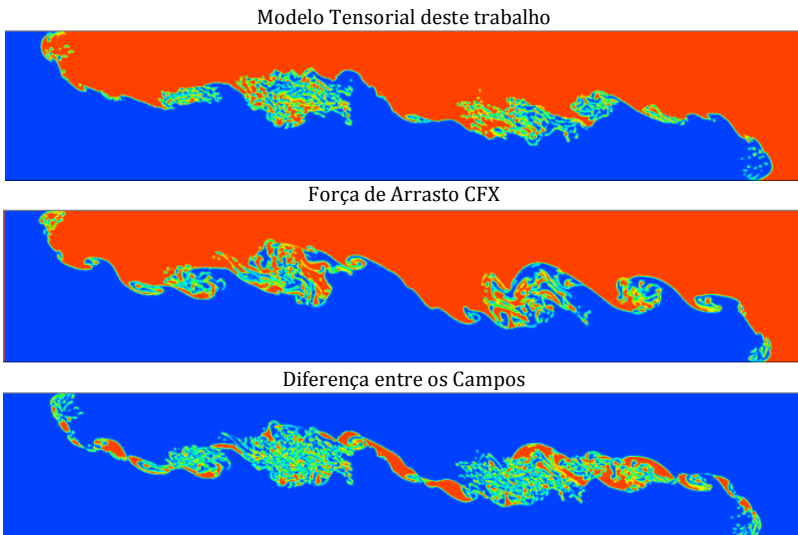


Figura 66. Shadowgraph da interface mostrando sua estrutura enovelada.



O comportamento dinâmico da interface é do tipo fractal, grandes vórtices gerando vórtices menores até a escala da malha, onde, ou a interface permanece íntegra, ou ela se degenera e se rompe gerando uma gota que se desgarra e é capturada pelo seio fluido. Esta gota distorcida tende a manter sua integridade e assumir uma forma mais suave e circular até ser novamente capturada por alguma grande estrutura da interface e reintegrada a ela.

Figura 67 Comparação entre o modelo tensorial e o padrão empregando força de arrasto e a diferença entre os modelos mais abaixo.



Este comportamento também se observa quando o modelo padrão de arrasto é empregado, todavia, com menos intensidade e as pequenas gotas que se desprendem tendem a se dissipar como

uma “névoa numérica”. E em algum momento se aglomeram como num processo de condensação no núcleo de algum vórtice. A Figura 67 compara as duas abordagens e apresenta a diferença de posição da interface. O comportamento médio e global é similar indicando que o modelo proposto se comporta como na modelagem usual, mas com uma dinâmica mais intensa e tendendo ao um comportamento complexo, contudo, sem destoar do que se observaria com o modelo de arrasto. Assinala-se que o coeficiente de arrasto empregado neste caso foi igual a 0,44.

A força atuante sobre a interface pode ser calculada facilmente no pós-processamento. É uma variável disponível nos dados gerados. Logo uma comparação quantitativa também pode ser efetuada. O coeficiente de arrasto é um parâmetro representativo do comportamento das fases. O coeficiente de arrasto é definido como

$$C_D = \frac{\tilde{F}}{\frac{1}{2} \rho \tilde{U}_b^2 A_i}, \quad (322)$$

onde \tilde{F} e \tilde{U} são as magnitudes dos vetores de força e velocidade, respectivamente; ρ a densidade da fase; e A_i a área da interface. A velocidade de escorregamento não é empregada para se evitar singularidades no caso de velocidade muito próximas ou mesmo iguais resultando em um coeficiente de arrasto infinito.

Para o cálculo, uma superfície material deve ser definida e uma isosuperfície com fração volumétrica igual a 0,5 foi escolhida por representar a igual probabilidade de ambas as fases estarem presente em determinado ponto. Ou seja, se há uma interface, este é o local onde ambas as fases atuam em igual proporção.

Tanto a força quanto a velocidade são definidas para o cálculo em questão como valores médios:

$$\tilde{F} = \frac{\int_{A_i} F dA}{\int_{A_i} dA}, \quad (323)$$

e

$$\tilde{U}_b = \frac{\int_{V_i} r_\alpha U_\alpha dV}{\int_{V_i} r_\alpha dV}. \quad (324)$$

A força é avaliada como a média atuante sobre a área da interface – definida pela isossuperfície -, enquanto a velocidade média é a velocidade baricêntrica da fase, calculada como uma média volumétrica da fase. Já a força é calculada automaticamente avaliando-se o tensor tensão sobre a interface. O cálculo é feito dinamicamente e demanda um certo esforço computacional pois a interface começa a ter uma estrutura mais complicada com o tempo.

Os resultados são comparados na Figura 68. A velocidade inicial é nula e nos primeiros instantes toda a massa fluida sofre os efeitos da aceleração devido ao empuxo. Os coeficientes são mais altos no início (não definidos para $t=0s$) e o sistema acelera até alcançar um estado dinâmico que sob o ponto de vista estatístico médio é aproximadamente constante, com coeficientes de arrasto em torno de 0,3-0,4 para o modelo de arrasto padrão do ANSYS CFX, e 0,9-1,0 para o modelo tensorial deste trabalho. As curvas são muito similares e ambos os modelos dão praticamente o mesmo resultado para o coeficiente de arrasto até o tempo de 8,5 segundos onde elas se separam. O que ocorre por este tempo é o aumento do comportamento dinâmico da interface, formação de mais vórtices e quebras e coalescências de estrutura de forma mais caótica.

Os valores finais são aproximadamente os valores das próprias constantes de cada modelo. Mas vale ressaltar que o valor 0,44 empregado é considerando um regime de Newton (Re elevado) e que é válido para corpos circulares ou esféricos rígidos e lisos. O que não é o caso da interface, principalmente nos primeiros instantes. A dificuldade em simular escoamentos deste tipo é justamente a falta de correlações para o coeficiente de arrasto em problemas de superfície livre.

Como já abordado o tratamento de termos fontes é um problema numérico delicado e somado ao processamento paralelo isto ainda se torna mais crítico. Para um domínio com esta razão de aspecto o particionamento é vertical em três secções. Outra direção poderia ser empregada, mas qualquer que ela seja uma parte da interface vai interceptá-la paralelamente. Este salto de propriedade sobre as fronteiras partições associado à própria dinâmica do escoamento resulta quase sempre em divergência.

Na Figura 69 tem-se *um vórtice e um abrupto desprendimento* de fluido na direção vertical sem nenhum motivo aparente. Neste estágio, os resíduos da solução se tornaram instáveis e a mesma divergiu. A posição em que isto ocorreu foi uma

sobre uma das fronteiras de particionamento. A solução mais eficiente foi retirar esta fronteira desta posição, subdividindo o domínio em quatro partições.

Figura 68. Caso de cisalhamento vertical. Comparação do coeficiente de arrasto sobre a interface obtido por meio do modelo tensorial proposto neste trabalho e o modelo de arrasto padrão existente do ANSYS CFX.

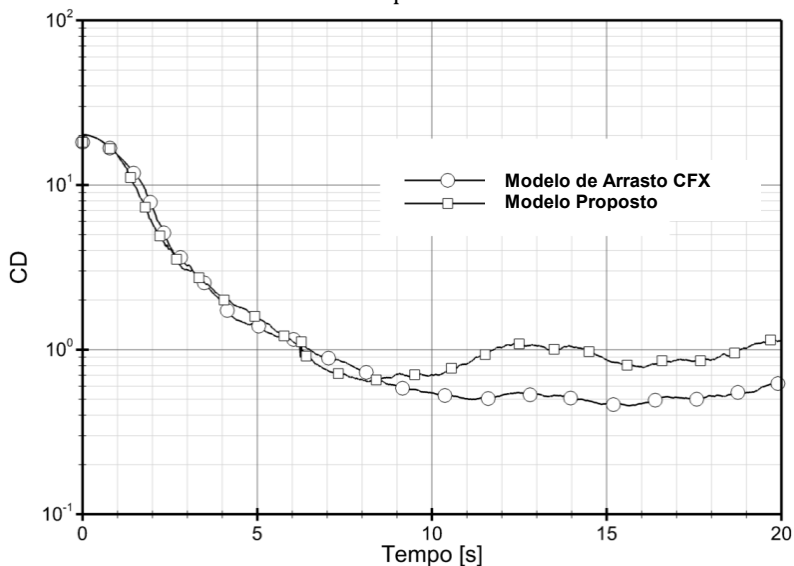
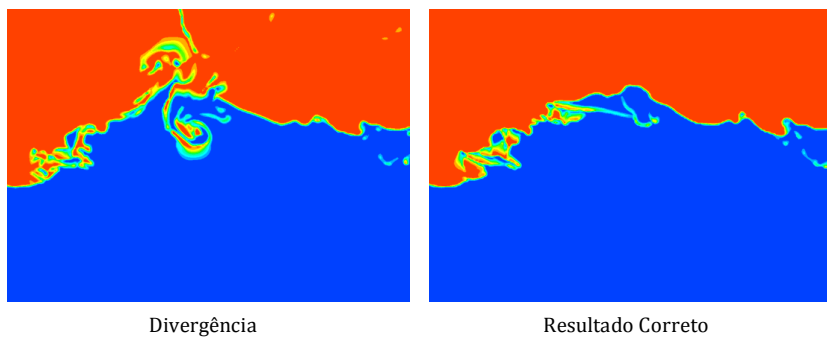


Figura 69. Detalhe da divergência da solução sobre a fronteira de uma partição, e o resultado correto após alterar a posição adicionar mais uma partição.



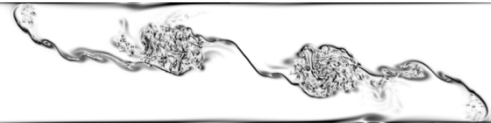
Esta tática acaba por deslocar a fronteira para longe de uma região de gradientes temporais e espaciais elevados. Após isto, os resultados se mostraram suaves novamente, e a simulação seguiu seu curso até o fim. Cabe dizer que a inserção de mais uma partição não aumentou a velocidade de cálculo para esta quantidade de nós.

Figura 70. Evolução temporal do campo de vorticidade.

Tempo =4.03[s]



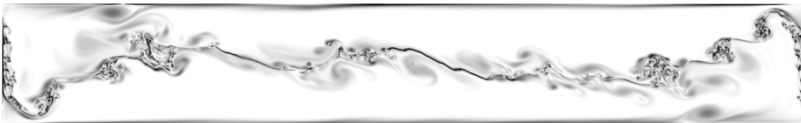
Tempo =8.02[s]



Tempo =12.03[s]



Tempo =16.02[s]



Tempo =20.00[s]



Esta tática também ajuda em uma das dificuldades numéricas que devem ser tratadas que é em relação ao campo de vorticidade que mais intenso junto à interface. Há formação de vórtices em cascata junto da interface e próximo às frentes de avanço em ambos os lados. A divergência assinalada anteriormente ocorre justamente quando um vórtice com uma vorticidade relativa acentuada atravessa uma partição. O campo de vorticidade pode ser analisado na Figura 70.

A intensidade da vorticidade é maior na interface e nas suas vizinhanças, pois os gradientes de velocidades são mais intensos devido ao cisalhamento entre as fases. A interface pode ser praticamente mapeada pelo monitoramento do campo de vorticidade. Embora também haja vorticidade devido à formação de camada limite junto às paredes.

6.3 Instabilidade de Rayleigh-Taylor – RT

O problema anterior poderia muito bem ser classificado como uma instabilidade RT, pois a força motriz é uma diferença de densidade e o cisalhamento da interface gera instabilidades do tipo Kelvin-Helmholtz. Este todavia possui uma diferença de densidades maior o que faz o sistema estar sujeito a uma força motriz - a força de empuxo - mais intensa que no caso anterior.

Este também é um problema de número de Reynolds moderado e passível de uma análise DNS. Mas por questões de esforço computacional ela não será efetuada, mesmo porque não há dados DNS para comparação referente a este problema. Os dados para comparação são fornecidos por Jahanbakhsh, Panahi e Seif (2007). Os autores empregam um método VOF pelo método de volumes finitos com reconstrução geométrica da interface, o método CICSAM. Nenhum modelo de turbulência é empregado, sem, contudo, ser uma simulação DNS, longe disto, o espaçamento de malha se encontra pelo menos há uma ordem de grandeza acima da menor escala do escoamento.

A simulação bidimensional empregou uma malha de 64 x 256 elementos, num total de 16.384 elementos. A mesma malha foi empregada neste trabalho, entretanto, dada a implementação peculiar do ANSYS CFX, o número de nós é o dobro com 16.705 nós para cada plano de simetria. O número de elementos, no entanto, é o mesmo, mas como o método de EbFVM é um método cell vertex,

para cada nó há um volume de controle associado. Logo, 33.410 volumes de controle fazem parte da simulação deste caso neste trabalho. O setup físico é essencialmente o mesmo do modelo anterior, empregando o mesmo passo de tempo, mas com ângulo de contato prescrito igual a 90° . O tempo de computação foi de aproximadamente três dias para 1 segundo de tempo físico. Os parâmetros numéricos são apresentados na Tabela 4, e as propriedades dos fluidos são listadas na Tabela 5.

Tabela 4. Parâmetros de Simulação da Instabilidade de Rayleigh-Taylor.

Número de nós	16,7 mil (por plano)
Passo de tempo	0,001s
Condições de contorno	Não escorregamento e ângulo de contato prescrito igual a 90°
Número de partições	3 partições

Tabela 5. Propriedades Físicas dos Fluidos da Instabilidade de Rayleigh-Taylor.

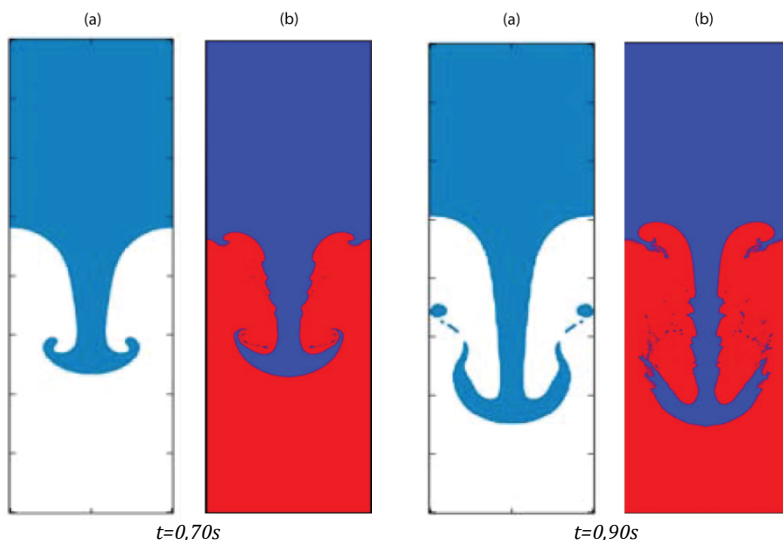
Material	$\rho [kg/m^3]$	$\mu [Pa \cdot s]$
Fluido Leve	0,1694	0,00313
Fluido Pesado	1,225	0,00313

A comparação de resultados são apresentados na Figura 71. Novamente o modelo proposto apresenta um comportamento dinâmico mais acentuado e a formação em cascata de ondulações sobre a interface, e o desprendimento de porções de fluido. A posição da frente de avanço em forma de cogumelo é a mesma em ambos os casos, enquanto as interfaces junto às paredes apresentam posições diferentes com a formação de vórtices não observados no trabalho de Jahanbakhsh, Panahi e Seif (2007).

Duas pequenas porções de fluido reportadas no tempo $t=0.90s$ também não são observados nos resultados dos autores. O que se vê é uma degeneração da interface por cisalhamento e o desprendimento de gotas que são dispersadas e recapturadas pelo fluido que desce. Afirmar uma causa desta discrepância é difícil, pois a formulação dos autores é homogênea com reconstrução da

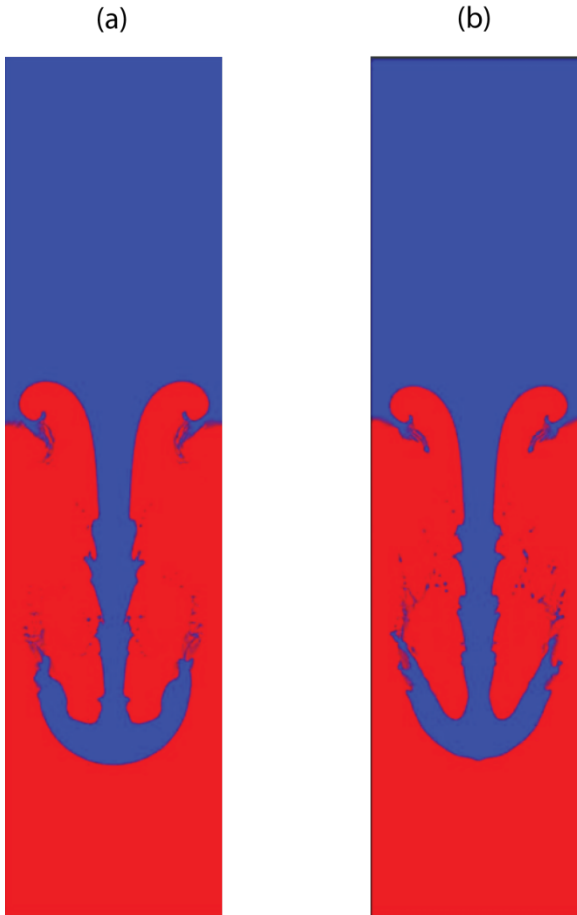
interface, e a deste trabalho heterogênea sujeita a forças na interface. As formulações numéricas também são distintas FVM vs. EbFVM, respectivamente, sendo que o segundo possui um estêncil maior que o primeiro, ou seja, há muitas diferenças que podem ser responsáveis pelas discrepâncias locais dos resultados.

Figura 71. Comparação de resultado para a Instabilidade de Rayleigh Taylor em dois tempos distintos. Em (a) os resultados de por Jahanbakhsh, Panahi e Seif (2007), e em (b) os deste trabalho.



Uma comparação com o modelo de dois fluidos com força de arrasto padrão também foi efetuada a fim de verificar se algum dos comportamentos dos dois modelos apresentados na Figura 71 prevalecem com esta formulação. A Figura 72 compara os resultados do modelo de dois fluidos empregando o modelo de arrasto padrão, e o de projeção do tensor de interface proposto neste trabalho. Novamente o coeficiente de arrasto é fixado em 0,44. O modelo proposto apresenta novamente um comportamento mais complexo e mais cisalhamento na interface, mas os resultados são muito similares.

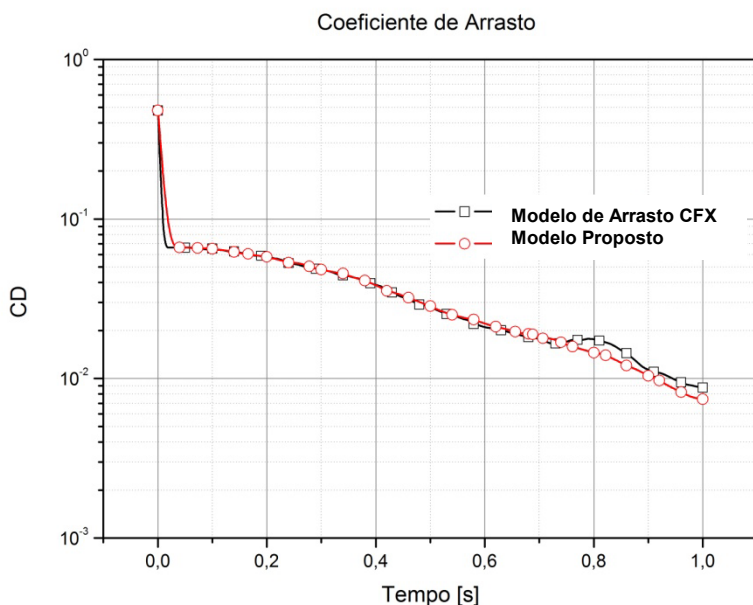
Figura 72. Comparação de resultados obtidos com o modelo de dois fluidos entre (a) modelo de arrasto padrão do CFX (b) modelo tensorial deste trabalho no tempo $t = 0.90s$.



De posse disto, pode-se especular que as diferenças entre uma interface bem delineada e uma caótica e mais dinâmica são provavelmente devido às diferenças dos termos interfaciais e como estes são tratados pelo solver. Entretanto, as diferenças são para as pequenas escalas do escoamento; o comportamento macroscópico ainda se repete nas três abordagens.

O mesmo procedimento descrito na Seção anterior para o cálculo do coeficiente de arrasto é repetido aqui. Os resultados apresentados na Figura 73 apresentam boa concordância. Há novamente uma divergência das curvas a partir do tempo 0,7s onde o comportamento da interface do modelo tensorial começa a se tornar mais complexo e haver desprendimento de fluido da interface. Todavia, esta diferença é bem mais sutil que no caso anterior e do ponto de vista quantitativo pode-se dizer que os modelos são equivalentes.

Figura 73. Caso da instabilidade de Rayleigh-Taylor. Comparação do coeficiente de arrasto na interface obtido por meio do modelo tensorial proposto neste trabalho e o modelo de arrasto padrão existente do ANSYS CFX.



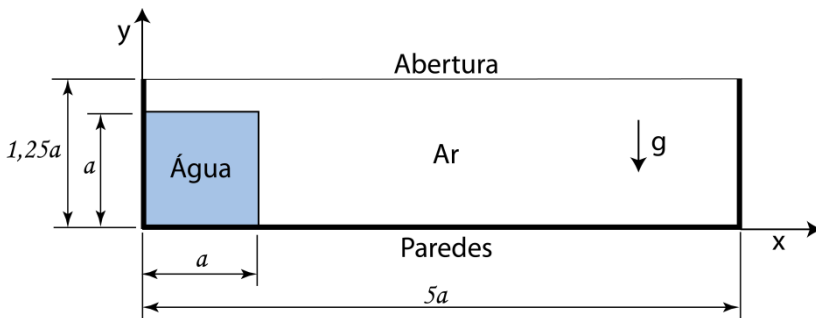
6.4 Rompimento de Barreira - RB

Este problema, diferentemente dos precedentes, possui uma alta diferença de propriedades física e escalas de velocidade maior. Ainda assim, não se fez uso de um modelo de turbulência, e a

convergência deste caso é mais delicada. O processo se dá de forma muito rápida, em cerca de 0,2 segundos. A variação brusca dos campos tende a gerar oscilações na solução resultando em divergência, e foi o que ocorreu nas fases iniciais. Algumas alterações em parâmetros de controle do solver e a redução do passo de tempo em dez vezes (0,0001s) foram suficientes para estabilizar a solução. O tempo de computação foi de aproximadamente 10 dias. A Figura 74 apresenta novamente o domínio de cálculo, e a Tabela 6 as propriedades físicas empregadas.

Jahanbakhsh, Panahi e Seif (2007) demonstram que não há ganhos significativos entre uma simulação bi ou tridimensional que justifiquem o esforço computacional. O domínio 2D foi subdividido em 41 x 161 nós, ou 6400 elementos ao todo. Para o ANSYS CFX tem-se 13.302 nós, ou volumes de controle. Neste problema, $a = 0,05715 \text{ m}$. Para esta simulação a parte superior do domínio foi fixada como um condição de contorno de abertura com pressão prescrita igual a 0,0Pa e fração volumétrica de ar igual a 1 (hum), permitindo que o ar possa fluir da maneira natural para dentro ou para fora do domínio sem restrições. A Tabela 7 apresenta o resumo dos parâmetros numéricos.

Figura 74. Domínio de cálculo do problema de rompimento de barreira, onde $a = 0,05715\text{m}$.



Neste caso em particular, um fenômeno ocorreu de forma sistemática: a interface sempre era literalmente rompida no instante de 0,112 segundos - um comportamento não visto nem experimental nem numericamente. A princípio supôs-se uma

instabilidade turbulenta não amortecida e uma abordagem LES foi empregada, e o mesmo comportamento no *mesmo instante* de tempo ocorria. Após uma análise cautelosa, o campo de vorticidade apresentou uma correlação com o fenômeno. A interface era cisalhada pelos vórtices gerados sobre a interface a ponto de romper a mesma.

Tabela 6. Propriedades Físicas dos Fluidos do Rompimento de Barreira.

Material	$\rho [kg/m^3]$	$\mu [Pa \cdot s]$
água	1000,00	0,001
ar	1,000	0,00002

Tabela 7. Parâmetros de Simulação do Rompimento de Barreira

	6,6 mil (por plano)
Número de nós	26,0mil (por plano) (ref2x) 103,2mil (por plano) (ref4x)
Passo de tempo	0,0001s
Condições de contorno	Não escorregamento e ângulo de contado prescrito igual a 90° nas paredes
	Abertura na tampa
Número de partições	3 partições

Apesar deste comportamento local distinto, tanto a frente quando a coluna de água continuavam inalteradas em seu deslocamento como descrito na literatura. A tensão superficial (ST) que até então não havia sido empregada, foi considerada neste caso, pois como as forças tangenciais estavam rompendo a interface, a força de tração da tensão superficial poderia equilibrar o sistema, tal como na condição de salto completa com tensão na interface (*viz.* Equação (139)). A adesão à parede também foi considerada

novamente com ângulo de contato prescrito de 90° . O coeficiente de tensão interfacial água-ar empregado é igual a $0,071\text{N/m}$.

Assim, outro caso empregando a mesma malha adicionando a tensão superficial foi analisado, e a degeneração da interface não mais ocorreu. A mesma configuração foi testada empregando malhas com refino igual a duas (ref2x) e quatro vezes (ref4x), respectivamente. Os resultados de todos estes casos são comparados entre si e aos dados experimentais e numéricos da literatura para sua validação. Na Figura 75 apresenta-se a variação da posição da frente de líquido com o tempo, e na Figura 76 a variação da altura da coluna de líquido.

Todos os resultados apresentam boa concordância, mas o último caso, com a malha mais refinada e considerando a tensão superficial teve um desempenho melhor, principalmente em relação a evolução da altura da coluna. Os mesmos desvios dos resultados experimentais são observados em outros trabalhos na literatura e atribuídos por diversos autores a ruídos experimentais e defasagem nas medidas (HIRT e NICHOLS, 1981; JAHANBAKHSI, PANABI e SEIF, 2007; LIND *et al.*, 2012; PARK *et al.*, 2012; CHUNG, 2013).

Isto pode ser visualizado nas imagens do trabalho de Martin e Moyce (1952) exibidos na Figura 77. O septo que mantém a coluna de líquido, mesmo após romper, cria uma descontinuidade na interface retendo parte do líquido ainda na coluna, o que reforça a hipótese de defasagem.

O último caso simulado (Numérico ST ref4x) foi o que apresentou o melhor resultado. A sequência temporal do colapso da coluna para este último caso é mostrada na Figura 78 (a espessura é apenas uma extrusão para efeitos de visualização).

Figura 75. Gráfico comparativo de resultados da variação da posição da frente de líquido com o tempo.

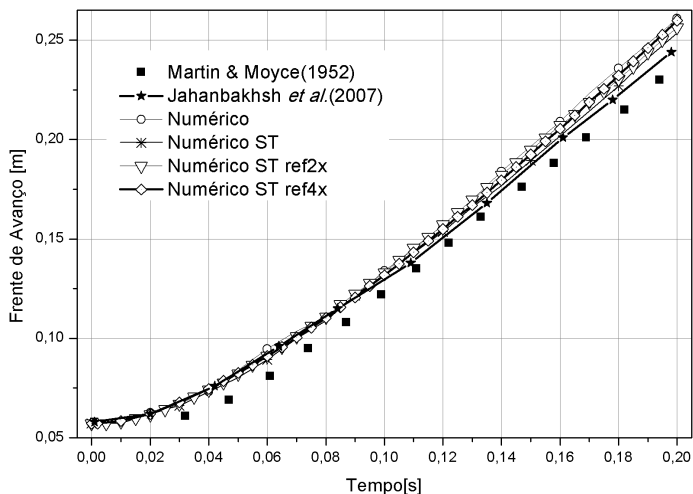


Figura 76 Gráfico comparativo de resultados da variação da altura da coluna de líquido com o tempo.

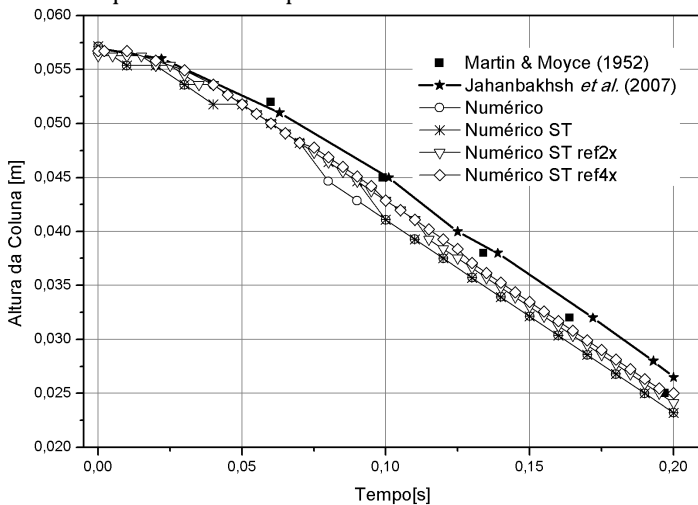
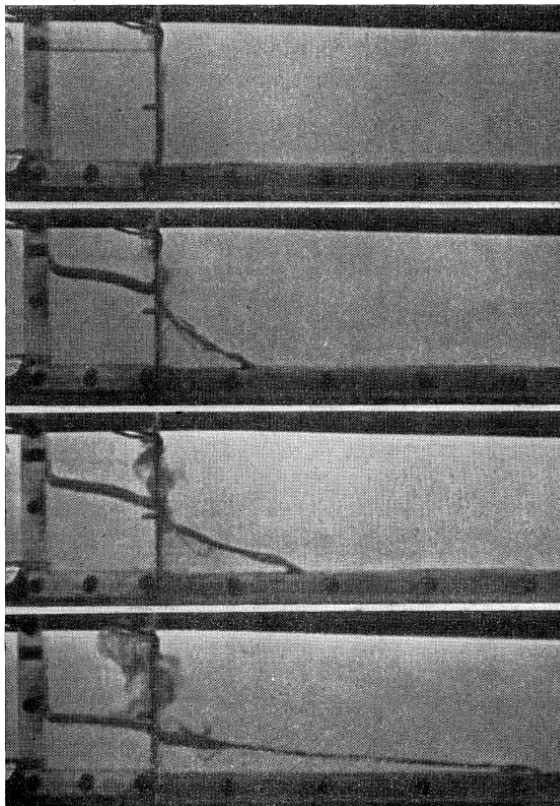
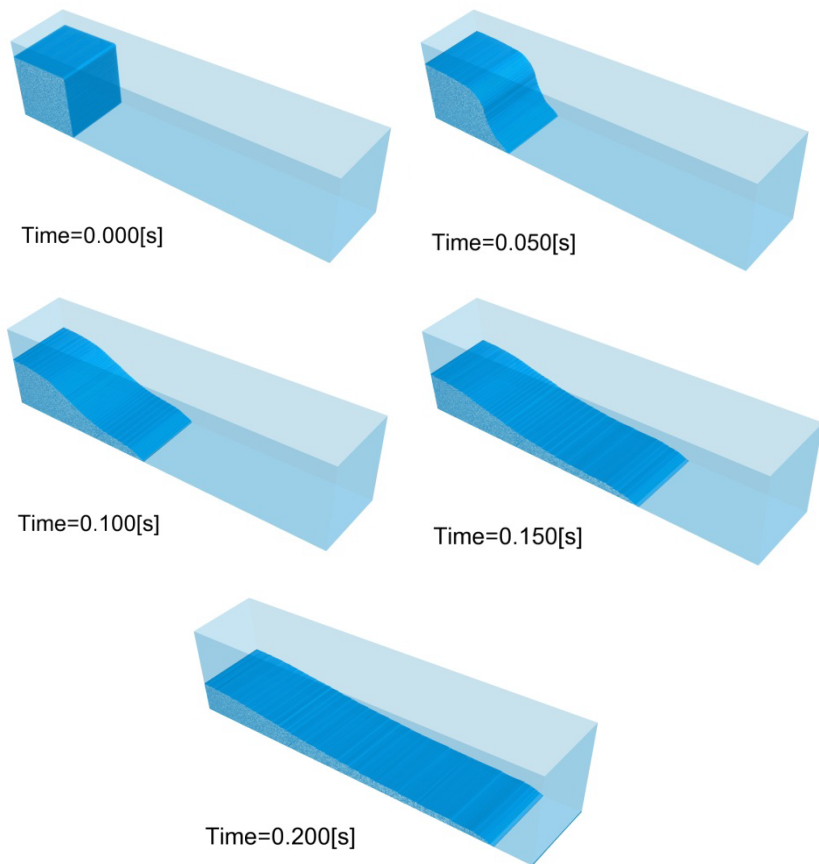


Figura 77. Imagens do experimento de Martin e Moyce (1952). O septo de papel retarda parte da coluna de líquido.



De todos os trabalhos citados para este problema, nenhum emprega o modelo de dois fluidos, e em sua maioria são formulações VOF com reconstrução geométrica da interface. O emprego de algum modelo de turbulência também é algo que deve ser levado em conta. Park e Colaboradores (2012) analisaram a influência da intensidade turbulenta neste problema empregando uma formulação VOF e modelos de turbulência URANS. Um exemplo dos seus resultados é apresentado na Figura 79.

Figura 78. Evolução temporal do rompimento de barreira obtido por este trabalho (Numérico ST ref4x).



A intensidade turbulenta empregada na inicialização alterava o comportamento da interface como mostrado, criando pequenas oscilações da frente, mas sem, contudo, alterar macroscopicamente a posição da frente. Esta oscilação não ocorre nos resultados deste trabalho.

Figura 79. Oscilações da interface na frente de avanço da coluna de líquido obtidas numericamente empregando modelo URANS com intensidade turbulenta de 20% Park *et al.* (2012).

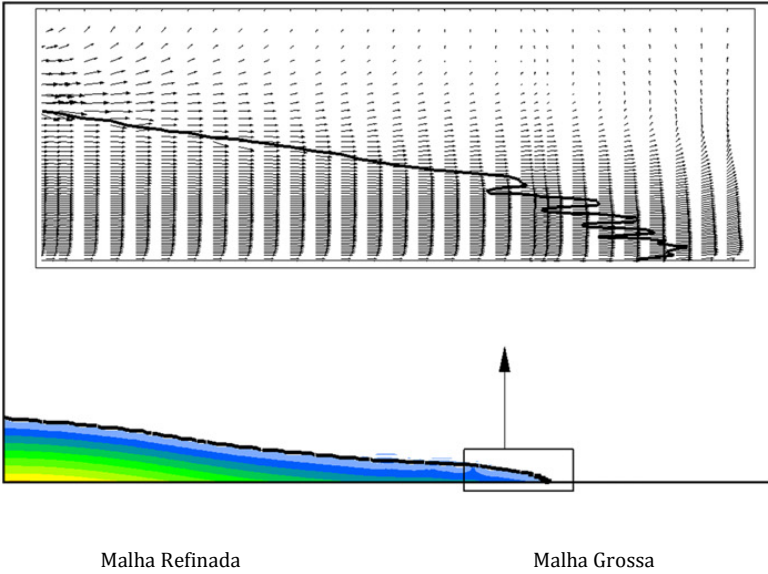
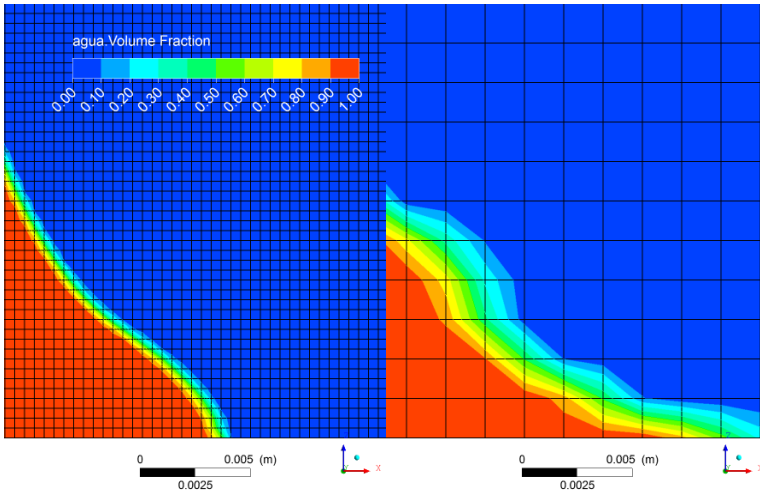


Figura 80. Aumento da resolução da interface com o refinamento de malha.



A resolução da malha também afeta o comportamento da interface. A malha mais grosseira empregada (41 x 161 nós) não permite que o algoritmo de compressão da interface do ANSYS CFD seja eficiente, e os refinamentos posteriores (até 161 x 641 nós) melhoram a resolução e até mesmo a condição de adesão com ângulo de contato prescrito se torna evidente. Isto é comprovado pela análise da Figura 80. Entretanto, a interface sempre se mantém espalhada por dois espaçamentos de malha – efeito do esquema de compressão da interface.

É interessante também mostrar o problema de ruptura da interface gerado na primeira simulação. Na Figura 81 apresenta-se uma comparação entre os campos de fração volumétrica e o de vorticidade. A interface apresenta-se rompida como se atingida por objeto. Este “objeto” é a colisão de um vórtice sobre a mesma, a estrutura mais escura. A intensidade do campo é 1000 vezes mais intenso que as regiões mais claras. Sempre que ocorre uma ruptura deste tipo, o campo de vorticidade neste ponto é mais intenso que nas vizinhanças.

As estruturas sobre a interface são estruturas rotativas e contrarrotativas e cisalham a interface criando gradientes de velocidade mais intensos. Este efeito de ruptura não é físico, ou é intrínseco à formulação do modelo proposto – função do tensor gradiente de velocidade – ou do tratamento numérico dado aos termos fontes pelo simulador ANSYS CFX. O mesmo modelo deveria ser implementado em outras plataformas para se definir a origem deste efeito, e outras formulações matemáticas similares testadas.

Contudo, o efeito pode advir apenas do desbalanço das forças tangentes à interface e a estabilização da interface após a introdução da força de tensão interfacial reforça esta hipótese.

O caso mais refinado (ST ref4x) apresentou convergência estável e contínua, sem oscilações. E apesar de se ajustar bem aos dados experimentais, optou-se por deixar evoluir mais no tempo, até 0,40 segundos. O objetivo era observar o comportamento do modelo durante a colisão da frente líquida com a parede. O modelo se comportou bem sem apresentar oscilações ou dificuldades de convergência e o seu comportamento físico foi o esperado. A Figura 82 ilustra parte desta colisão.

Figura 81. Ruptura da interface iniciada em $t = 0,112s$ e magnitude do campo de vorticidade.

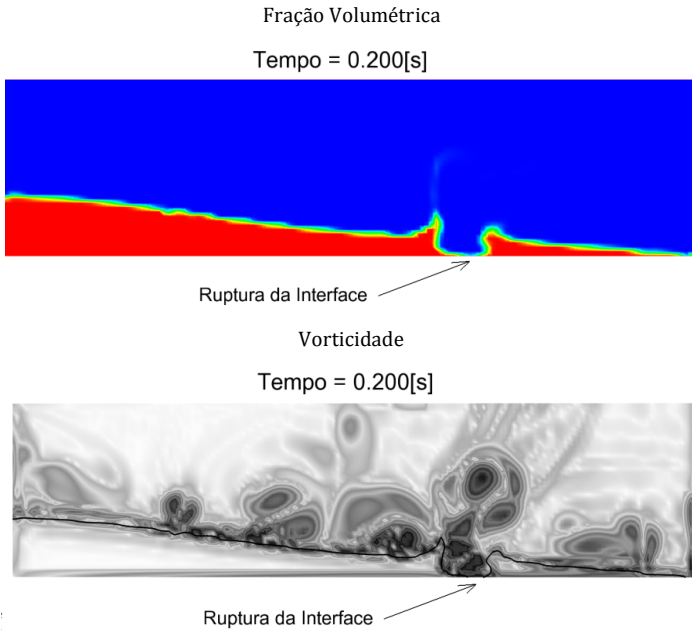
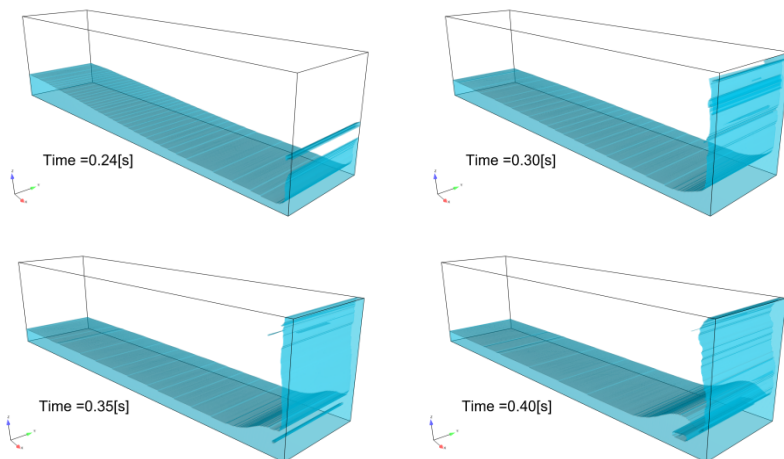


Figura 82. Colisão da frente de líquida com a parede. – caso ST ref4x.



Da Figura 83 a Figura 84 mostra-se a evolução do campo de vorticidade desde o colapso da coluna líquida até a colisão da frente. Estruturas de vórtices são geradas junto à interface, unindo-se e gerando estruturas menores. Na região onde a interface se rompia ainda há a formação de uma grande estrutura rotativa, mas sem a ruptura da interface.

Devido a este caso possuir base experimental e numérica na literatura para sua validação, a comparação entre modelo proposto neste trabalho e o de arrasto clássico não foi efetuada como nos anteriores. Sendo que o fator preponderante que pesou nesta decisão foi o esforço e tempo computacional. A curva para o coeficiente de arrasto poderia ser calculada como nos anteriores, mas não há base comparativa na literatura para que se justifique este procedimento, que também demanda certo esforço computacional.

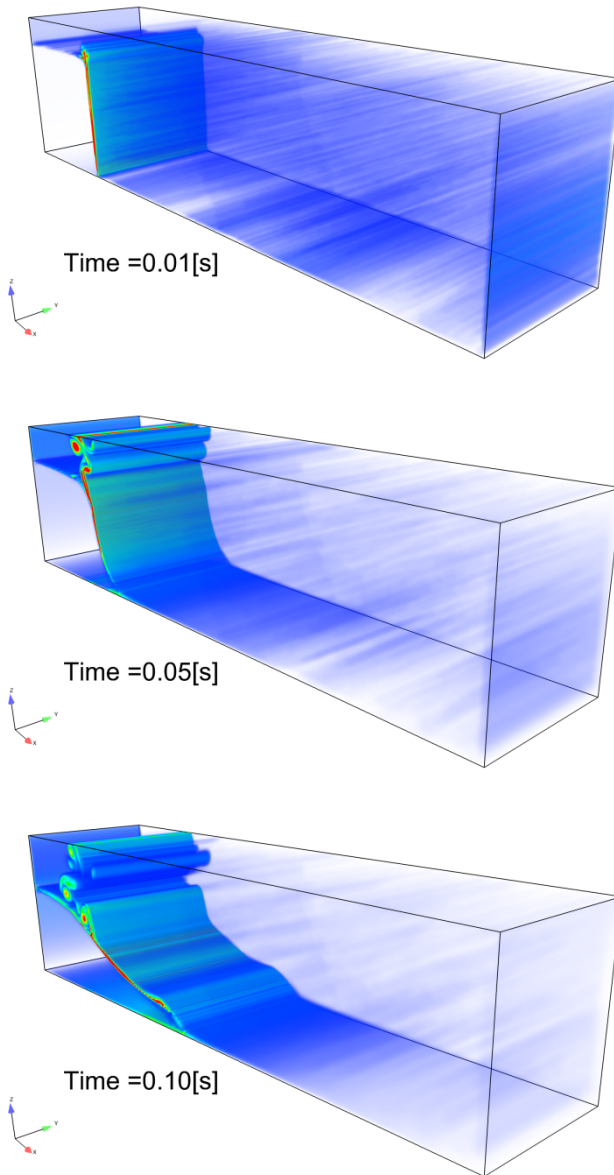
Figura 83. Evolução do campo de Vorticidade caso ST ref4x – Parte 1.

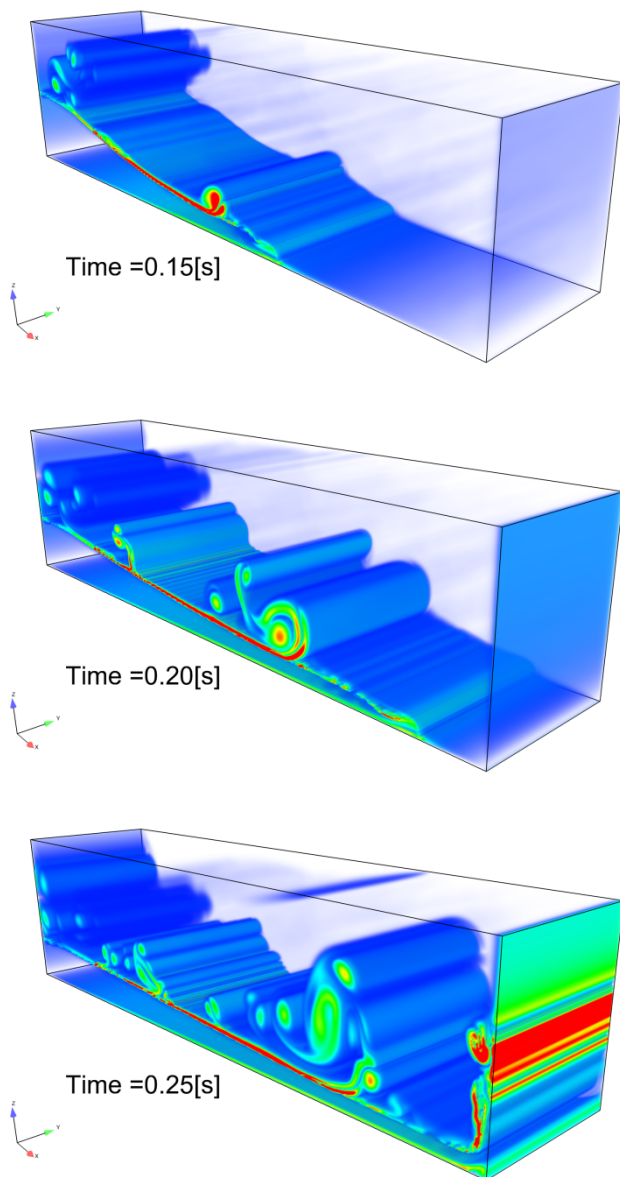
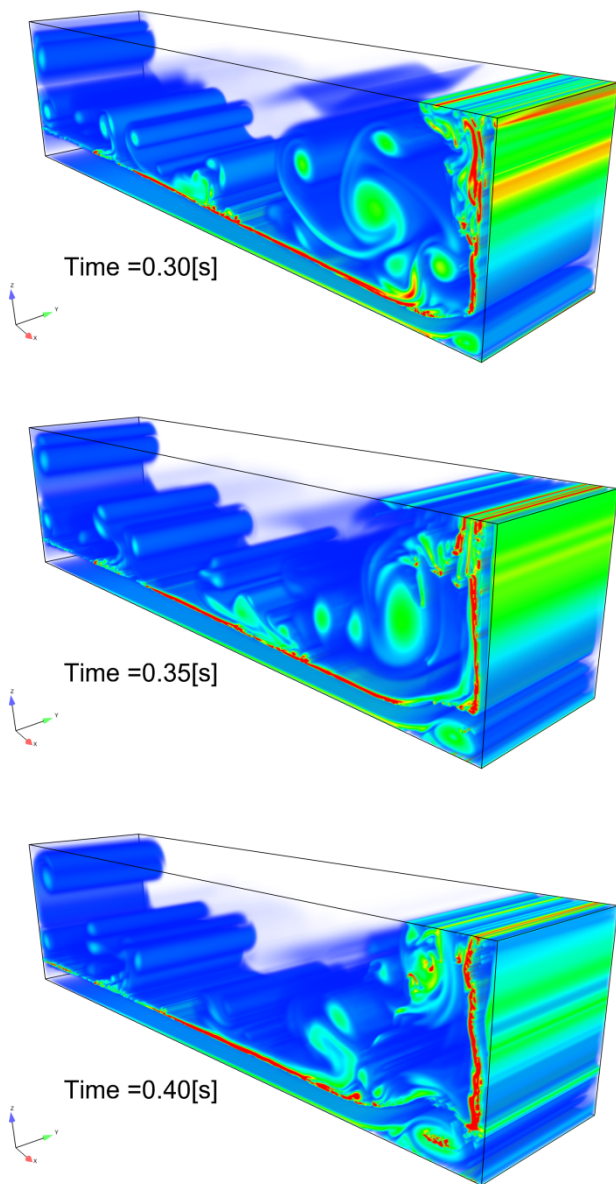
Figura 84. Evolução do campo de Vorticidade caso ST ref4x – Parte 2.

Figura 85. Evolução do campo de Vorticidade caso ST ref4x – Parte 3.

6.5 Coluna de Bolhas – CB

Este problema é um dos mais complexos tanto do ponto de vista físico quanto computacional. Colunas de bolhas são de grande importância industrial e vários equipamentos envolvem algum tipo de interação gás-líquido. As diferenças de propriedade são as mesmas do problema anterior, mas a morfologia do escoamento neste caso é polidisperso. As perguntas que sempre surgem na análise de um problema como este são:

- Qual o melhor modelo de partícula?
- Quais as correlações mais apropriadas?
- Quais forças considerar?
- Qual o melhor modelo de turbulência?
- É possível usar uma aproximação 2D?

Entre tantas outras de maior ou igual importância de acordo com o caso. E este é um dos principais problemas multifísicos que vem sendo estudado. Descrever como se dá a dispersão do gás no seio líquido é importante para a quantificação da taxa de transferência de massa e calor entre as fases, por exemplo. A configuração do problema é mostrada Figura 86.

O problema consiste em um tanque contendo água preenchendo um volume de 45 x 20 x 4cm. Na sua base, ao centro, por um *sparger* central com diâmetro de 2mm flui uma corrente de ar a vazão constante. As bolhas que se formam se dirigem à superfície livre do fluido. O tanque é aberto à atmosfera. Após algum tempo a pluma de gás começa a exibir um padrão sinuoso e a oscilar em uma ou mais frequências características que dependem das condições de operação. A configuração da coluna – plana e achatada – permite que o problema físico seja quase bidimensional, e possibilitando sua análise numérica por esta abordagem.

A configuração empregada aqui é apresentada pela 1ª vez no trabalho de Pflieger e Colaboradores (1999) em um aparato como descrito aqui e medição por Anemometria Laser por efeito Doppler (LDA), Velocimetria por Rastreamento de Partículas (PTV) e Velocimetria por Imagem de Partículas (PIV). A abordagem numérica empregou a versão 4.2 do CFX. O modelo utilizado foi o de dois fluidos juntamente com o modelo $k - \varepsilon$.

Figura 86. Configuração da Coluna de Bolhas. As linhas tracejadas indicam os locais de amostragem, bem como a posição do ponto de monitoramento.

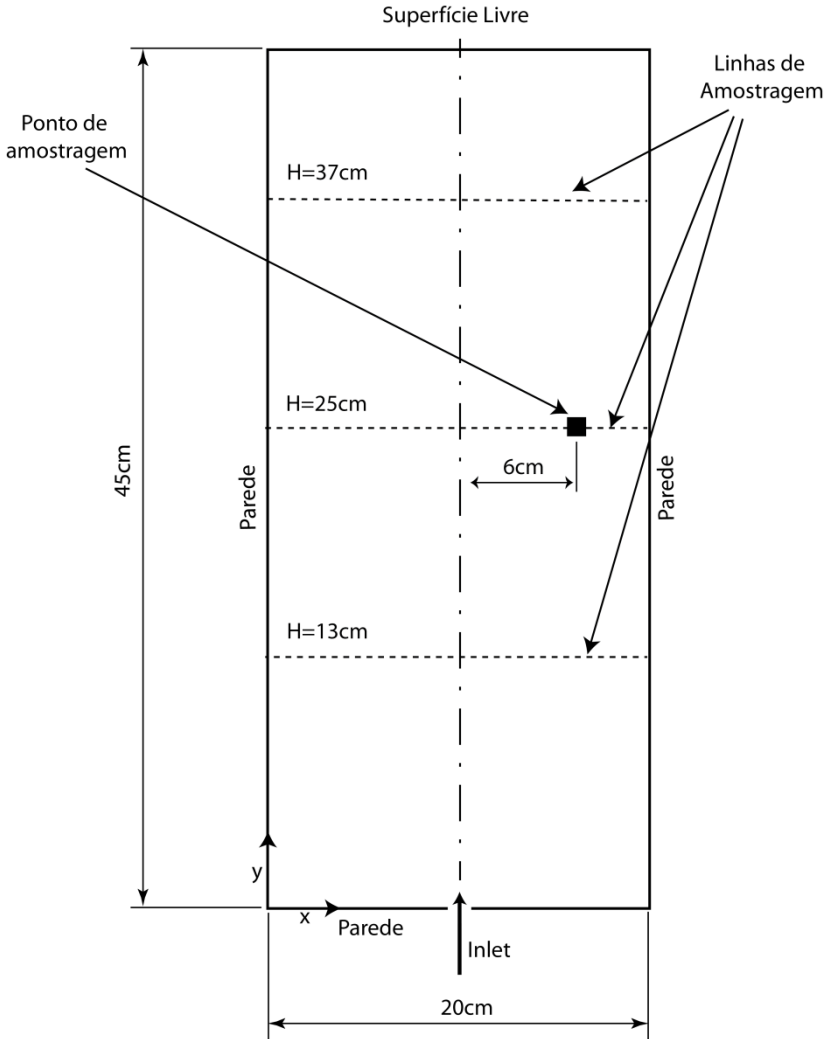
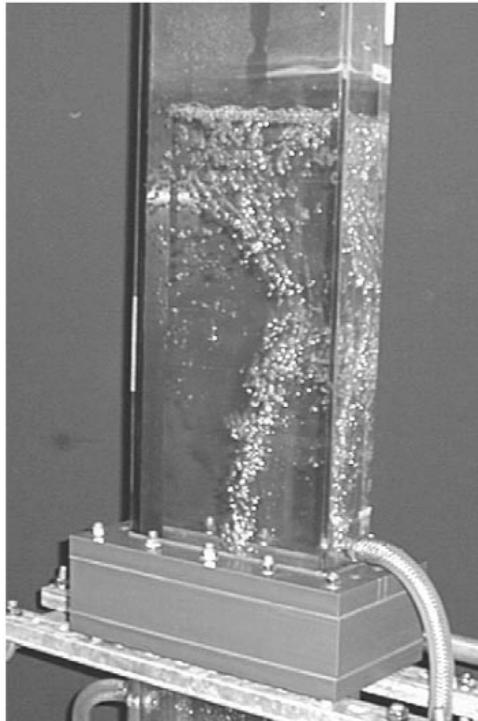


Figura 87. Aparato experimental da Coluna de Bolhas (Pleger *et al.*, 1999).



Experimentalmente, todas estas análises são feitas em termos de médias temporais. Quando o sistema entra em regime uma amostragem temporal de longa duração é efetuada e então os perfis médios são comparados. Numericamente o mesmo deve ser efetuado, e com uma taxa de amostragem adequada, logo, o custo computacional é considerável. Caso isto não seja feito, não é possível uma comparação fidedigna, mesmo que os campos instantâneos sejam numericamente bem resolvidos em cada passo de tempo.

A taxa de amostragem deve ser tal que permita a captura das frequências características de um determinado sinal que ele seja comprometido, no caso, a frequência de oscilação da pluma de gás.

Esta taxa pode ser determinada por meio do *Teorema de Nyquist* enunciado aqui de uma forma simples:

Teorema: *A frequência de amostragem deve ser pelo menos duas vezes maior que a maior frequência contida no sinal,*

$$f_a \geq 2f_s , \quad (325)$$

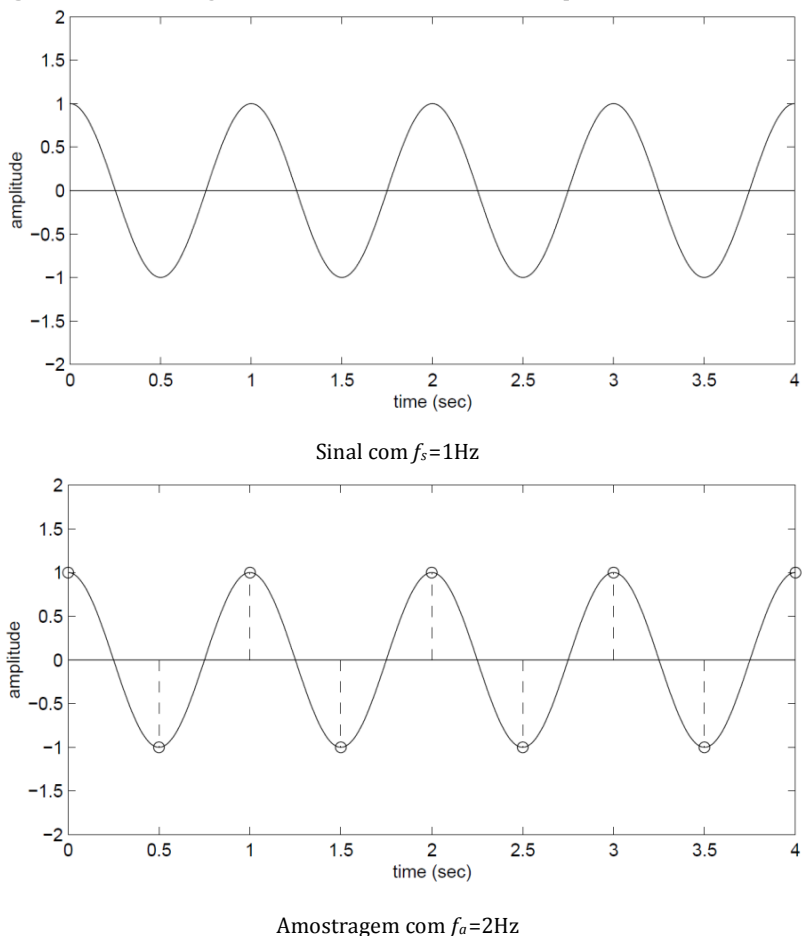
onde f_a é a frequência de amostragem do sinal contendo a frequência

f_s □

Esta taxa de amostragem deve ser respeitada, pois caso contrário, além de ruído a informação estará contaminada. Esclarecendo: considere o sinal apresentado na Figura 88 com frequência característica de 1Hz. Pelo Teorema de Nyquist a taxa de amostragem deve ser de no mínimo 2Hz, sem a qual não se poderia capturar os picos, como se pode observar pela figura. Obviamente uma amostragem maior geraria uma descrição melhor do sinal por isso de forma intuitiva se pode aceitar a validade da Equação (325).

Já na Figura 89, o sinal é amostrado com uma frequência inferior ao critério de Nyquist e esta amostragem não é capaz de distinguir entre um sinal de 1Hz e um outro de 2Hz. A aplicação de uma Transformada Rápida de Fourier (FFT) sobre esta amostragem implicaria em erro nos resultados em relação à frequência, pois, grosso modo, a repetição em intervalos de tempo regulares das mesmas dos mesmos padrões define a frequência, logo o resultado de uma FFT seria uma frequência característica de 3Hz e não de 1Hz.

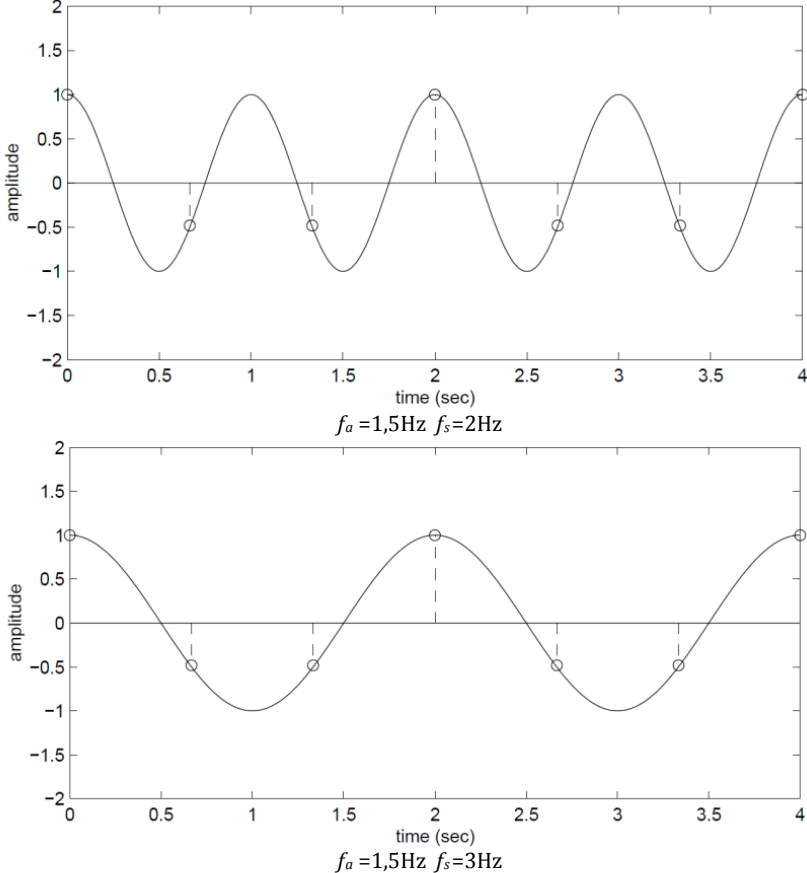
Para a configuração deste problema os períodos de oscilação da pluma encontram-se entre 16 e 25s, o que corresponde a frequências de 0,0625 a 0,04Hz, respectivamente. Isto implica em uma amostragem mínima de pelo menos 0,125Hz ou 8 amostras por segundo, ou, em termos práticos, uma amostragem a cada 0,1 segundo. Obviamente uma amostragem maior é sempre preferível para minimizar erros e ruídos, principalmente em oscilações com mais de um modo ou frequência característica. Para este caso, a frequência de amostragem empregada é de 0,02Hz ou 50 amostras por segundo, mais de 6 vezes a frequência mínima.

Figura 88. Amostragem em 2Hz de um sinal com frequência de 1Hz.

O modelo empregado na simulação da coluna é o de partícula representado pela Equação (254) considerando o Ar como fase primária fixando inicialmente a constante $C_T = 1$. Nenhum modelo de turbulência foi empregado.

Este problema é sob o ponto de vista numérico de dificuldade considerável, principalmente devido às condições de contorno e a inicialização. A superfície livre pode assumir várias condições de contorno: saída, abertura ou desgaseificação – sendo esta última possível somente na formulação heterogênea.

Figura 89. Amostragem abaixo do critério de Nyquist, a 1,5Hz. Em (a) o sinal de 1Hz e em (b) um sinal de 3Hz. Não se pode distinguir um do outro pela amostragem



Fisicamente, nenhuma porção de líquido deve deixar o domínio e o ar deve eclodir pela superfície livre até o ar atmosférico, e devido ao arrasto, a fase líquida é arrastada para cima. E chegando na superfície livre, ela deve recircular para baixo, logo uma condição de saída não é muito indicada, pois a recirculação no líquido no topo cria um gradiente favorável a entrada de fluido. Quando isto ocorre o solver automaticamente considera a região como uma parede com condição de escorregamento. Mas isto não é recomendado, visto ser a física desta condição realmente para saída de fluido.

A condição de abertura também é possível, mas devido a possível entrada de fluido as frações volumétricas das fases devem ser prescritas. A fração de água acima dela é zero e a de ar igual a um. Todavia, isto também gera problemas de convergência, pois uma interface irá parecer sobre a condição de contorno de maneira conturbada e todos os termos fontes associados a ela.

Considerar que a coluna está preenchida com água infinitamente para cima é mais estável, mas gera um problema de comportamento físico, pois não há, assim, uma superfície livre e a fase líquida não recirculará. Ela será arrastada juntamente com a fase gasosa para fora do domínio e entrará novamente por ela nas regiões onde o gradiente de pressão for favorável – geralmente junto às paredes – com duas circulações em “U” de ambos os lados da pluma, o que fisicamente não ocorre.

A condição que é fisicamente mais apropriada é a de desgaseificação, pois permite que o líquido tenha uma restrição sem atrito – a superfície livre – e crie duas zonas de recirculação fechadas em forma de “O”, e ao mesmo tempo permite somente que a fase dispersa – o ar – saia por ela, sendo assim, uma condição de saída somente para a fase dispersa. Esta condição é a empregada na literatura. Entretanto, ela padece de um inconveniente: a inicialização.

O regime de escoamento é incompressível, pois a coluna tem uma altura pequena e que não justifica o tratamento compressível do ar. Inicialmente a coluna está cheia de líquido – a água – e ar começa a ser injetado pelo *sparger* na base. Neste instante o volume de fluido dentro do domínio começa a aumentar proporcionalmente à vazão volumétrica de entrada. Como as fases não são compressíveis, oscilações começam a ocorrer na solução e até a divergência da mesma, pois nesta situação o problema fica mal posto sob o ponto de vista físico.

Outra opção teoricamente factível é impor uma condição de parede com escorregamento na superfície livre, e tanto a entrada e a superfície livre possuem termos fontes heterogêneos (que são aplicados localmente) para a saída e entrada de ar. Mas apesar de o ANSYS CFX em teoria permitir esta opção, um erro do software não tornou esta opção viável. Assim que a direção normal era estabelecida durante o setup físico, toda a configuração da simulação se perdia ocorrendo encerramento compulsório do

programa. Isto foi observado nas versões 12, 12.1, 13 e 14.5, a mais recente até o término do trabalho.

O protocolo observado na literatura é permitir ao sistema linear – mesmo instável – iterar até que a pluma de ar alcance a superfície livre onde começa então a deixar o domínio e, conseqüentemente, a permitir que se feche o balanço de massa. Uma vez estabilizada a solução, inicia-se a simulação propriamente dita e as análises de tempo longo (LTA).

O protocolo numérico adotado foi o seguinte:

- Inicializa-se o problema com a coluna totalmente preenchida de água, uma vazão de gás menor e com condição de abertura com fração de ar igual a zero na superfície livre (coluna de altura infinita);
- Aplicação do modelo homogêneo em regime permanente com o termo de força tensorial (modelo de mistura) até que a pluma de gás se desenvolva alcançando a superfície livre;
- Troca da condição de abertura para a de desgaifificação;
- Troca do modelo homogêneo para o heterogêneo com modelo de densidade de força interfacial apropriado usando o campo homogêneo como condição inicial;
- Realizar iterações no tempo até que as recirculações e oscilações comecem a se estabelecer;
- Aumentar linearmente a vazão de gás até seu valor físico experimental;
- Início do processo de amostragem temporal de tempo longo (LTA).

Este procedimento foi desenvolvido após uma série de testes, pois o modelo de dois fluidos empregando arrasto padrão do ANSYS CFX nem o modelo tensorial aqui proposto não obtiveram convergência. Este protocolo foi o que se mostrou efetivo.

6.5.1 Parâmetros Físicos

As propriedades físicas dos fluidos são apresentadas na Tabela 8.

Tabela 8. Propriedades Físicas dos Fluidos da Coluna de Bolhas

Material	$\rho [kg/m^3]$	$\mu [Pa \cdot s]$
água	997,0	$8,899 \times 10^{-4}$
ar	1,185	$1,831 \times 10^{-5}$

A vazão de ar é igual a 0,8 l/min, o que resulta em uma velocidade superficial de 0,167cm/s. Entretanto, deve-se ressaltar que esta velocidade superficial é definida pela razão entre a vazão de gás e a seção transversal da coluna (20cm x 4cm), mas no caso de uma simulação bidimensional, deve-se atentar para a condição de contorno de entrada. O diâmetro de bolha foi fixado em 5mm. Nestas condições o Reynolds de partícula é ~ 1000 . Considerando a maior escala como a largura da coluna igual 0,2m, a escala de Kolmogorov para este escoamento é de 1,125mm.

O ANSYS CFX é de formulação tridimensional e um caso 2D é efetuado com uma fatia do domínio *possuindo uma espessura* que pode ser qualquer, desde que não haja nós entre as faces que possuem condição de simetria. O domínio foi gerado com 1mm de espessura. Caso a mesma vazão seja prescrita (0,8 l/min) a velocidade superficial atravessando esta área de 20cm x 0,1cm seria de 6,67cm/s e no *sparger* (2mm x 1mm) cerca de 6,67m/s. Deve-se calcular o volume de gás que atravessa a seção de 1mm de espessura, ou seja, 0,02 l/min. Isto retorna a mesma velocidade superficial de 0,167cm/s, mas a velocidade de entrada no *sparger* cai para 0,167m/s, mais condizente com a física do problema. Esta condição de velocidade é para ambas as fases, mas a fração volumétrica de água é igual à zero significando uma velocidade superficial de água nula na entrada. As condições de parede são de não escorregamento e a pressão na superfície livre é igual a 0,0Pa.

6.5.2 Inicialização

Como ponto de partida, uma malha grosseira hexaédrica é empregada contendo 3.840 nós para cada plano de simetria. Como a formulação é Cell Vertex, o número de volumes de controle é igual ao número de nós. A malha de inicialização é mostrada na Figura 90. A distribuição não é uniforme, a parte central é mais refinada bem como a inferior, com um leve refino nas paredes laterais .

Esta malha é mais do que suficiente para gerar um campo inicial de velocidades, pressão e frações volumétricas para que se possa iniciar uma análise numérica. O fato da malha ser grosseira não importará nesta etapa, uma vez que será apenas uma estimativa como condição inicial, e os dados são interpolados na nova malha mais refinada. O tempo de computação nesta situação é relativamente rápido com 3000 iterações em pouco mais de 15 minutos empregando solução acoplada fixando o resíduo médio quadrático (RMS) em 0,001, o valor padrão do solver. A velocidade de entrada foi fixada em 0,167cm/s (100x menor) e o *passo de tempo físico* de 0,01 s²⁰, para manter todas as equações no mesmo nível iterativo.

Os resultados da inicialização podem ser analisados na Figura 91. Apesar da mancha dispersada, as frações volumétricas são baixas em torno de 1%. Já em (b) o efeito da condição de abertura é bem notório: líquido sai pelo centro e é repostado por um fluxo descendente junto às paredes e novamente subindo junto com a corrente de gás criando o padrão de recirculação em “U”. As velocidades também são pequenas, com uma média de 4cm/s.

²⁰ Embora a simulação seja em regime permanente, a discretização temporal é mantida e o passo de tempo age como um parâmetro de relaxação e ele não precisa ser constante nem mesmo uniforme para todos os volumes de controle ou equações de conservação (Falso Transiente)

Figura 90. Malha de Inicialização de Coluna de Bolhas. A região central é mais refinada em decorrência da região de entrada.

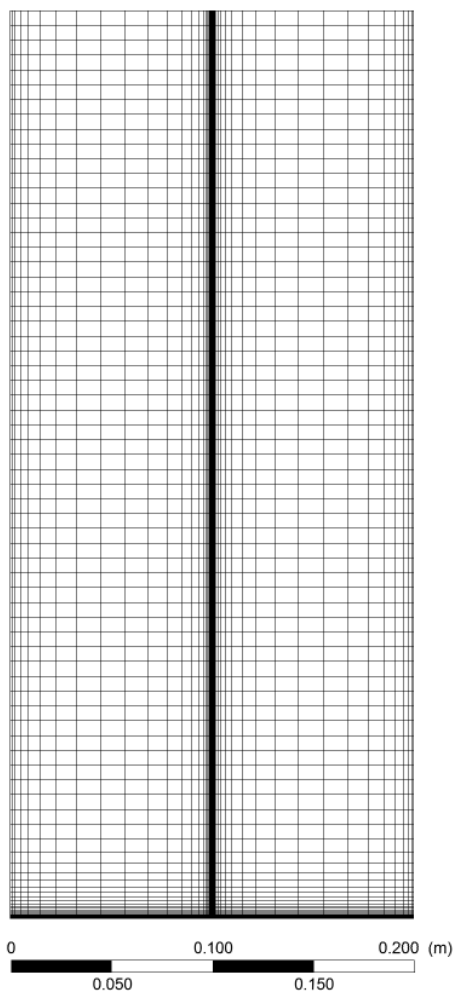
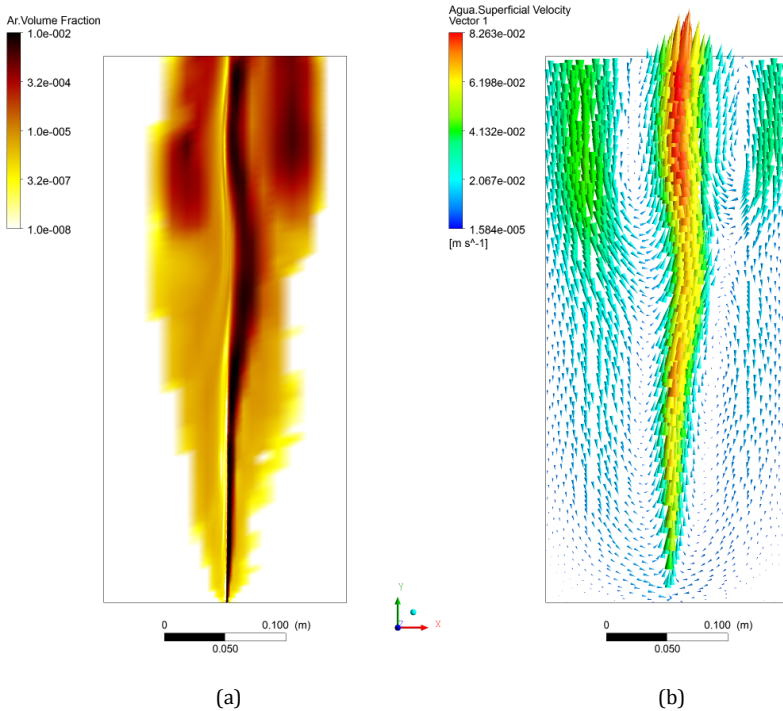


Figura 91. Resultado para o Modelo Homogêneo em regime permanente. Em (a) o campo de Fração Volumétrica de Ar, e em (b) o campo de Velocidade Superficial de Água.



A abordagem transiente usando esta configuração física inicialmente apresenta-se interessante, mas logo o sistema tende a um comportamento complexo devido os choques entre correntes ascendentes e descendentes de líquido e pequenas oscilações na pluma que logo aumentam em amplitude. Em pouco tempo todo o do domínio possui ar disperso em um padrão complexo.

6.5.3 Abordagem Transiente

A evolução temporal desta configuração é apresentada na Figura 92. Além de a pluma ser dispersada por todo o domínio, ela não é contínua. Este comportamento é ocasionado principalmente

pelos correntes de circulação. Além do mais, a fração volumétrica evolui no tempo tal como um escalar passivo, ou um corante sendo injetado, o que era de se esperar com o emprego do modelo homogêneo. Assim, a simulação de regime permanente apresentada na Figura 91 é realmente melhor opção para a inicialização.

Somente o efeito de troca da condição de contorno para a de desgaseificação teria um impacto mais drástico, pois criaria subitamente um desvio na corrente líquida. Este comportamento complexo é muito similar ao reportado por Bech (2005a) onde amplitude das oscilações são fortemente influenciadas pelo modelo de turbulência empregado e o termo de dispersão turbulenta na equação de conservação da massa. A Figura 93 apresenta a comparação entre os dois trabalhos. Do ponto de vista matemático ambos os modelos são muito similares, sendo interessante a comparação. O modelo de turbulência empregado por Bech (2005a) neste caso foi o de comprimento de mistura de Prandtl.

Qualitativamente o padrão de dispersão é o que apresenta similaridades. Mas segundo Bech, o padrão oscilatório é obtido por meio da calibragem adequada do modelo de turbulência e do valor do coeficiente de dispersão turbulenta, sem o qual a pluma não oscilaria.

O modelo de turbulência também é responsável por atenuar o comportamento dinâmico da pluma, pois a viscosidade turbulenta aumenta a difusão de quantidade de movimento e instabilidades locais que poderiam gerar algum tipo de oscilação são amortecidas. Alguns trabalhos são dedicados a avaliar o impacto do modelo de turbulência sobre o comportamento dinâmico da pluma (BECKER, SOKOLICHIN e EIGENBERGER, 1994; SOKOLICHIN e EIGENBERGER, 1994; BORCHERS *et al.*, 1999; SOKOLICHIN e EIGENBERGER, 1999).

Um efeito foi detectado: a magnitude média do termo interfacial tensorial foi muito pequena sendo mais intenso somente na faixa escura do campo de fração apresentado na Figura 91. A ativação do modelo heterogêneo como termo fonte manteve a pluma estável e centrada. As regiões com baixas frações se desfaziam até a pluma se tornar um filete com uma oscilação muitíssimo sutil, praticamente estável. Este efeito também ocorre no trabalho de Bech (2005a) como mostrado na Figura 94. No seu trabalho, este comportamento é devido à calibragem do modelo de comprimento de mistura empregado no tratamento da turbulência.

Figura 92. Padrão de dispersão da pluma de gás empregando o modelo homogêneo com termo fonte e condição de abertura. A cor negra indica uma fração de 1% de ar e a branca sua ausência.

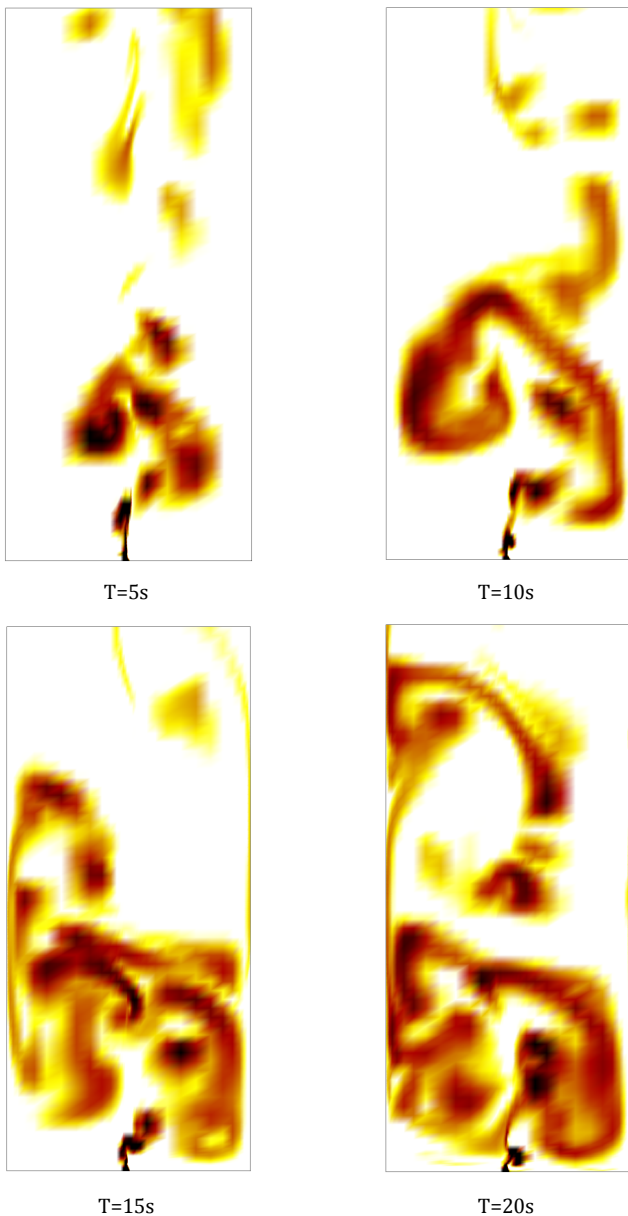
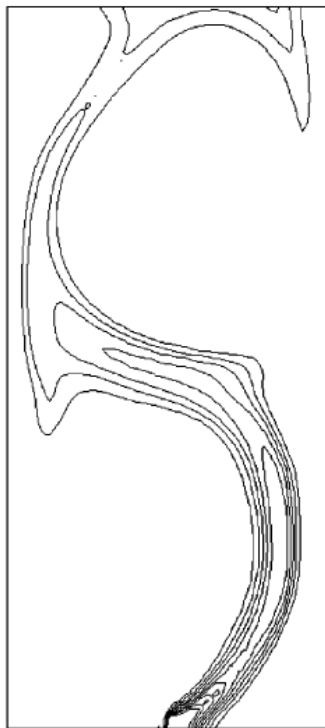


Figura 93. Comparação entre o modelo de mistura com turbulência algébrica empregado por Bech (2005a) e pelo modelo homogêneo com termo fonte tensorial deste trabalho.



Modelo de Mistura + Comprimento de Mistura de Prandtl (Bech,2005a).

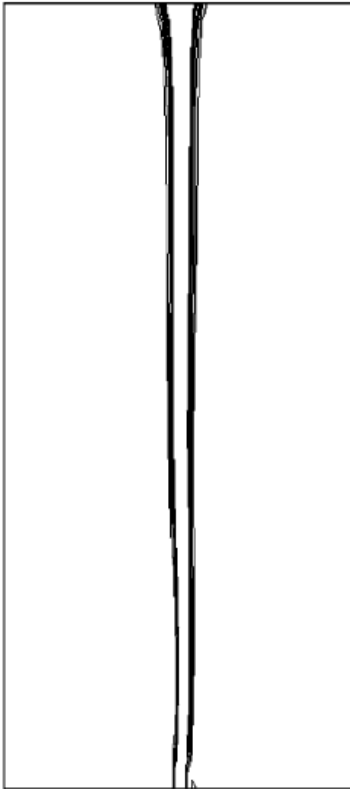


Modelo Homogêneo com termo fonte interfacial deste trabalho.

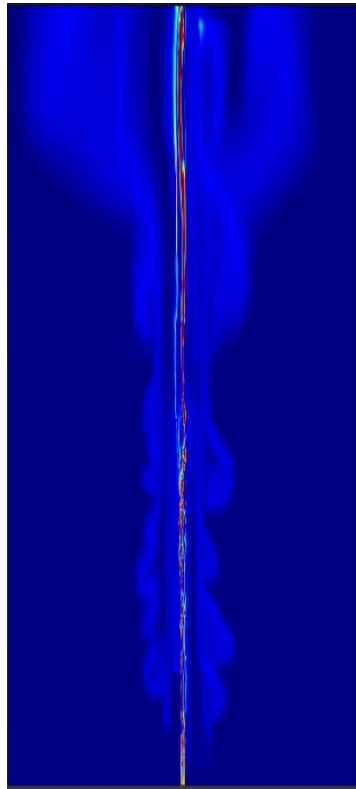
A alteração da constante C_r (de 1 até 10) gerou por algumas iterações um comportamento mais condizente com o que era fisicamente esperado, todavia, muito mais instável resultando sempre em divergência. O problema principal encontra-se na solução do campo de fração volumétrica. O desacoplamento das equações pelo valor nulo do termo de arrasto e o tratamento explícito dos termos fontes contribui para a falta de estabilidade da solução. A simulação com o termo de arrasto padrão sem termos fontes também não era estável exigindo passos de tempo muito

pequenos tornando a simulação de longa duração inviável e sem garantias de convergência após um longo esforço. A malha empregada nesta abordagem foi mais fina com pouco mais de 28,8 mil nós por plano de simetria mostrada em um detalhe na Figura 95.

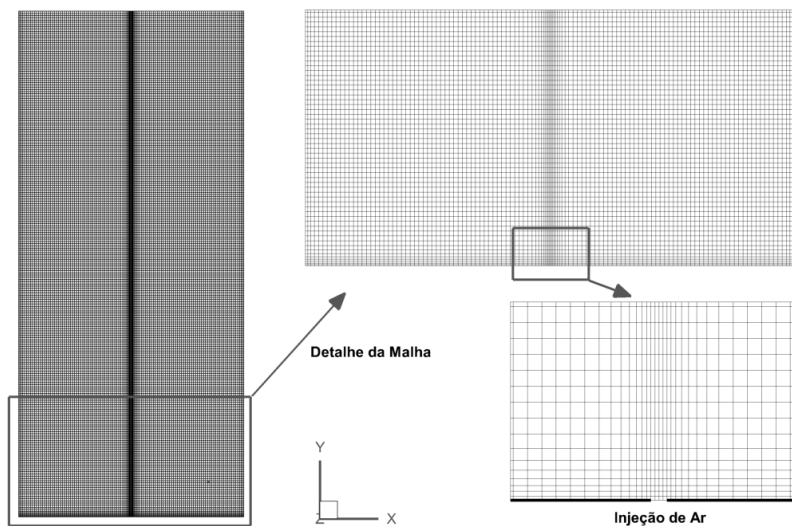
Figura 94. Comparação entre o modelo de mistura com turbulência algébrica empregado por Bech (2005a) e pelo modelo heterogêneo com termo fonte tensorial deste trabalho.



Modelo de Mistura + Comprimento de Mistura de Prandtl (Bech,2005a).



Modelo Heterogêneo com o termo fonte interfacial deste trabalho.

Figura 95. Detalhe inferior da malha empregada no modelo heterogêneo.

6.5.4 Modelo Associado

Embora o modelo tensorial não consiga capturar de maneira apropriada o comportamento do escoamento disperso, ele ainda gera localmente flutuações nas variáveis de campo dependentes do tensor taxa de deformação, e todos os termos que multiplicam o tensor agem como a viscosidade turbulenta, sob um ponto de vista funcional. A diferença é que ela é uma força não necessariamente alinhada ao fluxo difusivo de quantidade de movimento. Grosso modo, a formulação é muito similar a proposta por Smagorinsky (1963) para o fechamento da turbulência, tendo também uma dependência direta com a taxa de deformação e espaçamento de malha (cálculo dos gradientes) e uma constante de fechamento com um valor prescrito.

O uso simultâneo de ambos os modelos, o de arrasto padrão do ANSYS CFX com $C_D = 0,44$ e o tensorial de maneira associada se mostrou eficiente. A solução se mostrou mais estável – provavelmente pelo pseudo efeito de viscosidade turbulenta do

termo tensorial - e a pluma não mais teve um comportamento estático e sim com flutuações locais que induziram à oscilação. A importância de um termo que desbalance a pluma e ao mesmo tempo não a amortença é tratado em Bech (2005a; 2005b) analisando o emprego dos modelos $k - \varepsilon$, $k - \omega$, Comprimento de Mistura e LES em uma aproximação bidimensional do mesmo problema empregando o simulador comercial ANSYS FLUENT - que possui uma formulação realmente bidimensional como opção. *Todos os artigos citados que envolvem a simulação da coluna de bolhas empregam dispersão turbulenta.* Os resultados da abordagem associada são descritos a seguir.

Os parâmetros empregados na simulação são apresentados na Tabela 9.

Tabela 9. Parâmetros de Simulação da Coluna de Bolhas.

Número de nós	28,8 mil (por plano)
Passo de tempo	0,002s
Diâmetro de Bolha	5,0mm
Condições de contorno	Não escorregamento nas paredes Velocidade prescrita 0,167m/s na entrada Desgaseificação na superfície livre Abertura na tampa
Número de partições	3 partições

Na Figura 96 apresenta-se o início da recirculação de líquido junto à superfície livre. Esta mudança brusca na condição de contorno no topo (condição de desgaseificação) nos testes anteriores foi causa de grandes oscilações e divergência. Aqui ela se mostra suave e com magnitudes de velocidade da ordem de $\sim 0,05\text{m/s}$. Diante deste setup estável a simulação foi efetuada durante 60 segundos físicos com a vazão ainda menor de forma a avaliar o comportamento do sistema em uma condição física menos crítica. O tempo computacional foi de aproximadamente um mês.

Com frações volumétricas de ar e velocidades baixas a abordagem apresenta resultados fisicamente críveis como leve oscilação e correntes de recirculação como ilustrado na Figura 97. Até este período de tempo o escoamento apresenta um comportamento harmônico de baixa amplitude. Detalhe: a escala do contorno é logarítmica para melhor evidenciar a pluma.

No Intervalo de 60-65s a vazão é então aumentada até seu valor nominal experimental, aumentando-se linearmente a velocidade de entrada de acordo com

$$V_{in} = 0,00167 + 0,16533 \frac{(t - 60)}{5}. \quad (326)$$

A Figura 98 apresenta o início deste aumento de vazão. O comportamento de filete ainda é observado no começo, mas rapidamente oscilações começam a surgir na base e se propagam até a superfície livre. As correntes de recirculação também se tornam mais evidentes.

Figura 96. Início da circulação de líquido como a alteração da condição de contorno da superfície livre abertura para desgaseificação.

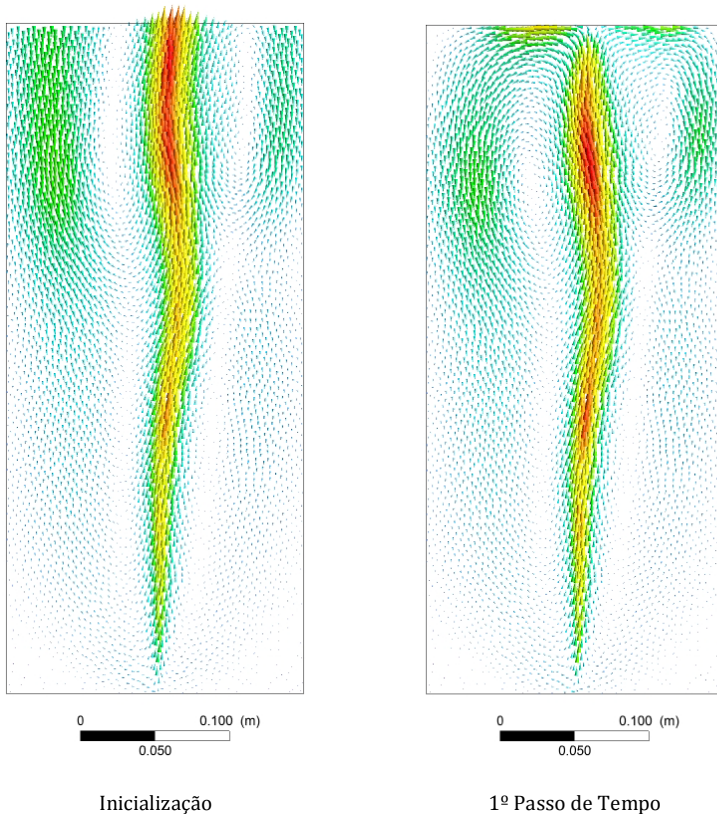


Figura 97. Exemplo de campos de Fração Volumétrica e Velocidade Superficial de Água para o Modelo Associado.

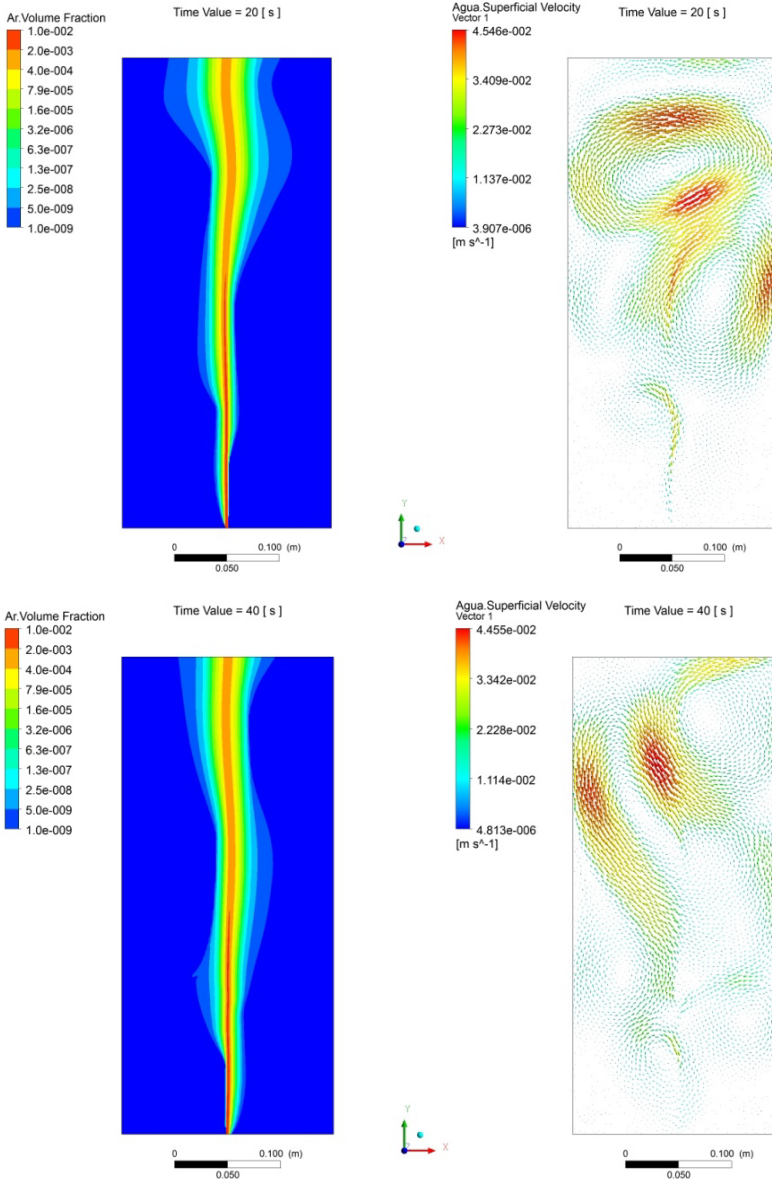
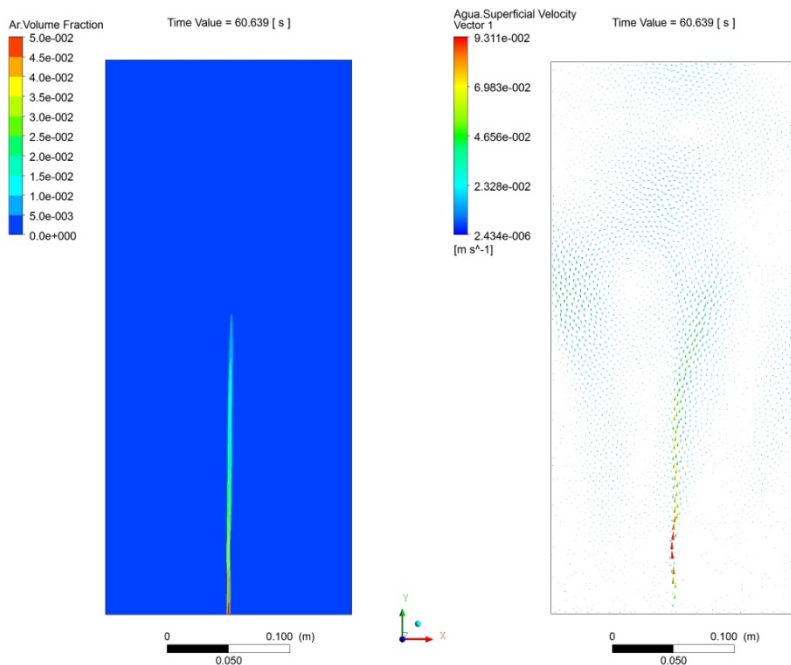


Figura 98. Fração de segundos após o início do aumento da vazão. A escala de contornos é linear.



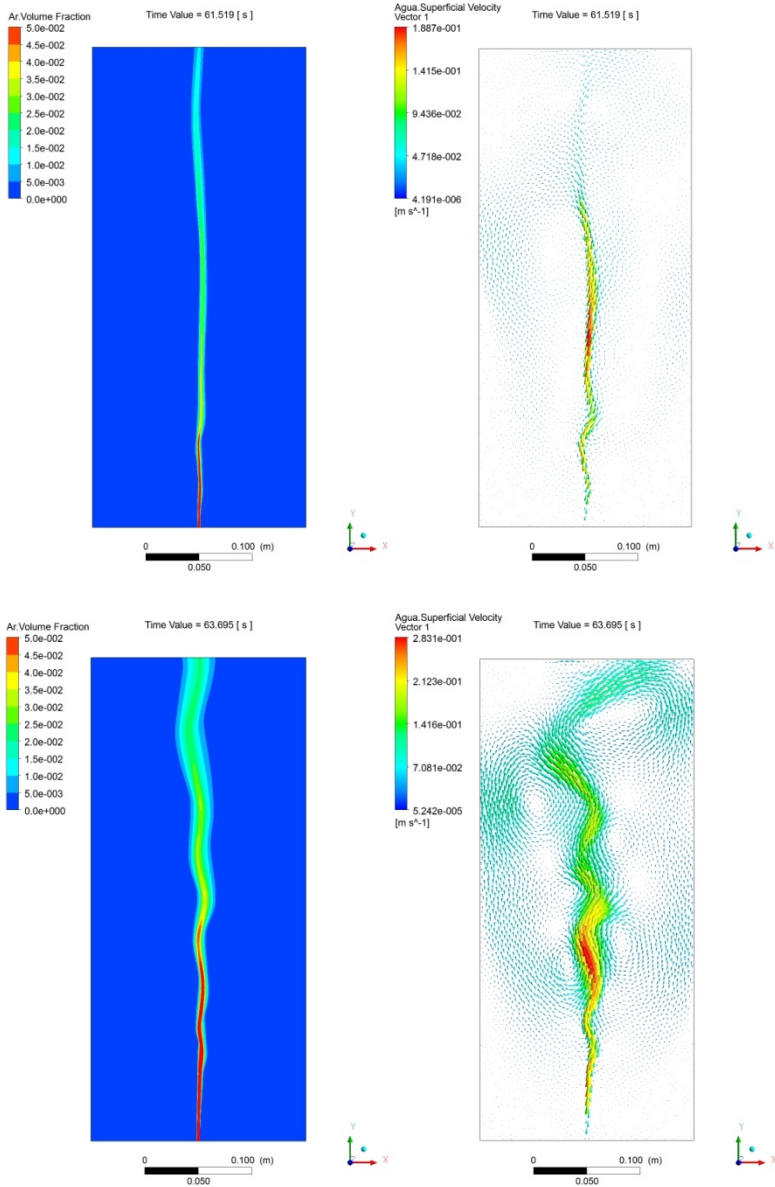
A partir de 65s as condições de operação são as mesmas da condição experimental e inicia-se a amostragem de longa duração (LTA) por 100 segundos físicos. O ANSYS CFX permite que se calculem médias no tempo das variáveis de campo à medida que a simulação avança. Ou seja, a média é incremental, ela não é efetuada ao fim da simulação. Uma média temporal é definida como:

$$\bar{\phi}(\mathbf{x}) = \frac{1}{T} \int_0^T \phi(\mathbf{x}, t) dt , \quad (327)$$

onde T é o tempo total de promediação . De forma discreta tem-se

$$\bar{\phi} = \frac{1}{T} \sum_{i=2}^n \phi_i \Delta t_i . \quad (328)$$

Figura 99. Aumento do dinâmica da pluma de gás e das correntes de recirculação de líquido com o aumento da vazão.



Considerando um passo de tempo uniforme e um conjunto com n elementos, pode-se escrever

$$\bar{\phi}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \phi_i = \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^{n-1} \phi_i + \phi_n \right). \quad (329)$$

De maneira equivalente, pode-se escrever a mesma média para $(n-1)$ termos

$$\bar{\phi}_{n-1} = \frac{1}{(n-1)} \sum_{i=1}^{n-1} \phi_i, \quad (330)$$

e isolando-se o somatório e substituindo na Equação (329)

$$\bar{\phi}_n = \frac{(n-1)\bar{\phi}_{n-1} + \phi_n}{n}, \quad (331)$$

ou seja,

$$\bar{\phi}_n = \bar{\phi}_{n-1} + \frac{\phi_n - \bar{\phi}_{n-1}}{n}, \quad (332)$$

assim, a média pode ser calculada de forma incremental. Ela é calculada para as variáveis definidas e em cada volume de controle em cada iteração de tempo. Há um aumento no tamanho dos arquivos de dados e o espaço em disco rígido é considerável cerca de 200GB para os 100 segundos de análise. Opções de compactação são possíveis, mas dado o longo tempo e o volume de dados gerados a chance de um erro de escrita aumenta. Logo, esta opção não foi considerada para garantir a integridade dos dados.

Antes de apresentar as análises das médias é indicado descrever o comportamento instantâneo. Pflieger e Colaboradores (1999) empregaram o modelo de dois fluidos e o modelo $k-\varepsilon$ padrão. O comportamento oscilatório só foi obtido por meio de uma simulação 3D, fixando o coeficiente de arrasto em 0,66. Seus resultados podem ser vistos na Figura 100. A oscilação da pluma é evidente bem como a formação de correntes de circulação. Seus resultados médios também são apresentados.

O período de oscilação da pluma neste experimento foi determinado entre 15 e 20 segundos, correspondendo a frequências características variando de 0,067 a 0,05Hz, respectivamente.

Becker, De Bie e Sweenet (1999) descrevem um detalhado experimento do mesmo problema. A Figura 101 compara as observações experimentais com os resultados deste trabalho. A concordância nos padrões e amplitude foi satisfatória. Os períodos de oscilação reportados pelos autores variam entre 16 e 19s, ou

frequências características variando entre 0,0625 a 0,0526Hz, respectivamente.

Outros dois trabalhos creditados a Bech (2005a; 2005b) conseguem capturar a oscilação em uma abordagem 2D, e seus resultados são comparados na Figura 102. A escala de contorno é logarítmica. Os resultados novamente apresentam boa concordância. Os períodos de oscilação reportados por Bech encontram-se entre 12,2 a 16 segundos – dependendo do modelo de turbulência e de sua calibragem e da dispersão turbulenta. Para um sparger retangular (como o empregado neste trabalho) o período foi de ~12,2 segundos, correspondendo a uma frequência de 0,082Hz.

A amostragem temporal de longa duração foi executada no ponto (0,6; 25)cm - tal como em Becker, De Bie e Sweeney (1999) -, monitorando-se a componente vertical da velocidade superficial de líquido. A curva é apresentada na Figura 103.

Figura 100. Evolução transiente da coluna de bolhas em intervalos de 10s, e a média de longo tempo (LTA) de 220 s obtidos por Pflieger *et al.* (1999).

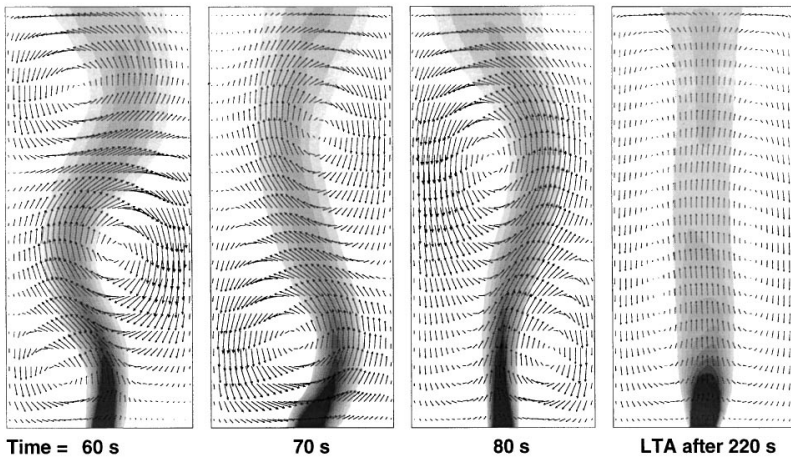
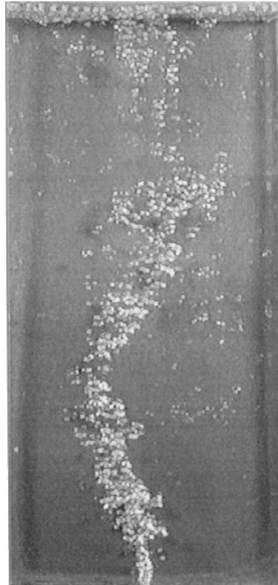
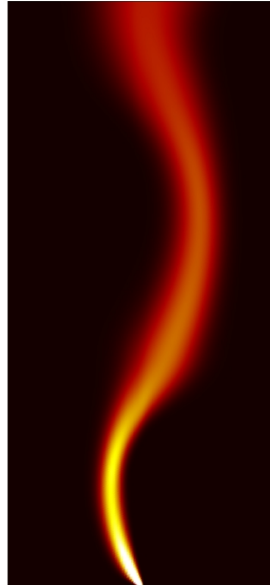


Figura 101. Comparação entre os resultados experimentais de Becker, De Bie e Sweeney (1999) e os deste trabalho.



Becker, De Bie e Sweeney
(1999)



Este trabalho

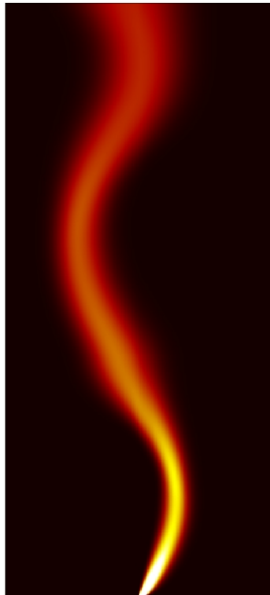
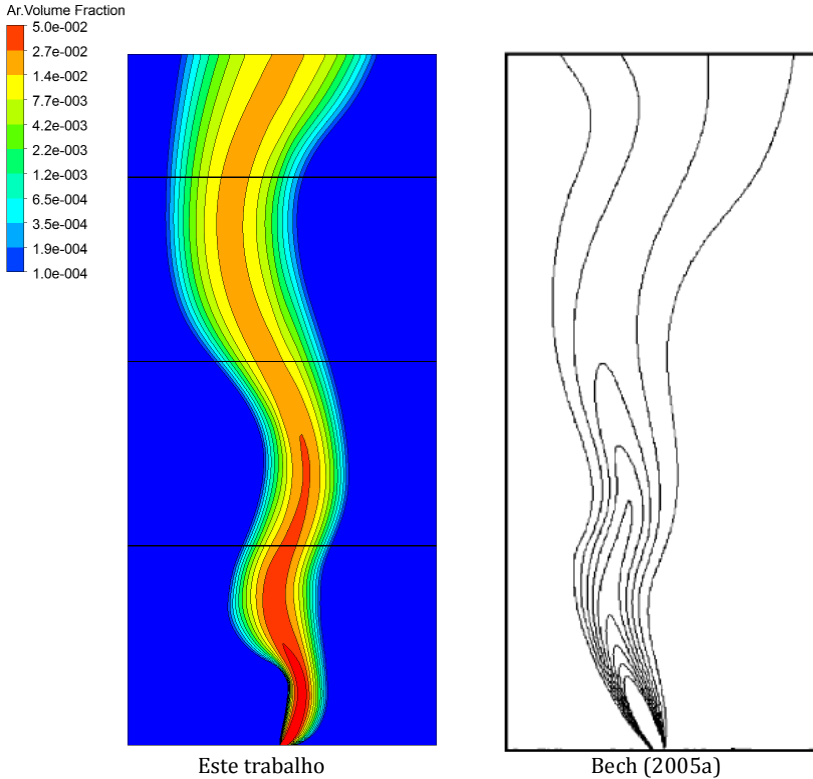
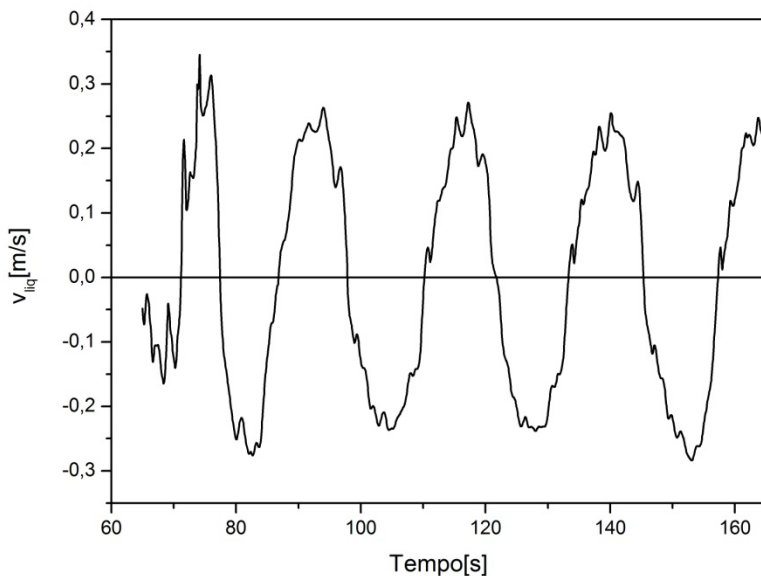


Figura 102. Comparação da pluma de gás obtida com este trabalho (Esq.) e o de Bech (2005a) (Dir.) A escala é logarítmica.



Pela Figura 103 nota-se que o sistema entra em regime rapidamente, logo após o primeiro período. Uma análise visual indica que o período de oscilação é de aproximadamente 20s, mas pelas características da curva o sinal contém mais frequências – importantes ou não – e uma aplicação de uma Análise de Fourier é indicada para se determinar quais frequências estão presentes e em que intensidade.

Figura 103. Amostragem temporal de longa duração (100s) da componente vertical de velocidade superficial de líquido

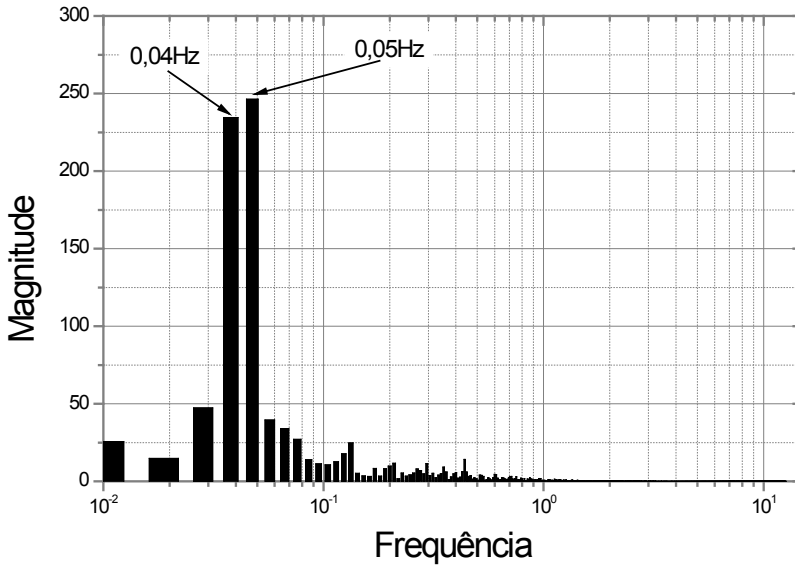


A Figura 104 apresenta o resultado da transformada rápida de Fourier – FFT – aplicada ao sinal. O janelamento foi do tipo Hamming. Nenhum filtro foi aplicado de maneira a não desprezar detalhes do sinal. O sinal apresenta duas frequências características: 0,04 e 0,05Hz o que equivale a períodos de oscilação de 25 e 20 segundos, respectivamente. O pico de 0,04Hz é de intensidade levemente inferior sendo a de 0,05Hz a dominante – mesmo que modestamente – e esta proximidade das frequências gera um fenômeno de batimento da pluma com ondulações percorrendo a pluma de cima para baixo ao longo de sua ondulação lateral. Este batimento é observado quando se analisa a sequência transiente.

Como já introduzido, a taxa de amostragem é importante para se capturar adequadamente os picos de frequência e redução de ruídos na análise FFT. Contudo a extensão desta análise também é importante, pois o sistema pode apresentar modos complexos de oscilar. Com apenas um período de análise o pico de 0,04Hz cai em intensidade enquanto o de 0,05Hz continua predominando como pode ser constatado na Figura 105. Uma análise por um período maior do que 100 segundos talvez revelasse outras frequências ou

aumentasse a predominância de um dos dois já capturados. Não obstante, estas frequências concordam com o observado experimentalmente.

Figura 104. FFT do sinal amostrado da componente vertical de velocidade apresentando duas frequências características com intensidades similares.



A análise de longo tempo efetuada permite a promediação temporal dos campos de interesse. Três linhas de amostragem foram fixadas nas alturas de 13, 15 e 37cm e os perfis da componente vertical de velocidade superficial de água foram amostrados. A intenção é capturar o fluxo ascendente e descendente de líquido criado pelas circulações. Na Figura 106, Figura 107 e Figura 108 apresentam-se as comparações dos perfis obtidos neste trabalho e os da literatura. Os dados experimentais são extraídos do trabalho de Pflieger *et al.* (1999). Os perfis comparam bem com os dados experimentais, mas apresentam desvios locais, ou junto às paredes ou no centro. O mesmo ocorre com a análise numérica de Bech (2005b) empregando uma abordagem submalha 3D. As magnitudes da velocidade são da mesma ordem.

Figura 105. Amostragem de 60s. Apenas o pico de 0,05Hz é capturado.

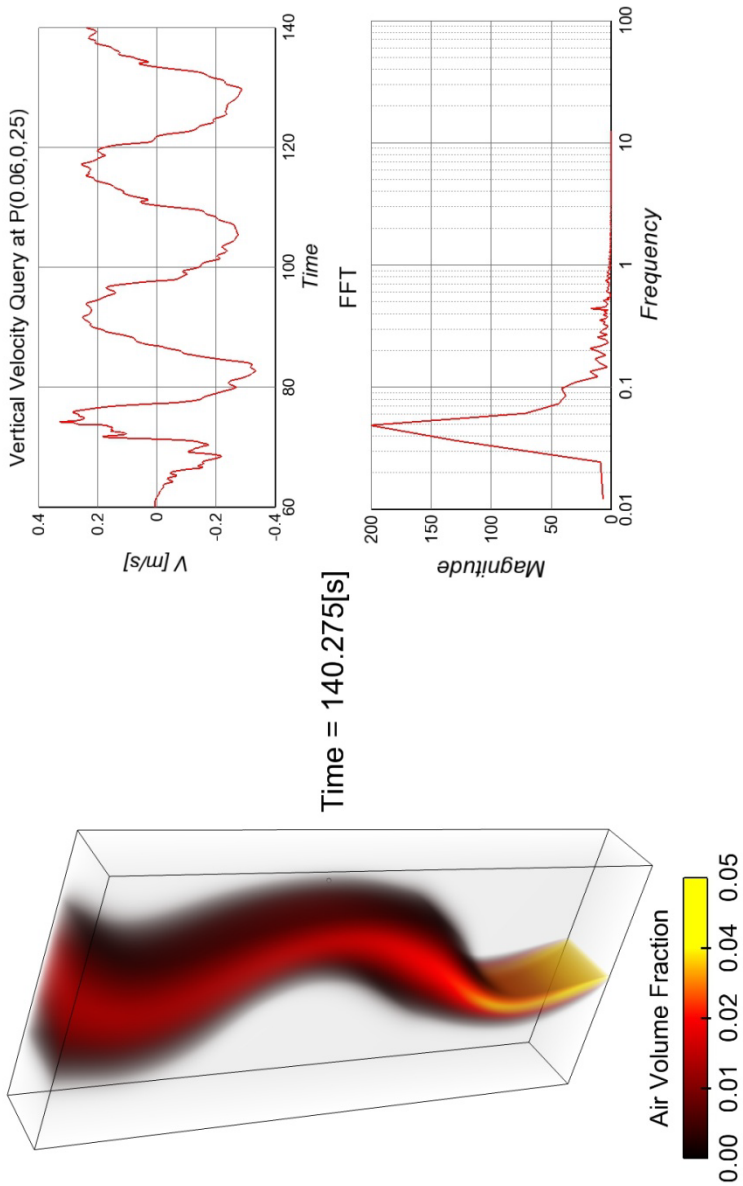


Figura 106. Comparação dos perfis médios de velocidade na altura de 13cm.

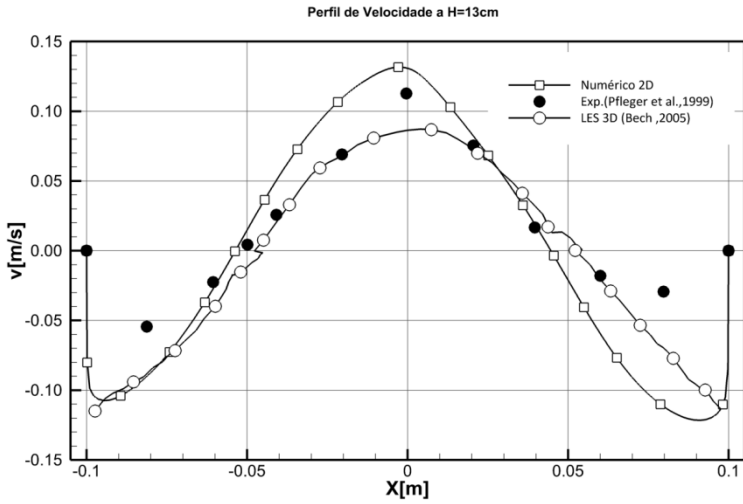


Figura 107. Comparação os perfis médios de velocidade na altura de 25cm.

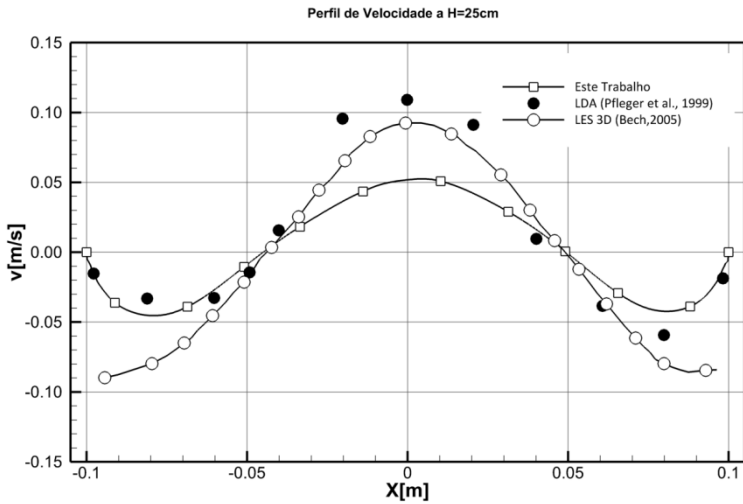
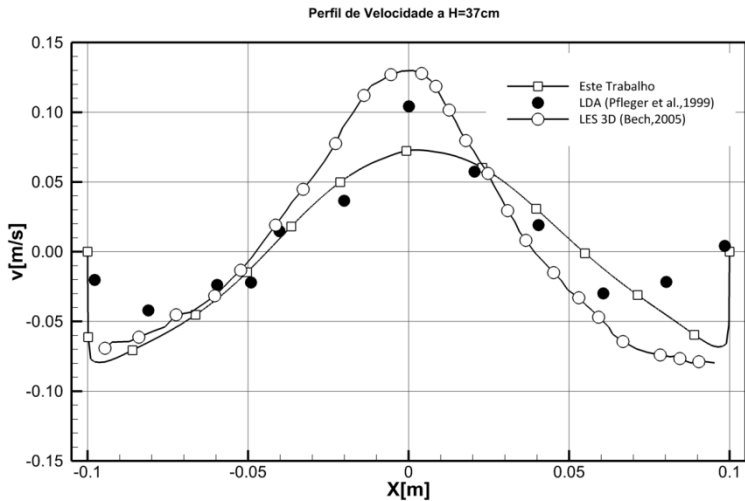


Figura 108. Gráfico comparativo os perfis médios de velocidade na altura de 37cm.



Os campos médios de velocidade superficial de água e fração volumétrica de ar são mostrados na Figura 109 e Figura 110, respectivamente. O campo ainda não é simétrico, indicando que o período de amostragem, embora longo ainda necessita ser maior. No entanto, este *Skewness* dos perfis é sutil.

Um detalhe importante que não é mencionado na literatura é em relação ao balanço de massa. Considerando uma seção qualquer, a componente vertical de velocidade que a travessa é responsável por distribuir a massa e como os fluidos são incompressíveis, o balanço final deve igual a zero, ou muito próximo disto levando em conta que é uma solução discreta. A simples integração da curva revela isto, os dados experimentais de Pfleger *et al.* (1999) apresentam um certo desvio no balanço de massa. Uma simples integração das curvas permite se avaliar o quanto desbalanceado estão os fluxos ascendentes e descendentes. Para uma melhor descrição da integral dos dados experimentais, um polinômio interpolador foi empregado para permitir uma integração analítica e contínua. A curva analisada foi a H=13cm,

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4 + a_5x^5 + a_6x^6 + a_7x^7, \quad (333)$$

onde

$$\begin{aligned}
 a_0 &= 1,00454389463974670000E - 001 \\
 a_1 &= 3,79184057097964180000E - 002 \\
 a_2 &= -5,65809866637796330000E + 001 \\
 a_3 &= -1,37738576097046120000E + 002 \\
 a_4 &= 6,80882005336967270000E + 003 \\
 a_5 &= 4,52327563680615280000E + 004 \\
 a_6 &= -2,16004005939866940000E + 005 \\
 a_7 &= -3,18447534113881880000E + 006
 \end{aligned}
 \tag{334}$$

O coeficiente de ajuste R^2 é de 0,987.

Figura 109. Campo vetorial médio de velocidade superficial de água.

Agua.Superficial Velocity.TrnavgTime Value = 165.001 [s]
Vector 1

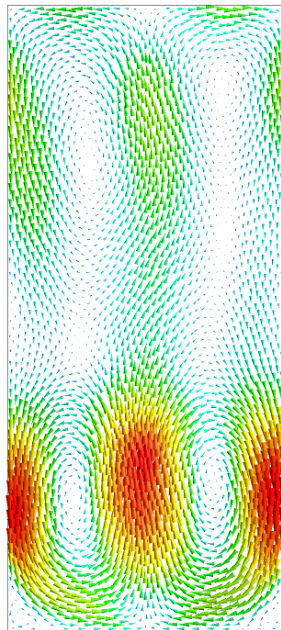
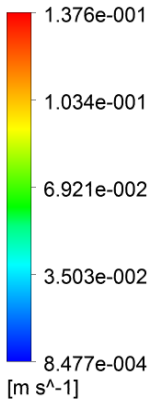
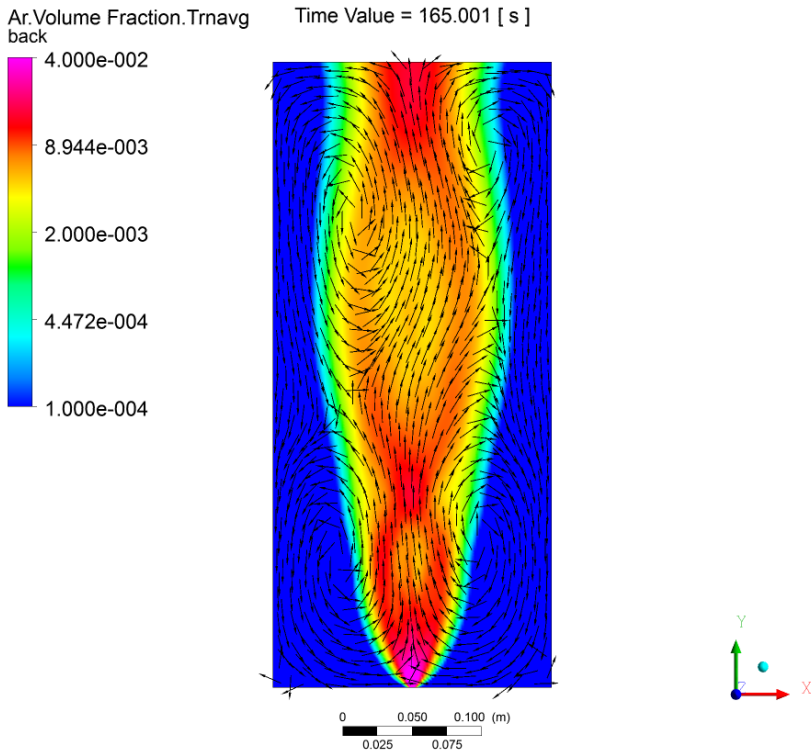


Figura 110. Campo médio de fração volumétrica de ar associado ao de vetorial de velocidade superficial de água.

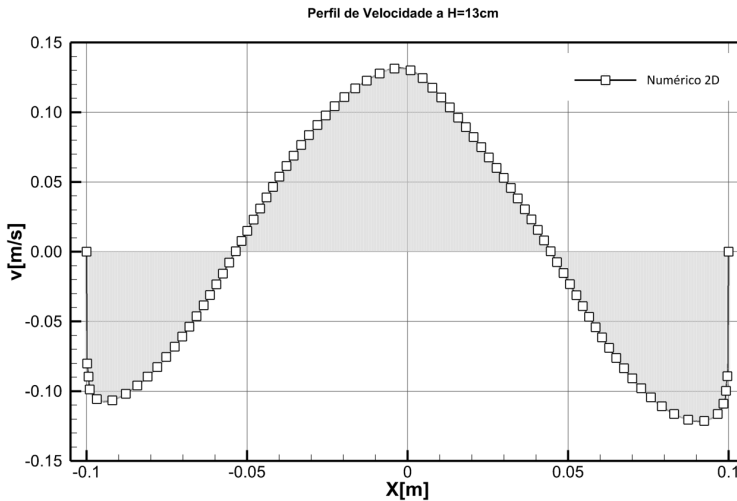


Na Tabela 10 os resultados dos cálculos são apresentados. Para os dados experimentais dois cálculos são apresentados; com os dados brutos e com a interpolação, a diferença é mínima entre as integrais ($\sim 3,5\%$). Os resultados de Bech (2005b) com um resíduo 14 vezes menor, enquanto o deste trabalho mais de 200 vezes.

Na Figura 111 e Figura 112, uma simples inspeção visual denota que a curva experimental possui um fluxo ascendente superior ao descendente. Muito provavelmente ocasionado por ruídos experimentais.

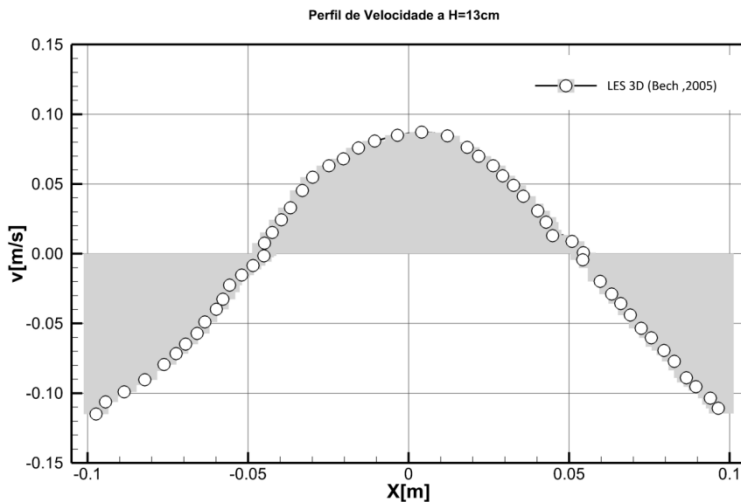
Tabela 10. Resultados da Integração da Linha de Amostragem H=13cm.

Fonte	Abordagem	Desbalanço de Massa	Razão
Pleger <i>et al.</i> (1999)	Experimental	3.4339573e-003 (poly)	----
		3.584956e-003 (dados)	
Bech (2005b)	Numérica	-2.494188e-004	~14
Este trabalho	Numérica	1.556714e-005	~200

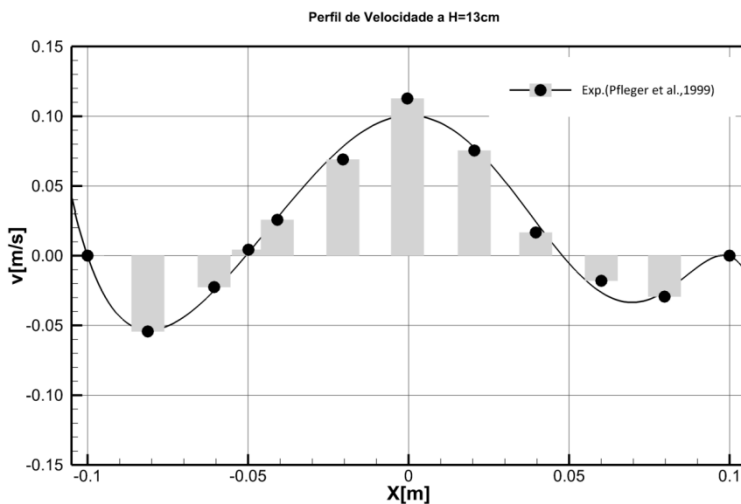
Figura 111. Integral da Curva de velocidade na linha 13cm deste trabalho.

A curva de 13cm tem uma concordância melhor com o perfil central ascendente, a de 25cm com os perfis laterais descendentes, e a de 37cm com a região intermediária. A amostragem numérica deste trabalho também poderia ser maior – apesar de estar dentro do intervalo praticado na literatura. Mas por questões de tempo computacional e limitações físicas de espaço em disco não foi efetuada uma amostragem por um período maior.

Figura 112. Integral da curva de velocidade na linha 13cm da literatura.



Numérico (Bech, 2005b)



Experimental (Pfleger *et al.*, 1999)

O mesmo procedimento foi efetuado para as demais linhas. Apenas os resultados são apresentados nas Tabela 11 e Tabela 12.

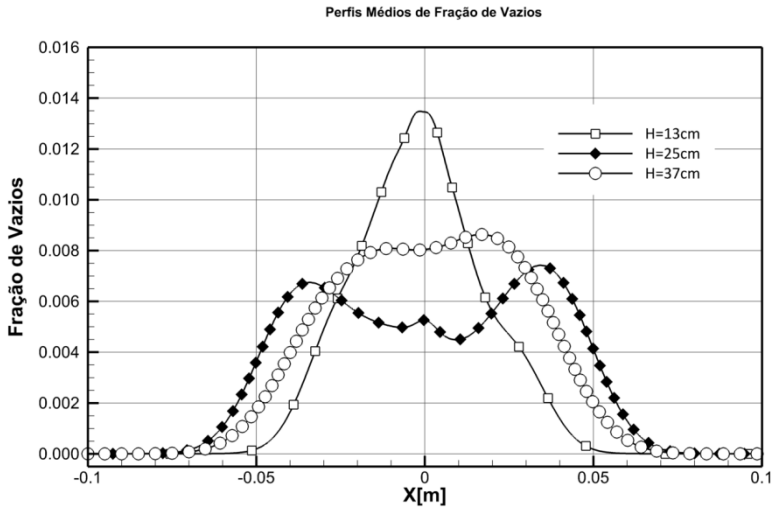
Tabela 11. Resultados da Integração da Linha de Amostragem H=23cm.

Fonte	Abordagem	Desbalanço de Massa	Razão
Pleger <i>et al</i> (1999)	Experimental	2,919971e-003	----
Bech (2005b)	Numérica	-2,969370e-004	~10
Este trabalho	Numérica	5,567492e-007	~5240

Tabela 12. Resultados da Integração da Linha de Amostragem H=37cm.

Fonte	Abordagem	Desbalanço de Massa	Razão
Pleger <i>et al</i> (1999)	Experimental	2.064960e-003	----
Bech (2005b)	Numérica	1.298064e-003	~1,6
Este trabalho	Numérica	1.005602e-005	~200

Os perfis médios de fração de vazios nas linhas de amostragem são apresentados na Figura 113. A leve assimetria é perceptível. Estes perfis não são apresentados na literatura. A razão disto não é conhecida uma vez que a medição LDA e a própria abordagem numérica permitem o acesso a esta informação.

Figura 113. Perfis médios de fração de vazios nas linhas de amostragem.

Na Figura 114 mostra-se, além da pluma de gás (em escala linear), o campo vetorial de velocidade superficial de água. A cada sinuosidade da pluma uma grande recirculação está associada e esta interação é a principal responsável pelo comportamento dinâmico do sistema. Estas correntes não são estáticas e se partem, fundem-se e aumentam ou decrescem em tamanho se movimentando ao longo da altura da coluna em um padrão complexo.

6.5.5 Modelo Tensorial

O comportamento do modelo tensorial isoladamente também foi analisado iniciando a partir de 65s. A constante C_T foi feita igual a 10 para que o termo se equiparasse em magnitude enquanto o coeficiente de arrasto foi zerado. Os resultados podem ser vistos na Figura 115. O passo de tempo é menor, 0,00025s. A interface começa a se degenerar e a pluma a se concentrar no centro da corrente de gás. Após alguns instantes a pluma apresenta-se como um filete. Oscilações ainda são percebidas sobre a mesma percorrendo-a de baixo para cima.

Figura 114. Correntes de circulação em conjunto com o perfil sinuoso da pluma.

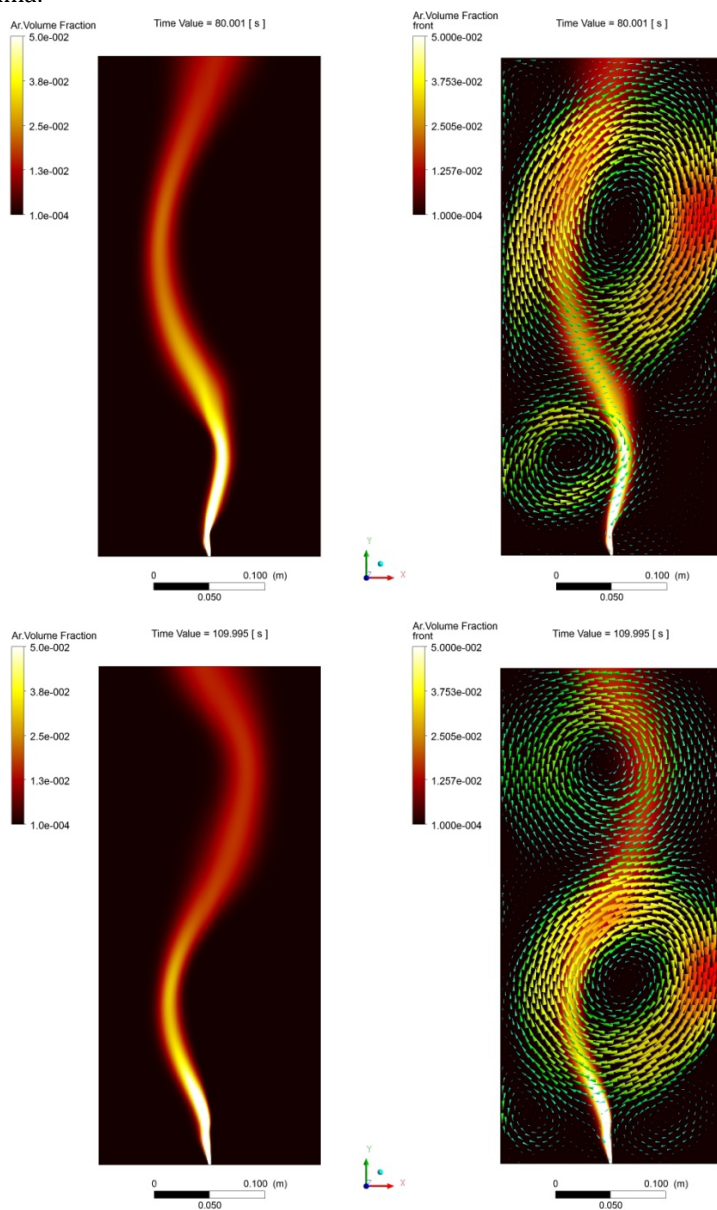
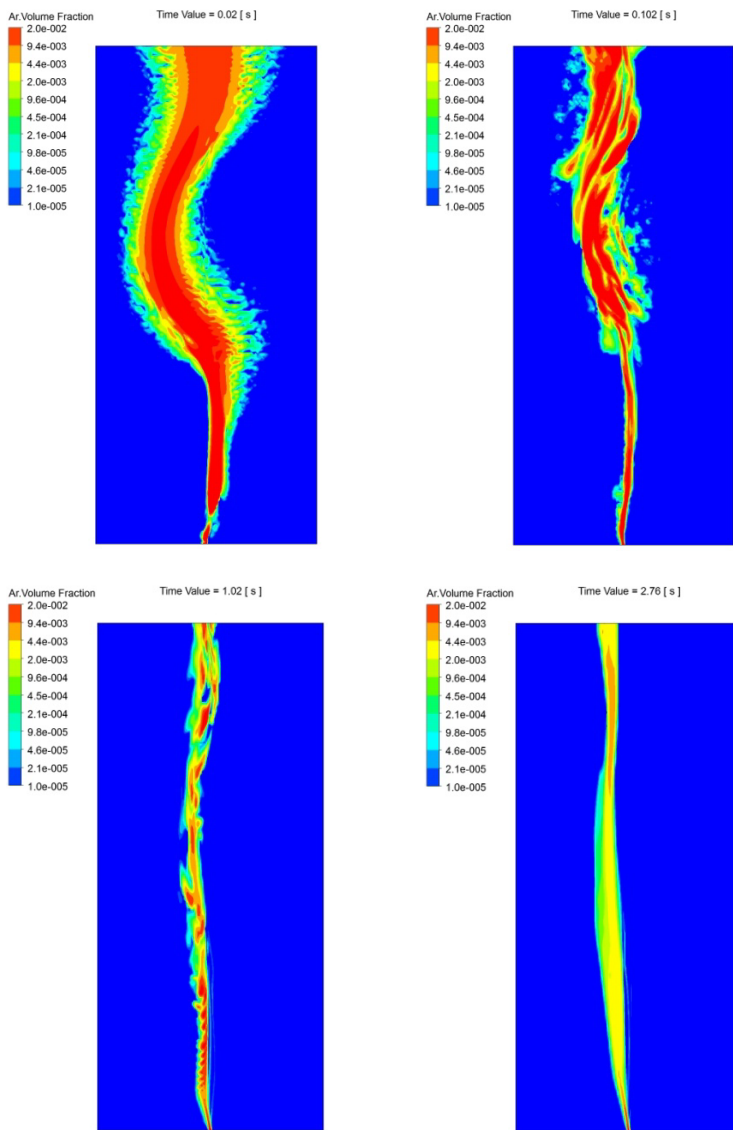


Figura 115. Comportamento Transiente do modelo tensorial sem o termo de arrasto padrão.



O comportamento global é no sentido de concentrar a pluma em uma região menor. A dinâmica é muito mais intensa e pequenas porções de gás são desprendidas e recapturadas, como pseudo processo de quebra e coalescência. O que, neste aspecto, seria até mais próximo do que se vê fisicamente, mas a natureza mais complexa e o acoplamento pelo termo de arrasto reduzido a praticamente zero, geram um problema de difícil convergência.

O sistema não se manteve estável o suficiente para uma análise mais duradoura. A dificuldade na redução dos resíduos do campo de fração volumétrica resultava sempre em divergência. Enquanto o erro RMS do Modelo Associado para as frações era em torno de 10^{-5} a 10^{-4} , o Modelo Tensorial dificilmente reduzia os erros abaixo de 10^{-3} , sendo este o limite superior crítico entre estabilidade e precisão. Logo, o modelo tensorial isoladamente não teve um bom desempenho para escoamentos dispersos com baixa fração de vazios.

6.6 Considerações Finais

Os resultados obtidos para os problemas que se classificam como escoamentos de superfície livre tiveram boa concordância com o que é fisicamente esperado e experimentalmente observado. E o modelo se aplica bem a esta classe de problemas, mas apresenta uma sensibilidade ao campo de vorticidade. Uma formulação dependente somente da taxa de deformação poderia afastar este problema.

Os resultados obtidos para o escoamento disperso indicam que o modelo não tem um desempenho adequado além de grande instabilidade numérica, o que dificultou análises mais detalhadas.

A associação entre os modelos, o de arrasto padrão ($C_D=0,44$) e o tensorial para partículas já se mostrou muito eficiente no tratamento do escoamento disperso da coluna de bolhas sem a necessidade de uma correlação ou modelo de partícula para o coeficiente de arrasto, como seria a prática vigente.

Estas constatações se devem principalmente à própria filosofia do método: modelar o tensor sobre a interface, o que nos três primeiros casos dá bons resultados uma vez que a interface é bem definida, todavia no caso disperso, com a baixa fração de vazios (menor a 10%) a interface é algo difuso pela própria natureza da abordagem Euleriana que degenera a informação da sua posição. O

mesmo ocorre com superfícies livres, mas a dispersão da informação é muito menos intensa.

No caso disperso, cada partícula possui sua interface e no procedimento de média esta informação é perdida, com frações muito baixas esta difusão da informação é mais intensa. Esta dispersão cria gradientes de fração de vazios muito suaves. Como o modelo é dependente desta informação, a destreza do modelo de fechamento pode ser comprometida.

O modelo também apresentou uma tendência a aglutinar a fase dispersa. Isto também ocorre nos problemas de superfície livre quando a interface é rompida e porções de fluido esparsas se aglutinavam e eram novamente recapturadas. Uma característica mais dinâmica e menos suave do que o observado com os modelos disponíveis.

De forma geral, a dinâmica é mais caótica em todos os problemas e principalmente no caso da coluna de bolhas. Esta tendência é muito similar ao que se vê quando uma abordagem submalha é empregada no tratamento da turbulência – e nenhum problema empregou algum modelo de turbulência. O modelo LES modela a parte deviatórica do tensor ainda de maneira clássica empregando a Hipótese de Boussinesq:

$$\tau_{ik} - \frac{1}{3}\tau_{kk}\delta_{ij} = -2(C_S\Delta)^2 \|\bar{\mathbf{D}}\| D_{ij}, \quad (335)$$

e a viscosidade turbulenta sendo definida como

$$\nu_{sgs} = (C_S\Delta)^2 \|\bar{\mathbf{D}}\|. \quad (336)$$

onde $\Delta = (\Delta V)^{1/3}$ e $\|\bar{\mathbf{D}}\| = \sqrt{2\bar{\mathbf{D}}:\bar{\mathbf{D}}}$, e a constante de fechamento, C_S variando entre 0,1-0,2 normalmente. Já o modelo de partícula tensorial proposto,

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta} = -C_T \frac{\mu_{mix}}{\|\nabla r_i\|} \frac{6r_d}{d_p} \langle \bar{\mathbf{D}} \rangle_i \cdot \nabla r_i. \quad (337)$$

cuja forma funcional é muito similar:

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta} = -C_T \tilde{\Delta} \left[\langle \bar{\mathbf{D}} \rangle_i \cdot \nabla r_i \right], \quad (338)$$

onde $\tilde{\Delta} \equiv \frac{\mu_{mix}}{\|\nabla r_i\|} \frac{6r_d}{d_p}$; mas ao invés de uma grandeza escalar, ela

retorna uma vetorial. As malhas empregadas ou estão na escala de Kolmogorov ou próximas, no intervalo de uma a duas ordens de

grandeza acima, o suficiente para uma simulação de grandes escalas (embora fossem abordagens 2D). O modelo de superfície livre também possui as mesmas características, mas envolvendo a ponderação de ambas as fases.

A estabilidade dos casos onde os resultados foram bem sucedidos foi acima do esperado, mesmo sem um modelo de turbulência e uma hipótese que explicaria isto, além do projeto da malha e passos de tempo bem adequados, pode justamente ser o termo fonte interfacial que age como um termo de troca de energia entre as fases.

O processo de promediação das equações gera o termo de densidade de força interfacial como resultado da perda de informação da microescala e da interface, assim como a promediação de Reynolds elimina a informação das flutuações turbulentas, e neste trabalho o modelo de interface é modelado baseado na Hipótese de Boussinesq tal quais os modelos URANS ou LES, e a dependência direta com a taxa de deformação e com a resolução da malha – pela dependência com o cálculo de gradientes de fração volumétrica e velocidade – guarda certas similaridades.

O aumento do comportamento complexo da interface, e no caso da coluna de bolhas isto foi mais notório, pode ser decorrência desta similaridade funcional. O divergente do tensor tensão viscoso é associado ao fluxo de tensão por uma superfície material – em resumo: força –, e pela aplicação do teorema de Gauss:

$$\int_V \nabla \cdot \bar{\mathbf{T}} dV = \int_A \bar{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{n} dA = \mathbf{F}_{vis} , \quad (339)$$

isto se torna mais claro, pois é a força que age sobre a superfície de controle. Já o termo de densidade de força interfacial,

$$\int_{A_i} \langle \bar{\mathbf{T}}_i \rangle \cdot \hat{\mathbf{n}}_i dA_i = \mathbf{M}_{\alpha\beta} , \quad (340)$$

com a diferença que a superfície material é a interface e não precisa ser fechada como na Equação (339), ou seja, ambas representam a ação de tensões sobre superfícies materiais de fluido, todavia a Equação (340) traz em si toda a informação da microescala e, quando modelada da forma proposta neste trabalho, ela age como uma formulação submalha, visto que ela filtra o comportamento complexo da escala em que a interface deveria ser realmente resolvida, e leva esta informação modelada com um caráter funcional de uma abordagem LES à escala em que o problema está sendo resolvido, ou seja, no espaçamento de malha empregado. (É

bom lembrar que a interface nos primeiros casos fica restrita a no máximo dois espaçamentos de malha)

Assim, para o caso mais crítico – a coluna de bolhas – apenas o termo fonte ou apenas o termo de arrasto padrão não foram hábeis em lidar com a dinâmica do problema, e após a sua associação o problema teve uma boa estabilidade, como se um modelo de turbulência tivesse sido empregado e aumentada a difusividade de quantidade de movimento e, conseqüentemente, o amortecimento de instabilidades e flutuações dos campos.

Apesar do uso da solução segregada, esta divisão é apenas em relação às equações hidrodinâmicas e as frações volumétricas. As equações de velocidade e da massa ainda são resolvidas de forma acoplada. O acoplamento entre as fases é deixado a cargo do termo de densidade de força interfacial, e uma vez que ele é zerado, este acoplamento é desfeito, e o sistema linear trabalha em uma configuração que pode facilmente divergir. Mas isto é um problema para o ANSYS CFX e o modo como ele resolve o sistema de EDP's. No ANSYS FLUENT, por exemplo, podem-se resolver as equações de forma segregada uma por uma: u , v , w , p , etc. (a opção acoplada também é possível). E talvez o desempenho numérico do caso da coluna de bolhas – o mais crítico – fosse diferente.

A quebra do acoplamento altera o condicionamento da matriz dos coeficientes, e se ao invés de uma se tiver várias matrizes, talvez este impacto não seja tão severo. Logo, uma análise com o ANSYS FLUENT seria interessante. O método numérico também é diferente, Volumes Finitos com formulação cell center.

Outra hipótese: a natureza vetorial deste termo também foi o responsável pela oscilação da pluma, uma vez que ela não oscilava ou o problema não convergia. E esta falta de oscilação é descrita na literatura (PFLEGER *et al.*, 1999) e associada à aproximação 2D, mas também é contestada em outros artigos que obtêm esta oscilação à custa da inserção de força de dispersão turbulenta (SOKOLICHIN e EIGENBERGER, 1999; PFLEGER e BECKER, 2001), sendo capturada em duas dimensões (BECH, 2005a) ou inserindo outras forças transversais, como a de sustentação e massa virtual (DELNOIJ *et al.*, 1997).

Não obstante a estas indagações, o modelo de um modo geral teve um bom desempenho, os coeficientes de arrasto calculados não divergiram consideravelmente do que se obtêm com a abordagem padrão, excetuando-se a situação em que a interface

aumentava em complexidade no modelo tensorial. E o modelo associado para o caso disperso foi efetivo na captura do comportamento dinâmico do problema mesmo em duas dimensões e sem uma modelagem formal da turbulência. Tanto qualitativamente quanto quantitativamente, uma vez que as frequências características e a forma da pluma de gás foram capturadas e concordam com os dados experimentais e numéricos.

Por último, há de se salientar o desafio em se resolver este número de problemas de naturezas distintas. A quantidade de detalhes e meandros de cada tipo de problema é singular e o projeto de simulação de cada um deles requer que cada passo seja repensado e analisado para conferir se o mesmo protocolo ainda se aplica - o que se confirmou -, e no caso da Coluna de Bolhas toda uma tática de inicialização teve de ser projetada para contornar problemas inerentes deste tipo de simulação e descritas na literatura. Assim, o protocolo de simulação proposto e executado também se mostrou eficiente.

CAPÍTULO

7

CONCLUSÕES

Um modelo de fechamento para a densidade de força interfacial que considera a ação das tensões sobre a interface foi proposto. A abordagem apresenta duas distintas formas: uma para problemas de superfície livre, e outra para problemas em regime disperso. Ambas consideram o termo de interface como função dos gradientes de velocidade e gradientes de fração volumétrica.

O modelo foi posto à prova por meio da simulação de casos benchmarks bem conhecidos e desenvolvidos na literatura em situações físicas distintas e representativas, e os resultados numéricos foram comparados com dados numéricos e/ou experimentais de várias fontes bibliográficas.

Os problemas classificados como de superfície livre com duas fases contínuas (cisalhante vertical, Rayleigh-Taylor e rompimento de barreira) tiveram um bom desempenho e os resultados tiveram boa concordância com os reportados na literatura e em comparação com a metodologia corrente.

Esta correspondência indica que o modelo pode ser empregado de forma inversa como um método para o cálculo do coeficiente de arrasto em problemas de superfície livre de forma dinâmica, como feito para os modelos de partículas.

O modelo tensorial não se mostrou hábil na captura do comportamento de escoamentos do tipo disperso e com baixas frações de vazios, pela inexistência de uma interface bem definida e por questões numéricas. Os resultados obtidos indicaram uma tendência a aglomerar a fase dispersada além de ser instável numericamente para esta situação. O modelo de arrasto padrão também não teve um bom desempenho.

Apenas o modelo associado (arrasto padrão + formulação tensorial) foi capaz de capturar com fidedignidade o

comportamento da coluna de bolhas. Tanto a frequência característica de oscilação de 0,04-0,05Hz quanto a forma da pluma de gás puderam ser bem comparadas aos resultados da literatura - experimentais e numéricos.

Os perfis médios de velocidade da coluna são similares, mas apresentam desvios locais quando comparados aos dados experimentais e numéricos; quando integrados, os deste trabalho possuem erros na conservação da massa de duas a três ordens menores do que os da literatura, sendo mais precisos na sua distribuição.

A natureza matemática do modelo, que se baseia na Hipótese de Boussinesq, assemelha-se a uma formulação submalha de natureza vetorial para o termo de densidade de força interfacial.

O desempenho numérico e computacional também foi muito satisfatório. O protocolo de simulação proposto foi efetivo para lidar com a fenomenologia envolvida. Frente à complexidade física dos casos escolhidos, o tempo de computação não foi em absoluto proibitivo, ao contrário, foi factível e aplicável a CPU's do tipo *Desktop*, sem a necessidade de *clusters* ou uma infraestrutura computacional mais agressiva - o problema da coluna de bolhas apenas requeria um logo tempo físico de análises para o processo de promediação temporal.

Uma sensibilidade ao campo de vorticidade foi percebido no problema de Rompimento de Barreira e gerou algumas dificuldades numéricas. A inclusão da tensão superficial com o intuito de equilibrar as forças tangenciais na interface dirimiu os efeitos da força cisalhante e o modelo se comportou de maneira adequada e estável.

Diante disto, pode-se afirmar que:

- Em problemas de superfície livre, o modelo consegue lidar com mudanças bruscas de morfologia, transicionando entre superfície livre, bolhas e gotas;
- Ele pode ser usado diretamente como termo de transferência de quantidade de movimento interfacial, ou para o cálculo dinâmico do coeficiente de arrasto em problemas de superfície livre usando o modelo clássico;
- Os tempos de computação são similares aos da metodologia clássica;

- O termo fonte é linear, e seu tratamento ilícito traria vantagens para o aumento da dominância diagonal da matriz do sistema linear, melhorando o condicionamento do sistema;
- Não se indica o seu uso em problemas com baixas frações de vazão;
- O tratamento desta classe de problemas ainda requer mais análises;
- A associação com o modelo de arrasto de mistura com coeficiente de arrasto constante - embora um modelo de partícula possa também ser empregado - é suficiente para tratar problemas de classe dispersa;
- A abordagem associada é capaz de capturar a dinâmica de um sistema do tipo coluna de bolhas, mesmo em duas dimensões;
- Um bom planejamento da simulação deve ser elaborado, pois o modelo em sua forma e pelo tratamento numérico dado pelo ANSYS CFX é sensível a instabilidades numéricas.
- Os objetivos traçados foram alcançados com sucesso.

7.1 Sugestões para Trabalhos Futuros

Como indicações para outros trabalhos sugerem-se:

- Estender a análise a três dimensões
- Elaborar e testar novas formulações tensoriais
- Incluir as tensões de Reynolds
- Empregar outros códigos como ANSYS FLUENT ou OpenFOAM, por exemplo
- Analisar outros escoamentos dispersos em outros regimes e avaliar a influência da constante de fechamento
- Quando possível empregar uma formulação implícita dos termos fontes.
- Explorar melhor a característica submalha da formulação.
- Explorar a filosofia aplicada ao balanço de energia e entropia.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANSYS. **ANSYS CFX Release 12.1 Manual**. 2010

AZIZI, F. e A. M. AL TAWHEEL. Algorithm for the accurate numerical solution of PBE for drop breakup and coalescence under high shear rates. **Chemical Engineering Science**, v.65, n.23, p.6112-6127. 2010.

BAKKER, A. **Applied Computational Fluid Dynamics - Lecture Notes 16: Free Surface Flows**. Fluent Inc. 2002.

BARBOSA JR, J. R. Turbulência em sistemas bifásicos gás-líquido. In: III Escola de Primavera de Transição e Turbulência, 2002, Florianópolis. **Proceedings of III Escola de Primavera de Transição e Turbulência**. Florianópolis: UFSC, 2002. p. 451.

BARKHUDAROV, M. R. **Lagrangian VOF Advection Method for FLOW-3D**. Flow ScienceJuly. 2004.

BARTH, T. J. e D. C. JEPERSON. The Design and Application of Upwind Schemes on Unstructured Meshes. **AIAA**, v.89, n.0366. 1989.

BASSET, A. B. On the Motion of a Sphere in a Viscous Liquid. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London. (A.)**, v.179, p.43-63. 1888a.

_____. **A treatise on hydrodynamics, with numerous examples**. Cambridge Eng.: Deighton, Bell and Co., v.I & II. 1888bp.

BECH, K. Dynamic simulation of a 2D bubble column. **Chemical Engineering Science**, v.60, n.19, p.5294-5304. 2005a.

_____. LES of a Rectangular Bubble Column. In: Fourth International Conference on CFD in the Oil and Gas, Metallurgical & Process Industries - SINTEF NTNU, 2005b, Trondheim, Noruega. **Proceedings of Fourth International Conference on CFD in the Oil and Gas, Metallurgical & Process Industries - SINTEF NTNU**. Trondheim, Noruega. 6-8 June, 2005b. p.

BECKER, S., H. DE BIE e J. SWEENEY. Dynamic flow behaviour in bubble columns. **Chemical Engineering Science**, v.54, n.21, p.4929-4935. 1999.

BECKER, S., A. SOKOLICHIN e G. EIGENBERGER. Gas—liquid flow in bubble columns and loop reactors: Part II. Comparison of detailed experiments and flow simulations. **Chemical Engineering Science**, v.49, n.24, Part 2, p.5747-5762. 1994.

BHAGA, D. e M. E. WEBER. Bubbles in viscous liquids: shapes, wakes and velocities. **Journal of Fluid Mechanics**, v.105, p.61-85. 1981.

BORCHERS, O., *et al.* Applicability of the standard k - ϵ turbulence model to the dynamic simulation of bubble columns. Part II:: Comparison of detailed experiments and flow simulations. **Chemical Engineering Science**, v.54, n.24, p.5927-5935. 1999.

BRACKBILL, J. U., D. B. KOTHE e C. ZEMACH. A continuum method for modeling surface tension. **Journal of Computational Physics**, v.100, n.2, p.335-354. 1992.

BUNNER, B. e G. TRYGGVASON. Direct numerical simulations of three-dimensional bubbly flows. **Physics of Fluids**, v.11, n.8, p.1967-1969. 1999.

BURNS, A. D. **Computational fluid dynamics modeling of multi-phase flows**. In: Multiphase Flow Course. Alpha-Beta Numerics, Lecture Notes. 2002.

BURNS, A. D., *et al.* The Favre Averaged Drag Model for Turbulent Dispersion in Eulerian Multi-Phase Flows. In: 5th International Conference on Multiphase Flow, ICMF04, 2004, Yokohama, Japan. **Proceedings of 5th International Conference on Multiphase Flow, ICMF04**. Yokohama, Japan. June 4, 2004. p. 17.

CHAHED, J., V. ROIG e L. MASBERNAT. Eulerian-Eulerian two-fluid model for turbulent gas-liquid bubbly flows. **International Journal of Multiphase Flow**, v.29, n.1, p.23-49. 2003.

CHAPMAN, S. e T. G. COWLING. **The mathematical theory of non-uniform gases : an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction, and diffusion in gases.** 3rd. Cambridge ; New York: Cambridge University Press. 1990. xxiv, 422 p. p. (Cambridge mathematical library)

CHUNG, M.-H. An adaptive Cartesian cut-cell/level-set method to simulate incompressible two-phase flows with embedded moving solid boundaries. **Computers & Fluids**, v.71, n.0, p.469-486. 2013.

CLIFT, R., J. R. GRACE e M. E. WEBER. **Bubbles, drops, and particles.** New York: Academic Press. 1978. xiii, 380 p. p.

CORDAZZO, J. **Simulação de Reservatórios de Petróleo Utilizando o método EbFVM e Multigrid Algébrico.** Tese (Doutorado). Eng. Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2006. 272 p.

COURANT, R., K. FRIEDRICHS e H. LEWY. On the Partial Difference Equations of Mathematics Physics. **IBM Journal**, n.March, p.215-234. 1967.

DELNOIJ, E., *et al.* Dynamic simulation of dispersed gas-liquid two-phase flow using a discrete bubble model. **Chemical Engineering Science**, v.52, n.9, p.1429-1458. 1997.

DIJKHUIZEN, W., *et al.* Numerical investigation of closures for interface forces acting on single air-bubbles in water using Volume of Fluid and Front Tracking models. **Chemical Engineering Science**, v.60, n.22, p.6169-6175. 2005.

DREW, D., L. CHENG e R. T. LAHEY JR. The analysis of virtual mass effects in two-phase flow. **International Journal of Multiphase Flow**, v.5, n.4, p.233-242. 1979.

DREW, D. A. Mathematical flow modeling of two-phase flow. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v.15, p.261-291. 1983.

_____. Effect of particle velocity fluctuations on the inertia coupling in two-phase flow. In: *Constitutive Relationships and Models in Continuum Theories of Multiphase Flows*, 1989, Huntsville, Alabama.

Proceedings of Constitutive Relationships and Models in Continuum Theories of Multiphase Flows. Huntsville, Alabama: NASA George C. Marshall Space Flight Center, 1989. p. 172.

_____. Analytical modeling of multiphase flows. In: Elsevier Science Publishers. **Boiling Heat Transfer : Modern Developments and Advances.** Amsterdam; New York: R. T. Lahey, 1992. v. p. 31 - 83

FAXÉN, H. Der Widerstand gegen die Bewegung einer starren Kugel in einer zähen Flüssigkeit, die zwischen zwei parallelen ebenen Wänden eingeschlossen ist. **Annalen der Physik**, v.373, n.10, p.89-119. 1922.

FOURNIER, E., S. GAUTHIER e F. RENAUD. 2D pseudo-spectral parallel Navier–Stokes simulations of compressible Rayleigh–Taylor instability. **Computers & Fluids**, v.31, n.4–7, p.569-587. 2002.

FOX, R. O. A quadrature-based third-order moment method for dilute gas-particle flows. **Journal of Computational Physics**, v.227, n.12, p.6313-6350. 2008.

FUKANO, T. e T. INATOMI. Analysis of liquid film formation in a horizontal annular flow by DNS. **International Journal of Multiphase Flow**, v.29, n.9, p.1413-1430. 2003.

GALPIN, P. F. e G. D. RAITHBY. Numerical Solution of Problems in Incompressible Fluid Flow: Treatment of the Temperature-Velocity Coupling. **Numerical Heat Transfer**, v.10, p.105-129. 1986.

GEORG, I. C. **Modelagem e simulação numérica tridimensional do escoamento gás-líquido em um reator de craqueamento catalítico em um leito fluidizado.** Tese (Doutorado). Depto. Eng. Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Florianópolis, 2005. 268 p.

GEORG, I. C., R. V. D. P. REZENDE e C. R. MALISKA. Direct Numeric Simulation of a Gas Bubble and a Buoyancy-Driven Motion of a Viscous Drop in a Constricted Capillary Using a Eulerian Homogeneous Model. In: CFD OIL 2008
2008a, Rio de Janeiro. **Proceedings of CFD OIL 2008**
Rio de Janeiro: ESSS, 2008a. p.

_____. Estudo Numérico do Escoamento Ascendente de uma Bolha de Gás em um Meio Líquido. In: EBECEM - 1º Encontro Brasileiro sobre Ebulição, Condensação e Escoamento Líquido-Gás, 2008b, Florianópolis. **Proceedings of EBECEM - 1º Encontro Brasileiro sobre Ebulição, Condensação e Escoamento Líquido-Gás**. Florianópolis: ABCM, 2008b. p.

GIDASPOW, D. **Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions**. Boston: Academic Press. 1994. xx, 467 p.

HE, X., S. CHEN e R. ZHANG. A Lattice Boltzmann Scheme for Incompressible Multiphase Flow and Its Application in Simulation of Rayleigh–Taylor Instability. **Journal of Computational Physics**, v.152, n.2, p.642-663. 1999.

HIBIKI, T. e M. ISHII. Interfacial area concentration of bubbly flow systems. **Chemical Engineering Science**, v.57, n.18, p.3967-3977. 2002.

_____. Lift force in bubbly flow systems. **Chemical Engineering Science**, v.62, n.22, p.6457-6474. 2007.

HILTUNEN, K., *et al.* **Multiphase Flow Dynamics. Theory and Numerics**. Espoo. VTT. 2009. 113 p.

HIRT, C. W. **The Modeling of Shallow Flows**. In: Flow Science, Inc. Technical Note: TN48. 1999.

HIRT, C. W. e B. D. NICHOLS. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. **Journal of Computational Physics**, v.39, n.1, p.201-225. 1981.

HÖHNE, T. e C. VALLÉE. Numerical Prediction of Horizontal Stratified Flows. In: 6th International Conference on CFD in Oil & Gas, Metallurgical and Process Industries - SINTEF/NTNU, 2008, Thondhein, Norway. **Proceedings of 6th International Conference on CFD in Oil & Gas, Metallurgical and Process Industries - SINTEF/NTNU**. Thondhein, Norway, 2008. p. 10.

HOLST, M. J. **Notes on the KIVA-II Software and Chemically Reactive Fluid Mechanics**. University of Illinois. Livermore, California, Thechnical Report, p.45. 1992.

HÖLZER, A. e M. SOMMERFELD. Lattice Boltzmann simulations to determine drag, lift and torque acting on non-spherical particles. **Computers & Fluids**, v.38, n.3, p.572-589. 2009.

HUA, J. e J. LOU. Numerical simulation of bubble rising in viscous liquid. **Journal of Computational Physics**, v.222, n.2, p.769-795. 2007.

HUA, J., J. F. STENE e P. LIN. Numerical simulation of 3D bubbles rising in viscous liquids using a front tracking method. **Journal of Computational Physics**, v.227, n.6, p.3358-3382. 2008.

HUTTON, D. V. **Fundamentals of finite element analysis**. International. Boston: McGraw-Hill. 2004. xiv, 494 p. p. (McGraw-Hill series in mechanical engineering)

ISHII, M. e T. HIBIKI. **Thermo-fluid dynamics of two-phase flow**. New York, N.Y.: Springer Science+Business Media. 2006. xvi, 462 p. p.

ISHII, M. e K. MISHIMA. Two-fluid model and hydrodynamic constitutive relations. **Nuclear Engineering and Design**, v.82, p.107-126. 1984.

ISHII, M. e N. ZUBER. Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows. **AIChE Journal**, v.25, n.5, p.843-855. 1979.

JACKSON, D. e B. LAUNDER. Osborne Reynolds and the Publication of His Papers on Turbulent Flow. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v.39, n.1, p.19-35. 2007.

JACKSON, R. **The Dynamics of Fluidized Particles**. Cambridge University Press. 2000. 368 p.

JAHANBAKSH, E., R. PANAHÍ e M. S. SEIF. Numerical simulation of three-dimensional interfacial flows. **International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow**, v.17, n.4, p.384 - 404. 2007.

KASHIWA, B. A. e W. B. VANDERHEYDEN. **Toward a general Theory for Multiphase Turbulence**. Los Alamos National Laboratory. Los Alamos, p.95. 2000.

KATAOKA, I. e A. SERIZAWA. Basic equations of turbulence in gas-liquid two-phase flow. **International Journal of Multiphase Flow**, v.15, n.5, p.843-855. 1989.

KELLER, S. C. **O método multigrid de correções aditivas para a solução numérica acoplada das equações de Navier-Stokes com malhas não-estruturadas**. Tese (Doutorado). Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2007. 140 p.

KOCAMUSTAFAOGULLARI, G. e M. ISHII. Foundation of the interfacial area transport equation and its closure relations. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.38, n.3, p.481-493. 1995.

KOLMOGOROV, A. N. Equations of Tubulent Motion of an Incompressible Fluid **Akad. Nauk. SSSR, Seria Fizicheska (Tradução: Imperial Colleg, Mech. Eng. Dept. Rept. ON/6,1968)**, v.6, n.1-2, p.56-58. 1942.

KOSTETZER, L. A. e R. V. P. REZENDE. **Análise Fluidodinâmica do Escoamento Bifásico em Regime Anular no Interior de Dutos**. ESSS. Florianópolis, p.154. 2008.

KREPPER, E., *et al.* The inhomogeneous MUSIG model for the simulation of polydispersed flows. **Nuclear Engineering and Design**, v.238, n.7, p.1690-1702. 2008.

KULKARNI, A. A. Lift force on bubbles in a bubble column reactor: Experimental analysis. **Chemical Engineering Science**, v.63, n.6, p.1710-1723. 2008.

LAHEY JR, R. T. The simulation of multidimensional multiphase flows. **Nuclear Engineering and Design**, v.235, n.10-12, p.1043-1060. 2005.

LAMB, H. **Hydrodynamics**. Cambridge,: University press. 1895. xviii p., 1 l., 604 p. p.

_____. **Hydrodynamics**. 6th. New York,: Dover publications. 1945. 2 p.l., vii -xv, 738 p. p.

LANDAU, L. D. e E. M. LIFSHITS. **Fluid mechanics**. 2nd. Oxford, England ; New York: Pergamon Press. 1987. xiii, 539 p., 1 leaf of plates p. (Course of theoretical physics)

LEICHTBERG, S., *et al.* A Study of Unsteady Forces at Low Reynolds Number: A Strong Interaction Theory for the Coaxial Settling of Three or More Spheres. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences**, v.282, n.1311, p.585-610. 1976.

LEVEQUE, R. J. e K.-M. SHYUE. Two-Dimensional Front Tracking Based on High Resolution Wave Propagation Methods. **Journal of Computational Physics**, v.123, n.2, p.354-368. 1996.

LI, B. Q. **Discontinuous finite elements in fluid dynamics and heat transfer**. London: Springer. 2006. xvii, 578 p. p.

LIAO, Y., *et al.* Development of a generalized coalescence and breakup closure for the inhomogeneous MUSIG model. **Nuclear Engineering and Design**, v.241, n.4, p.1024-1033. 2011.

LIM, Y. I., *et al.* On the solution of population balance equations (PBE) with accurate front tracking methods in practical crystallization processes. **Chemical Engineering Science**, v.57, n.17, p.3715-3732. 2002.

LIND, S. J., *et al.* Incompressible smoothed particle hydrodynamics for free-surface flows: A generalised diffusion-based algorithm for stability and validations for impulsive flows and propagating waves. **Journal of Computational Physics**, v.231, n.4, p.1499-1523. 2012.

LO, S. **Application of population balance to cfd modelling of bubbly flow via the MUSIG model**. In:Technical Report AEAT-1096. AEA Technology plc. 1996.

LOPEZ-DE-BERTODANO, M., R. T. LAHEY-JR e O. C. JONES. Development of k- ϵ Model for Bubbly Two-Phase Flow. **Journal of Fluid Engineering**, v.116, p.128-134. 1994.

LOPEZ DE BERTODANO, M. **Turbulent bubbly two-phase flow in a triangular duct**. Thesis (Ph.D.). Rensselaer Polytechnic Institute, New York, USA, 1992

LUCAS, D., *et al.* Extension of the inhomogeneous MUSIG model for bubble condensation. **Nuclear Engineering and Design**, v.241, n.11, p.4359-4367. 2011.

LUCY, L. B. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. **Astronomical Journal**, v.82, p.1013-1024. 1977.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. 2ª edição. Rio de Janeiro: LTC - Livros Técnicos e Científicos. 2004p.

MALISKA, C. R. e J. F. V. DE VASCONCELLOS. An unstructured finite volume procedure for simulating flows with moving fronts. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v.182, n.3-4, p.401-420. 2000.

MALISKA, C. R., *et al.* Interface Forces Calculation for Multiphase Flow Simulation. In: EBCEM - 1º Encontro Brasileiro sobre Ebulição, Condensação e Escoamento Líquido-Gás 2008, Florianópolis. **Proceedings of EBCEM - 1º Encontro Brasileiro sobre Ebulição, Condensação e Escoamento Líquido-Gás** Florianópolis: ABCM, 2008. p.

MANNINEN, M., V. TAIVASSALO e S. KALLIO. On the mixture model for multiphase flow: VTT Publications: 67 p. 1996.

MARIANO, P. F., *et al.* A New incompressible Navier-Stokes solver combining Fourier pseudo-spectral and immersed boundary methods. **Computer Modeling in Engineering & Sciences**, v.59, p.181-216. 2010.

MARONNIER, V., M. PICASSO e J. RAPPAZ. Numerical Simulation of Free Surface Flows. **Journal of Computational Physics**, v.155, n.2, p.439-455. 1999.

MARTIN, J. C. e W. J. MOYCE. Part IV. An Experimental Study of the Collapse of Liquid Columns on a Rigid Horizontal Plane. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences**, v.244, n.882, p.312-324. 1952.

MCCASLIN, J. O. e O. DESJARDINS. A localized re-initialization equation for the conservative level set method. **Journal of Computational Physics**, v.262, n.0, p.408-426. 2014.

MCGRAW, R. Description of Aerosol Dynamics by the Quadrature Method of Moments. **Aerosol Science and Technology**, v.27, n.2, p.255-265. 1997.

MEHRAVARAN, M. e S. K. HANNANI. Simulation of incompressible two-phase flows with large density differences employing lattice Boltzmann and level set methods. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v.198, n.2, p.223-233. 2008.

MENDES, R. **Análise do Acoplamento Pressão-Velocidade nas Equações de Navier-Stokes Utilizando o Método dos Volumes Finitos Baseado em Elementos e Solução Acoplada**. Dissertação (Mestrado). Eng. Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2007. 114 p.

MONAGHAN, J. J. Simulating Free Surface Flows with SPH. **Journal of Computational Physics**, v.110, n.2, p.399-406. 1994.

NGUYEN, A. V. e G. M. EVANS. Computational fluid dynamics modelling of gas jets impinging onto liquid pools. **Applied Mathematical Modelling**, v.30, n.11, p.1472-1484. 2006.

NIKITOPULOS, D. E. e E. E. MICHAELIDES. Phenomenological Model for Dispersed Bubbly Flow Pipes. **Applied International Chemical Engineering**, v.41, n.1, p.12-22. 1995.

OSHER, S. e J. A. SETHIAN. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. **Journal of Computational Physics**, v.79, n.1, p.12-49. 1988.

PALADINO, E. E. **Estudo do escoamento multifásico em medidores de vazão do tipo pressão diferencial** Tese (Doutorado). Depto. Eng.

Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2005. 263 p.

PARK, I., *et al.* Numerical investigation of the effects of turbulence intensity on dam-break flows. **Ocean Engineering**, v.42, n.0, p.176-187. 2012.

PASSMAN, S. L. Stress in Dilute Suspensions. In: Constitutive Relationships and Models in Continuum Theories of Multiphase Flows, 1989, Huntsville, Alabama. **Proceedings of Constitutive Relationships and Models in Continuum Theories of Multiphase Flows**. Huntsville, Alabama: NASA George C. Marshall Space Flight Center, 1989. p. 172.

PATANKAR, N. A. e D. D. JOSEPH. Lagrangian numerical simulation of particulate flows. **International Journal of Multiphase Flow**, v.27, n.10, p.1685-1706. 2001.

PESKIN, C. S. Numerical analysis of blood flow in the heart. **Journal of Computational Physics**, v.25, n.3, p.220-252. 1977.

_____. The immersed boundary method. **Acta Numerica**, v.11, p.479-517. 2002.

PFLEGER, D. e S. BECKER. Modelling and simulation of the dynamic flow behaviour in a bubble column. **Chemical Engineering Science**, v.56, n.4, p.1737-1747. 2001.

PFLEGER, D., *et al.* Hydrodynamic simulations of laboratory scale bubble columns fundamental studies of the Eulerian-Eulerian modelling approach. **Chemical Engineering Science**, v.54, n.21, p.5091-5099. 1999.

REYNOLDS, O. On the Dynamical Theory of Incompressible Viscous Fluids and the Determination of the Criterion. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London. A (1887-1895)**, v.186, n.-1, p.123-164. 1895.

REZENDE, R. V. P. **Modelagem Matemática e Desenvolvimento de Metodologia Computacional para a simulação do Escoamento Bifásico de ar e Ferro-Gusa em Canal de Corrida de Alto-Forno.**

Dissertação (Mestrado). Engenharia Mecânica, Universidade federal de Santa Catarina, 2009. xxx, 156 p.

REZENDE, R. V. P., I. C. GEORG e C. R. MALISKA. Numerical simulation of a gas bubble and a buoyancy-driven motion of a viscous drop in In: . In: 17th Discrete Simulation of Fluid Dynamics - DSFD, 2008, **Proceedings of 17th Discrete Simulation of Fluid Dynamics - DSFD.LMPT**, 2008. p.

ROSA, E. S. **Escoamento Multifásico Isotérmico: Modelos de Multifluidos e de Mistura**. Bookman. 2011. 280 p.

SANADA, T., *et al.* Motion and coalescence of a pair of bubbles rising side by side. **Chemical Engineering Science**, v.64, n.11, p.2659-2671. 2009.

SANKARANARAYANAN, K., *et al.* Analysis of drag and virtual mass forces in bubbly suspensions using an implicit formulation of the lattice Boltzmann method. **Journal of Fluid Mechanics**, v.452, p.61-96. 2002.

SANTOS, F. P. **Resolução da Equação de Balanço Populacional pelo Método de Quadratura Direta Baseado em Momentos Generalizados**. Dissertação (Mestrado). Engenharia Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ/COPPE, Rio de Janeiro, 2010. 96 p.

SANTOS, L. O. E. **Desenvolvimento de Modelos de Gás em Rede para Escoamentos Monofásicos e Bifásicos**. Tese (Doutorado). Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina UFSC/EMC, Florianópolis, 2000. 174 p.

SATO, Y., M. SADATOMI e K. SEKOGUCHI. Momentum and heat transfer in two-phase bubble flow—I. Theory. **International Journal of Multiphase Flow**, v.7, n.2, p.167-177. 1981a.

_____. Momentum and heat transfer in two-phase bubble flow—II. A comparison between experimental data and theoretical calculations. **International Journal of Multiphase Flow**, v.7, n.2, p.179-190. 1981b.

SCARDOVELLI, R. e S. ZALESKI. Direct Numerical Simulation of Free-Surface and Interfacial Flow. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v.31, n.1, p.567-603. 1999.

SCHILLER, L. e A. NAUMANN. Über die grundlegenden berechnungen bei der schwerkraftaufbereitung
Vereines Deutscher Ingenieure, v.77, p.318-320. 1933.

SETTLES, G. S. **Schlieren and shadowgraph techniques : visualizing phenomena in transparent media**. Berlin ; New York: Springer. 2001. xviii, 376 p. p. (Experimental fluid mechanics)

SHAKIBAEINIA, A. e Y.-C. JIN. A mesh-free particle model for simulation of mobile-bed dam break. **Advances in Water Resources**, v.34, n.6, p.794-807. 2011.

SHEN, H. H. e G.-J. HWANG. Interpretation and Modeling of the Average Equations for a Fluid-Solid Flow. In: Constitutive Relationships and Models in Continuum Theories of Multiphase Flows, 1989, Huntsville, Alabama. **Proceedings of Constitutive Relationships and Models in Continuum Theories of Multiphase Flows**. Huntsville, Alabama: NASA George C. Marshall Space Flight Center, 1989. p. 172.

SHI, J. M., T. FRANK e A. BURNS. **Turbulence Dispersion Force - Physics, Model Derivation and Evaluation**. In:FZR -ANSYS CFX Workshop on Multiphase Flow. Forschungszentrum Rossendorf. Dresden. 2004.

SHIN, S., I. YOON e D. JURIC. The Local Front Reconstruction Method for direct simulation of two- and three-dimensional multiphase flows. **Journal of Computational Physics**, v.230, n.17, p.6605-6646. 2011.

SILVEIRA-NETO, A. D. Fundamentos da Turbulência nos Fluidos. In: ABCM. **Turbulência**. Rio de Janeiro: A. P. S. Freire, P. P. M. Menut, *et al*, 1998. v. Único. p. 292

SILVEIRA NETO, A. **Turbulência nos Fluidos Aplicada**. 2005

SMAGORINSKY, J. General Circulation Experiments With the Primitive Equations. **Monthly Weather Review**, v.91, n.3, p.99 -164. 1963.

SMITH, T. R., *et al.* Mechanistic modeling of interfacial area transport in large diameter pipes. **International Journal of Multiphase Flow**, v.47, n.0, p.1-16. 2012.

SOKOLICHIN, A. e G. EIGENBERGER. Gas—liquid flow in bubble columns and loop reactors: Part I. Detailed modelling and numerical simulation. **Chemical Engineering Science**, v.49, n.24, Part 2, p.5735-5746. 1994.

_____. Applicability of the standard $k-\epsilon$ turbulence model to the dynamic simulation of bubble columns: Part I. Detailed numerical simulations. **Chemical Engineering Science**, v.54, n.13-14, p.2273-2284. 1999.

STELLING, G. S. e S. P. A. DUINMEIJER. A staggered conservative scheme for every Froude number in rapidly varied shallow water flows. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v.43, n.12, p.1329-1354. 2003.

STOKES, G. G. On the effect of internal friction of fluids on the motion of pendulums. **Transactions of the Cambridge Philosophical Society**, v.9, n.8. 1851.

SUI, Y., *et al.* A front-tracking lattice Boltzmann method to study flow-induced deformation of three-dimensional capsules. **Computers & Fluids**, v.39, n.3, p.499-511. 2010.

SUSSMAN, M., P. SMEREKA e S. OSHER. A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow. **Journal of Computational Physics**, v.114, n.1, p.146-159. 1994.

SZEWC, K., J. POZORSKI e J. P. MINIER. Simulations of single bubbles rising through viscous liquids using Smoothed Particle Hydrodynamics. **International Journal of Multiphase Flow**, v.50, n.0, p.98-105. 2013.

TABIB, M. V., S. A. ROY e J. B. JOSHI. CFD simulation of bubble column—An analysis of interphase forces and turbulence models. **Chemical Engineering Journal**, v.139, n.3, p.589-614. 2008.

TAKADA, N., *et al.* Simulation of Bubble Motion under Gravity by Lattice Boltzmann Method. **Journal of Nuclear Science and Technology**, v.38, n.5, p.330-341. 2001.

THOMAS, B. G. e L. ZHANG. Mathematical Modeling of Fluid in Continuous Casting Mold. **ISIJ International**, v.41, n.10, p.1181-1193. 2001.

TOMIYAMA, A. Struggle with computational bubble dynamics. In: ICMF'98, 3rd Int. Conf. Multiphase Flow, 1998, Lyon, France. **Proceedings of ICMF'98, 3rd Int. Conf. Multiphase Flow**. Lyon, France. June 8-12, 1998. p. 1-18.

TOMIYAMA, A., *et al.* Transverse migration of single bubbles in simple shear flows. **Chemical Engineering Science**, v.57, p.1849-1858. 2002.

TROSHKO, A. A. e Y. A. HASSAN. Law of the wall for two-phase turbulent boundary layers. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.44, n.4, p.871-875. 2001a.

_____. A two-equation turbulence model of turbulent bubbly flows. **International Journal of Multiphase Flow**, v.27, n.11, p.1965-2000. 2001b.

TSAI, W. e D. K. P. YUE. Computation of Nonlinear Free-Surface Flows. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v.28, n.1, p.249-278. 1996.

UDAYKUMAR, H. S., *et al.* Multiphase Dynamics in Arbitrary Geometries on Fixed Cartesian Grids. **Journal of Computational Physics**, v.137, n.2, p.366-405. 1997.

UNVERDI, S. O. e G. TRYGGVASON. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. **Journal of Computational Physics**, v.100, n.1, p.25-37. 1992.

URZAY, J., *et al.* Wind gusts and plant aeroelasticity effects on the aerodynamics of pollen shedding: A hypothetical turbulence-initiated wind-pollination mechanism. **Journal of Theoretical Biology**, v.259, n.4, p.785-792. 2009.

VIKAS, V., *et al.* Modeling of bubble-column flows with quadrature-based moment methods. **Chemical Engineering Science**, v.66, n.14, p.3058-3070. 2011.

WEN, C. Y. e Y. H. YU. Mechanics of Fluidization. **Chemical Engineering Progress Symposium Series**, v.62, p.100-11. 1966.

WHITAKER, S. **The Method of Volume Averaging**. Norwell: Springer. 1999. 240 p. (Theory and Applications of Transport in Porous Media)

WILCOX, D. C. **Turbulence modeling for CFD**. La Cãnada, CA: DCW Industries, Inc. 1993. xix, 460 p. p.

_____. **Turbulence modeling for CFD**. 2nd ed. La Cañada, California: DCW Industries, Inc. 1994. xix, 460 p.

ZASTAWNY, M., *et al.* Derivation of drag and lift force and torque coefficients for non-spherical particles in flows. **International Journal of Multiphase Flow**, v.39, n.0, p.227-239. 2012.

ZHANG, D., N. G. DEEN e J. A. M. KUIPERS. Numerical simulation of the dynamic flow behavior in a bubble column: A study of closures for turbulence and interface forces. **Chemical Engineering Science**, v.61, n.23, p.7593-7608. 2006.

ZHANG, J. e L.-S. FAN. On the rise velocity of an interactive bubble in liquids. **Chemical Engineering Journal**, v.92, n.1-3, p.169-176. 2003.

ANEXOS

ANEXO

1

DETALHAMENTOS DA MODELAGEM MATEMÁTICA: NOTAÇÃO INDICIAL E OPERADORES

Visto a notação indicial ser usada ao longo do trabalho e é sabido que nem todos têm familiaridade com a mesma, uma breve descrição da notação e de algumas das regras é dada de forma a permitir ao leitor uma base teórica elementar.

A1.1 Definições

1. Dois índices repetidos indicam uma soma para os índices. Assumindo o espaço \mathbb{R}^3 , os índices variam de um a três, ou seja,

$$a_i b_i = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 \quad (\text{A1.1})$$

2. Índices repetidos podem ser trocados por qualquer outro índice, assim,

$$a_i b_i = a_j b_j = a_k b_k = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 \quad (\text{A1.2})$$

3. Não é permitido mais de dois índices repetidos em uma dada representação, pois ela é ambígua,

$$\cancel{a_i b_i c_i} \quad (\text{A1.3})$$

4. Índices repetidos são chamados de *índices mudos*; e índices não repetidos, de *índices livres*,

$$a_i b_j c_j = \sum_{i=1}^3 a_i (b_1 c_1 + b_2 c_2 + b_3 c_3) \quad (\text{A1.4})$$

5. O número de termos associados a certa representação indicial é 3^n , sendo n o número de *índices livres*,

$$\begin{array}{llll}
\phi & \rightarrow & 1 \text{ termo} & \rightarrow \text{ ordem } 0 \\
A_i & \rightarrow & 3 \text{ termos} & \rightarrow \text{ ordem } 1 \\
a_{ij} & \rightarrow & 9 \text{ termos} & \rightarrow \text{ ordem } 2 \\
\vdots & & \vdots & \vdots \\
b_{ijkl} & \rightarrow & 81 \text{ termos} & \rightarrow \text{ ordem } 4
\end{array} \tag{A1.5}$$

6. Os índices livres de uma equação devem ser os mesmos para que a mesma faça sentido,

$$a_i b_j c_j + d_k e_i = \sum_{i=1}^3 [a_i (b_1 c_1 + b_2 c_2 + b_3 c_3) + (d_1 + d_2 + d_3) e_i] \tag{A1.6}$$

Já a representação $a_p b_j c_j + d_k e_i = ?$

7. Delta de Kröenecker:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 \rightarrow i \neq j \\ 1 \rightarrow i = j \end{cases} \tag{A1.7}$$

Com a seguinte propriedade: $\delta_{ii} = \delta_{11} + \delta_{22} + \delta_{33} = 3$.

8. Operação de contração de índices:

$$\begin{aligned}
\delta_{ij} a_j &= \delta_{11} a_1 + \delta_{22} a_2 + \delta_{33} a_3 = a_1 + a_2 + a_3 \\
\therefore \delta_{ij} a_j &= a_i
\end{aligned} \tag{A1.8}$$

Pois os índices cruzados são nulos de acordo com a Eq.(A3.7). Então

$$\delta_{\boxed{j}k} a_i b_{\boxed{j}} = a_i b_k \tag{A1.9}$$

9. Vetores de base unitários:

$$\hat{\mathbf{e}} = \sum_{i=1}^n \hat{\mathbf{e}}_i \tag{A1.10}$$

10. Representação de vetores no espaço \mathbb{R}^3 :

$$\mathbf{u} = u_i \hat{\mathbf{e}}_i = u_1 \hat{\mathbf{e}}_1 + u_2 \hat{\mathbf{e}}_2 + u_3 \hat{\mathbf{e}}_3 \tag{A1.11}$$

Que no sistema cartesiano ortogonal é geralmente escrito como

$$\mathbf{u} = u_i \hat{\mathbf{e}}_i = u\hat{\mathbf{i}} + v\hat{\mathbf{j}} + w\hat{\mathbf{k}} \tag{A1.12}$$

11. Produto escalar ou produto interno entre dois vetores

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = u_i \hat{\mathbf{e}}_i \cdot v_j \hat{\mathbf{e}}_j \tag{A1.13}$$

Os escalares u_i e v_j não são operados, apenas os vetores de base, com a seguinte propriedade:

$$\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_j = \delta_{ij} \tag{A1.14}$$

Assim, usando (A1.14) e a contração de índice dada em (A1.9), tem-se

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = u_i v_j (\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_j) = u_{[i} v_j \delta_{i]j} = u_j v_j \quad (\text{A1.15})$$

Que resulta num escalar $u_i v_i$.

12. Representação de tensores de segunda ordem:

$$\bar{\mathbf{T}} = T_{ij} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{bmatrix} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j \quad (\text{A1.16})$$

13. Produto escalar entre um vetor e um tensor:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{u} &= T_{ij} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j \cdot u_k \hat{\mathbf{e}}_k = T_{ij} u_k \hat{\mathbf{e}}_i (\hat{\mathbf{e}}_j \cdot \hat{\mathbf{e}}_k) \\ \bar{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{u} &= T_{ij} u_{[k]} \hat{\mathbf{e}}_i \delta_{j[k]} = T_{ij} u_j \hat{\mathbf{e}}_i \end{aligned} \quad (\text{A1.17})$$

Que resulta em um vetor $T_{ij} u_j \hat{\mathbf{e}}_i$. Note que $\bar{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{u} \neq \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{T}}$, pois

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{T}} &= u_k \hat{\mathbf{e}}_k \cdot T_{ij} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j = u_k T_{ij} (\hat{\mathbf{e}}_k \cdot \hat{\mathbf{e}}_i) \hat{\mathbf{e}}_j \\ \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{T}} &= u_k T_{[ij]} \delta_{k[i]} \hat{\mathbf{e}}_j = u_k T_{kj} \hat{\mathbf{e}}_j \end{aligned} \quad (\text{A1.18})$$

14. Produto escalar ou interno tensorial entre tensores de 2ª ordem:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{P}} : \bar{\mathbf{T}} &= P_{ij} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j : T_{nk} \hat{\mathbf{e}}_n \hat{\mathbf{e}}_k = P_{ij} T_{nk} (\hat{\mathbf{e}}_j \cdot \hat{\mathbf{e}}_n) (\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_k) \\ \bar{\mathbf{P}} : \bar{\mathbf{T}} &= P_{ij} T_{nk} \delta_{jn} \delta_{ik} = P_{in} T_{ni} \end{aligned} \quad (\text{A1.19})$$

Que resulta em um escalar.

15. Produto diádico entre dois vetores ou tensores de 1ª ordem:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \otimes \mathbf{v} &= u_i \hat{\mathbf{e}}_i \otimes v_j \hat{\mathbf{e}}_j = u_i v_j (\hat{\mathbf{e}}_i \otimes \hat{\mathbf{e}}_j) \\ \mathbf{u} \otimes \mathbf{v} &= u_i v_j \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j \end{aligned} \quad (\text{A1.20})$$

Ou simplesmente,

$$\mathbf{u} \otimes \mathbf{v} = \mathbf{uv} \quad (\text{A1.21})$$

Que não deve ser confundido com uma multiplicação ordinária, pois esta operação resulta em uma grandeza tensorial de 2ª ordem.

16. Operador Vetorial Nabla:

$$\nabla(\) \equiv \hat{\mathbf{e}}_i \frac{\partial}{\partial x_i}(\) = \frac{\partial}{\partial x_1}(\) \hat{\mathbf{e}}_1 + \frac{\partial}{\partial x_2}(\) \hat{\mathbf{e}}_2 + \frac{\partial}{\partial x_3}(\) \hat{\mathbf{e}}_3 \quad (\text{A1.22})$$

Que em coordenadas cartesianas ortogonais é geralmente escrito como:

$$\nabla(\) \equiv \hat{\mathbf{e}}_i \frac{\partial}{\partial x_i}(\) = \frac{\partial}{\partial x}(\) \hat{\mathbf{i}} + \frac{\partial}{\partial y}(\) \hat{\mathbf{j}} + \frac{\partial}{\partial z}(\) \hat{\mathbf{k}} \quad (\text{A1.23})$$

Uma outra forma ainda mais compacta de representar e também utilizada neste trabalho é a seguinte:

$$\nabla(\) \equiv \hat{\mathbf{e}}_i \partial_i(\) = \partial_1(\) \hat{\mathbf{e}}_1 + \partial_2(\) \hat{\mathbf{e}}_2 + \partial_3(\) \hat{\mathbf{e}}_3 \quad (\text{A1.24})$$

Onde $\partial_i(\)$ representa a derivada parcial do operando em relação às coordenadas espaciais x_i . Esta notação também é usada para derivadas em relação à coordenada temporal,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\) = \partial_t(\) \quad (\text{A1.25})$$

17. Operador Laplaciano:

$$\begin{aligned} \nabla(\) \cdot \nabla(\) &= \hat{\mathbf{e}}_i \partial_i(\) \cdot \hat{\mathbf{e}}_j \partial_j(\) = \partial_i \partial_j (\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_j)(\) \\ \nabla(\) \cdot \nabla(\) &= \partial_i \partial_j \delta_{ij}(\) = \partial_i \partial_i(\) = \partial_i^2 \\ \nabla(\) \cdot \nabla(\) &= \nabla^2(\) \end{aligned} \quad (\text{A1.26})$$

18. Gradiente de um campo escalar

$$\nabla(\phi) \equiv \hat{\mathbf{e}}_i \frac{\partial}{\partial x_i}(\phi) = \frac{\partial \phi}{\partial x_1} \hat{\mathbf{e}}_1 + \frac{\partial \phi}{\partial x_2} \hat{\mathbf{e}}_2 + \frac{\partial \phi}{\partial x_3} \hat{\mathbf{e}}_3 \quad (\text{A1.27})$$

O qual resulta num campo vetorial.

19. Gradiente de um campo vetorial

$$\begin{aligned} \nabla(\mathbf{u}) &= \hat{\mathbf{e}}_i \partial_i(u_j \hat{\mathbf{e}}_j) = \hat{\mathbf{e}}_i \partial_i(u_j) \hat{\mathbf{e}}_j + \cancel{\hat{\mathbf{e}}_i u_j \partial_i(\hat{\mathbf{e}}_j)} \\ \nabla(\mathbf{u}) &= \partial_i(u_j) \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j = \begin{bmatrix} \partial_1 u_1 & \partial_1 u_2 & \partial_1 u_3 \\ \partial_2 u_1 & \partial_2 u_2 & \partial_2 u_3 \\ \partial_3 u_1 & \partial_3 u_2 & \partial_3 u_3 \end{bmatrix} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j \end{aligned} \quad (\text{A1.28})$$

Que resulta numa grandeza tensorial. Para o sistema cartesiano ortogonal a segunda parcela é nula, pois os vetores de base não variam com a posição o que não é verdade para sistemas ortogonais curvilíneos.

20. Divergente de um campo vetorial

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{u}) &= \hat{\mathbf{e}}_i \partial_i \cdot (u_j \hat{\mathbf{e}}_j) = \partial_i(u_j) (\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_j) \\ \nabla \cdot (\mathbf{u}) &= \partial_i u_j \delta_{ij} = \partial_i u_i \end{aligned} \quad (\text{A1.29})$$

Que resulta em uma grandeza escalar.

21. Divergente de um campo tensorial

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (\bar{\mathbf{T}}) &= \hat{\mathbf{e}}_i \partial_i \cdot (T_{jk} \hat{\mathbf{e}}_j \hat{\mathbf{e}}_k) = \partial_i (T_{jk}) (\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_j) \hat{\mathbf{e}}_k \\ \nabla \cdot (\bar{\mathbf{T}}) &= \partial_i T_{jk} \delta_{ij} \hat{\mathbf{e}}_k = \partial_i T_{ik} \hat{\mathbf{e}}_k\end{aligned}\tag{A1.30}$$

Que resulta em uma grandeza vetorial.

ANEXO

2

EXEMPLO SCRIPT CCL ANSYS CFX R12.x

O script a seguir é um exemplo das linhas de comando geradas pelo pré-processador como diretivas e comandos para o solver. Esta configuração não é necessariamente estática, alguns parâmetros podem ser alterados ao longo da simulação com ela em execução, como passos de tempo, resíduos, número de iterações, entre alguns. Outros são fixos após o início da simulação e não podem ser alterados sem interrompê-la primeiro como, por exemplo, a ordem da discretização do termo advectivo.

Os pontos mais importantes, aqui dizem respeito à introdução dos termos fontes e ajustes de solver, sem os quais a simulação diverge seguramente. Eles podem variar quantitativamente, mas isto é de cada caso.

O seguinte exemplo é referente ao problema da salmoura, ou o escoamento cisalhante vertical. A implementação é bidimensional, mas é clara o suficiente para sua aplicação tridimensional.

```
#      +-----+
#      |                                     |
#      |           CFX Command Language for Run           |
#      |                                     |
#      +-----+
```

LIBRARY:

CEL:

EXPRESSIONS:

```
Fx1 = -agua.Dynamic Viscosity*( (agua.Velocity u.Gradient \
X)*Nx+(agua.Velocity v.Gradient X)*Ny)
Fx2 = -salmoura.Dynamic Viscosity*( (salmoura.Velocity u.Gradient \
X)*Nx+(salmoura.Velocity v.Gradient X)*Ny)
Fy1 = -agua.Dynamic Viscosity*( (agua.Velocity u.Gradient \
Y)*Nx+(agua.Velocity v.Gradient Y)*Ny)
Fy2 = -salmoura.Dynamic Viscosity*( (salmoura.Velocity u.Gradient \
Y)*Nx+(salmoura.Velocity v.Gradient Y)*Ny)
Fz = 0.0[N/m^3]
Mx = (agua.Volume Fraction *Fx1- salmoura.Volume Fraction \
```

```

*Fx2)*step(agua.Volume Fraction -1e-4)*step(salmoura.Volume \
Fraction -1e-4)
My = (agua.Volume Fraction *Fx1- salmoura.Volume Fraction \
*Fx2) step(agua.Volume Fraction -1e-4)*step(salmoura.Volume \
Fraction -1e-4)
Mz = 0[N/m^3]
Nx = agua.Volume Fraction.Gradient X
Ny = agua.Volume Fraction.Gradient Y
Nz = 0.0[m^-1]
VF = 0.5*tanh(x/0.085[cm])+0.5
END
END
MATERIAL: agua
Material Description = Water (liquid)
Material Group = Water Data,Constant Property Liquids
Option = Pure Substance
Thermodynamic State = Liquid
PROPERTIES:
Option = General Material
EQUATION OF STATE:
Density = 1000 [kg m^-3]
Molar Mass = 18.02 [kg kmol^-1]
Option = Value
END
SPECIFIC HEAT CAPACITY:
Option = Value
Specific Heat Capacity = 4181.7 [J kg^-1 K^-1]
Specific Heat Type = Constant Pressure
END
REFERENCE STATE:
Option = Specified Point
Reference Pressure = 1 [atm]
Reference Specific Enthalpy = 0.0 [J/kg]
Reference Specific Entropy = 0.0 [J/kg/K]
Reference Temperature = 25 [C]
END
DYNAMIC VISCOSITY:
Dynamic Viscosity = 8.899E-4 [kg m^-1 s^-1]
Option = Value
END
THERMAL CONDUCTIVITY:
Option = Value
Thermal Conductivity = 0.6069 [W m^-1 K^-1]
END
ABSORPTION COEFFICIENT:
Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]

```

```
Option = Value
END
SCATTERING COEFFICIENT:
Option = Value
Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
Option = Value
Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
THERMAL EXPANSIVITY:
Option = Value
Thermal Expansivity = 2.57E-04 [K^-1]
END
END
END
MATERIAL: salmoura
Material Group = User
Option = Pure Substance
Thermodynamic State = Liquid
PROPERTIES:
Option = General Material
EQUATION OF STATE:
Density = 1005.1 [kg m^-3]
Molar Mass = 18.02 [kg kmol^-1]
Option = Value
END
SPECIFIC HEAT CAPACITY:
Option = Value
Specific Heat Capacity = 4187.7 [J kg^-1 K^-1]
Specific Heat Type = Constant Pressure
END
DYNAMIC VISCOSITY:
Dynamic Viscosity = 1e-3 [Pa s]
Option = Value
END
END
END
FLOW: Flow Analysis 1
SOLUTION UNITS:
Angle Units = [rad]
Length Units = [m]
Mass Units = [kg]
Solid Angle Units = [sr]
Temperature Units = [K]
```

```
Time Units = [s]
END
ANALYSIS TYPE:
Option = Transient
EXTERNAL SOLVER COUPLING:
Option = None
END
INITIAL TIME:
Option = Automatic with Value
Time = 0 [s]
END
TIME DURATION:
Option = Total Time
Total Time = 20 [s]
END
TIME STEPS:
Option = Timesteps
Timesteps = 0.001 [s]
END
END
DOMAIN: Dominio
Coord Frame = Coord 0
Domain Type = Fluid
Location = SOLID
BOUNDARY: Back
Boundary Type = SYMMETRY
Location = BACK
END
BOUNDARY: Front
Boundary Type = SYMMETRY
Location = FRONT
END
BOUNDARY: Wall
Boundary Type = WALL
Location = WALL
BOUNDARY CONDITIONS:
MASS AND MOMENTUM:
Option = No Slip Wall
END
END
WALL CONTACT MODEL:
Option = Use Volume Fraction
END
END
DOMAIN MODELS:
BUOYANCY MODEL:
```



```
Buoyancy Reference Density = 1000 [kg m^-3]
Gravity X Component = 0 [m s^-2]
Gravity Y Component = -g
Gravity Z Component = 0 [m s^-2]
Option = Buoyant
BUOYANCY REFERENCE LOCATION:
  Option = Automatic
END
END
DOMAIN MOTION:
  Option = Stationary
END
MESH DEFORMATION:
  Option = None
END
REFERENCE PRESSURE:
  Reference Pressure = 1 [atm]
END
END
FLUID DEFINITION: agua
Material = agua
Option = Material Library
MORPHOLOGY:
  Minimum Volume Fraction = 1e-15
  Option = Continuous Fluid
END
END
FLUID DEFINITION: salmoura
Material = salmoura
Option = Material Library
MORPHOLOGY:
  Minimum Volume Fraction = 1e-15
  Option = Continuous Fluid
END
END
FLUID MODELS:
COMBUSTION MODEL:
  Option = None
END
FLUID: agua
FLUID BUOYANCY MODEL:
  Option = Density Difference
END
END
FLUID: salmoura
FLUID BUOYANCY MODEL:
```

```
Option = Density Difference
END
END
HEAT TRANSFER MODEL:
Homogeneous Model = Off
Option = None
END
THERMAL RADIATION MODEL:
Option = None
END
TURBULENCE MODEL:
Homogeneous Model = False
Option = Laminar
END
END
FLUID PAIR: agua | salmoura
INTERPHASE TRANSFER MODEL:
Option = Free Surface
END
MASS TRANSFER:
Option = None
END
MOMENTUM TRANSFER:
DRAG FORCE:
Drag Coefficient = 1e-15
Option = Drag Coefficient
END
END
SURFACE TENSION MODEL:
Option = None
END
END
INITIALISATION:
Option = Automatic
FLUID: agua
INITIAL CONDITIONS:
Velocity Type = Cartesian
CARTESIAN VELOCITY COMPONENTS:
Option = Automatic with Value
U = 0 [m s^-1]
V = 0 [m s^-1]
W = 0 [m s^-1]
END
VOLUME FRACTION:
Option = Automatic with Value
Volume Fraction = VF
```

```
END
END
END
FLUID: salmoura
INITIAL CONDITIONS:
  Velocity Type = Cartesian
  CARTESIAN VELOCITY COMPONENTS:
    Option = Automatic with Value
    U = 0 [m s^-1]
    V = 0 [m s^-1]
    W = 0 [m s^-1]
  END
  VOLUME FRACTION:
    Option = Automatic with Value
    Volume Fraction = 1-VF
  END
  END
  INITIAL CONDITIONS:
  STATIC PRESSURE:
    Option = Automatic with Value
    Relative Pressure = 0 [Pa]
  END
  END
  END
  MULTIPHASE MODELS:
  Homogeneous Model = False
  FREE SURFACE MODEL:
    Interface Compression Level = 2
    Option = Standard
  END
  END
  SUBDOMAIN: Subdomain 1
  Coord Frame = Coord 0
  Location = SOLID
  FLUID: agua
  SOURCES:
  MOMENTUM SOURCE:
  GENERAL MOMENTUM SOURCE:
    Include Coefficient in Rhie Chow = On
    Momentum Source X Component = Mx
    Momentum Source Y Component = My
    Momentum Source Z Component = Mz
    Option = Cartesian Components
    Redistribute in Rhie Chow = On
  END
```

```
END
END
END
FLUID: salmoura
SOURCES:
MOMENTUM SOURCE:
GENERAL MOMENTUM SOURCE:
  Include Coefficient in Rhie Chow = On
  Momentum Source X Component = Mx
  Momentum Source Y Component = My
  Momentum Source Z Component = Mz
  Option = Cartesian Components
  Redistribute in Rhie Chow = On
END
END
END
END
END
OUTPUT CONTROL:
BACKUP RESULTS: Backup Results 1
  File Compression Level = Default
  Option = Standard
OUTPUT FREQUENCY:
  Elapsed Time Interval = 15 [min]
  Option = Elapsed Time Interval
END
END
RESULTS:
  File Compression Level = Default
  Option = Standard
END
TRANSIENT RESULTS: Transient Results 1
  File Compression Level = Default
  Include Mesh = No
  Option = Selected Variables
  Output Variable Operators = All
  Output Variables List = agua.Conservative Volume \
  Fraction,agua.Density,agua.Velocity u,agua.Velocity v,agua.Velocity \
  w,agua.Volume Fraction,agua.Shear Strain Rate,salmoura.Conservative \
  Volume Fraction,salmoura.Density,salmoura.Dynamic \
  Viscosity,agua.Dynamic Viscosity,Absolute \
  Pressure,Pressure,salmoura.Superficial Velocity \
  X,salmoura.Superficial Velocity Y,salmoura.Superficial Velocity \
  Z,Volume of Finite Volumes,agua.Superficial Velocity \
  X,agua.Superficial Velocity Y,agua.Superficial Velocity \
```

```
Z,salmoura.Volume Fraction,salmoura.Shear Strain \
Rate,salmoura.Velocity u,salmoura.Velocity v,salmoura.Velocity w
OUTPUT FREQUENCY:
  Option = Time Interval
  Time Interval = 0.02 [s]
END
END
END
SOLVER CONTROL:
ADVECTION SCHEME:
  Option = High Resolution
END
BODY FORCES:
  Body Force Averaging Type = Harmonic
END
CONVERGENCE CONTROL:
  Maximum Number of Coefficient Loops = 10
  Minimum Number of Coefficient Loops = 3
  Timescale Control = Coefficient Loops
END
CONVERGENCE CRITERIA:
  Residual Target = 1e-4
  Residual Type = RMS
END
EQUATION CLASS: continuity
ADVECTION SCHEME:
  Option = High Resolution
END
TRANSIENT SCHEME:
  Option = Second Order Backward Euler
TIMESTEP INITIALISATION:
  Option = Automatic
END
END
END
EQUATION CLASS: momentum
ADVECTION SCHEME:
  Option = High Resolution
END
TRANSIENT SCHEME:
  Option = Second Order Backward Euler
TIMESTEP INITIALISATION:
  Option = Automatic
END
END
END
```

```
MULTIPHASE CONTROL:
  Volume Fraction Coupling = Segregated
END
TRANSIENT SCHEME:
  Option = Second Order Backward Euler
TIMESTEP INITIALISATION:
  Option = Previous Timestep
END
END
EXPERT PARAMETERS:
  mg solver option = 3
  model coefficient relaxation = 0.5
  multigrid solver = t
  outer loop relaxations default = 0.75
  overlap relaxation fluids = 0.25
  relax mass = 0.75
  solver relaxation fluids = 0.9
  solver relaxation scalar = 0.5
END
END
COMMAND FILE:
  Results Version = 12.1
  Version = 12.1
END
SIMULATION CONTROL:
EXECUTION CONTROL:
  EXECUTABLE SELECTION:
    Double Precision = On
  END
INTERPOLATOR STEP CONTROL:
  Runtime Priority = Standard
MEMORY CONTROL:
  Memory Allocation Factor = 1.0
END
END
PARALLEL HOST LIBRARY:
  HOST DEFINITION: host6521
  Remote Host Name = 6521
  Host Architecture String = winnt-amd64
  Installation Root = C:\ANSYS Inc\v%v\CFX
END
END
PARTITIONER STEP CONTROL:
  Multidomain Option = Independent Partitioning
  Runtime Priority = Standard
```

```
EXECUTABLE SELECTION:
  Use Large Problem Partitioner = Off
END
MEMORY CONTROL:
  Memory Allocation Factor = 1.0
END
PARTITIONING TYPE:
  MeTiS Type = k-way
  Option = MeTiS
  Partition Size Rule = Automatic
  Partition Weight Factors = 0.33333, 0.33333, 0.33333
END
END
RUN DEFINITION:
  Run Mode = Full
  Solver Input File = I:\Caso1.res
END
SOLVER STEP CONTROL:
  Runtime Priority = Standard
MEMORY CONTROL:
  Memory Allocation Factor = 1.0
END
PARALLEL ENVIRONMENT:
  Number of Processes = 3
  Start Method = HP MPI Local Parallel
  Parallel Host List = host6521*3
END
END
END
END
```


ANEXO**3****ARTIGO**

Manuscrito do submetido ao periodico Chemical Engineering Science

Ref: CES-D-14-00111

Title: A Two-Fluid Model with a Tensor Closure Model Approach for Free Surface Flow Simulations

Authors: Ricardo Vicente de Paula Rezende, Ph.D.; Antônio A Ulson de Souza, Ph.D.; Selene M A. Guelli U. Souza, Ph.D.

Article Type: Regular Article

A Two-Fluid Model with a Tensor Closure Model Approach for Free Surface Flow Simulations.

Ricardo V. P. Rezende^{1,a}, Antônio A. Ulson de Souza², Selene M. A. Guelli U. Souza³

^{1,2,3} *Chemical Systems Simulation Lab – LABSIN, Chemical Engineering Department, Federal University of Santa Catarina- UFSC, Florianópolis, Brazil. Zip Code: 88040-900. P.O. Box 476
Tel.: +55 48 3721 5231, Fax: +55 48 3721 9687*

^a rezendervp@gmail.com

Abstract: In multiphase flows, the mathematical and physical nature of the phenomena leads to the postulation of closure models to describe the exchange of momentum across the interface as well as other properties such as heat and mass, and there are various models available with this intent. However, unlike dispersed flows, free surface flows have a lack of correlations for the drag coefficient, which is an issue to manage in this kind of flows. In this paper, the calculation of the interfacial density force was done dynamically without the use of any correlation through the modeling, the viscous tensor and the normal vector to the interface. The model has been applied to benchmark cases as vertical shear flow, dam break and Rayleigh-Taylor instability. The comparison of the results was satisfactory with good agreement with numerical and experimental data from the literature, as well as with the standard approach also employed. These results indicate that the model is a good alternative for stratified flows, and can be used directly to calculate the drag coefficient when the standard formulation is preferred.

Key-words: free surface flow, closure model, two-phase flow, CFD

Highlights

- An interfacial closure model to two-fluid model with tensor approach is proposed.
- Well know benchmark free-surface problems have been used to model validation.

- Calculation of the drag coefficients are in good agreement with classic formulation.
- Experimental data from dam break problem were well described with tensor model.
- The model can be used to calculate the drag coefficient in the classical approach.

1. Introduction

Free surface flows are common and represent a considerable number of problems involving multiphase flows. When, in a multiphase system, the separation of phases results in a relatively well-defined interface, the system may be classified as stratified and a suitable approach to this morphology must be used. Industrially, this kind of flows has a great importance in the petrochemical and nuclear area, e.g., the performance of unit operations and the safety of these refining operations, transport of heat and mass depend on the flow dynamics within the equipment.

Although many studies have been devoted to multiphase flows in recent years, systems classified as dispersed or poly-dispersed are still receiving more attention due to their importance in equipment such as bubble columns and multiphase reactors. In addition, much effort has been committed to the improvement of their closure models and correlations. This dedication may be found in experimental and numerical studies. Although stratified flows do not receive the same level of attention, two of the methods developed to deal with these flows deserve to be singled out for their wide applicability: the Volume of Fluid method – VOF (Hirt and Nichols, 1981) and Level Set method (Bakker, 2002, Fournier et al., 2002). These methods and their variants are employed in commercial codes, e.g., FLOW3D, ANSYS FLUENT and COMSOL Multiphysics.

Other approaches are also capable of dealing with this class of flow as the Smoothed Particle Hydrodynamics Method – SPH Method (Monaghan, 1994, Monaghan, 2011, Faxén, 1922, Lucy, 1977), the Immersed Boundary and Front Tracking Methods (Peskin, 1977, Peskin, 2002, Hua et al., 2008, Udaykumar et al., 1997), and the Cut-Cell Method (Hua and Lou, 2007, Chung, 2013);

however, their use in physical applications of industrial use is still rare.

Nevertheless, the number of available analytical tools and flows with a high degree of freedom and complexity does not always enable a reliable analysis. Changes in the local morphology turn flow identification (dispersed or free surface flux) into a challenge. Some flow regions may have a well-defined free surface, while others may show droplets or bubbles. What rigorously, it requires a different treatment for each one of these regions and appropriate correlations for the drag coefficient.

In this context, in a sequence of studies, Egorov (2004), Höhne and Vallée (2008) Höhne (2009) and Höhne and Vallée (2010) and, more recently, Deendarlianto et al. (2012), used an approach in which the three morphologies (bubbles, free-surface, and droplets) are simultaneously considered, and thus, improve the two-fluids model.

The Algebraic Interfacial Area Density Model - AIAD - calculates the interfacial density and the drag coefficient as a linear composition of the three morphologies; the interface between the free surfaces is considered as a wall and the drag coefficient is computed dynamically as a function of the viscous stress in this region. However, they still keep the same functional form of the term of the drag force

$$\mathbf{F}^{Drag} = \frac{1}{2} C_D A_i \rho_{LG} |\mathbf{u}_L - \mathbf{u}_G| (\mathbf{u}_L - \mathbf{u}_G), \quad (1)$$

where C_D is the drag coefficient, A_i is the interfacial area density, ρ_{LG} is the mixture density, and $(\mathbf{u}_L - \mathbf{u}_G)$ is the slip velocity.

Another detail refers to the forces that are strictly inherent in dispersed systems, such as virtual mass force and lift force, and despite the improvements of this model, these forces do not yet account for the AIAD model.

This paper presents a different approach and proposes modeling the interfacial force density as a function of viscous stress and volume fraction gradients. This formulation can be characterized as a volumetric method because there is no need to track or reconstruct an interface to calculate the parameters of the model, although a reconstruction method can still be used and the same calculation can be made and applied on the tracked or

reconstructed interface. The direct advantage that arises from this philosophy is to maintain the formulation as close as possible to the original averaged term without an aggressive postulation, instead of maintaining the functional form of the drag force given in Equation (1) and the superposition of different forces.

The model has been implemented and solved using the ANSYS CFX commercial code. The accuracy, validation and performance of the model were measured by simulating three well-known cases found in the literature:

1. Vertical Shear Flow or the Brine Problem.
2. Rayleigh-Taylor's Instability.
3. Dam Break Problem.

First, the mathematical formulation is described, and then the methodology of analysis and simulation are detailed. Finally, the validation of the results is presented and their implications are discussed and followed by the conclusions.

2. Mathematical Model

Based on the Eulerian approach, this paper considers a two-phase flow and accounts for the balance of mass and momentum for each phase. In the selected test cases, the two-phase flow was considered transient and two-dimensional (2D) for simplicity. No turbulence model was used and, when possible, a direct numerical simulation (DNS) was performed. Other hypotheses were also employed:

1. Incompressible fluids;
2. Newtonian fluids;
3. Isothermal flow without viscous dissipation;
4. Immiscible fluids;
5. There is no mass transfer.

With such assumptions, the two-fluid model assumes the following form

$$\frac{\partial (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) = 0, \quad (2)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) + \nabla \cdot (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle \otimes \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) = \\
& -\nabla (r_\alpha \langle p \rangle) + \nabla \cdot [r_\alpha \mu_\alpha \langle \nabla \mathbf{u}_\alpha + \nabla \mathbf{u}_\alpha^T \rangle] + \dots \\
& \dots + r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \mathbf{g} + \mathbf{M}_\alpha,
\end{aligned} \tag{3}$$

$$\sum_{\alpha=1}^2 r_\alpha = 1, \tag{4}$$

where $\langle \rangle$ represents the Ensemble Average integral operator; r_α is the volume fraction; \mathbf{u}_α , ρ_α , μ_α represent the velocity, density and dynamic viscosity of phase α , respectively; p represents the pressure field shared among the phases, and \mathbf{M}_α is the interfacial force density.

The last term in Equation (3), interfacial force density, describes the momentum transfer across the interface and, from the classic formulation, it may be expressed as a linear composition of several forces: $\mathbf{M}_\alpha = \mathbf{F}_\alpha^{Drag} + \mathbf{F}_\alpha^{Lift} + \mathbf{F}_\alpha^{VM} + \mathbf{F}_\alpha^{Basset} + \dots$, with each one having a distinct functional form of its own. However, this process is carried out after the averaging procedure of the transport equations, and in the absence of mass transfer, it assumes the following form

$$\mathbf{M}_\alpha = -\langle \overline{\mathbf{T}}_i \cdot \nabla \chi_\alpha \rangle, \tag{5}$$

,where $\overline{\mathbf{T}}_i$ is the viscous tensor on the interface; and χ_α is the phase indicator function:

$$\chi_\alpha(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{if } \mathbf{x} \in \alpha, \\ 0 & \text{if } \mathbf{x} \notin \alpha. \end{cases} \tag{6}$$

The phase indicator function acts as a Dirac Delta function inside the integral operator of average

$$\mathbf{M}_\alpha = \int_E \overline{\mathbf{T}}_i \cdot \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \hat{\mathbf{n}}_i dm(\mu) \tag{7}$$

where m is the probability that the event μ may occur within the ensemble of the runs E (Drew, 1983, Drew, 1992, Drew and

Passman, 1999). Figure 1 depicts the projection of the tensor on each side of the interface. The resulting vector from the dot product between the interfacial viscous tensor and the gradient of the phase indicator function is the force per unit of volume acting on the interface.

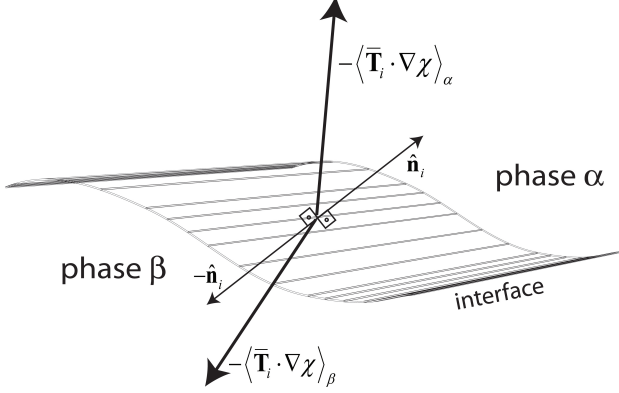


Figure 1. Schematic representation of the interface that depicts the normal vectors and the interfacial force density is mathematically described as an ensemble average of the dot product between the viscous tensor at the interface and the gradient of the phase indicator function.

The average of the phase indicator function is defined as the volume fraction, $\langle \chi_\alpha \rangle \equiv r_\alpha$, or in statistical terms, the probability of finding a phase in a given position \mathbf{X} , at a time t , and it represents its potential presence (Burns, 2002). The magnitude of its gradient thus represents the density of the interfacial area, when only two phases are present

$$A_i \equiv \|\nabla r_\alpha\|. \quad (8)$$

There is still a restriction of the jump condition, which in the absence of mass transfer processes, which can be written as,

$$\mathbf{M}_\alpha + \mathbf{M}_\beta = \mathbf{m}_i^\sigma \quad (9)$$

where \mathbf{m}_i^σ represents the surface tension force. The surface tension force is modeled and solved by the continuous surface force model (Brackbill et al., 1992), but the interfacial tension force is not always accounted for. It acts by balancing the forces on both sides of the

interface, and when the system is quiescent, Equation (9) results in a Young-Laplace's equation.

The proposed model retains the formulation as close as possible to the functional form of Equation (5), weighting the action of the stresses acting on the interface. Accounting for the interfacial force density of phase k as a single force: $\mathbf{M}_k = -\langle T_{ij} \rangle_k \partial_j r_k \hat{\mathbf{e}}_i$ is the resultant on the interface and can be assumed as

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta} = \left(-r_\alpha \langle \bar{\mathbf{T}}_i \rangle_\alpha \nabla r_\alpha \right) + \left(-r_\beta \langle \bar{\mathbf{T}}_i \rangle_\beta \nabla r_\beta \right). \quad (10).$$

Thus, the closure model employs a tensor approach. And as the closure models for turbulence, this model employs the Boussinesq's Hypothesis modeling the stresses on the interface as a function of velocity gradients; thus, in a two-dimensional approach, the interfacial force density is written as

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{\alpha\beta} = C_T \cdot & \left\{ -r_\alpha \langle \mu_\alpha \rangle \left\langle \left[\begin{array}{cc} \partial_x u_\alpha & \partial_y u_\alpha \\ \partial_x v_\alpha & \partial_y v_\alpha \end{array} \right] \right\rangle \cdot \left[\begin{array}{c} \partial_x r_\alpha \\ \partial_y r_\alpha \end{array} \right] + \dots \right. \\ & \left. \dots -r_\beta \langle \mu_\beta \rangle \left\langle \left[\begin{array}{cc} \partial_x u_\beta & \partial_y u_\beta \\ \partial_x v_\beta & \partial_y v_\beta \end{array} \right] \right\rangle \cdot \left[\begin{array}{c} \partial_x r_\beta \\ \partial_y r_\beta \end{array} \right] \right\} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \hat{\mathbf{e}}_k, \end{aligned} \quad (11)$$

where $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ is a delta function that activates the source term only in the interface \mathbf{x}_i and in its vicinity:

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \approx u(r_\alpha - r_{\alpha,\min}) \cdot u(r_{\beta,\min} - r_\beta), \quad (12)$$

u is a step function and $r_{k,\min}$ is the minimum volume fraction in which the interface is considered. In this study, the minimum volume fraction is considered equal to 10^{-5} . The direction of the normal vector is given by the gradients of volume fraction and its magnitude is the interfacial area density. The parameter C_T is a closure constant, but in this study, it is considered equal to 1.

Sometimes the density of the interfacial force, even without the limitation of constitutive models, is separated into two parts: one is due to viscous stress, and it is modeled in this study, and one is due to the pressure force or normal components of the stress

tensor that still works in a quiescent fluid. The term in question is the following:

$$(p_i - p_\alpha) \nabla r_\alpha, \quad (13)$$

where p_i is pressure on the interface, and p_α is the phase pressure. According to Drew (1983), the pressure may be calculated by

$$p_i = \langle p_\alpha \nabla \chi_\alpha \rangle \cdot \nabla r_\alpha \|\nabla r_\alpha\|^{-2}. \quad (14)$$

And according to Lamb (1945), the interfacial pressure difference of at least a potential flow is obtained by

$$p_i - p_\alpha = -C_p r_\alpha \rho_\alpha \|\mathbf{u}_{rel}\| \quad (15)$$

where \mathbf{u}_{rel} is the slip velocity; C_p is the pressure force coefficient.

However, in isochoric conditions or with incompressible fluids, with the absence of expansion and/or contraction of a bubble, at a microscopic level, a very fast balance of pressure occurs, hence, the pressure force is negligible or may be made equal to zero (Troshko and Hassan, 2001). However, in formulations where these assumptions are not valid, the model can be considered to account for the pressure force.

Finally, it is noteworthy that since the model is based on viscous stress, the components of the Reynolds tensor can also directly be added in the model, regardless of whether stress is from an URANS or LES model, which would account for the effects of turbulence on the behavior of the interface, an open problem with few contributions in this direction.

3. Methodology

3.1 Numerical Method

The model has been implemented in the commercial simulator ANSYS CFX release 12.1 through CCL coding, the native language of the software. The method used was the Finite Volume Method based on Elements - EbFVM, and the linear system is solved by an incomplete LU decomposition - ILU - associated with the

algebraic multigrid method - AMG - with additive corrections (Maliska, 2004).

Advective terms are managed by a high resolution scheme that automatically alternates between an upwind approximation of 1st and 2nd order according to the local flow conditions (Barth and Jeperson, 1989). The same philosophy is used for the good resolution of the interface in the treatment of the free surface. In this situation, the fixed mixing factor equals 2, which generates a counter diffusion, which makes its compression limited only by the mesh resolution. The transient terms are approximated by a regressive 2nd order Euler approximation, while the pressure-velocity coupling is handled by the 4th order Rhie-Chou method (Moguen et al., 2011).

Equation (11) is inserted into the system of equations as an additional source term. Its solution then gives the explicit form and is not part of the coefficient matrix.

The drag force given by Equation (1) is still present as part of the software implementation. However, the value of the drag coefficient, C_D , must be equal as close as possible to zero, but not equal to zero. This action virtually shuts down the drag term and avoids possible numerical oscillations or instabilities due to the consequent weakening of the coupling between phases. In this study, the drag coefficient has been determined as being equal to 10^{-15} .

A segregated solution has been used and the volume fraction field is then solved apart from hydrodynamic equations. As the source terms are solved explicitly and they are dependent on the volume fraction fields, this approach allows both of them to be on the same iterative level within each cycle of solution inside a given time step. This improves the stability of the solution.

Each case has its own mesh resolution, and all Cartesian meshes and each time step are calibrated according to each physical situation. This is presented in the next sections in the description of each selected benchmark problem.

The simulations were performed on an Intel Core™ i7 CPU @ 3,4 GHz, Sand Bridge 2nd Generation with eight HyperThread cores (four physical cores) with 16GB RAM @1333MHz DDR3 with Windows® 7 Ultimate 64-bit OS.

3.2 Analysis Methodology

To evaluate the model, the analysis methodology is based on the comparison of the results obtained by using the proposed model with similar cases reported in the literature. The cases have been chosen mostly based on their familiarity, data availability for comparison and ease of implementation. The validation, which is case-dependent, may be either numerical or experimental, or both, whenever possible.

In addition to validation, a comparison with the standard drag model has been also performed in order to establish the differences between the classical approach and the proposed model. It is worth noting, once again, that no turbulence model has been used. The explanation lies in the fact that turbulence models are not well defined for flows with more than one phase and they almost always have a homogeneous approach. Another reason lies in the fact that with the increase of the effective viscosity behavior with a more chaotic dynamics and details can be damped. And at this first step, effects from other models could affect the analysis of the performance of the proposed model itself. However, a more careful setup and a good design of mesh and time steps must be produced.

The next sections describe the study cases; they also present their configuration and relevant information so that they can be better understood.

3.3 Vertical Shear Flow

The problem of vertical shear flow, brine's problem, is a purely theoretical problem, and it is used for testing multiphase numerical codes. Bakker (2002) (available at <http://www.bakker.org/>) has tested this case in the FLUENT commercial code as a benchmark test of VOF algorithm. Figure 2 illustrates the configuration of the problem.

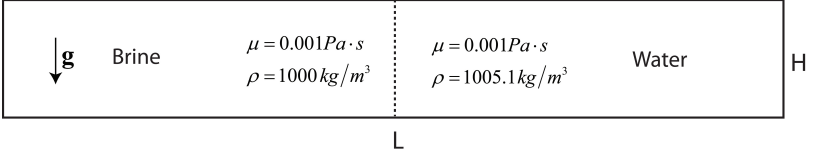


Figure 2. Schematic drawing of the brine problem. The rectangular domain with dimensions $L = 1.00\text{m}$ and $H = 0.15\text{m}$ has been filled with two fluids (water and brine), and each one occupies half of the domain and the fluids are initially at rest. By gravity, the heavier fluid – brine – seeps down, and the lighter one – water – flows upward and the interface is vertically sheared in the process.

In this case, two fluids, brine and pure water, are initially at rest, with each one occupying half of the domain. The driving force is the subtle density difference that generates a small buoyancy force and, thus, the fluids start to change their position while the interface is vertically sheared, basically generating only drag forces between the fluids.

One advantage of this problem is that even though the jump in the values of physical properties on the interface is subtle, only 0.5% is for density. This avoids numerical problems resulting from steep gradients in physical properties along the interface.

This is a problem of moderate Reynolds number; hence, it can be analyzed by a direct numerical simulation - DNS, which is interesting. But first, the characteristic scales of the flow should be calculated. According to Kolmogorov (1942),

$$\eta \equiv \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4}, \quad \tau \equiv \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2}, \quad \nu \equiv (\nu \varepsilon)^{1/4}, \quad (16)$$

which can be written as a function of the Reynolds number,

$$\eta \approx L \text{Re}^{-3/4}, \quad \tau \approx t \text{Re}^{-1/2}, \quad \nu \approx u \text{Re}^{-1/4}, \quad (17)$$

where L , t and u are the characteristic scales of length, time and speed of the problem, respectively. The Reynolds number is then calculated from these scales. The physical properties of the fluids are shown in Table 1.

Table 1. Physical properties of the fluids used in the study of Vertical Shear Flow.

Material	$\rho [kg/m^3]$	$\mu [Pa \cdot s]$
Water	1000.00	0.001
Brine	1005.10	0.001

The problem in question is considered to be two-dimensional with two length scales: $L=1.00m$ and $H=0.15m$. To determine speed range, one may simulate with a coarse mesh and verify scale velocity, or estimate it on the basis of the physical problem. Both alternatives have been tested. In a previous simulation study, the range of average speed was around $0.01m/s$. Thus, as the characteristic velocity scale we have $U \approx o(0.01m/s)$. Thus, the Reynolds number based on H is 5.34×10^3 , and Kolmogorov's spatial scale for this flow is $8.5 \times 10^{-4}m$. The calculation domain has been divided into a grid of 1181×177 nodes resulting in a uniform spacing equal to $8.4 \times 10^{-4}m$.

The shortest Kolmogorov's time scale is found considering the speed and spatial range, i.e., around $15s$ for one of the fluids to move through the entire length L . Thus, according to Equation (17), the short time scale is $\tau \approx 0.014s$. The used time step in this analysis was fixed and equal to $0.001s$, fourteen times below the characteristic scale. A total physical simulation time of 20 seconds was specified in order to capture the collision with the fronts of the side walls.

Because the domain is closed, the boundary conditions for speed are no-slip without a prescribed contact angle for volume fraction since the surface tension was not being considered.

3.4 Rayleigh-Taylor's Instability

A classic problem which consists in a rectangular domain with two immiscible fluids where the denser fluid initially lies on the less dense one, and they are separated by a well defined

interface. This meta-stable equilibrium is easily undone with some disturbance of the interface. Once the system is disturbed, gravity causes the acceleration of both fluids toward each other, and fluids exchange positions by action of the buoyancy force and the interface is sheared in the process.

Numerically, the interface must have a prescribed disturbance, otherwise the metastable equilibrium remains. A sinusoidal profile is enough to create a slight difference in static pressure and start the flow. Figure 3 shows the initial setup of the problem, the physical properties and dimensions of the field. This problem is easily found in the literature and it is often used as a benchmark in the analysis of numerical codes (Fournier et al., 2002, viz. He et al., 1999, Mehravaran and Hannani, 2008). A source where its description is quite simple and the results are clear and easily comparable is given by Jahanbakhsh et al. (2007).

In this case, the density ratio is greater than in the previous case one, approximately 33% heavier, which generates more intense buoyancy force. Despite the moderate Reynolds number, it is higher due to the higher speed ranges involved, which implicates the much smaller time and space scales; thus, a DNS approach was not feasible.

Nevertheless, the domains have been divided with the same mesh applied in the research by Jahanbakhsh et al. (2007), a Cartesian grid of 256 x 64 nodes. The physical setup is essentially the same as that of the previous model. The physical analysis time was 1s, and no turbulence model was used. The physical properties are shown in Table 2.

3.5 Dam Break

Perhaps the best known case is that of the dam break problem and it is almost always used in the verification and validation of multiphase codes, as in the work of Hirt and Nichols (1981). One may find several sources in the literature where the problem and its variations are analyzed. An experimental basis on which comparison is found is in the work of Martin and Moyce (1952), and the classical configuration of the experiment is shown Figure 4.

Table 1. Physical properties of fluids used in the study of Rayleigh-Taylor's instability.

Material	$\rho [kg/m^3]$	$\mu [Pa \cdot s]$
Light Fluid	0.1694	0.00313
Heavy Fluid	1.2250	0.00313

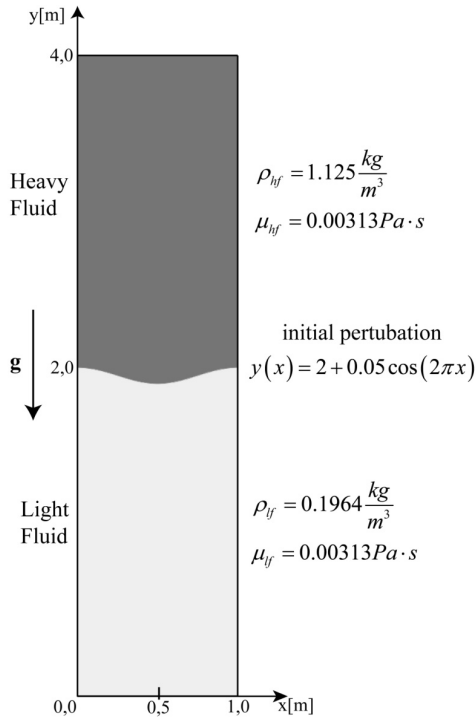


Figure 3. Sketch of the Rayleigh-Taylor's instability configuration. At the top of the rectangular domain is the heavy fluid and in the lower, the lighter one. Their respective physical properties are also shown. The fluids are separated by the interface with a sinusoidal initial disturbance.

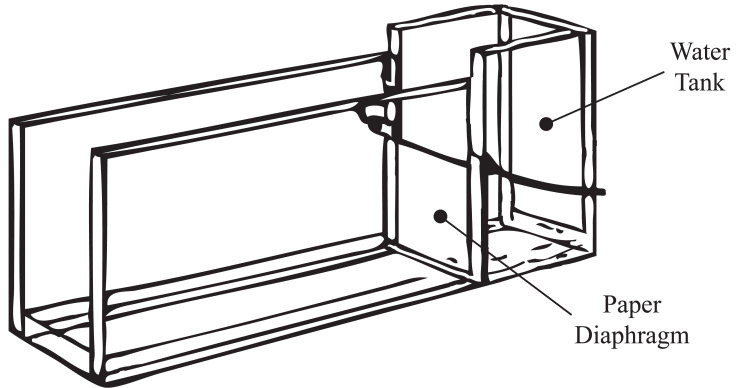


Figure 4. Experimental apparatus used in the problem of dam brake by Martin and Moyce (1952). A water column at rest is contained by a barrier formed by a paper diaphragm. By means of an electric current flowing in a conductor positioned at junctions around the diaphragm, the heat then breaks the junctions and the fluid column collapses, moving toward the exit of the apparatus.

Again, Jahanbakhsh et al. (2007) provide a good comparative basis in addition to comparing the differences between 2D and 3D analysis, concluding that the results are nearly identical, and the small difference with the higher computational cost is not an advantage.

Besides being a classic problem for the verification and validation of multiphase codes and models, the features of the problem add more difficulties compared to the previous ones. In this case, the difference in physical properties is greatly increased. The fluids in question are atmospheric air and pure water at 25°C, which have a density ratio of about 1000; the viscosities are quite different and the shear strain rates involved, associated with sudden acceleration, turn this seemingly simple problem into a delicate numerical problem to deal with. The physical properties of the fluids are shown in Table 3.

Figure 5 shows the calculation domain with $a = 0.05715$ m. The domain is initially divided into a Cartesian mesh of 41 x 161 nodes and refined in two 81 x 321 nodes, and four times the initial spacing (161 x 641 nodes), with constant time step of 0.0001s.

Table 3. Physical properties of fluids used in the Dam Break problem.

Material	ρ [kg/m ³]	μ [Pa·s]
Water	1000.00	0.00100
Air	1.00	0.00002

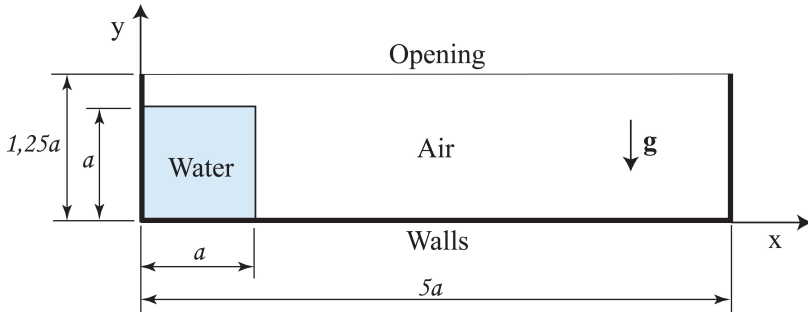


Figure 5. Schematic illustration of the calculation domain. The water column is initially at rest on the left. The boundary conditions and also the proportions domain are indicated in the Figure.

The time scale of the process is much lower, about 0.2s for the advancing front of the liquid to reach the right end. But the problem was simulated twice this time to determine the performance of the model in a collision with the right wall.

The results and discussion are presented in the next section.

4. Results and Discussion

4.1. Vertical Shear Flow

Figure 6 shows a comparison of results over time against those reported by Bakker (2002). The macroscopic behavior presents similarities with the appearance of coiled structures and a certain organization in time and space, such as Kelvin-Helmholtz structures. However, the results obtained with the tensor model have a more complex and chaotic regime.

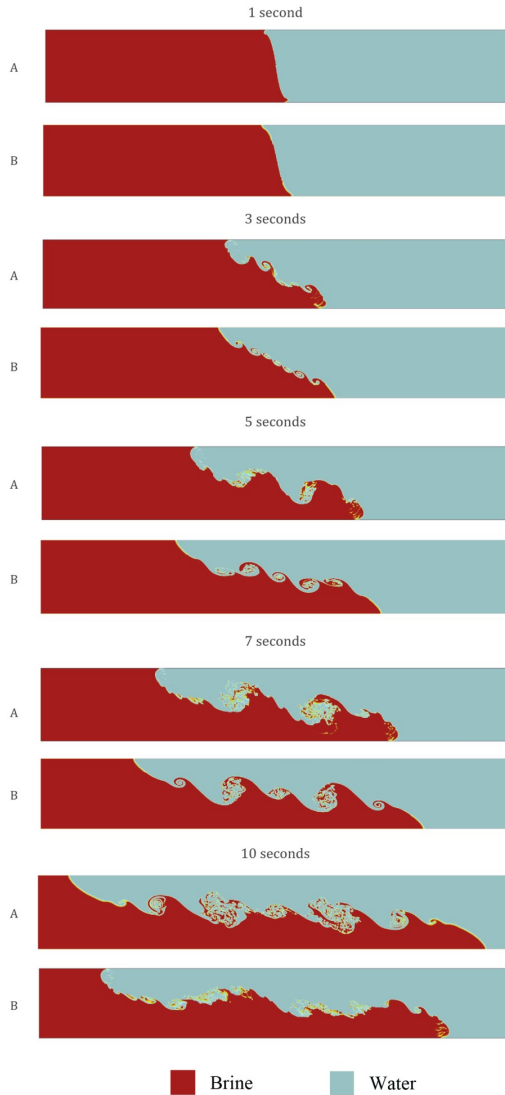


Figure 6. Comparison of the results obtained by Bakker (2002) (A) and in this study (B) using the tensor formulation. The behavior is similar with local differences as vortex structures and position of the advancing front. The latter result is a function of not prescribed contact angle and some differences in the numerical formulations.

Another difference refers to the position of the fluid fronts in the upper and lower walls. On the results of Bakker (2002) the interface always has a contact angle close to 90° , while in the model of this paper it does not happen. As the model solved in this work for this case does not have a prescribed contact angle, the interface is free and by the no-slip condition, it tends to be delayed with respect to faster portions of the fluid above it.

The mathematical models and numerical methods are also different. Bakker (2002) has used a VOF model with an interface reconstruction method solving it with the FVM, while in this work the two-fluid model with a high resolution interface compression algorithm was applied and the PDE system was solved by the EbFVM with a DNS analysis. Boundary conditions have a quite different treatment in the two methods, although they both maintain a characteristic conservation of flows. Despite these local differences, the general behavior was satisfactory with each model having the same tendencies. The same structures are presented in both results, and they differ in the stability and complexity of the interface.

A comparison with the classical approach according to Equation (1) for the drag force was performed and is shown in Figure 7. The classical approach considering only the drag force had the same chaotic behavior breaks and eddies cascading observed with the tensor model. But from a macroscopic point of view, they have almost the same flow structure and the differences are restricted to details of the interface.

The degeneration of the free surface observed in all three approaches is precisely the difficulty that Höhne and Vallée attempted to circumvent with relative success with the AIAD model (Höhne and Vallée, 2008). The drops detached and recaptured by the eddies on the interface follow another dynamic and may suffer the action of other effects, e.g. virtual mass and lift forces, which are still not contemplated by the AIAD model. Nevertheless, the tensor model is the joint action of the forces on the interface without decomposition or distinction of effects.

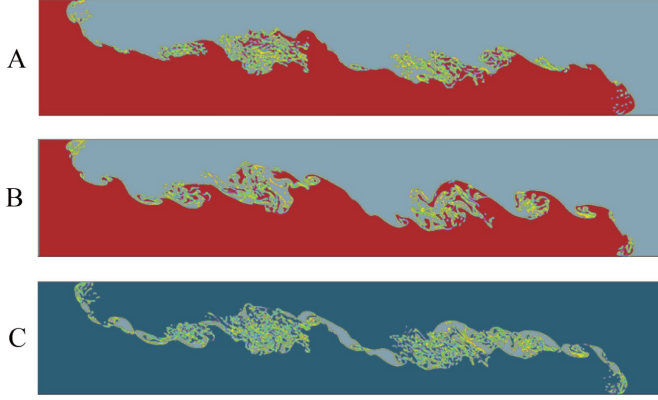


Figure 7. Comparison between the tensor model (A) proposed in this paper, and the classical approach (B) employing drag force with a constant drag coefficient equal to 0.44. In (C), the difference between the two results is shown.

In these comparisons, the magnitude of the drag coefficient, C_D , was also measured. The drag coefficient is a parameter representative of phase behavior. The drag coefficient may be defined as

$$C_D = \frac{\tilde{F}}{\frac{1}{2} \rho \tilde{U}^2 A_i}, \quad (18)$$

where \tilde{F} and \tilde{U} are the magnitudes of the force and velocity vectors, respectively; ρ is the phase density; and A_i is the interfacial area. For this calculation, a material surface should be defined and an isosurface with volume fraction equal to 0.5 was chosen to represent equal propability of both phases present at some point. If there is an interface, this is where both phases act in equal proportion.

Both force and speed were set for the calculation as mean values

$$\tilde{F} = \frac{\int_{A_i} F dA}{\int_{A_i} dA} \quad (19)$$

and

$$\tilde{U}_b = \frac{\int_{A_i} r_\alpha U_\alpha dV}{\int_{A_i} r_\alpha dV} \quad (20)$$

The force is evaluated as the active average over the interface area - defined by an isosurface - while the average speed is the barycentric velocity of the material volume of fluid, calculated as a volumetric average of phase. The calculation was carried out dynamically and demanded a considerable computational effort because the interface assumes a more complicated structure with time.

A comparison is shown in Figure 8. The initial velocity is zero and at the first moments the fluids suffer the effects of acceleration as a result of buoyancy. The drag coefficients are higher at the beginning (not defined for $t = 0s$) and the system accelerates until it has reached an approximately constant level, with drag coefficients around 0.3 to 0.4 for the drag model, and 0.9 to 1.0 for the tensor model. The curves are very similar and both models have almost the same result for the drag coefficient until the time of 8.5 seconds when they separate. At this time, what happens is the increase of the dynamic behavior of the interface and the formation of eddies and more breakage and coalescence of more chaotic structures.

The collision of the advance fronts with the sidewalls did not result in numerical difficulties or spurious results. In relation to the computational performance, the computation time took ten days for a physical time of 20 seconds regarding the tensor model, and about twelve days for the drag model.

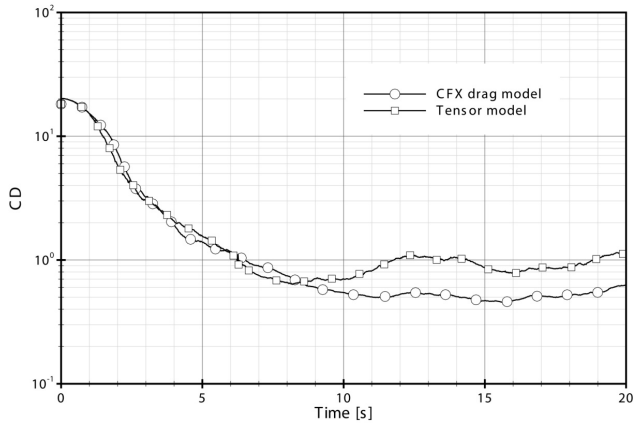


Figure 8. Comparative graph of the drag coefficients calculated for the vertical shear flow according to Equation (18) using the classical formulation drag and the tensor formulation proposed in this study.

4.2. Rayleigh-Taylor's Instability

This is also a problem with a moderate Reynolds number and it can be treated by means of a DNS analysis. However, as a result of the greater computational effort compared to the previous case, such analysis was not performed. Data for comparison are provided by Jahanbakhsh et al. (2007). The authors used a VOF model with a CICSAM method (Ubbink and Issa, 1999). No turbulence model was used either, without, however, to be a DNS simulation. It is far away from it; the mesh spacing is at least ten times above the lower scale of the flow.

The simulation used a two-dimensional mesh of 64×256 nodes, and the physical setup is still the same as the previous model, using the same time step, but with a prescribed contact angle equal to 90° . The physical time was fixed in 1 second, spending a computation time of three days.

Figure 9 shows a comparison of the results. Again, the proposed model shows a more pronounced dynamic behavior and a training cascade of ripples on the interface with detachment of portions of fluid. However, the position, curvature and size of the advancing front are nearly the same in both cases. Along the walls,

interfaces have different positions and eddy formation was not observed in the work of Jahanbakhsh et al. (2007) .

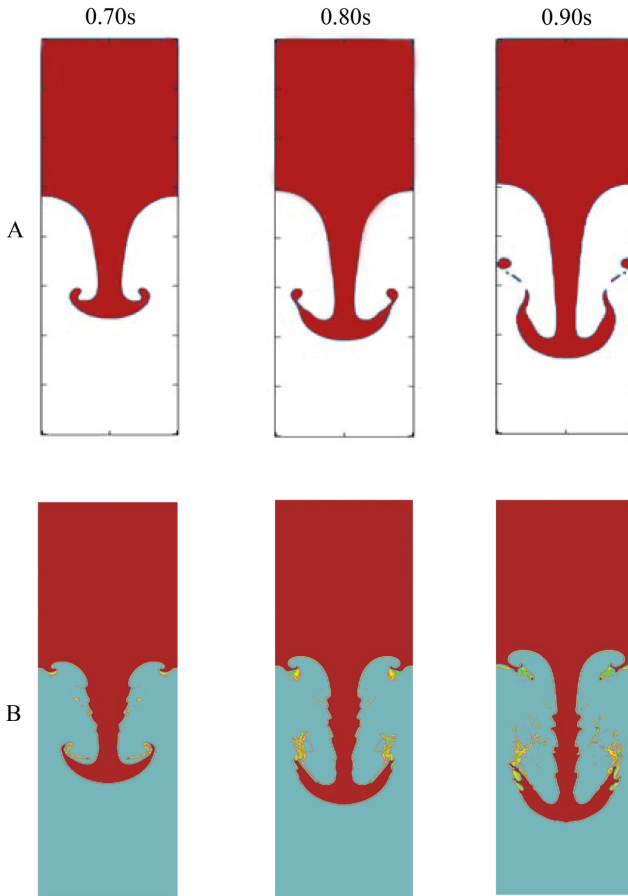


Figure 9. Comparison of the volume fraction fields during the advance of the heavy fluid. (A) represents the results of Jahanbakhsh et al. (2007), and (B), the results of this work. The position of the front is the same, but in (B) the results again reveal a more chaotic morphology and detachment drops.

A comparison with the two-fluid model with drag force was performed in order to check if any of the behaviors are repeated. Figure 10 compares the results two-fluid with the drag model and

the proposed tensor model in this work. The drag coefficient was set at 0.44.

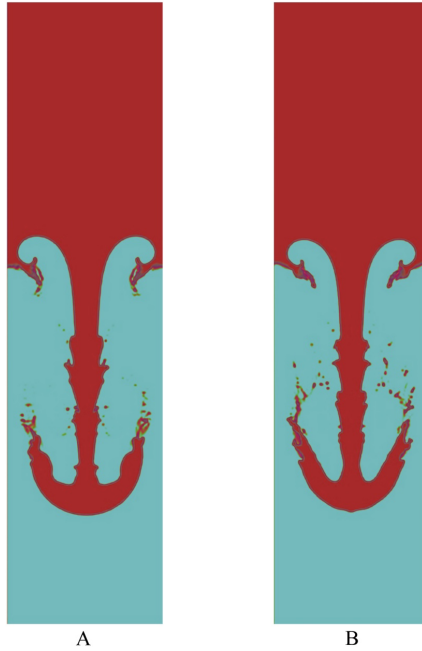


Figure 10. Comparative results obtained with the two-fluid model with (A) standard drag, and (B) the tensor model. They both have a more chaotic behavior with minor differences in the behavior of the interface.

When compared with the drag model, the tensor model presents a chaotic behavior of the interface. The differences observed referred to small scales of the flow; the macroscopic behavior is still the same in the three approaches. And in general, the results obtained with the two-fluid model are more dynamic than those obtained by the VOF formulation, whether using the classical drag force or the tensor model.

The same procedure described in the previous section to calculate the drag coefficient was repeated here. Figure 11 shows the results and they are in good agreement. There is a small divergence of the curves starting at time 0.7s, when the behavior of

the interface toward the tensor model starts to become chaotic with detachment of fluid. However, this difference is much more subtle than in the vertical shear flow. And from the quantitative point of view, one can say that the models are equivalent.

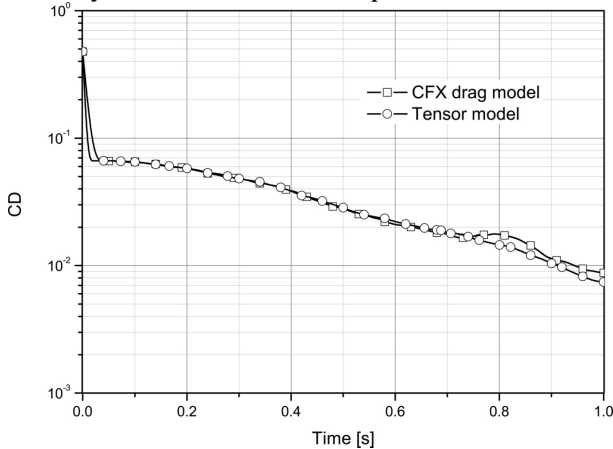


Figure 11. Comparative graph of the drag coefficients calculated for the Rayleigh-Taylor instability in accordance with Equation (18) using the classical drag formulation and the tensor formulation.

4.3. Dam Break

This problem, unlike the previous ones, has a high difference in physical properties and higher speed ranges. Without the use of a turbulence model, the convergence of this case is more delicate. The process takes place very quickly - in about 0.2 seconds. The sharp variation of the fields tends to generate oscillations and divergence in solution, which happened at the early stages. Some changes in the solver control parameters and the ten-fold reduction of the time step (0.0001s) were sufficient to stabilize the solution. Computation time was approximately 10 days for the finest mesh.

Jahanbakhsh et al. (2007) showed that there are not significant gains with a three-dimensional simulation to justify the computational effort. The 2D domain was initially subdivided into 41 x 161 nodes, a relatively coarse mesh.

In this particular case, a phenomenon occurred systematically: the interface was always broken *exactly* at time

0.112s. And as a result of accelerations, the high ratios of physical properties and a higher Reynolds number, it was assumed initially that some kind of undamped turbulent instability was acting and a LES approach was employed, however, the same behavior at the same instant of time occurred, regardless of mesh refinement or time step adjustment. After a careful analysis, the vorticity field showed a correlation with the phenomenon. The interface was stretched by eddies generated on the interface to the point of breaking it.

Despite this local distinct behavior, the surge front and the column height of the water remained unchanged as for their displacement as described in the literature. To circumvent the interface breaking, surface tension (ST) was taken into account for the traction forces to equilibrate the system, as indicated by jump condition at the interface. The insertion of tension does not imply any problem, because it is present only if the local curvature of the interface is important. To complete the model, a prescribed contact angle of 90° was imposed at the walls. The coefficient of interfacial tension for the air-water system was considered equal to 0.071N/m . Four different situations were studied :

1. Standard mesh (41 x 161 nodes);
2. Standard mesh + surface tension (ST);
3. Refined 2x (ref2x) + surface tension (ST);
4. Refined 4x (ref4x) + surface tension (ST);

In Figure 11 and Figure 12, the results are shown and compared. All the results showed good agreement, but the latter (ref4x + ST) had a better performance, especially regarding the evolution of the height of the column. The deviations of the experimental results were also observed in other studies in the literature by several authors and attributed to experimental noise and lag in the measurements (Chung, 2013, Lind et al., 2012, Park et al., 2012, Hirt and Nichols, 1981). The temporal evolution of the collapse of the water column ref4x + ST case is shown in Figure 14. The thickness in the Figure is a graphical extrusion of the plane.

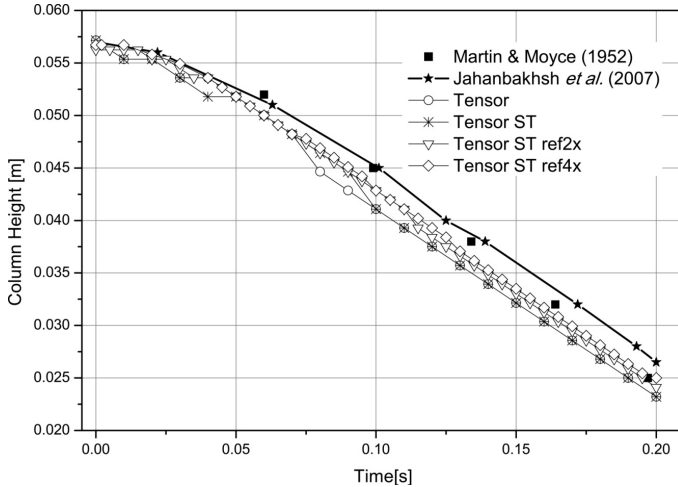


Figure 12. Comparative graph of the temporal evolution of the height of the liquid column, where comparisons were made for experimental and numerical data, and the influence of mesh refinement (ref) and the inclusion of surface tension (ST).

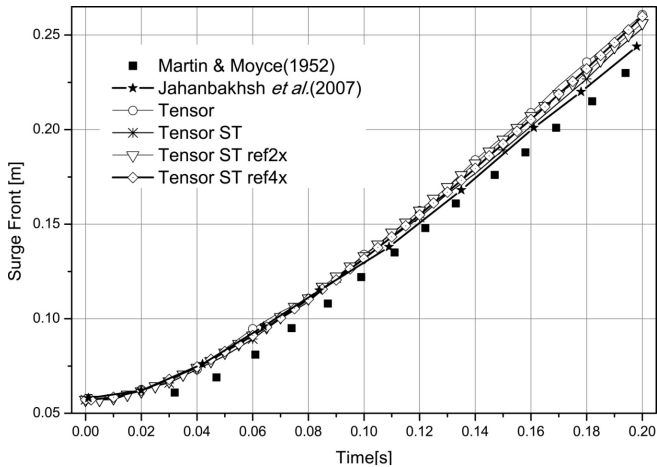


Figure 13. Comparative graph of the temporal evolution of the surge front, where comparisons were made for experimental and numerical data, and the influence of mesh refinement (ref) and the inclusion of surface tension (ST).

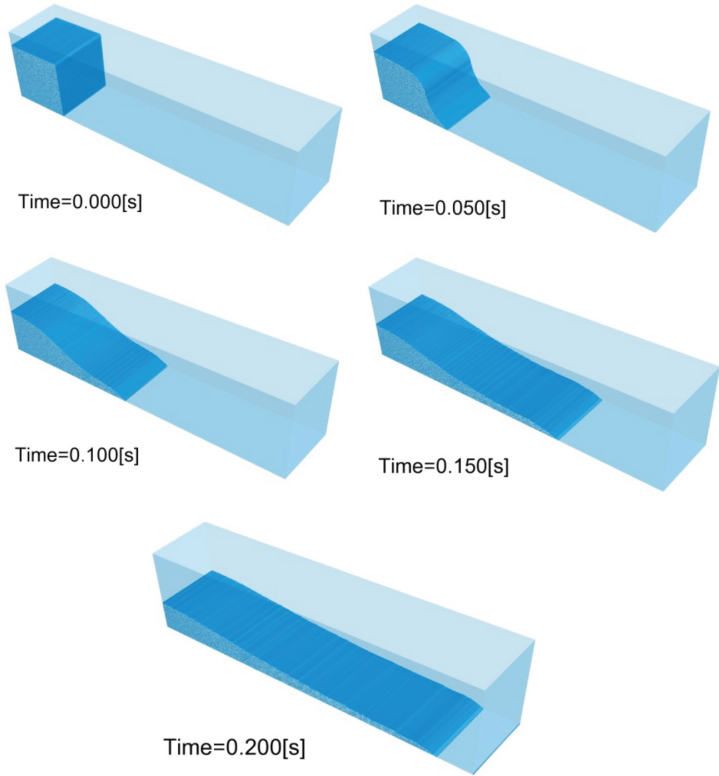


Figure 14. Temporal evolution of the collapse of the water column. The three-dimensional domain is an extrusion of the computational plan just for viewing purposes.

The effect of the collision is another interesting phenomenon to observe, because the accelerated fluid needs to change direction abruptly and fluid parts can be detached creating regions formed by drops beyond the propagation wave and entrainment of air into the liquid. Figure 15 shows the collision, which occurs after 0.2s against the tank wall.

The dynamics of this point onwards is not only a stratified flow, as the morphology appears more complex with the formation

of droplets of collision of liquid waves and capture of air through these waves. Part of the liquid is also lost by the open condition.

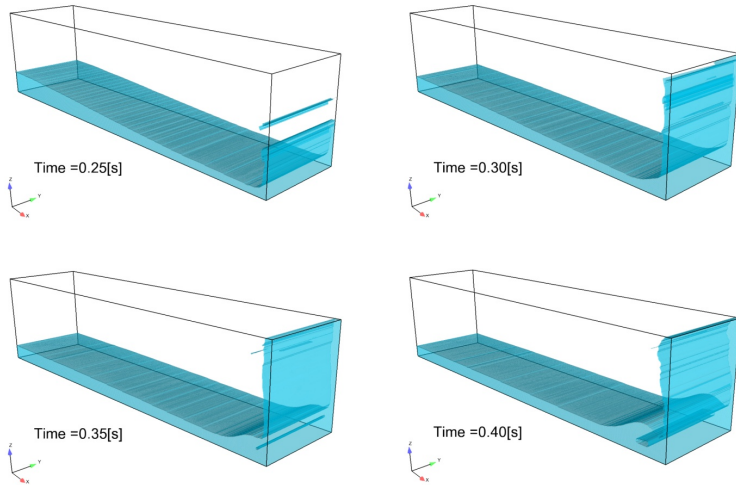


Figure 15. Collision of liquid surge front against the tank wall. The liquid suddenly rises and returns by gravity, colliding with the rising stream, generating drops and capturing air in the process.

Despite the greater physical complexity of the process, the model has a good performance without numerical instabilities or convergence problems.

The deviation between experimental data and numerical results attributed to the delay in the collapse of the liquid column can be easily verified in Figure 16. The diaphragm, which keeps the column of liquid, even after rupture, creates a step discontinuity at the interface of the liquid retaining the part of the column. This situation is not reproduced numerically and the column collapses as a whole. Obviously, with these differences in initial conditions, some deviation is expected between the results, which only confirms what has been reported in the literature.

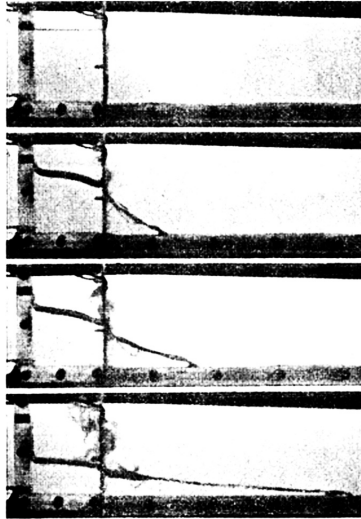


Figure 16. Moyce and Martin's experiment (1952). The rupture of the diaphragm paper, although rapid, still retains part of the water in the liquid column.

Concerning the works cited for this problem, none has used the two-fluid model, and they are mostly VOF formulations with geometric reconstruction of the interface. The use of a turbulence model is also something that should be taken into account. Park et al. (2012) analyzed the influence of the turbulent intensity on this problem with a VOF formulation and two-equation turbulence models. The turbulent intensity prescribed at startup altered the behavior of the interface creating small oscillations of the front but without macroscopically change of the position of the front.

The mesh resolution also affects the behavior of the interface. The coarser mesh (41 x 161 nodes) does not allow the compression algorithm of the ANSYS CFX interface to be efficient; two subsequent refinements (161 x 641 nodes) improve the resolution and even the adhesion condition with the prescribed angle becoming evident and respecting the prescription of 90° , as is evident in Figure 17. However, the interface always remains spread over two mesh spacings - an effect of the interface compression scheme.

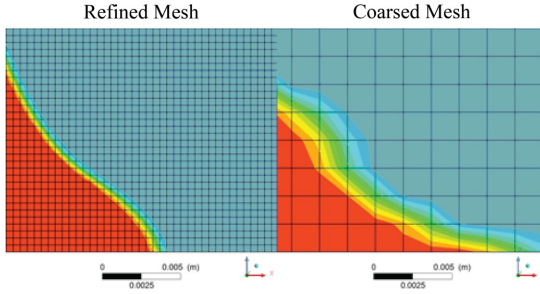


Figure 17. Increasing the resolution of the interface with the mesh refinement. The smearing of the interface always gives two mesh spacings while the prescribed contact angle is only effective with a good refining .

Figure 18 shows a comparison of the volume fraction and vorticity fields. The interface is presented after being disrupted by an eddy, the darker structure in the Figure. The field intensity in this region is 1000 times stronger than the lighter regions. Whenever such a break occurs, the vorticity at this point is more intense than in the surrounding areas. The light and dark structures on the interface are rotating and counter-rotating structures that have more intense velocity gradients that shear the interface. The introduction of the interfacial tension force allowed stability and integrity of the interface. The most refined case (ref4x + ST) showed a stable and continuous convergence without oscillation with a good agreement to the experimental data with the expected physical behavior.

Figure 19 shows the evolution of the vorticity field since the collapse of liquid column to the surge front collision. And it can be seen, in more detail, how vortex structures are generated along the interface, joining and creating smaller structures. In the region where the interface got broken, a large rotatable structure was formed, but the interface remained intact. As this problem has both experimental and numerical data basis in the literature for validation, the comparison between the models and the drag tensor was not performed as in previous cases. The main factor in this decision was the computational effort and time involved in the calculations to validate a case with a good data basis for validation.

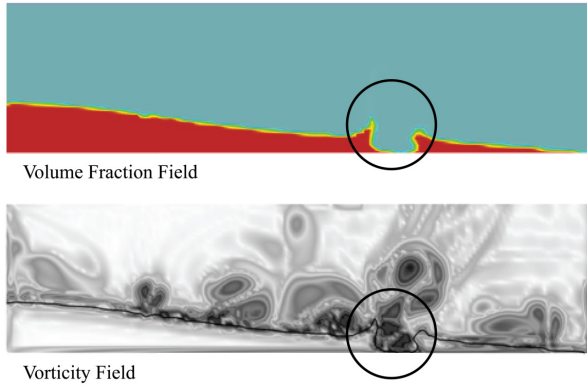


Figure 18. Rupture of the interface and magnitude of vorticity. The marked area indicates the rupture zone and high magnitude of vorticity.

4.4 Final Remarks

It must be noted that it is possible to use the tensor model directly for calculating the coefficient of drag force. Its use in conjunction with the classical model should be taken into consideration, as the main difficulty is precisely the behavior of the coefficient in stratified flows which undergo changes of regime and morphology. This philosophy has proved efficient in the AIAD model, although with a different approach.

Furthermore, the tensor formulation has an advantage in addition to drag force: it contains inherent different effects regarding particle models as transversal components forces relative to slip velocity vector direction. As for the turbulent nature of the forces, the Reynolds stress may easily be considered in the model because it is the resultant of the forces on the interface; they are either only due to the drag or a composition of effects such as turbulence dispersion.

Another interesting aspect is the numerical one: the tensor model is a linear mixture model. Its implicit inclusion in the numerical method would increase the diagonal dominance of the coefficient matrix, thus improving its conditioning and probably improving the solution process. Furthermore, as other components involve velocity and volume fraction of more than one phase, the coupling between the fields would be enhanced.

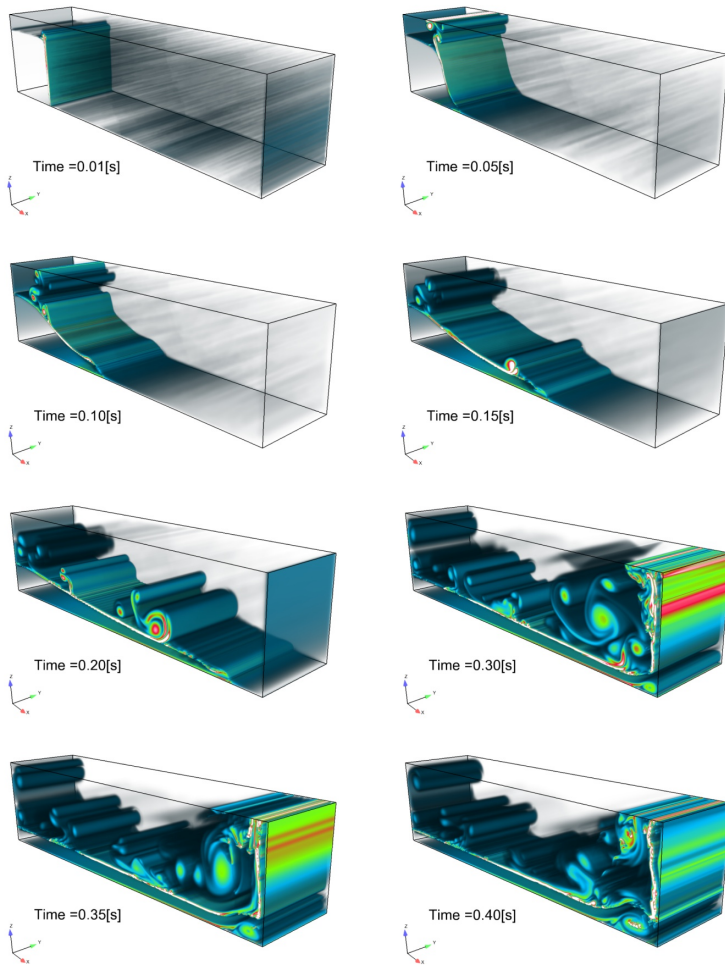


Figure 19. . Volume rendering of the temporal evolution of the vorticity field from the dam break problem. There was the development of rotating structures that break and generate smaller structures. These rotating structures occur in regions where the interface is more intensely sheared.

5. Conclusions

A new approach to stratified flows, also called free surface flows, was proposed for closure of the interfacial force density term in the two-fluid model, one of the terms responsible for the transfer of momentum between the phases in a multiphase flow model. Stratified flows occur in many industrial processes and in nature, and few studies addressed how to deal with changes in the regime and morphologies of these flows.

The proposed model employed a tensor approach to calculate the forces acting on the interface without the use of constitutive correlations and implemented in the ANSYS CFX Release 12.1 platform. The model is based on the Boussinesq's Hypothesis. It is a function of the viscous stress and volume fraction gradients, and it can be classified as a volumetric method. In the analyses, no turbulence model was used, but the DNS analysis was made whenever possible.

To validate the model, three benchmarks problems were analyzed: vertical shear flow, Rayleigh – Taylor's instability and dam break. Hence, the results were compared to numerical and experimental data available in the literature which reproduce well these results.

The drag coefficients calculated and compared to those obtained by the drag force model also are in good agreement, but they suffer a bifurcation when the structure of the interface increases in complexity.

The tensor model was able to capture, with considerable precision, details of each case, such as the development of instabilities like the Kelvin – Helmholtz, and the process of entrainment of phases, even when facing processes of formation of drops, bubbles and collision with walls, because the model considers the net force on the interface. A sensitivity vorticity was also pointed.

Despite the good quality of the results, further studies and validations should be performed to determine the limitations of the model. The interference of the turbulent field and the ability to deal with completely dispersed flows are also points to be analyzed in future work.

Nevertheless, the new model, although conceptually simple, presents a philosophy that indicates a promising way and a little

advancement for the treatment of the terms of interface; it is still preferred even for the calculation of the drag coefficient when using the drag model.

6. Acknowledgments

The authors would like to thank the Coordination for Improvement of Higher Education Personnel - CAPES (www.capes.gov.br) for granting a scholarship to the first author, enabling the development of this research. We would also like to thank the researchers Ivan Carlos Georg, Regiani Aparecida de Almeida and Dirceu Noriler for their fruitful discussions that helped the completion of this work.

References

- BAKKER, A. 2002. Applied Computational Fluid Dynamics - Lecture Notes 16: Free Surface Flows. Fluent Inc.
- BARTH, T. J. & JEPERSON, D. C. 1989. The Design and Application of Upwind Schemes on Unstructured Meshes. *AIAA*, 89.
- BRACKBILL, J. U., KOTHE, D. B. & ZEMACH, C. 1992. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100, 335-354.
- BURNS, A. D. 2002. Computational fluid dynamics modeling of multi-phase flows. *Multiphase Flow Course*. Alpha-Beta Numerics.
- CHUNG, M.-H. 2013. An adaptive Cartesian cut-cell/level-set method to simulate incompressible two-phase flows with embedded moving solid boundaries. *Computers & Fluids*, 71, 469-486.
- DEENDARLIANTO, HÖHNE, T., APANASEVICH, P., LUCAS, D., VALLÉE, C. & BEYER, M. 2012. Application of a new drag coefficient model at CFD-simulations on free surface flows relevant for the nuclear reactor safety analysis. *Annals of Nuclear Energy*, 39, 70-82.
- DREW, D. A. 1983. Mathematical flow modeling of two-phase flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 15, 261-291.
- DREW, D. A. 1992. Analytical modeling of multiphase flows. In: LAHEY, R. T. (ed.) *Boiling Heat Transfer : Modern Developments and Advances*. Amsterdam; New York: Elsevier Science Publishers.

- DREW, D. A. & PASSMAN, S. L. 1999. *Theory of multicomponent fluids*, New York, Springer.
- EGOROV, Y. 2004. Validation of CFD codes with PTS-relevant test cases. *5th Euratom Framework Program ECORA project*.
- FAXÉN, H. 1922. Der Widerstand gegen die Bewegung einer starren Kugel in einer zähen Flüssigkeit, die zwischen zwei parallelen ebenen Wänden eingeschlossen ist. *Annalen der Physik*, 373, 89-119.
- FOURNIER, E., GAUTHIER, S. & RENAUD, F. 2002. 2D pseudo-spectral parallel Navier–Stokes simulations of compressible Rayleigh–Taylor instability. *Computers & Fluids*, 31, 569-587.
- HE, X., CHEN, S. & ZHANG, R. 1999. A Lattice Boltzmann Scheme for Incompressible Multiphase Flow and Its Application in Simulation of Rayleigh–Taylor Instability. *Journal of Computational Physics*, 152, 642-663.
- HIRT, C. W. & NICHOLS, B. D. 1981. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39, 201-225.
- HÖHNE, T. Experiments and Numerical Simulations of Horizontal Two-Phase Flow Regimes. Seventh International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries, 2009 Melbourne, Australia.
- HÖHNE, T. & VALLÉE, C. Numerical Prediction of Horizontal Stratified Flows. 6th International Conference on CFD in Oil & Gas, Metallurgical and Process Industries - SINTEF/NTNU, 2008 Thondheim, Norway. 10.
- HÖHNE, T. & VALLÉE, C. 2010. Experiments and numerical simulations of horizontal two-phase flow regimes using an interfacial area density model. *The Journal of Computational Multiphase Flows*, 2, 131-143.
- HUA, J. & LOU, J. 2007. Numerical simulation of bubble rising in viscous liquid. *Journal of Computational Physics*, 222, 769-795.
- HUA, J., STENE, J. F. & LIN, P. 2008. Numerical simulation of 3D bubbles rising in viscous liquids using a front tracking method. *Journal of Computational Physics*, 227, 3358-3382.
- JAHANBAKHSI, E., PANAHI, R. & SEIF, M. S. 2007. Numerical simulation of three-dimensional interfacial flows. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 17, 384 - 404.

- KOLMOGOROV, A. N. 1942. Equations of Tubulent Motion of an Incompressible Fluid *Akad. Nauk. SSSR, Seria Fizicheska (Translation: Imperial Colleg, Mech. Eng. Dept. Rept. ON/6,1968)*, 6, 56-58.
- LAMB, H. 1945. *Hydrodynamics*, New York,, Dover publications.
- LIND, S. J., XU, R., STANSBY, P. K. & ROGERS, B. D. 2012. Incompressible smoothed particle hydrodynamics for free-surface flows: A generalised diffusion-based algorithm for stability and validations for impulsive flows and propagating waves. *Journal of Computational Physics*, 231, 1499-1523.
- LUCY, L. B. 1977. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astronomical Journal*, 82, 1013-1024.
- MALISKA, C. R. 2004. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, Rio de Janeiro, LTC - Livros Técnicos e Científicos.
- MARTIN, J. C. & MOYCE, W. J. 1952. Part IV. An Experimental Study of the Collapse of Liquid Columns on a Rigid Horizontal Plane. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 244, 312-324.
- MEHRAVARAN, M. & HANNANI, S. K. 2008. Simulation of incompressible two-phase flows with large density differences employing lattice Boltzmann and level set methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198, 223-233.
- MOGUEN, Y., KOUSKSOU, T., BRUEL, P., VIERENDEELS, J. & DICK, E. 2011. Rhie-Chow interpolation for low Mach number flow computation allowing small time steps. *In: FOÛT, J., FÜRST, J., HALAMA, J., HERBIN, R. & HUBERT, F. (eds.) Finite Volumes for Complex Applications VI Problems & Perspectives*. Springer Berlin Heidelberg.
- MONAGHAN, J. J. 1994. Simulating Free Surface Flows with SPH. *Journal of Computational Physics*, 110, 399-406.
- MONAGHAN, J. J. 2011. Smoothed Particle Hydrodynamics and Its Diverse Applications. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 44, 323-346.
- PARK, I., KIM, K., KIM, J. & VAN, S. 2012. Numerical investigation of the effects of turbulence intensity on dam-break flows. *Ocean Engineering*, 42, 176-187.
- PESKIN, C. S. 1977. Numerical analysis of blood flow in the heart. *Journal of Computational Physics*, 25, 220-252.

- PESKIN, C. S. 2002. The immersed boundary method. *Acta Numerica*, 11, 479-517.
- TROSHKO, A. A. & HASSAN, Y. A. 2001. A two-equation turbulence model of turbulent bubbly flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 27, 1965-2000.
- UBBINK, O. & ISSA, R. I. 1999. A Method for Capturing Sharp Fluid Interfaces on Arbitrary Meshes. *Journal of Computational Physics*, 153, 26-50.
- UDAYKUMAR, H. S., KAN, H.-C., SHYY, W. & TRAN-SON-TAY, R. 1997. Multiphase Dynamics in Arbitrary Geometries on Fixed Cartesian Grids. *Journal of Computational Physics*, 137, 366-405.

Nomenclature

\mathbf{F}^{Drag}	drag force [N/m ³]
\tilde{F}	average force [N]
\tilde{U}	barycentric velocity [m/s]
C_D	drag coefficient
A_i	interfacial area density [m ⁻¹]
\mathbf{u}	velocity vector [m/s]
ρ	density [kg/m ³]
r_α	volume fraction
\mathbf{g}	gravity acceleration vector [m/s ²]
\mathbf{M}_α	interfacial density force [N/m ³]
p	pressure
$\bar{\mathbf{T}}_i$	viscous tensor at interface [Pa]
χ_α	phase indicator function
\mathbf{x}	position vector [m]
t	time [s]
$\hat{\mathbf{n}}_i$	normal vector [m ²]
μ_α	dynamic viscosity of a phase
E	ensemble of all events
\mathbf{m}_i^σ	surface tension force [N/m ³]

∂_x	derivative in x-direction
∂_y	derivative in y-direction
C_T	closure constant
δ	delta function
$\langle \rangle$	average integral operator
$\hat{\mathbf{e}}_k$	basis unit vector
u	step function
C_p	pressure coefficient
η	Kolmogorov's space scale [m]
τ	Kolmogorov's time scale [m]
ν	Kolmogorov's velocity scale [m]
ν	kinematic viscosity [m ² /s]
ε	eddy dissipation rate [m ² /s ³]
Re	Reynolds number
U	flow velocity scale [m/s]

Subscripts

α, β, k	index of a phase
L	liquid phase
G	gas phase
LG	gas-liquid mixture
i, j	Cartesian direction index
x	x-axis direction
y	y-axis direction
min	minimum value